

Квантовый мир

I. Механика

Сергей С. Степанов

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

Оглавление

I Основы	9
I Введение	11
II Краткое содержание книги	11
III Система единиц	13
1 Основные постулаты	15
1 Векторные пространства	16
2 Операторы	18
3 Физическая интерпретация	22
4 Гамильтонов формализм	26
5 Матричные представления	30
6 Одновременная измеримость	32
7 Координатное представление	36
2 Дискретный спектр одномерных систем	41
1 Общие свойства одномерных задач	42
2 Чётность	46
3 Бесконечная потенциальная яма	48
4 Яма конечной глубины	50
5 Квазивырождение	54
6 Рассеяние на одномерной потенциальной яме	58
7 Гармонический осциллятор	62
8 Ангармонический осциллятор	66
3 Временная эволюция	69
1 Свободное движение	70
2 Гармонический осциллятор	74
3 Амплитуда перехода для гармонического осциллятора	76
4 Когерентные состояния осциллятора	78
5 Уравнения для средних	82
6 Оператор эволюции и функция Грина *	84

4 Момент импульса и спин	87
1 Момент импульса в квантовой механике	88
2 Сферические координаты	92
3 Спин электрона	94
4 Сpinоры и вращение	98
5 Сложение спинов	102
5 Сферически симметричные задачи	105
1 Трёхмерное движение	106
2 Трёхмерный осциллятор	110
3 Атом водорода: дискретный спектр	114
4 Потенциал воронки	118
6 Матрица плотности	121
1 Смешанные состояния	122
7 Тождественные частицы	127
1 Бозоны и фермионы	128
2 Молекула водорода	132
3 Колебания в системе осцилляторов	134
4 Фононы	138
8 Метафизика	145
1 Процесс измерения	145
2 Индетеминизм квантовой физики	145
3 Спутанные состояния	145
4 Эволюция во времени	145
5 Квантовая логика	145
II Приближённые методы	147
9 Теория возмущений для дискретного спектра	149
1 Теория возмущений Релея–Шредингера	150
2 Резольвента *	154
3 Теория возмущений для средних	156
4 Асимптотические ряды	160
5 Вариационный метод	164
6 Сходящиеся ряды теории возмущений	166

10 Квазиклассические приближения	169
1 Метод ВКБ	170
2 \hbar -разложение	174
III Рассеяние, переходы и распады	179
11 Теория рассеяния	181
1 Рассеяние в классической механике	182
2 Рассеяние в квантовой теории	186
3 Парциальное разложение	188
4 Кулоновский потенциал	190
12 Представление взаимодействия	193
1 S -оператор	194
2 Теория возмущений для S -оператора	196
3 S -оператор в энергетическом представлении	198
4 Рассеяние на потенциале $V(x) = -g \delta(x)$	200
5 Сечение рассеяния	202
6 Теория возмущения для S -оператора	206
13 Распады	211
1 Стационарное рассмотрение	212
IV Нерелятивистская теория поля	215
14 Нерелятивистская теория поля	217
1 Полевой формализм	218
2 Импульсное представление	222
3 Представление Гейзенберга	226
4 Модель Ли *	228
5 Перенормировка массы *	232
6 Представление Гейзенберга для полей	236
7 Сверхтекучесть	238
V Специальные вопросы	245
15 Метод факторизации	247
1 Построение спектра оператора	248
2 Потенциал Морзе	250

3	Гиперболический потенциал	252
4	Трехмерные задачи	254
5	Класс точно решаемых задач	256
16	Симметрии квантовой механики	259
1	Симметрии осциллятора	260
2	Симметрия кулоновского потенциала	264
17	Функции Грина	267
1	Функции Грина	268
2	Дифференцирование хронологических произведений	272
3	Уравнения Дайсона	274
4	Теория возмущений для уравнения Дайсона	276
5	Среднее S -оператора *	280
18	Функциональные методы	285
1	Функциональные производные	286
2	Производящий функционал	288
3	Теория возмущений для уравнения Швингера	290
4	Непертурбативное решение уравнения Швингера	292
19	Функциональный интеграл	295
1	Интеграл по траекториям	296
2	Статистическая сумма	300
3	Гармонический осциллятор	304
4	Метод Монте-Карло	308
5	Алгоритм Метрополиса	312
6	Метод перевала *	316
VI	Математические приложения	321
Анализ		323
A.1	Множества	324
A.2	Отношения и функции	326
A.3	Действительные числа и функции	330
A.4	Функции Дирака и Хевисайда	334
A.5	Обобщённые функции	336
A.6	Преобразования Фурье	340
A.7	Метрические пространства	342
A.8	Интегралы Римана, Стильеса и Лебега	344

Векторные пространства	349
V.1 Векторное пространство	350
V.2 Операторы	354
V.3 Матричная алгебра	358
V.4 Векторные подпространства	362
V.5 Собственные значения	366
V.6 Преобразования операторов	370
V.7 Гильбертово пространство	372
V.8 Функциональные пространства	374
V.9 Функции от операторов	378
Интегралы	383
I.1 Теорема Коши	384
I.2 Многозначные функции	388
I.3 Примеры вычисления интегралов	392
I.4 Гауссов интеграл	394
I.5 Дисперсионные соотношения	396
Функции	399
F.1 Гамма-функция	400
F.2 Вырожденная гипергеометрическая функция	404
F.3 Полиномы Лежандра	406
Вероятность, статистика и процессы	409
Помощь	411
I Основные постулаты	412
II Дискретный спектр одномерных систем	414
III Временная эволюция	416
IV Момент импульса и спин	417
V Сферически симметричные задачи	419
VI Матрица плотности	420
VII Приближённые методы дискретного спектра	421
VIII Квазиклассические приближения	423
IX Метод факторизации	424
X Функции Грина	426
XI Функциональный интеграл	427
XII Анализ	429
XIII Векторные пространства	430

Часть I

Основы

III Система единиц

• Скорость света и постоянная Планка являются фундаментальными физическими константами, определяющими масштабы эффектов в релятивистской квантовой теории:

$$\begin{aligned} c &= 299\,792\,458 \text{ м/с}, \\ \hbar &= 1.054\,572 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 6.582\,119 \cdot 10^{-22} \text{ МэВ} \cdot \text{с}, \\ \hbar c &= 197.327 \cdot 10^{-15} \text{ Мэв} \cdot \text{м}. \end{aligned} \quad (1)$$

Выше использованы латинские обозначения для метра, секунды и джоуля (система СИ). Электронвольт $\text{eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ равен энергии, затрачиваемой при переносе элементарного заряда между точками с разницей потенциалов в один вольт, а MeV означает 10^6 eV (mega электронвольт). Часто встречаются следующие приставки степеней десяти:

$$\begin{aligned} 10^6 &: \text{М (mega),} & 10^9 &: \text{Г (гига),} & 10^{12} &: \text{T (тера),} \\ 10^{-6} &: \mu \text{ (микро),} & 10^{-9} &: \text{n (нано),} & 10^{-12} &: \text{p (пико).} \end{aligned}$$

Элементарный электрический заряд определяется безразмерной постоянной тонкой структуры:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137.035\,999\,074(44).$$

В физике элементарных частиц принята система единиц в которой $\hbar = c = 1$. В этой системе из соотношений (без c и \hbar) $E^2 = p^2 + m^2$ и $\hat{p} = -i\partial/dx$ следует, что длина, время, энергия и импульс выражаются в единицах массы (которую принято измерять в электронвольтах):

$$t \sim x \sim M^{-1}, \quad E \sim p \sim M.$$

Скорость, заряд $q^2 = Er$ безразмерны (в единицах массы).

Чтобы восстановить в формулах фундаментальные константы, необходимо для времени, длины и массы сделать следующие замены:

$$t \mapsto \frac{ct}{\hbar}, \quad x \mapsto \frac{x}{\hbar}, \quad m \mapsto mc. \quad (2)$$

Подстановки остальных величин определяются их размерностями в классической механике (где нет констант \hbar и c). Например, для энергии $E = mx^2/t^2$, импульса $p = mx/t$ и заряда $q^2 = Er$:

$$E \mapsto \frac{E}{c}, \quad p \mapsto p, \quad q^2 \mapsto \frac{q^2}{\hbar c}.$$

Замены для полей определяются из соображения отсутствия постоянной Планка \hbar в их энергии (классические поля) и соответствия полевых коммутаторов квантовой механике.

- Приведём несколько характерных масштабов в физике элементарных частиц. Массы электрона и протона равны:

$$m_e = 0.511 \text{ MeV},$$

$$m_p = 938 \text{ MeV} = 1836 m_e,$$

а для поколений лептонов (μ -мезон, τ -лептон):

$$m_\mu \approx 207 m_e, \quad m_\tau \approx 3477 m_e = 17 m_\mu.$$

Нейтрон чуть тяжелее протона, а дейтерий легче чем сумма масс протона и нейтрона из которых он состоит:

$$m_n = 1.0014 m_p = m_p + 2.5 m_e, \quad m_d = m_p + m_n - 4.4 m_e.$$

Для сравнения, боровская энергия электрона в атоме водорода равна $E_B/c^2 = m_e \alpha^2/2 = 2.7 \cdot 10^{-5} m_e$. Самые лёгкие π -мезоны имеют массы:

$$m_{\pi^\pm} = 140 \text{ MeV}, \quad m_{\pi^0} = 135 \text{ MeV} = m_{\pi^\pm} - 9 m_e.$$

Масса тяжёлых мезонов (из известных) около $11\,000 \text{ MeV} = 11 \text{ GeV}$. Массы барионов, начинаются с тяжёлого (по сравнению с π мезоном) протона растут несколько скромнее и достигают значений $6\,000 \text{ MeV}$.

Характерный размер атомов и шага кристаллической решётки твёрдых тел составляет ангстремы. Один ангстрем равен $\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$. Другой важный масштаб длины называется ферми (в честь Энрико Ферми) и равен $\text{fm} = 10^{-15} \text{ m} \approx 5/\text{GeV}$, см. (1). Это значение определяет характерный размер протона и лёгких ядер атомов. Для электрона существуют следующие типичные масштабы длины: “классический радиус”, комптоновская длина и “радиус” боровской орбиты:

$$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.818 \text{ fm}, \quad \lambda_e = \frac{r_e}{\alpha} = 0.004 \text{ \AA}, \quad r_B = \frac{r_e}{\alpha^2} = 0.5 \text{ \AA}.$$

Первая длина не зависит от постоянной Планка \hbar , вторая $\lambda_e = \hbar/m_e c$ не зависит от заряда e , а третья $r_B = \hbar^2/m_e e^2$ – от скорости света c .

Временные интервалы в физике элементарных частиц меняются в очень широких диапазонах. Время жизни свободного нейтрона ($n \mapsto p e^- \bar{\nu}_e$) составляет 880 секунд. Мезон $\pi^\pm \mapsto \mu \nu_\mu$ распадается за $2.6 \cdot 10^{-8}$ сек, а $\pi^0 \mapsto 2\gamma$ за $8.5 \cdot 10^{-17}$ сек. Большинство мезонов и барионов являются очень короткоживущими частицами. Их также называют *резонансами*. Время жизни $\tau = 1/\Gamma$ резонансов измеряется в энергетических единицах – ширинах распада Γ . Типичные значения ширин для резонансов составляют сотни мегаэлектронвольт: $6.6 \cdot 10^{-22}$ сек = MeV^{-1} , см. (1).

Глава 1

Основные постулаты

Опыт показывает, что в микромире многие физические величины принимают дискретные значения. Примерами являются момент импульса или энергия электрона в атоме. Кроме этого, две физические величины часто нельзя измерить одновременно сколь угодно точно. Наиболее адекватным математическим аппаратом, позволяющим всё это описать, оказывается теория линейных операторов, действующих в векторном пространстве. Первые два раздела кратко перечисляют необходимые математические факты, более подробное изложение которых можно найти в приложении V, стр. 349.

Физическая интерпретация подобной математики называется квантовой теорией и её основные соотношения определяются фундаментальной константой – постоянной Планка \hbar . Приводятся основные постулаты теории, которые будут использоваться на протяжении всей книги, поэтому к этой главе имеет смысл время от времени возвращаться.

Напомним, что знак $\ll H_{xx}$ обозначает ответ на задачу под номером xx, приведенную в тексте. Его можно найти в приложении H, стр. 411. Блоки, помеченные звёздочкой: \triangleright^* , требуют самостоятельных вычислений и при первом чтении их можно опустить.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Векторные пространства

▷ *Векторное пространство* \mathbb{V} (стр. 350) состоит из объектов, называемых векторами. Будем их обозначать буквами, окружёнными прямой и угловой скобкой: $|\Psi\rangle$, $|\Phi\rangle$, ... Векторы можно умножать на комплексные числа α , β , ... и складывать друг с другом. В результате снова получается вектор из этого же пространства: $\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle$. Умножение любого вектора на ноль даёт *нулевой вектор*: $0|\Psi\rangle = |\mathbf{0}\rangle$ и всегда: $|\mathbf{0}\rangle + |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$.

▷ Векторы $|\Psi_1\rangle$, ..., $|\Psi_k\rangle$ называются линейно *зависимыми*, если существует k ненулевых чисел α_1 , ..., α_k для которых:

$$\alpha_1|\Psi_1\rangle + \dots + \alpha_k|\Psi_k\rangle = |\mathbf{0}\rangle. \quad (1.1)$$

Любой из линейно зависимых векторов можно выразить через комбинацию остальных. Если же (1.1) выполняется только при $\alpha_1 = \dots = \alpha_k = 0$, то векторы называются линейно *независимыми*. Наибольшее число независимых векторов равно размерности $n = \dim \mathbb{V}$ пространства. Если такое число существует, то говорят, что пространство n -мерно.

▷ В n -мерном пространстве n независимых векторов $|e_1\rangle$, ..., $|e_n\rangle$ образует *базис*, по которому можно *разложить* любой вектор:

$$|a\rangle = a_1|e_1\rangle + \dots + a_n|e_n\rangle. \quad (1.2)$$

Числа a_1 , ..., a_n называются *координатами* вектора $|a\rangle$. Такое разложение всегда единствено (стр. 352) и вектор $|a\rangle$ полностью определяется своими координатами. Можно выбрать много различных базисов и в каждом из них один и тот же вектор будет иметь различные координаты.

▷ *Подпространством* называют часть векторов, принадлежащих \mathbb{V} , сумма которых и умножение на число снова дают вектор из этого подпространства. Например, пусть $\dim \mathbb{V} > 2$ и $|e_k\rangle$ – базис. Тогда множество векторов $\alpha_1|e_1\rangle + \alpha_2|e_2\rangle$, где α_i – любые числа, образуют 2-мерное подпространство пространства \mathbb{V} .

▷ Векторное пространство может быть бесконечномерным. Если его базисные векторы можно пронумеровать целыми числами, то пространство является *сепарабельным*. Сепарабельное, бесконечномерное векторное пространство называется *гильбертовым пространством* (стр. 372). В квантовой теории часто имеют дело с гильбертовыми пространствами, хотя приходится за них выходить и рассматривать также несепарабельные пространства. При этом надо иметь ввиду, что некоторые утверждения, очевидные для конечномерных или гильбертовых пространств, могут оказаться неверными для пространств несепарабельных.

▷ С каждой парой векторов $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ свяжем комплексное число, которое назовём *скалярным произведением* и обозначим угловыми скобками с разделяющей вертикальной чертой: $\langle\Psi|\Phi\rangle$. Постулируется, что при комплексном сопряжении происходит перестановка векторов

$$\langle\Psi|\Phi\rangle^* = \langle\Phi|\Psi\rangle \quad (1.3)$$

и выполняется свойство *линейности* по второму вектору:

$$|\Phi\rangle = \alpha_1 |\Phi_1\rangle + \alpha_2 |\Phi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi|\Phi\rangle = \alpha_1 \langle\Psi|\Phi_1\rangle + \alpha_2 \langle\Psi|\Phi_2\rangle \quad (1.4)$$

и в соответствии с (1.3) *антилинейности* по первому вектору:

$$|\Psi\rangle = \alpha_1 |\Psi_1\rangle + \alpha_2 |\Psi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi|\Phi\rangle = \alpha_1^* \langle\Psi_1|\Phi\rangle + \alpha_2^* \langle\Psi_2|\Phi\rangle. \quad (1.5)$$

Таким образом, скалярное произведение – это билинейная функция от двух векторов (стр. 328), имеющая комплексные значения ($\mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{C}$).

Если скалярное произведение равно нулю, то говорят, что векторы ортогональны друг другу. Важную роль играют ортогональные базисы, а неортогональный базис всегда можно ортогонализовать (сделав векторы попарно ортогональными) при помощи алгоритма Шмидта (стр. 353).

▷ Скалярное произведение вектора на себя самое называется его *нормой*. Постулируется, что норма неотрицательна: $\langle\Psi|\Psi\rangle \geqslant 0$. Если норма конечна, умножением вектора на число, можно добиться чтобы: $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. В этом случае говорят, что вектор *нормирован*. Обычно, на гильбертовы пространства накладывают дополнительное требование конечности нормы всех векторов. Однако, в квантовой теории часто рассматриваются пространства допускающие и бесконечные нормы.

▷ Скалярное произведение удобно записывать в терминах *сопряженного* векторного пространства. Предполагается, что помимо исходных векторов $|\Psi\rangle$, $|\Phi\rangle$, ... существуют сопряженные им $\langle\Psi|$, $\langle\Phi|$, ... Такие векторы называются “*бра*”, в отличие от исходных “*кет*” векторов. Эти названия происходят от двух частей английского слова bracket (скобка) и были придуманы Дираком. Взаимно-однозначное соответствие между исходным пространством и ему сопряженным, записывается в виде

$$|\Psi\rangle^+ = \langle\Psi|, \quad \langle\Psi|^+ = |\Psi\rangle, \quad (\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle)^+ = \alpha^* \langle\Psi| + \beta^* \langle\Phi|, \quad (1.6)$$

где крестик называется *эрмитовым сопряжением*. Для чисел эрмитово сопряжение действует как комплексное сопряжение: $\alpha^+ = \alpha^*$. В результате, скалярное произведение является как бы произведением вектора из сопряженного пространства и исходного: $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Psi| \cdot |\Phi\rangle$, где для краткости убирается одна вертикальная черта.

2 Операторы

Ещё один важный объект – это *оператор*. Он будет помечаться сверху шляпкой. Оператор одному вектору ставит в соответствие некоторый другой ($\mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}$). Неформально говорят, что оператор “действует” на вектор, в результате чего “получается” новый вектор:

$$\hat{A} |\Psi\rangle = |\Phi\rangle.$$

Операторы можно складывать: $\hat{A} + \hat{B}$, умножать на число: $\alpha \hat{A}$ и перемножать друг с другом: $\hat{A}\hat{B}$. В последнем случае на вектор сначала действует ближайший к нему оператор, затем на получившийся вектор действует следующий оператор и т.д.:

$$(\hat{A}\hat{B}) |\Phi\rangle = \hat{A} (\hat{B} |\Phi\rangle).$$

Умножение операторов ассоциативно: $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$ и дистрибутивно: $\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C})$. Но последовательность действий важна и в общем случае операторы *не коммутируют* друг с другом: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Если же перестановка не меняет результата, то говорят, что операторы коммутируют. *Коммутатором* двух операторов называются скобки:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.7)$$

Операторы коммутируют, если их коммутатор равен нулю. Несложно проверить выполнение следующих тождеств ($\prec H_1$), стр. 412:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \quad (1.8)$$

▷ Оператор называется *линейным*, если для любых чисел и векторов выполняется соотношение:

$$\hat{A} (\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle) = \alpha \hat{A}|\Psi\rangle + \beta \hat{A}|\Phi\rangle, \quad (1.9)$$

т.е. действие оператора на линейную комбинацию векторов эквивалентно линейной комбинации результата действия оператора на каждый вектор.

▷ *Нулевой* оператор при действии на любой вектор даёт нулевой вектор, а *единичный* оператор не меняет вектора:

$$\hat{0} |\Psi\rangle = |\mathbf{0}\rangle, \quad \hat{1} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle.$$

Нулевой и единичный операторы коммутируют с любым оператором и $\hat{0}\hat{A} = \hat{0}$, $\hat{1}\hat{A} = \hat{A}$. Заметим, что из $\hat{A}\hat{B} = \hat{0}$, в общем не следует, что один из операторов нулевой (стр. 361).

▷ При работе с операторами необходимо помнить, что они в общем случае не коммутируют. Например:

$$(\hat{A} + \hat{B})^2 = (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (1.10)$$

(два последних слагаемых нельзя объединять в $2\hat{A}\hat{B}$). По этой же причине, в общем случае, $e^{\hat{A}+\hat{B}} \neq e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$, где экспонента от оператора понимается в смысле ряда (стр. 378).

▷ Для некоторых (не всех!) операторов \hat{A} существуют им *обратные*, которые обозначаются как \hat{A}^{-1} . Для *любого* вектора $|a\rangle$:

$$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{A}^{-1}|b\rangle = |a\rangle.$$

Обратный оператор коммутирует с исходным и справедливы тождества (стр. 356):

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}, \quad (\hat{A}^{-1})^{-1} = \hat{A}, \quad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}. \quad (1.11)$$

Если \hat{A}^{-1} для данного \hat{A} существует, то он всегда единственный.

▷ *Эрмитово сопряжение* \hat{A}^+ оператора \hat{A} , определяется по аналогии с матрицами:

$$\langle \Psi | \hat{A}^+ | \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle^*, \quad (1.12)$$

где Ψ и Φ – *произвольные* векторы, а звездочка – комплексное сопряжение. Для спряжения выполняются тождества (стр. 356):

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}, \quad (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+, \quad \langle \Psi | \hat{A}^+ \hat{A} | \Psi \rangle \geq 0 \quad (1.13)$$

и если эрмитово сопряжение \hat{A}^+ совпадает с \hat{A} , то такой оператор называется *эрмитовым* или *самосопряженным*. Например, $\hat{1}^+ = \hat{1}$.

С учётом (1.6) комплексное сопряжение в правой части (1.12), можно также считать эрмитовым сопряжением, которое переставляет местами векторы и операторы, ставя над последними знак $^+$.

▷ Учитывая определения эрмитового сопряжения и скалярного произведения, можно написать:

$$\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A}^+ | \Phi \rangle^* = \langle \Psi | \Phi' \rangle^* = \langle \Phi' | \Psi \rangle,$$

где $|\Phi'\rangle = \hat{A}^+ |\Phi\rangle$. Поэтому можно считать, что в $\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle$ либо \hat{A} действуют направо на $|\Psi\rangle$, либо \hat{A}^+ “действует налево” на $\langle \Phi |$. В частности, эрмитов оператор $\hat{A}^+ = \hat{A}$ может в матричном элементе $\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle$ действовать как налево, так и направо.

- Иногда при действии оператора на вектор получается тот же вектор, умноженный на число:

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle. \quad (1.14)$$

Такое соотношение называется *уравнением на собственные значения*. Ненулевой $|a\rangle$ является собственным вектором, а число a – собственным значением оператора \hat{A} . Уравнение (1.14) может иметь несколько решений (различных a и $|a\rangle$). Множество всех собственных значений a называется *спектром* оператора \hat{A} . Спектр бывает *дискретным* (собственные векторы можно пронумеровать целыми числами) и *непрерывным* (для идентификации векторов используются непрерывные числа).

▷ Собственные значения эрмитовых операторов *действительны*, а собственные векторы линейно *независимы*. Векторы с различными собственными значениями *ортогональны* (стр. 366), поэтому можно записать условие *ортонормированности*:

$$\langle a | a' \rangle = \delta_{aa'}, \quad (1.15)$$

где $\delta_{aa'}$ – символ Кронекера (стр. 353) для дискретного спектра (единичная норма) и δ –функция Дирака $\delta(a - a')$, стр. 334 для непрерывного спектра (норма бесконечна).

▷ Любой вектор $|\Psi\rangle$ представим в виде суммы (стр. 367) по всем собственным векторам $|a\rangle$ эрмитового оператора \hat{A} (*условие полноты*):

$$|\Psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\Psi\rangle, \quad (1.16)$$

где комплексные коэффициенты разложения c_a обозначены как $\langle a|\Psi\rangle$. Если вычислить скалярное произведение с фиксированным собственным вектором оператора \hat{A} , “умножив” (1.16) слева на $\langle a'|$, то под суммой получится символ Кронекера $\langle a'|a\rangle = \delta_{aa'}$ (для дискретного спектра). Проводя суммирование мы приходим к тождеству: $\langle a'|\Psi\rangle = \langle a'|\Psi\rangle$. Для непрерывного спектра вместо суммы будет интеграл по da , а символ Кронекера заменится на δ –функцию Дирака. Сумму:

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = \hat{1} \quad (1.17)$$

можно рассматривать как единичный оператор. Его действие на произвольный вектор $|\Psi\rangle$, в соответствии с (1.16), снова даёт этот вектор. Таким образом, собственные векторы $|a\rangle$ эрмитового оператора образуют *базис* в векторном пространстве.

• Некоторые операторы обладают *вырожденным спектром*. Это означает, что различным, линейно независимым собственным векторам соответствует одно и тоже собственное значение. Пометим дополнительным индексом i собственные векторы с одинаковым собственным значением:

$$\hat{A} |a, i\rangle = a |a, i\rangle. \quad (1.18)$$

Будем считаем их ортонормированными (что всегда можно сделать при помощи алгоритма Шмидта, стр. 353):

$$\langle j, a' | a, i \rangle = \delta_{aa'} \delta_{ij}.$$

Введём *проективный оператор* (стр. 364) в котором суммируются все независимые собственные векторы для *данного* собственного значения:

$$\hat{P}_a = \sum_{i=1}^k |a, i\rangle \langle i, a|, \quad (1.19)$$

где $k = k(a)$ – *кратность вырождения*, различная для разных собственных значений. Несложно проверить ($\ll H_2$), что

$$\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a, \quad \hat{P}_a \hat{P}_{a'} = \hat{0}, \quad \sum_a \hat{P}_a = \hat{1}, \quad (1.20)$$

где в последнем равенстве суммируются все различные собственные значения. Оно выступает аналогом соотношения (1.17).

Набор проективных операторов \hat{P}_a проецируют любой вектор на *собственные подпространства* (стр. 362) оператора \hat{A} . Их *прямая сумма* (стр. 364) покрывает всё векторное пространство (собственные векторы $|a, i\rangle$ эрмитового оператора образуют базис).

Оператор \hat{A} можно представить в виде суммы по всем различным собственным значениям, которую называют *спектральным разложением*:

$$\hat{A} = \sum_a a \hat{P}_a. \quad (1.21)$$

Действительно, матричные элементы оператора \hat{A} , вычисленные при помощи *произвольных* векторов $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$, равны:

$$\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_a \sum_{i=1}^{k(a)} \langle \Phi | \hat{A} | a, i \rangle \langle i, a | \Psi \rangle = \sum_a \sum_{i=1}^{k(a)} a \langle \Phi | a, i \rangle \langle i, a | \Psi \rangle,$$

где во втором равенстве учтено (1.18). Этот же результат получится, если вычислить $\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle$ для (1.21).

3 Физическая интерпретация

▷ В классической механике для однозначного задания состояния системы, состоящей из частиц, требуется знание текущего значения их координат и скоростей. В квантовой теории вместо этого необходим вектор векторного пространства. Определяя *состояние* при помощи вектора $|\Psi\rangle$, мы полностью характеризуем квантовую систему.

Часто термины “вектор” и “состояние” используются как синонимы, хотя если $|\Psi\rangle$ описывает данное состояние, то его же описывает и $\alpha|\Psi\rangle$ (где $\alpha \neq 0$). Квантовое состояние может возникать в результате измерений физических величин (при взаимодействии макроскопического прибора с квантовой системой). Говорят, что данное состояние соответствует полному заданию фиксированных макроскопических условий.

Если независимые векторы $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ описывают некоторые состояния, то их *суперпозиция* $c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle$ также соответствует определённому состоянию. Исключением являются правила *суперотбора*, когда суперпозиция запрещена законами сохранения. Например, суперпозиция состояний с различным электрическим зарядом невозможна. Нулевой вектор $|\mathbf{0}\rangle$ также не связан ни с каким состоянием.

▷ Каждой физической величине (координате частицы, энергии и т.д.) в квантовой теории ставится в соответствие линейный оператор \hat{A} , действующий в векторном пространстве состояний. Собственные значения (1.14) оператора \hat{A} образуют множество “разрешенных” значений физической величины A . Так как физические величины действительны, обычно, рассматриваются эрмитовы операторы $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

Спектр операторов физических величин может быть как дискретным, так и непрерывным. Например, угловой момент имеет дискретные значения, а координата частицы – непрерывные. Возможна также ситуация, когда часть собственных значений дискретна, а часть непрерывна. Условие полноты (1.16) в этом случае записывается следующим образом:

$$|\Psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n| \Psi \rangle + \int da |a\rangle \langle a| \Psi \rangle. \quad (1.22)$$

Примером являются энергии электрона в атоме водорода: при отрицательных значениях спектр дискретный (“связанные состояния”), а при положительных – непрерывный. Случается также, что некоторые дискретные a_n появляются внутри непрерывного спектра, если их собственные векторы ортогональны: $\langle a_n | a \rangle = 0$.

▷ Пусть система находится в состоянии $|\Psi\rangle$, не являющимся собственным вектором \hat{A} . Тогда при измерении величины A будут получаться различные значения a из спектра оператора \hat{A} . Если \hat{A} не зависит от времени, то измерив $A = a$ мы “переводим” систему в состояние $|a\rangle$, где при следующих измерениях A всегда будет получаться значение a .

Для нормированного вектора $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, числа $|\langle a|\Psi\rangle|^2$ в (1.22) равны *вероятности* обнаружить дискретное значение a_n при измерении величины A в системе, находящейся в состоянии $|\Psi\rangle$. Для непрерывного спектра $|\langle a|\Psi\rangle|^2$ – это *плотность вероятности*, т.е. $|\langle a|\Psi\rangle|^2 da$ равна вероятности получить для A значение из интервала $[a \dots a + da]$.

Суммарная вероятность (любое a) равна единице:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_a \langle\Psi|a\rangle \langle a|\Psi\rangle = \sum_a |\langle a|\Psi\rangle|^2 = 1,$$

где далее сумма по a означает дискретный или непрерывный случай (или их объединение) и учтено (1.3).

▷ В состоянии $|\Psi\rangle$ можно вычислить *среднее значение* величины A . Оно обозначается тремя эквивалентными способами:

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle = \bar{A}. \quad (1.23)$$

В первой записи оператор \hat{A} действует на вектор $|\Psi\rangle$, что даёт новый вектор $\hat{A}|\Psi\rangle$, скалярное произведение которого на исходный, определяет среднее значение. Второе $\langle\hat{A}\rangle$ и третье \bar{A} обозначения используются, когда известно о каком состоянии идет речь (или оно произвольно).

Используя условие полноты для собственных векторов \hat{A} , убедимся, что (1.23) действительно даёт значение для среднего:

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_a \langle\Psi|\hat{A}|a\rangle \langle a|\Psi\rangle = \sum_a a \langle\Psi|a\rangle \langle a|\Psi\rangle = \sum_a a |\langle a|\Psi\rangle|^2,$$

где во втором слагаемом учтено $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ и a вынесено за скобки (линейность скалярного произведения). В результате получилась сумма по всем значениям a физической величины A , умноженным на вероятности этого значения $|\langle a|\Psi\rangle|^2$. По определению, это и есть среднее значение. Для ненормированных векторов среднее равно:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}. \quad (1.24)$$

Например, для единичного оператора $\hat{A} = \hat{1}$ среднее всегда равно 1.

▷ Пусть среднее значение оператора \hat{A} в некотором нормированном состоянии $|\Psi\rangle$ равно $\bar{A} \equiv \langle \hat{A} \rangle$. Определитм оператор отклонения от среднего:

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \bar{A}. \quad (1.25)$$

Его среднее по этому же состоянию равно нулю. Среднее от квадрата можно вычислить следующим образом:

$$\langle (\hat{A} - \bar{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\bar{A} + \bar{A}^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - 2\bar{A}\langle \hat{A} \rangle + (\bar{A})^2,$$

где в силу линейности среднего, число $2\bar{A}$ вынесено за знак усреднения и учтено, что $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Таким образом:

$$D_A = \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2. \quad (1.26)$$

В общем случае $\langle \hat{A}^2 \rangle \neq \langle \hat{A} \rangle^2$ и $\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle$ не равно нулю. Оно называется *дисперсией* D_A , а корень из дисперсии – *среднеквадратичным отклонением*. Чем больше эта величина, тем чаще при измерениях A в состоянии $|\Psi\rangle$ будут получаться значения отличающиеся от среднего значения \bar{A} . В этом случае говорят, что существует большая *неопределённость* в значении A . Наоборот, если дисперсия равна нулю, то при каждом измерении будет получаться одно и тоже значение. Это происходит, когда состояние является собственным вектором измеряемой величины.

Неопределённость в измерениях имеет статистический характер. При каждом конкретном измерении результат может быть, в принципе, получен сколь угодно точно. Однако, повторение таких измерений в одном и том же состоянии может приводить к разбросу результатов вокруг среднего значения. Говорить о вероятностях или средних для одного измерения бессмысленно.

Важной характеристикой двух физических величин в данном состоянии $|\Psi\rangle$ является *ковариация*:

$$D_{AB} = \frac{1}{2} \langle \Delta\hat{A} \Delta\hat{B} + \Delta\hat{B} \Delta\hat{A} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \rangle - \bar{A}\bar{B}, \quad (1.27)$$

где определения (1.25) для $\Delta\hat{A}$ и $\Delta\hat{B}$ перемножены с учётом порядка следования операторов. Понятно, что D_{AA} равно дисперсии D_A . Если ковариация равна нулю, то говорят, что величины *статистически независимы*. Такая независимость является свойством как операторов \hat{A} , \hat{B} , так и состояния $|\Psi\rangle$ по которому происходит усреднение. В частности, ковариация может оказаться отличным от нуля, даже для коммутирующих операторов, если в данном состоянии $\langle \hat{A}\hat{B} \rangle \neq \bar{A}\bar{B}$.

▷ Подчеркнём, что говоря об *измерениях*, не имеют ввиду обязательного присутствия физика (наблюдателя), снабжённого приборами. Квантовая система может взаимодействовать с любой макросистемой. Поэтому измерением будем считать взаимодействие, которое за короткое время меняет состояние микросистемы.

Физические величины определены, когда задан способ их измерения. Другими словами, должна быть описана некоторая (обычно макроскопическая) система, резкое и хорошо различимое изменение свойств которой нами интерпретируется как измерение физической величины. Такую систему естественно называть *прибором*.

Разделение на квантовые микросистемы и “классические” макросистемы достаточно условно. Одна и та же система, в зависимости от постановки задачи или учитываемой точности, может считаться квантовой или классической. С одной стороны, квантовая механика, как любая самосогласованная физическая теория, имеет своим предельным случаем классическую механику. С другой стороны, используемые при измерениях приборы, с высокой степенью точности, классические объекты. Поэтому такую важную роль при обсуждении квантовой теории играет процесс измерения или взаимодействие микро- и макромира.

▷ В классической механике, по крайней мере в принципе, можно получить наиболее детальное описание системы. Наблюдение за ней возможно без оказания какого либо воздействия. Это идеализация, которая сплошь и рядом нарушается в окружающем мире. Предсказания эволюции классической системы полностью однозначны. Вероятность лишь отражает степень нашего незнания или невозможности учесть все факторы. Поэтому говорят, что классическая теория *детерминирована*.

В квантовом мире всё это не так. Мы не можем “подсматривать” за микрообъектами без воздействия, меняющего их состояние. Как бы детально не определялось состояние системы, всегда существует элемент неопределённости. В общем случае мы не можем однозначно предсказать результаты эксперимента. В отличии от классической физики, квантовый мир в своей основе имеет вероятностную природу, которую называют *индетерминизмом*. Он не связан с нашим незнанием, а принципиально присущ природе квантовых объектов.

Существуют различные “интерпретации” квантовой механики, пытающиеся тем или иным образом “объяснить” природу индетерминизма. Некоторые из них рассмотрены в главе 8. Впрочем, математический аппарат и физические выводы не зависят от того, какая философская позиция считается верной.

4 Гамильтонов формализм

• Энергия, выраженная через координаты и импульсы, называется *функцией Гамильтона*. Пусть N частиц массой m находятся во внешнем поле $U(\mathbf{x})$ и попарно взаимодействуют при помощи потенциала $W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Тогда функция Гамильтона равна:

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{x}_i) \right\} + \sum_{i < j=1}^N W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \quad (1.28)$$

Динамика (изменение координат и импульсов со временем) в классической механике описывается *уравнениями Гамильтона*:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (1.29)$$

где $q_i = q_i(t)$ – обобщённые координаты. Для одной частицы в декартовых координатах $q_1 = x$, $q_2 = y$, $q_3 = z$. Для системы N частиц q_i – это множество координат всех частиц. Каждой обобщённой координате соответствует обобщённый импульс $p_i = p_i(t)$.

Полная производная по времени от функции $f = f(t, q(t), p(t))$, с учётом уравнений Гамильтона (1.29), равна:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{dq_i}{dt} \frac{\partial f}{\partial q_i} + \frac{dp_i}{dt} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right).$$

Вводя скобку Пуассона:

$$\{f, g\}_c = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right),$$

производную запишем следующим образом:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}_c. \quad (1.30)$$

Несложно проверить, что:

$$\{q_i, q_j\}_c = 0, \quad \{p_i, p_j\}_c = 0, \quad \{p_i, q_j\}_c = \delta_{ij} \quad (1.31)$$

и справедливы тождества, аналогичные операторным для коммутаторов:

$$\{f, g\}_c = -\{g, f\}_c, \quad \{f, gh\}_c = \{f, g\}_c h + g \{f, h\}_c.$$

Если функция f явным образом не зависит от времени ($\partial f / \partial t = 0$) и $\{H, f\}_c = 0$, то $f = f(q, p)$ постоянна (интеграл движения). Для двух интегралов движения f и g скобка Пуассона также является интегралом движения: $\{f, g\} = \text{const}$ (теорема Пуассона).

- Постулируется следующее соответствие между классической скобкой Пуассона величин A, B и коммутатором $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ операторов \hat{A}, \hat{B} в квантовой теории:

$$\{A, B\}_c = C \quad \Rightarrow \quad \frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}. \quad (1.32)$$

Другими словами, во всех выражениях, где встречается скобка Пуассона $\{A, B\}_c$, её необходимо заменить на $(i/\hbar) [\hat{A}, \hat{B}]$. Константа \hbar , стоящая в (1.32) является *постоянной Планка*.

Пользуясь правилом (1.32) и (1.31), запишем коммутационные соотношения для операторов обобщённых координат и импульсов:

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{q}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}. \quad (1.33)$$

В одномерном случае коммутатор декартовой координаты и импульса равен:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.34)$$

(операторы под коммутатором переставлены местами со знаком минус).

Любой классической функции координат и импульсов $A(q, p)$ в квантовой механике соответствует оператор $\hat{A} = A(\hat{q}, \hat{p})$. Он зависит от операторов координат и импульсов так же как и классическая функция. Впрочем, необходимо уточнение, связанное с некоммутирующими операторами. Если \hat{A} и \hat{B} неперестановочны, то для их произведения используется следующее правило соответствия:

$$AB \quad \Rightarrow \quad \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2}. \quad (1.35)$$

Такая симметризованная комбинация эрмитова, поэтому физическая величина AB будет иметь действительные собственные значения.

В случае нелинейной зависимости $A(\hat{q}, \hat{p})$, построение эрмитового оператора обладает определённым произволом. Тем не менее, в большинстве случаев это не составляет проблем. Например гамильтониан движения частицы во внешнем поле аддитивно зависит от некоммутирующих операторов:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{x}}).$$

Это выражение, полностью аналогичное классическому, будет часто использоваться в дальнейшем. При этом потенциалы $U(\hat{\mathbf{x}})$ также будут иметь классический функциональный вид.

- Рассмотрим величину $A = A(q, p)$, которая явным образом не зависит от времени. Соответствующей ей оператор зависит от времени $\hat{A}(t)$ в смысле зависимости $\hat{A}(t) = A(\hat{q}(t), \hat{p}(t))$. Пользуясь правилом (1.32) и классическим уравнением (1.30), запишем:

$$\imath\hbar \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}]. \quad (1.36)$$

Это *уравнение Гейзенберга* описывает динамику изменения физических величин в квантовой теории. В частности, если \hat{A} коммутирует с гамильтонианом, то физическая величина *сохраняется*:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0, \quad \Rightarrow \quad \frac{d\hat{A}}{dt} = 0. \quad (1.37)$$

Решение уравнения Гейзенберга можно представить в виде:

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^+(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t), \quad \hat{U}(0) = \hat{1}, \quad (1.38)$$

где $\hat{A}(0) \equiv \hat{A}$ – оператор в начальный момент времени $t = 0$. Такая запись с операторами $\hat{U}(t)$ слева и справа от $\hat{A}(0)$ обеспечивает сохранение эрмитовости $\hat{A}(t)$ в любой момент времени, если в начальный момент он был эрмитов ($\lessdot H_3$). Возьмём производную произведения с сохранением порядка операторов:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{d\hat{U}^+}{dt} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^+ \hat{A} \frac{d\hat{U}}{dt}.$$

Уравнение (1.36) будет выполняться, если:

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = -\frac{\imath}{\hbar} \hat{U} \hat{H} \quad (1.39)$$

и аналогично для эрмитового сопряжения со знаком плюс ($\imath^+ = \imath^* = -\imath$) и $(\hat{U} \hat{H})^+ = \hat{H} \hat{U}^+$ так как гамильтониан эрмитов. Если \hat{H} не зависит от времени, можно написать

$$\frac{d^2\hat{U}}{dt^2} = -\frac{\imath}{\hbar} \frac{d\hat{U}}{dt} \hat{H} = \left(-\frac{\imath}{\hbar} \right)^2 \hat{U} \hat{H}^2, \quad \dots \quad \Rightarrow \quad \frac{d^n\hat{U}}{dt^n} \Big|_{t=0} = \left(-\frac{\imath}{\hbar} \hat{H} \right)^n,$$

где положено $\hat{U}(0) = \hat{1}$. В силу разложения экспоненты в ряд Тейлора, справедливо следующее выражение для *эволюционного оператора*:

$$U(t) = e^{-\frac{\imath}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (1.40)$$

Он зависит от гамильтониана, и их можно переставлять: $\hat{U} \hat{H} = \hat{H} \hat{U}$.

▷ Среднее значение произвольного оператора в состоянии $|\Psi\rangle$ может изменяться со временем:

$$\langle \Psi | \hat{A}(t) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{U}^+(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t) | \Psi \rangle = \langle \Psi, t | \hat{A}(0) | \Psi, t \rangle,$$

где в последнем равенстве введен новый вектор:

$$|\Psi, t\rangle = \hat{U}(t) |\Psi, 0\rangle \quad (1.41)$$

и состояние $|\Psi, 0\rangle$ соответствует начальному моменту времени $t = 0$. Беря производную (1.41), с учётом (1.39) и перстановочности $\hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U}$, получаем *уравнение Шрёдингера*:

$$i\hbar \frac{d|\Psi, t\rangle}{dt} = \hat{H} |\Psi, t\rangle. \quad (1.42)$$

▷ Оператор \hat{U} *унитарен* (эрмитово сопряжение даёт обратный оператор):

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{1}, \quad \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}, \quad (1.43)$$

поэтому норма вектора $|\Psi, t\rangle$, удовлетворяющего уравнению Шрёдингера, с течением времени не меняется: $\langle \Psi, t | \Psi, t \rangle = \langle \Psi, 0 | \Psi, 0 \rangle$.

В общем случае $e^{\hat{A}+\hat{B}} \neq e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$, однако, экспоненты от коммутирующих операторов таким образом перемножать можно и эволюционный оператор (1.40) подчиняется соотношениям *линейности* и *обратимости*:

$$\hat{U}(t_1 + t_2) = \hat{U}(t_2) \hat{U}(t_1), \quad \hat{U}(-t) = \hat{U}^{-1}(t). \quad (1.44)$$

Линейность вполне естественна и означает, что эволюция за время t_1 (от $t = 0$), а затем от $t = t_1$ ещё в течении времени t_2 эквивалентна эволюции от $t = 0$ до $t = t_1 + t_2$.

Закон композиции (линейность) и существование обратного преобразования (обратимость) приводят к непрерывной однопараметрической группе. Она характеризуется поведением оператора $\hat{U}(t)$ в окрестности нуля. Можно показать ($\lessdot H_4$), что из (1.44) следует уравнение Ли в форме (1.39), где \hat{H}/\hbar является *инфinitезимальным* эрмитовым оператором.

Подведём итоги. В квантовой теории возможны два эквивалентных подхода к описанию динамики. В первом, которое называется *представлением Гейзенберга*, операторы являются динамическими величинами $\hat{A}(t)$, а векторы состояний неизменны: $|\Psi\rangle = |\Psi, 0\rangle$. Во втором (*представление Шрёдингера*) ситуация обратная: операторы $\hat{A} = \hat{A}(0)$ не зависят от времени, а векторы $|\Psi, t\rangle$ – зависят. В обоих случаях динамику системы определяет эволюционный оператор (1.40).

5 Матричные представления

▷ В базисе собственных векторов некоторого оператора: $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, любые операторы можно записать в матричном виде. По определению, матричное представление оператора \hat{B} имеет вид $\langle a|\hat{B}|a'\rangle$. Если спектр дискретный – это обычная матрица с индексами $B_{aa'}$ (возможно бесконечномерная для неограниченного спектра). Действие оператора на вектор $\hat{B}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$, с учётом (1.17), в матричном виде записывается так:

$$\langle a|\hat{B}|\Psi\rangle = \sum_{a'} \langle a|\hat{B}|a'\rangle \langle a'|\Psi\rangle = \langle a|\Phi\rangle. \quad (1.45)$$

▷ Если динамика классической системы допускает только *финитные* движения (в ограниченной области пространства), то в квантовой теории гамильтониан такой системы часто имеет дискретный спектр (дискретный набор собственных значений). Обозначим его собственные векторы как $|E_n\rangle$:

$$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle, \quad \langle E_n|E_m\rangle = \delta_{nm}.$$

Запись величин в базисе $|E_n\rangle$ называется *энергетическим представлением*. Любой вектор в этом базисе выражается числом $\langle E_n|\Psi\rangle$. В соответствии с общими принципами $|\langle E_n|\Psi\rangle|^2$, имеет смысл вероятности получить энергию E_n системы в состоянии $|\Psi\rangle$. Матрица гамильтониана в энергетическом представлении диагональна:

$$H_{nm} \equiv \langle E_n|\hat{H}|E_m\rangle = E_n \langle E_n|E_m\rangle = E_n \delta_{nm}. \quad (1.46)$$

▷ Если базисом служат собственные векторы оператора координаты $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ с непрерывным спектром, то это называется *координатным представлением*. Так как спектр непрерывный, индексы матриц пробегают непрерывные значения и суммирование заменяется на интегрирование. В этом базисе гамильтониан в общем случае уже не диагонален и уравнение на собственные значения (1.46) выглядит следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle x|\hat{H}|x'\rangle \langle x'|E_n\rangle dx' = E_n \langle x|E_n\rangle.$$

Величины $u_n(x) = \langle x|E_n\rangle$ называются собственными *волновыми функциями* гамильтониана.

▷ Удобно также *импульсное представление*, использующее в качестве базиса собственные векторы $|p\rangle$ оператора импульса \hat{p} частицы. Уравнение на собственные значения гамильтониана записывается аналогично координатному представлению, при помощи суммирования (интегрирования) по всем возможным значениям импульса (одномерный случай):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle p | \hat{H} | k \rangle \langle k | E_n \rangle dk = E_n \langle p | E_n \rangle. \quad (1.47)$$

▷ Если система находится в состоянии $|\Psi\rangle$, то волновая функция $\langle x | \Psi \rangle$ в координатном базисе равна амплитуде *плотности* вероятности получить при измерении координаты значение x . Это означает, что $|\langle x | \Psi \rangle|^2 dx$ даёт *вероятность* обнаружить частицу между x и $x + dx$. Аналогичный смысл амплитуды плотности вероятности имеет функция $\langle p | \Psi \rangle$ импульсного базиса. Интеграл по всем x для $|\langle x | \Psi \rangle|^2$ или импульсам для $|\langle p | \Psi \rangle|^2$ должен равняться единице (частица находится хоть где-то или имеет хоть какой-то импульс):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\langle x | \Psi \rangle|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\langle p | \Psi \rangle|^2 dp = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (1.48)$$

Эти утверждения являются условием нормировки вектора $|\Psi\rangle$, записанного в координатном и импульсном базисах, соответственно.

▷ Переход от одного представления к другому осуществляется при помощи условия полноты (1.17). Например, волновые функции координатного и энергетического представлений связаны следующим образом:

$$\langle x | \Psi \rangle = \sum_n \langle x | E_n \rangle \langle E_n | \Psi \rangle. \quad (1.49)$$

Аналогично осуществляется переход от координатного базиса к импульсному и наоборот:

$$\langle x | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | p \rangle \langle p | \Psi \rangle dp, \quad \langle p | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dp, \quad (1.50)$$

где $\langle p | x \rangle$ и $\langle x | p \rangle$, в соответствии со свойствами скалярного произведения (1.3), связаны комплексным сопряжением: $\langle x | p \rangle = \langle p | x \rangle^*$.

6 Одновременная измеримость

- Если физическим величинам A и B соответствуют некоммутирующие эрмитовы операторы \hat{A} и \hat{B} , то эти величины нельзя одновременно измерить. Этот факт выражается при помощи соотношения неопределеностей. Пусть для эрмитовых операторов \hat{A} , \hat{B} и \hat{C} :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \imath \hat{C} \quad (1.51)$$

и система находится в состоянии, описываемом нормированным вектором $|\Psi\rangle$. В этом состоянии средние значения физических величин равны:

$$\bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle, \quad \bar{B} = \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle.$$

Введем операторы отклонения от среднего $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \bar{A}$ и аналогично для $\Delta\hat{B}$ (стр. 24). Запишем среднее, зависящее от действительного числа α :

$$I(\alpha) = \langle (\alpha\Delta\hat{A} + \imath\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A} - \imath\Delta\hat{B}) \rangle \geq 0.$$

Оно неотрицательно в силу последнего соотношения (1.13), так как под средним стоит выражение вида $\hat{L}\hat{L}^+$ ($\Delta\hat{A}$ и $\Delta\hat{B}$ – эрмитовы). Перемножим скобки с сохранением порядка операторов:

$$I(\alpha) = \alpha^2 D_A + \alpha \langle \hat{C} \rangle + D_B \geq 0,$$

где D_A , D_B – дисперсии величин и учтено, что $-\imath [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = -\imath [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ (операторы \hat{A} , \hat{B} с числами \bar{A} , \bar{B} коммутируют). Парабола $I(\alpha)$ лежит над осью α и ближе всего к нулю находится её минимум. Найдём его, взяв производную по α и приравняв её нулю:

$$2\alpha_0 D_A + \langle \hat{C} \rangle = 0, \quad I(\alpha_0) = -\frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4 D_A} + D_B \geq 0.$$

Таким образом, получаем неравенство, называемое *соотношением неопределённостей*:

$$D_A D_B \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle^2. \quad (1.52)$$

Дисперсии, стоящие слева, имеют смысл квадратов ошибок измерений величин A и B . В классической механике ошибки измерений можно сделать сколь угодно малыми. В квантовой теории, если $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ и среднее их коммутатора отлично от нуля, то произведение дисперсий всегда больше нуля. Если мы уменьшаем ошибку измерения одной величины, то возрастает ошибка в измерениях другой и наоборот.

▷ Соотношение неопределенностей – это *статистическое* утверждение, не применимое для однократных измерений. Чтобы им воспользоваться, необходимо создать множество одинаковых систем, находящихся в одном и том-же состоянии $|\Psi\rangle$. Их принято называть *ансамблем*. У каждой системы ансамбля измеряются физические величины A и B . Обычно, у данной системы в один момент времени нельзя измерить и A и B . Но так как состояния всех систем одинаковы, это не принципиально. У одной группы систем ансамбля можно измерить A , а у другой B . По совокупности этих измерений вычисляются средние значения \bar{A} , \bar{B} и дисперсии. Последние и будут удовлетворять неравенству (1.52).

Необходимость в ансамбле связана с тем, что взаимодействие прибора и микросистемы меняет состояние последней. Если в состоянии $|\Psi\rangle$ измерить величину A , получив значение a , то состояние $|\Psi\rangle$ изменится на $|a\rangle$ (собственный вектор \hat{A}). При продолжении измерения A , всегда будет получаться a . Если же измерить B , то из состояния $|a\rangle$ система перейдёт в $|b\rangle$. Поэтому необходимо после каждого измерения “возвращать” систему в исходное состояние $|\Psi\rangle$ или использовать ансамбль одинаковых систем в одном состоянии. Подчеркнём, что ансамбль является совокупностью систем, которые не обязаны находиться в одном месте или даже формироваться в одно время.

▷ Соотношение (1.52) можно усилить, при помощи неравенства Коши-Шварца (V.9), стр. 351, справедливого для любых двух векторов:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2.$$

Выберем их в виде:

$$| \alpha \rangle = \Delta \hat{A} |\Psi\rangle, \quad | \beta \rangle = \Delta \hat{B} |\Psi\rangle.$$

Тогда (среднее везде по состоянию $|\Psi\rangle$):

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = D_A, \quad \langle \beta | \beta \rangle = D_B, \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle = \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \bar{A} \bar{B}.$$

Модуль комплексного числа z запишем как: $|z|^2 = \{(z+z^*)^2 - (z-z^*)^2\}/4$.

Для $z = \langle \alpha | \beta \rangle$ и $z^* = \langle \alpha | \beta \rangle^+ = \langle \Delta \hat{B} \Delta \hat{A} \rangle$ теперь получаем:

$$D_A D_B \geq D_{AB}^2 + \frac{1}{4} \langle i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2, \quad (1.53)$$

где D_{AB} – *ковариация* величин A и B (1.27). Благодаря ей, в правой части может быть не ноль, даже для коммутирующих операторов (например $D_{XY} = D_x$ для $\hat{X} = \hat{x}$ и $\hat{Y} = \hat{x} + \hat{y}$, где $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$, $\bar{x} = \bar{y} = \langle \hat{x} \hat{y} \rangle = 0$).

Соотношение (1.52) называют неравенством Робертсона (1929 г.). Для координат и импульса его первым сформулировал Гейзенберг (1927 г.). Более общее неравенство (1.53) получил Шрёдингер в 1930 г.

- Коммутирующие операторы $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ имеют общие собственные векторы и можно создать состояние, не меняющееся при измерении и A и B (по очереди или одновременно). Справедливо и обратное утверждение: если операторы имеют общую систему собственных векторов, то они коммутируют. Действительно, пусть:

$$\hat{A}\hat{B}|a, b\rangle = b\hat{A}|a, b\rangle = ba|a, b\rangle = \hat{B}\hat{A}|a, b\rangle.$$

Это соотношение справедливо и для произвольного состояния $|\Psi\rangle$, так как его можно разложить по векторам $|a, b\rangle$, образующим базис векторного пространства (\hat{A} , \hat{B} – эрмитовы).

▷ В тоже время, не коммутирующие операторы $\hat{K} = [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ не имеют общих собственных векторов. Действительно, пусть от противного общим вектором \hat{A} и \hat{B} является $|\Psi\rangle$ с собственными значениями a и b :

$$\hat{K}|\Psi\rangle = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle = (ab - ba)|\Psi\rangle = 0.$$

Если для \hat{K} вектор $|\Psi\rangle$ не собственный с нулевым значением, то мы приходим к $\hat{K} = \hat{0}$, что противоречит некоммутативности операторов.

▷ Множество всех не единичных операторов, коммутирующих друг с другом называется *полным набором*. Наиболее детальное описание состояния системы возникает при одновременном измерении физических величин, операторы которых входят в полный набор. Например, при свободном движении частицы в 3-мерном пространстве полным набором могут быть проекции вектора импульса: $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$. Они коммутируют с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, т.е. не меняются со временем (1.37).

Для получения состояния $|a, b\rangle$ не обязательно физические величины A , B измерять одновременно. Это можно сделать и последовательно, отбирая сначала системы, имеющие $A = a$, а затем (в отобранных), оставить системы с $B = b$.

Различные наборы коммутирующих операторов могут пересекаться. Пусть эрмитовы операторы \hat{A} и \hat{B} не коммутируют между собой, но коммутируют с третьим оператором \hat{C} :

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0, \quad [\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0, \quad (1.54)$$

т.е. есть два коммутирующих набора: \hat{C} , \hat{A} и \hat{C} , \hat{B} . В каждый из них входит один и тот-же оператор \hat{C} . Собственные векторы этих наборов будут отличаться и их можно нумеровать собственными значениями каждого набора: $|c, a\rangle$ – в первом случае и $|c, b\rangle$ – во втором. Это два *различных* базиса, по каждому из которых можно разложить произвольный вектор. При этом $|c, a\rangle$ и $|c, b\rangle$, вообще говоря, не ортогональные векторы.

▷ Если выполняется (1.54), то спектр оператора \hat{C} вырожден. Действительно, рассмотрим собственные векторы полного набора \hat{C}, \hat{A} :

$$\hat{C} |c, a\rangle = c |c, a\rangle, \quad \hat{A} |c, a\rangle = a |c, a\rangle.$$

Так как \hat{C} и \hat{B} коммутируют, то:

$$\hat{C}\hat{B} |c, a\rangle = \hat{B}\hat{C} |c, a\rangle = c \hat{B} |c, a\rangle.$$

Отсюда следует, что, если вектор $\hat{B}|c, a\rangle$ не нулевой, то он также является собственным вектором оператора \hat{C} с тем же собственным значением, что и $|c, a\rangle$. Так как \hat{A} и \hat{B} не коммутируют, вектор $\hat{B}|c, a\rangle$ не совпадает (с точностью до константы) с вектором $|c, a\rangle$ (иначе он был бы собственным вектором и оператора \hat{B}). Поэтому данному собственному значению c соответствует по крайней мере два различных собственных вектора $|c, a\rangle$ и $\hat{B}|c, a\rangle$. Это и означает, что спектр \hat{C} вырожден. Действуя на один известный вектор $|c, a\rangle$ операторами \hat{B}, \hat{B}^2 и т.д., можно находить другие вырожденные векторы (пока не получится ноль или повторы).

Для коммутирующих операторов $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ не всем парам собственных значений $|c, a\rangle$ соответствует не нулевой вектор. Для данного c число таких векторов равно кратности вырождения c ($\Leftarrow H_6$).

▷* В заключение отметим, что в матричном представлении коммутирующие операторы \hat{A} и \hat{B} можно одновременно привести к диагональному виду. Рассмотрим базис, построенный на уравнении $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$. В нём матрица $A_{aa'} = \langle a|\hat{A}|a'\rangle$ диагональна и равна $a\delta_{aa'}$. Запишем матричные элементы произведения операторов ($\Leftarrow H_5$):

$$\langle a|\hat{A}\hat{B}|a'\rangle = \sum_{a''} A_{aa''} B_{a''a'} = a B_{aa'}, \quad \langle a|\hat{B}\hat{A}|a'\rangle = \sum_{a''} B_{aa''} A_{a''a'} = a' B_{aa'}.$$

Так как $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, вычитая их, имеем

$$(a - a') B_{aa'} = 0.$$

Если $a' \neq a$, то $B_{aa'} = 0$, т.е. матрица диагональна.

При вырождении $\langle a, i|\hat{A}|a', i'\rangle = a\delta_{aa'}\delta_{ii'}$, где $i = 1, \dots, k$ и $k = k(a)$ – кратность вырождения собственного значения a . В этом случае, при умножении матриц надо суммировать по a , и для каждого a по i , что снова проведёт к $(a - a') B_{ai, a'i'} = 0$. Пусть $a = a'$ с кратностью вырождения k . Тогда отличны от нуля могут быть k^2 элементов $B_{ai, ai'}$, из которых k диагональны и $k^2 - k$ недиагональны. Вместо $|a, i\rangle$ можно взять линейную комбинацию $|a, i\rangle'$ (сумму по j от $c_{ij}|a, j\rangle$, где c_{ij} – унитарная матрица, стр. 370). При помощи чисел c_{ij} можно обратить в ноль недиагональные элементы $B_{ai, ai'}$.

7 Координатное представление

Координатное представление играет особую роль, так как позволяет свести многие задачи к решению дифференциальных уравнений.

“Непрерывная” матрица оператора координаты в этом базисе диагональна и имеет вид

$$x_{xx'} = \langle x | \hat{x} | x' \rangle = x' \langle x | x' \rangle = x' \delta(x - x'),$$

где учтена нормировка собственных функций непрерывного спектра на функцию Дирака. Чтобы найти матрицу импульса, умножим коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ справа на $|x'\rangle$, а слева на $\langle x|$:

$$\langle x | (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) | x' \rangle = (x - x') \langle x | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \langle x | x' \rangle,$$

где учтено уравнение на собственные значения $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$ и его сопряжение $\langle x|\hat{x} = x\langle x|$ (эрмитовый оператор $\hat{x}^+ = \hat{x}$ действует налево), стр. 19. Таким образом:

$$(x - x') p_{xx'} = i\hbar \delta(x - x'), \quad (1.55)$$

что выполняется, если:

$$p_{xx'} = -i\hbar \frac{\partial \delta(x - x')}{\partial x}. \quad (1.56)$$

Действительно, подставим эту матрицу в (1.55), умножим на произвольную функцию $f(x)$ и проинтегрируем по dx :

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \delta(x - x')}{\partial x} (x - x') f(x) dx = i\hbar f(x') \quad (1.57)$$

(интеграл в правой части (1.55) с функцией Дирака дал $f(x')$, стр. 334). Проведём теперь интегрирование по частям. При фиксированном $x' \neq \infty$ на границах интегрирования $\pm\infty$ функция Дирака равна нулю ($x \neq x'$), поэтому имеем:

$$i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \frac{\partial(x - x') f(x)}{\partial x} dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \left\{ f(x) + (x - x') \frac{df(x)}{dx} \right\} dx.$$

Первое слагаемое в фигурных скобках при интегрировании с функцией Дирака даст $i\hbar f(x')$, как в правой части (1.57). Второе слагаемое равно нулю в силу множителя $(x - x')$, обращающегося в ноль после интегрирования с $\delta(x - x')$.

▷ При умножении матриц проводится суммирование (1.45). В непрерывном случае оно заменяется на интегрирование по dx , которое снимается при наличии функции Дирака. Например:

$$\langle x | \hat{p} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p_{xx'} \langle x' | \Psi \rangle dx' = -i\hbar \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \langle x' | \Psi \rangle dx' = -i\hbar \frac{d \langle x | \Psi \rangle}{dx}.$$

В результате, в координатном базисе оператор координаты можно считать переменной x , а оператор импульса – производной по x :

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad \Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle. \quad (1.58)$$

Их действие на функцию $\langle x | \Psi \rangle$ уже не требует интегрирования.

▷ Уравнение на собственные значения импульса $\hat{p} | p \rangle = p | p \rangle$ в координатном представлении несложно решить ($\Leftarrow H_7$):

$$-i\hbar \frac{d\Psi_p(x)}{dx} = p \Psi_p(x), \quad \Psi_p(x) \equiv \langle x | p \rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} xp}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (1.59)$$

где константа интегрирования выбрана так, чтобы интеграл по x приводил к функции Дирака (стр. 334):

$$\langle p' | p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p'}^*(x) \Psi_p(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} x(p-p')}}{2\pi\hbar} dx = \delta(p - p'). \quad (1.60)$$

▷ Плотность вероятности для ненормированного на единицу вектора $|\Psi\rangle$ необходимо вычислять по формуле: $|\langle x | \Psi \rangle|^2 / \langle \Psi | \Psi \rangle$, чтобы интеграл от этой величины был равен единице:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\langle x | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle \Psi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} dx = \frac{\langle \Psi | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 1.$$

Плотность вероятности обнаружить координату x в состоянии с определённым импульсом p постоянна:

$$\frac{|\Psi_p(x)|^2}{\langle p | p \rangle} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\delta(0)} = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{2\pi\hbar}{V} = \frac{1}{V}, \quad (1.61)$$

где V – объём “всего пространства”, равный интегралу по dx в (1.60) при $p = p'$. Это означает, что частицу можно обнаружить где угодно, т.е. её координата не имеет определённого значения.

▷ Так как $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, в соответствии с соотношением неопределённостей (1.52), ошибки измерения (корень из дисперсий) координаты и импульса частицы удовлетворяют *неравенству Гейзенберга* (1927 г):

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.62)$$

Состояние $|p\rangle$ в координатном базисе это функция $\Psi_p(x) = \langle x|p\rangle$. В этом состоянии импульс имеет определённое значение p и оно “возникает” при точном измерении импульса. Импульс *свободной* частицы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ сохраняется (1.37). Поэтому, если в состоянии $|p\rangle$ повторно измерять импульс, всегда будет получаться это же значение p с нулевым статистическим разбросом: $\Delta p = 0$. Тогда, в силу (1.62), разброс при измерении координаты равен бесконечности: $\Delta x = \infty$. Именно это отражает постоянство плотности вероятности (1.61).

Состояние (1.59) не является собственным вектором оператора координаты. Невозможность одновременно измерить координату и импульс также означает, что нельзя создать состояние, которое одновременно описывалось бы собственным вектором и координаты и импульса (стр. 34).

▷* Рассмотрим состояние $|\Psi\rangle$, зависящее от четырёх параметров: \bar{x} , \bar{p} , D_x , D_{xy} и имеющее следующий вид в координатном базисе:

$$\langle x|\Psi\rangle = \frac{1}{(2\pi D_x)^{1/4}} \exp\left\{-\left(1 - 2\frac{i}{\hbar}D_{xp}\right)\frac{(x - \bar{x})^2}{4D_x} + \frac{i}{\hbar}\bar{p}x\right\}. \quad (1.63)$$

В импульсном базисе (1.50) оно же равно:

$$\langle p|\Psi\rangle = \frac{\left(\frac{\hbar}{2} + iD_{xp}\right)^{1/2}}{(2\pi D_x D_p^2)^{1/4}} \exp\left\{-\left(1 + 2\frac{i}{\hbar}D_{xp}\right)\frac{(p - \bar{p})^2}{4D_p} - \frac{i}{\hbar}(p - \bar{p})\bar{x}\right\}, \quad (1.64)$$

где константа D_p и остальные параметры соответствуют *нижней границе* соотношения неопределённостей (1.53):

$$D_x D_p = \frac{\hbar^2}{4} + D_{xp}^2. \quad (1.65)$$

Обе функции нормированы (интегралы от $|\langle p|\Psi\rangle|^2$ и $|\langle x|\Psi\rangle|^2$ равны 1). Параметр \bar{p} (среднее значение импульса) определяет положение максимума плотности вероятности импульсов, а D_p (дисперсия) – её ширину. Аналогичный смысл у \bar{x} и D_x для распределения координаты. Параметр D_{xy} – это ковариация координаты и импульса. В состоянии $|\Psi\rangle$ не определён ни импульс, ни координата, но ошибки их измерения минимальны. Такие состояния называются *когерентными*.

- Гамильтониан частицы с массой m , движущейся в 3-мерном пространстве в поле потенциала $U(\mathbf{x})$ имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{x}}).$$

По каждой оси декартовых координат $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$ выполняются коммутаторы: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, $[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$ и $[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$, поэтому в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \equiv -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \quad \hat{\mathbf{x}} = \{x, y, z\}.$$

Если при описании временной эволюции используется представление Шрёдингера (1.42), то в координатном базисе $\Psi(t, \mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Psi, t \rangle$, оно имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \left\{ -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + U(\mathbf{x}) \right\} \Psi(t, \mathbf{x}), \quad (1.66)$$

где $\Delta = \nabla^2$ – лапласиан (сумма вторых производных по координатам). Возьмём его комплексное сопряжение:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \left\{ -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + U(x) \right\} \Psi^*(t, \mathbf{x}).$$

Умножая уравнение (1.66) на Ψ^* , а его комплексно сопряжённую версию на Ψ и вычитая друг из друга, получаем *уравнение непрерывности*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0, \quad (1.67)$$

где ρ – плотность вероятности, а \mathbf{j} – её поток:

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \mathbf{j} = -\frac{i}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (1.68)$$

Если уравнение непрерывности проинтегрировать по объёму V , то в силу интегральной теоремы Гаусса:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(t, \mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} = - \int_S \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) d\mathbf{S},$$

где S – поверхность, окружающая объём. Представим некоторый ансамбль невзаимодействующих частиц, находящихся в состоянии $\Psi(t, \mathbf{x})$ и одновременно “существующих” в пространстве. Плотность вероятности $\rho(t, \mathbf{x})$ обнаружить частицу в точке \mathbf{x} в момент времени t пропорциональна обычной плотности частиц, а ток $\mathbf{j}(t, \mathbf{x})$ – потоку частиц через поверхность.

Глава 2

Дискретный спектр одномерных систем

В этой главе рассматриваются простые системы, энергия которых принимает дискретные значения. Сначала сформулированы основные свойства таких систем и найдены решения для “ступенчатых” потенциалов. Потенциалы с несколькими минимумами играют важную роль в физике элементарных частиц. Мы рассмотрим простую одномерную задачу в которой проявляется эффект квазивырождения уровней энергии.

Гармонический осциллятор является любимой моделью физиков, в первую очередь потому, что он точно решается, как в классической, так и в квантовой теории. Его квантование изящным образом проводится при помощи операторов рождения и уничтожения. Этот метод может быть обобщён при помощи процедуры факторизации, позволяющей находить точно решаемые задачи. Он будет рассмотрен в главе 15. Заканчивается глава качественным обсуждением ангармонического осциллятора.

Квантовая теория поля

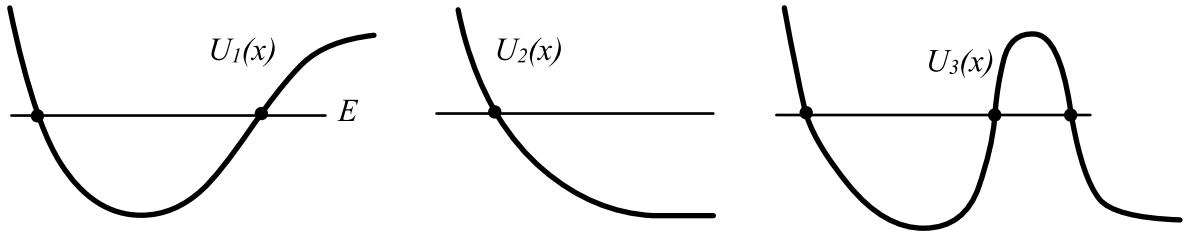
Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Общие свойства одномерных задач

В классической механике одномерная система определяется потенциалом $U(x)$ в котором движется частица. Он, вместе с начальными условиями $x(0)$ и $p(0)$, полностью определяет изменение со временем координаты и импульса. Рассмотрим консервативные системы в которых потенциал зависит только от координаты и не зависит от времени или скорости частицы. Энергия таких системах сохраняется. Движение может быть ограниченным или неограниченным, что определяется соотношением значений энергии и потенциала. Ниже на рисунках приведено несколько примеров:



При данной энергии E , потенциал $U_1(x)$ имеет две точки поворота между которыми частица совершает *финитное* (ограниченное) движение. В потенциале $U_2(x)$ – точка поворота одна и движение *инфinitо*. В третьем случае, в зависимости от начальных условий, возможна реализация обоих типов движения.

В квантовой механике разрешенные значения энергии принадлежат к спектру гамильтониана:

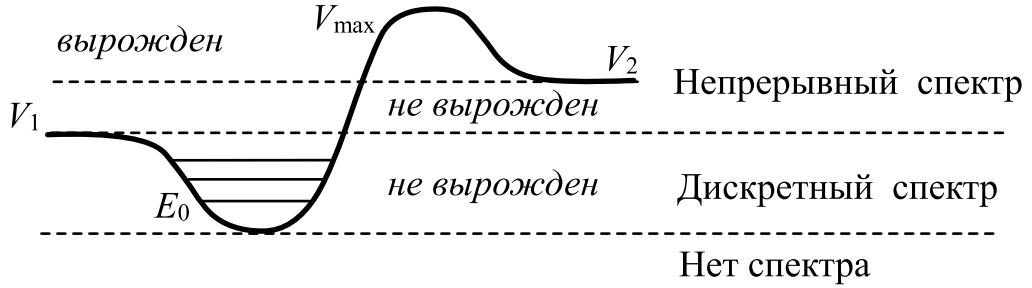
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}),$$

где m – масса частицы. В координатном представлении $\Psi(x) = \langle x | E \rangle$ уравнение на собственные значения (*стационарное уравнение Шрёдингера*) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + U(x) \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (2.1)$$

Для его решения необходимо задать граничные условия. В случае потенциала $U_1(x)$ с классическим финитным движением, естественно предположить, что квантовая частица не может оказаться на бесконечности и $\Psi(\pm\infty) = 0$. Решение уравнения (2.1) с такими граничными условиями приводит к дискретному спектру энергий. При инфинитном движении $U_2(x)$ спектр непрерывный. Третий случай $U_3(x)$ более хитрый и к нему мы вернёмся позднее.

- Дифференциальное уравнение 2-го порядка (2.1) при данном E имеет два линейно независимых решения, т.е. в принципе возможно двухкарточное вырождение. Наличие граничных условий это вырождение может снимать. Рассмотрим потенциал, изображённый ниже на рисунке:



Пусть $U(+\infty) = V_2 > U(-\infty) = V_1$. При больших $|x|$ (2.1) становится уравнением с постоянными коэффициентами. Если $E < V_1$, то

$$\Psi''(x) - \gamma_i^2 \Psi(x) = 0, \quad \gamma_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_i - E).$$

Два независимых решения этого уравнения пропорциональны $e^{\pm \gamma_i x}$. Так как классическая частица совершает финитное движение, потребуем, чтобы частицы на бесконечности не было: $\Psi(\pm\infty) = 0$. Это оставляет одно решение с асимптотикой $e^{\gamma_1 x}$ при $x \rightarrow -\infty$ и $e^{-\gamma_2 x}$ при $x \rightarrow +\infty$.

При $V_1 < E < V_2$ классическое движение инфинитно и спектр энергии непрерывный. Однако на бесконечности справа ($x = +\infty$) частица оказаться не может, что соответствует граничному условию $\Psi(+\infty) = 0$. Это также снимает вырождение, так как необходимо оставить только одно частное решение с асимптотикой $e^{-\gamma_2 x}$ при $x \rightarrow +\infty$.

Наконец, при $E > V_2$, как будет показано далее, квантовая частица может “просачиваться” (тунелировать) через холм V_{\max} . Поэтому нет физических причин требовать определённых граничных условий на бесконечности. Будем предполагать только что $\Psi(x)$ ограничена во всём пространстве (по модулю меньше некоторой константы). В этом случае спектр оказывается двухкратно вырожденным.

▷ То, что *дискретный* спектр уравнения (2.1) *не вырожден* можно также доказать следующим образом. Пусть от противного двум функциям Ψ_1 и Ψ_2 соответствует одна энергия E . Тогда:

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) \quad \Rightarrow \quad \Psi_1'' \Psi_2 - \Psi_2'' \Psi_1 = 0,$$

откуда следует, что при любом x : $\Psi_1' \Psi_2 - \Psi_2' \Psi_1 = const$. Так как на бесконечности $\Psi_i(\pm\infty) = 0$, константа равна нулю, и следовательно $\Psi_1'/\Psi_1 = \Psi_2'/\Psi_2$. Интегрируя, получаем, что $\Psi_2 = const \Psi_1$, т.е. функции, с точностью до постоянного множителя, совпадают.

- Разберёмся “на пальцах” с поведением решения уравнения (2.1) в случае дискретного спектра. Положим $2m = \hbar = 1$ и запишем ряд Тейлора для волновой функции в окрестности точки x_0 :

$$\Psi(x) \approx \Psi(x_0) + \Psi'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}(U(x_0) - E)\Psi(x_0)(x - x_0)^2,$$

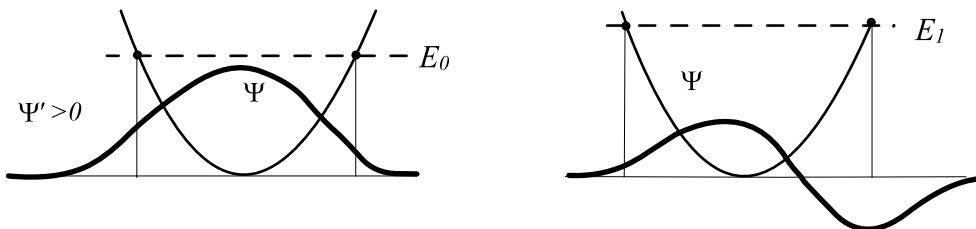
где вторая производная $\Psi''(x_0)$ подставлена из уравнения (2.1). Дифференцируя по x , имеем:

$$\Psi'(x) \approx \Psi'(x_0) + (U(x_0) - E)\Psi(x_0)(x - x_0).$$

Пусть x_0 находится далеко в классически запрещённой области слева от первой точки поворота и в её окрестности $\Psi(x_0) \gtrsim 0$ и $\Psi'(x_0) \gtrsim 0$. Будем перемещаться вправо с шагом Δx , вычисляя в точках $x = x_0 + \Delta x$ функцию $\Psi(x)$, а затем полагая $x_0 = x$ и т.д. В начале $U(x_0) - E > 0$ и $\Psi'(x) > 0$, поэтому волновая функция при увеличении x растёт.

После достижения первой точки поворота потенциал становится меньше энергии: $U(x_0) - E < 0$, производная начинает уменьшаться и рост $\Psi(x)$ замедлится. Если E в точности равна энергии основного состояния E_0 , то между точками поворота производная станет отрицательной и волновая функция, снижаясь, выйдет на асимптотическое значение $\Psi(\infty) = 0$ (при $E < E_0$ уменьшение производной не достаточно и после пересечения правой точки поворота $\Psi(x)$ начнёт неограничено расти).

Если теперь увеличить энергию E , производная быстрее станет отрицательной и волновая функция успеет пересечь ось x , оказавшись меньше нуля. При этом между точками поворота $(U(x_0) - E)\Psi(x_0) > 0$ и производная начнёт увеличиваться, пока не станет положительной. Когда E в точности равна первому возбуждённому уровню E_1 , волновая функция начнёт расти, выходя снизу на асимптотическое значение $\Psi(\infty) = 0$:



При дальнейшем увеличении энергии, до значения $E = E_2$ между точками поворота окажется два нуля, и т.д. В результате, волновая функция n -ого уровня энергии E_n имеет $n = 0, 1, 2, \dots$ нулей между точками поворота. Этот факт называется *осцилляционной теоремой*.

- Для любого оператора \hat{A} среднее его коммутатора с гамильтонианом по собственным состояниям $|E\rangle$ равно нулю ($\lessdot H_8$):

$$\langle E | [\hat{A}, \hat{H}] | E \rangle = \langle E | \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} | E \rangle = 0. \quad (2.2)$$

Этот результат позволяет находить различные соотношения между средними значениями физических величин. Например, положим $\hat{A} = \hat{x}$. Так как $[\hat{x}, \hat{H}] = i\hbar \hat{p}/m$ ($\lessdot H_9$), имеем:

$$\langle E | \hat{p} | E \rangle = 0, \quad (2.3)$$

т.е. среднее значение импульса в состоянии $|E\rangle$ равно нулю. При выборе $\hat{A} = \hat{p}$, получаем ($\lessdot H_{10}$):

$$\langle E | U'(x) | E \rangle = 0. \quad (2.4)$$

Наконец, для $\hat{A} = \hat{x}\hat{p}$ ($\lessdot H_{11}$):

$$\langle E | \hat{p}^2 | E \rangle = m \langle E | x U'(x) | E \rangle,$$

откуда, подставляя среднее квадрата импульса $\hat{p}^2 = 2m(\hat{H} - U(x))$ из гамильтониана, приходим к *виртуальной теореме*:

$$E = \langle E | \left\{ U(x) + \frac{1}{2} x U'(x) \right\} | E \rangle. \quad (2.5)$$

▷ Получим ещё одно полезное соотношение для средних. Пусть гамильтониан зависит от параметра λ . От него будут также зависеть собственные значения энергии и векторы состояния. Дифференцируя по λ среднее от гамильтониана, имеем:

$$\frac{dE}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \langle E | \hat{H} | E \rangle = \langle E | \frac{d\hat{H}}{d\lambda} | E \rangle + \frac{d\langle E |}{d\lambda} \hat{H} | E \rangle + \langle E | \hat{H} \frac{d|E\rangle}{d\lambda}.$$

Сумма последних двух слагаемых равна нулю:

$$\frac{d\langle E |}{d\lambda} | E \rangle E + E \langle E | \frac{d|E\rangle}{d\lambda} = E \frac{d\langle E | E \rangle}{d\lambda} = 0,$$

так как $\langle E | E \rangle = 1$. Поэтому, окончательно, имеем:

$$\frac{dE}{d\lambda} = \langle E | \frac{d\hat{H}}{d\lambda} | E \rangle. \quad (2.6)$$

Это соотношение, позволяющее выражать средние через производную от энергии, называется *теоремой Фейнмана-Геллмана*.

2 Чётность

• В ряде случаев в системе может присутствовать симметрия, которая приводит к дополнительной сохраняющейся величине (по-мимо энергии). Введём оператор чётности, квадрат которого равен единичному:

$$\hat{P}^2 = \hat{1}, \quad \hat{P}^{-1} = \hat{P} \quad (2.7)$$

и антисимметрический с операторами координаты и импульса:

$$\hat{P}\hat{x} = -\hat{x}\hat{P}, \quad \hat{P}\hat{p} = -\hat{p}\hat{P}. \quad (2.8)$$

Соответственно, он коммутирует с их квадратами. Действительно, представляя последовательно операторы (перенося \hat{P} вправо), имеем:

$$\hat{P}\hat{x}^2 = \hat{P}\hat{x}\hat{x} = -\hat{x}\hat{P}\hat{x} = \hat{x}\hat{x}\hat{P} = \hat{x}^2\hat{P}.$$

Аналогично оператор чётности коммутирует с любыми чётными степенями \hat{x} , \hat{p} и антисимметрический с любыми нечётными. Поэтому для функций, которые можно разложить в ряд Тейлора, справедливы соотношения:

$$\hat{P}U(\hat{x}) = U(-\hat{x})\hat{P}, \quad \hat{P}F(\hat{p}) = F(-\hat{p})\hat{P}. \quad (2.9)$$

▷ Запишем оператор чётности в координатном базисе. Для этого вычислим матричные элементы $\langle x|...|x' \rangle$ от (2.9): $P_{xx'}U(x') = U(-x)P_{xx'}$. Учитывая свойства функции Дирака (A.3), стр. 334, можно написать:

$$P_{xx'} = \langle x|\hat{P}|x' \rangle = \delta(x + x'). \quad (2.10)$$

Соответственно, его действие на любой вектор в этом базисе имеет вид:

$$\langle x|\hat{P}|\Psi \rangle = \int \langle x|\hat{P}|x' \rangle \langle x'|\Psi \rangle dx' = \int P_{xx'}\Psi(x') dx' = \Psi(-x).$$

Опуская, как и для операторов \hat{x} , \hat{p} в координатном базисе функцию Дирака и интегрирование, можно считать, что оператор чётности меняет знак аргумента функции (инвертирует ось x):

$$\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x). \quad (2.11)$$

▷ У оператора чётности два собственных значения $P = \pm 1$. Действительно, пусть $\Psi_P(x)$ собственная функция, тогда $\hat{P}^2\Psi_P(x) = P^2\Psi_P(x)$. С другой стороны $P^2 = 1$, так как:

$$\hat{P}^2\Psi_P(x) = \hat{P}\hat{P}\Psi_P(x) = \hat{P}\Psi_P(-x) = \Psi_P(x).$$

Собственными функциями для $P = 1$ являются все чётные функции: $\Psi_P(-x) = \Psi_P(x)$, в для $P = -1$ – нечётные функции: $\Psi_P(-x) = -\Psi_P(x)$.

▷ Пусть потенциал одномерной системы не меняется при инверсии координаты $x \mapsto -x$ (чётная функция). Тогда гамильтониан и оператор чётности коммутируют:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}), \quad U(-x) = U(x) \quad \Rightarrow \quad [\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (2.12)$$

Если два оператора коммутируют, то они имеют общие собственные функции (стр. 34). Следовательно, собственные функции оператора Гамильтона с симметричным потенциалом должны быть либо чётными, либо нечётными. Так как дискретный спектр одномерной системы невырожден, собственные функции одних энергий будут чётными, а для других – нечётными. Вспоминая осцилляционную теорему (стр. 44), можно прийти к выводу, что собственная функция основного состояния (не имеющая нулей) чётная, а чётности последующих уровней энергии чередуются.

▷ При свободном движении с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, кроме чётности \hat{P} , коммутирует оператор импульса \hat{p} . Но так как $[\hat{P}, \hat{p}] \neq 0$, спектр \hat{H} должен быть вырожден (стр. 35). Действительно, энергии $E = p^2/2m$ соответствует два линейно независимых собственных вектора импульса $|p\rangle$ и $|-p\rangle$ (противоположно направленные импульсы). Их суперпозиция $c_1 |p\rangle + c_2 |-p\rangle$ с произвольными коэффициентами является собственным вектором гамильтониана свободной частицы. В координатном базисе для полного набора операторов энергии \hat{H} и импульса \hat{p} независимыми собственными функциями будут $e^{\frac{i}{\hbar}xp}$ и $e^{-\frac{i}{\hbar}xp}$.

Если же в качестве полного набора взять энергию \hat{H} и чётность \hat{P} , то независимыми собственными функциями в координатном базисе будут $\cos(\omega x)$ и $\sin(\omega x)$, где $\omega^2 = 2mE/\hbar$. Заметим, что действие оператора импульса \hat{p} на одну вырожденную собственную функцию, переводит её в другую (стр. 35). Аналогично ведёт себя оператор чётности по отношению к $e^{\frac{i}{\hbar}xp}$ и $e^{-\frac{i}{\hbar}xp}$.

▷ В трёхмерном пространстве все векторы делятся на два класса – *полярные* **V** и *аксиальные* **A**. С операторами первых чётность антисимметрична, а со вторым коммутирует:

$$\hat{P}^{-1} \hat{\mathbf{V}} \hat{P} = -\hat{\mathbf{V}}, \quad \hat{P}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \hat{P} = \hat{\mathbf{A}}. \quad (2.13)$$

(такая запись преобразования величин при различных симметриях достаточно типична, а более привычный вид получается при умножении их на \hat{P} слева). Примерами полярных векторов являются операторы радиус-вектора $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$ и 3-мерного импульса $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$, а аксиальный вектор, например, момент импульса $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ (стр. 88).

3 Бесконечная потенциальная яма

- Рассмотрим частицу, одномерное “движение” которой ограничено бесконечно высокими потенциальными стенками. Пусть одна стенка располагается в точке $x = 0$, а вторая в $x = a$. Запишем уравнение для гамильтониана $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ в координатном базисе $\Psi(x) = \langle x|E\rangle$ внутри ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x), \quad 0 < x < a. \quad (2.14)$$

Так как потенциальные стенки бесконечно высокие, проникнуть за них частица не может, поэтому на границах ямы волновая функция (и, следовательно, плотность вероятности) обращается в ноль, т.е. выполняются *граничные условия*:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0.$$

Дифференциальное линейное уравнение второго порядка (2.14) является “осцилляторным” с частотой ω :

$$\Psi'' + \omega^2 \Psi = 0, \quad \omega = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

и его общее решение равно сумме двух независимых частных решений, умноженных на константы A и B :

$$\Psi(x) = A \sin(\omega x) + B \cos(\omega x).$$

Границное условие $\Psi(0) = 0$ приводит к $B = 0$, а граничное условие $\Psi(a) = 0$ даёт разрешенные значения частот, нумерующихся целым числом $n = 1, 2, \dots$:

$$\sin(\omega a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega a = \pi n.$$

Нумерация n начинается с единицы, так как значение $n = 0$ соответствует волновой функции тождественно равной нулю. Такое решение нефизично (вероятность найти частицу где-либо равна нулю). Таким образом, разрешенные уровни энергии частицы в бесконечно высокой потенциальной яме равны:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2. \quad (2.15)$$

Чем уже яма (меньше a), тем больше энергия. Уровни энергии идут неравномерно. Первое возбуждённое состояние в 4 раза выше основного, а второе выше в 9 раз.

Константу A (считая действительной) найдём из условия нормировки:

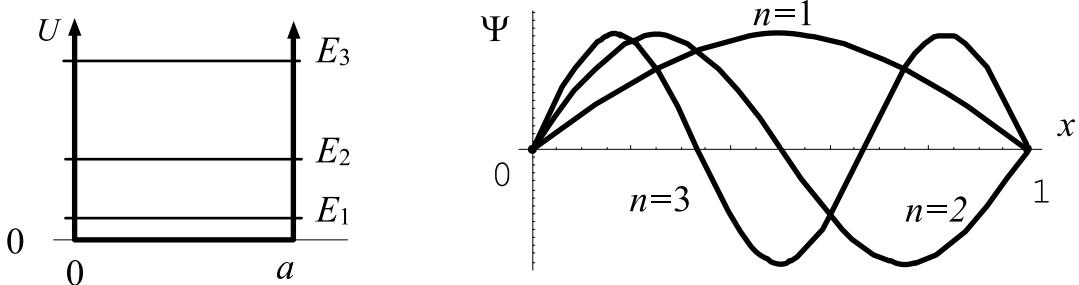
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \theta(x)\theta(a-x) \sin\left(\pi n \frac{x}{a}\right), \quad \int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = 1, \quad (2.16)$$

где функции Хевисайда отражают равенство нулю функции вне ямы. Бесконечное (счётное) множество функций $\{\Psi_1(x), \Psi_2(x), \dots\}$ образует базис пространства (стр. 372) дифференцируемых функций, определённых на интервале $0 < x < a$. Их можно разложить по этому базису:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x), \quad c_n = \int_0^a \Psi(x) \Psi_n^*(x) dx.$$

В дираковских обозначениях $\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$, $\Psi_n(x) = \langle x | E_n \rangle$, и коэффициенты разложения равны $c_n = \langle E_n | \Psi \rangle$.

Ниже на рисунке слева приведены линии дискретных уровней энергии основного ($n = 1$) и первых двух возбуждённых состояний ($n = 2, 3$). Справа нарисованы волновые функции этих состояний:



Заметим, что для возбуждённых состояний внутри потенциальной ямы существуют точки в которых невозможно встретить частицу.

В силу (2.3), средний импульс в состоянии $\Psi_n(x)$ нулевой: $\bar{p} = 0$. Средний квадрат получим усреднения гамильтониан: $\langle \hat{p}^2 \rangle = 2m \langle \hat{H} \rangle = 2mE_n$. Отметим, что $\langle \hat{p}^4 \rangle = \infty$ ($\ll H_{12}$). Среднее значение координаты из соображений симметрии равно $\bar{x} = a/2$, а средние её степеней получаем интегрированием с (2.16). Для этого удобно вычислить ($\ll H_{13}$) среднее

$$\left[1 + \frac{\lambda^2 a^2}{\pi^2 n^2} \right] \langle e^{2\lambda(\hat{x}-\bar{x})} \rangle = \frac{\operatorname{sh}(\lambda a)}{\lambda a}, \quad (2.17)$$

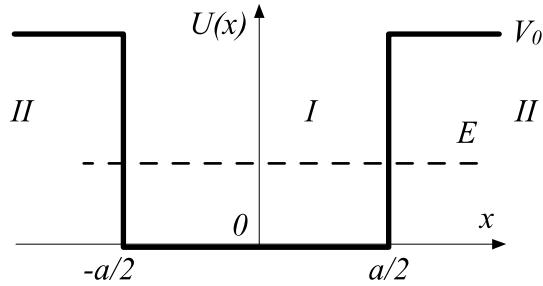
разложение которого по λ даёт все средние. В частности, нечётные степени $\langle (\hat{x} - \bar{x})^{2k+1} \rangle = 0$, а дисперсия координаты и импульса равны

$$D_x = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right), \quad D_p = \frac{\hbar^2}{a^2} \pi^2 n^2, \quad D_x D_p = \frac{\hbar^2}{12} (\pi^2 n^2 - 6). \quad (2.18)$$

В основном состоянии и $D_x D_p \approx 1.3 (\hbar^2/4)$, что на 30% больше нижней границы соотношения неопределённостей (стр. 32).

4 Яма конечной глубины

- Перейдём теперь к чуть более сложной задаче потенциальной ямы конечной глубины V_0 . Разместим начало координат $x = 0$ в середине ямы:



В классической механике для энергии $E < V_0$ частица отражается от “стенок” ямы, находясь внутри неё. В квантовой механике существует вероятность обнаружить частицу за пределами ямы.

Уравнение на собственные значения энергии имеет вид:

$$\Psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \Psi(x), \quad (2.19)$$

где потенциал кусочный:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2, \\ V_0, & |x| \geq a/2. \end{cases}$$

Он симметричен $U(-x) = U(x)$, поэтому чётность сохраняется (стр. 46) и собственные функции должны быть чётными или нечётными (в предыдущей задаче чётность также сохраняется, для демонстрации чего достаточно сдвинуть начало отсчёта $x \mapsto x - a/2$).

Проведем размерный анализ. Ширина ямы a имеет размерность x , поэтому $\hbar \sim a p$ (соотношение неопределённостей). Размерность V_0 равна размерности кинетической энергии $V_0 \sim p^2/2m$, откуда $V_0 \sim \hbar^2/2ma^2$ и в задаче есть *безразмерный* параметр λ :

$$E = V_0 \varepsilon, \quad \varepsilon = \varepsilon(\lambda), \quad \lambda = \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0. \quad (2.20)$$

Координату естественно измерять в единицах ширины ямы a . Делая в (2.19) замену $x = a\xi$, получаем “обезразмеренное” уравнение:

$$\begin{aligned} \Psi_I''(\xi) + \lambda \varepsilon \Psi_I(\xi) &= 0, & |\xi| &< 1/2, \\ \Psi_{II}''(\xi) - \lambda(1 - \varepsilon) \Psi_{II}(\xi) &= 0, & |\xi| &\geq 1/2, \end{aligned}$$

которое записано внутри и снаружи ямы (штрихи – производные по ξ).

Внутри ямы уравнение Шрёдингера осцилляторно и его линейно независимые решения это синус и косинус. Косинус имеет положительную чётность, а синус – отрицательную. Их двух решений вне ямы необходимо выбрать убывающее на бесконечности, чтобы удовлетворить граничным условиям $\Psi(\pm\infty) = 0$. Рассмотрим сначала чётные решения:

$$\begin{aligned}\Psi_I(\xi) &= A \cos(\sqrt{\lambda\varepsilon} \xi), & |\xi| < 1/2, \\ \Psi_{II}(\xi) &= B e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)} |\xi|}, & |\xi| \geq 1/2,\end{aligned}$$

где A и B – константы. Хотя потенциал изломан, вторая производная волновой функции Ψ'' в (2.19) конечна. Это означает, что первая производная Ψ' и, естественно, сама функция Ψ не испытывают скачков и должны гладко *сшиваться* на х границах ямы:

$$\Psi_I(\pm a/2) = \Psi_{II}(\pm a/2), \quad \Psi'_I(\pm a/2) = \Psi'_{II}(\pm a/2).$$

Запишем условия сшивки функций и их производных на границе $\xi = 1/2$:

$$\begin{aligned}A \cos(\sqrt{\lambda\varepsilon}/2) &= B e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}/2}, \\ A \sqrt{\lambda\varepsilon} \sin(\sqrt{\lambda\varepsilon}/2) &= B \sqrt{\lambda(1-\varepsilon)} e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}/2}.\end{aligned}$$

Деля уравнения, имеем:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\sqrt{\lambda\varepsilon}}{2} \right) = \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} - 1}. \quad (2.21)$$

Для нечётных функций решения уравнения (2.19) равны:

$$\begin{aligned}\Psi_I(\xi) &= A \sin(\sqrt{\lambda\varepsilon} \xi), & |\xi| < 1/2, \\ \Psi_{II}(\xi) &= \pm B e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)} |\xi|}, & |\xi| \geq 1/2,\end{aligned}$$

где плюс для $\xi > 1/2$, а минус – для $\xi < -1/2$, чтобы обеспечить нечётность решения вне ямы: $\Psi_{II}(-\xi) = -\Psi_{II}(\xi)$ (знак B может быть любым и зависит от поведения Ψ_I). Снова записывая условия сшивки волновых функций и их производных в точке $\xi = 1/2$, получаем:

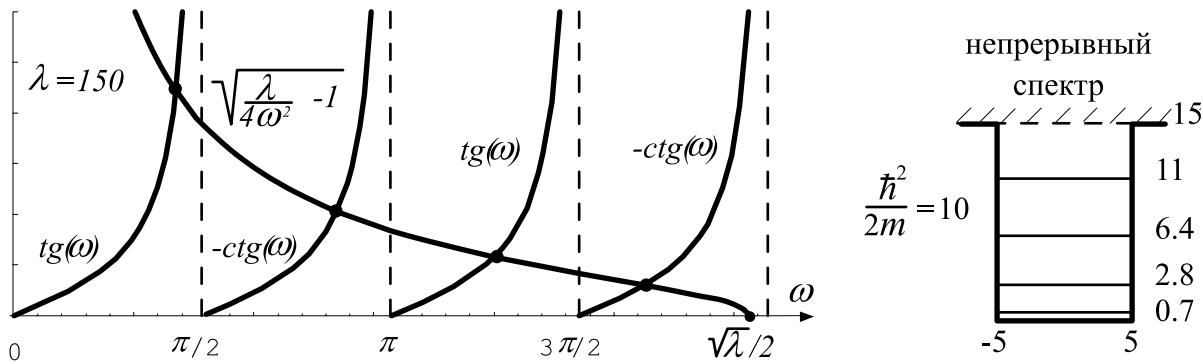
$$-\operatorname{ctg} \left(\frac{\sqrt{\lambda\varepsilon}}{2} \right) = \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} - 1}. \quad (2.22)$$

Уравнения (2.21) и (2.22) имеют решения только при дискретных значениях $\varepsilon < 1$ ($E < V_0$). Они определяют энергию частицы в потенциальной яме. При $\varepsilon \geq 1$ ($E \geq V_0$) спектр непрерывен и этот случай рассматривается в следующей главе. Уравнения (2.21), (2.22) трансцендентны, поэтому их решения можно получить численно.

▷ Рассмотрим качественно поведение решений. Введём $\omega = \sqrt{\lambda\varepsilon}/2$ и перепишем уравнения в виде:

$$\operatorname{tg}(\omega) = \sqrt{\frac{\lambda}{4\omega^2} - 1}, \quad -\operatorname{ctg}(\omega) = \sqrt{\frac{\lambda}{4\omega^2} - 1}.$$

Нарисуем на одном графике тангенс и минус котангенс. Их пересечения с функцией стоящей в правых частях уравнений даёт решения. Так, при $\lambda = 150$ возникает 4 уровня энергии (жирные точки) – для 2-х чётных и 2-х нечётных волновых функций:



Для ямы конечной глубины количество дискретных уровней энергии всегда конечно. Чем больше λ , тем их больше. При $\lambda \rightarrow \infty$ (бесконечно высокая яма) функция $\sqrt{\lambda/4\omega^2 - 1}$ пересекает левые части уравнений в асимптотах тангенса и котангенса (пунктиры). Поэтому $\omega_n = n\pi/2$ и мы возвращаемся к уровням энергии (2.15).

Если $\lambda < \pi^2$ возможно только одно дискретное состояние (чётное). Рассмотрим решение при $\lambda \rightarrow 0$. Возведя (2.21) в квадрат и заменяя тангенс его аргументом, получаем уравнение:

$$\frac{\lambda}{4}\varepsilon^2 + \varepsilon - 1 = 0,$$

решение которого, в первом порядке по λ , имеет вид: $\varepsilon = 1 - \lambda/4 + \dots$ Поэтому при малых λ энергия единственного (и всегда существующего) дискретного уровня равна:

$$E = V_0 - \frac{m}{2\hbar^2} (aV_0)^2 + \dots, \quad \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_0 \ll 1. \quad (2.23)$$

Возникновению более высоких значений дискретных энергий препятствует соотношение неопределённости. В связанном состоянии Δx порядка ширины ямы a . При её уменьшении, квадрат импульса становится большим и кинетическая энергия “выбрасывает” частицу из ямы. Малые λ соответствуют узким (a мало) или мелким (V_0 мало) ямам.

- Пусть яма бесконечно глубокая и узкая, но произведение $aV_0 = g$ конечно. В пределе $a \rightarrow 0$ и $V_0 \rightarrow \infty$ такой потенциал становится дельта-функцией Дирака (“площадь” ямы равна $g = aV_0$):

$$U(x) = -g \delta(x), \quad (2.24)$$

где отсчёт энергии ведётся от нулевого значения (т.е. перед предельным переходом потенциальная яма опущена вниз на V_0). В таком сингулярном потенциале существует единственный ($\lambda \sim ag \rightarrow 0$) дискретный уровень энергии (2.23):

$$E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \quad (2.25)$$

Его можно также получить, решая уравнение Шрёдингера в импульсном базисе (стр. 31). Матричные элементы гамильтониана равны:

$$\langle p | \hat{H} | k \rangle = \frac{p^2}{2m} \delta(p - k) + \int \langle p | x \rangle \langle x | k \rangle U(x) dx = \frac{p^2}{2m} \delta(p - k) - \frac{g}{2\pi\hbar},$$

где подставлен потенциал (2.24) и учтено, что $\langle x | p \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}xp} / \sqrt{2\pi\hbar}$ (стр. 37). С этими элементами уравнение на собственные значения гамильтониана (1.47), стр. 31 принимает вид:

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E \right) \Psi(p) = \frac{g}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) dk. \quad (2.26)$$

Для нормируемой волновой функции $\Psi(p) = \langle p | E \rangle$ (связанные состояния) правая часть равна константе и можно записать:

$$\Psi(p) = \frac{\Psi_0}{p^2 + \omega^2}, \quad (2.27)$$

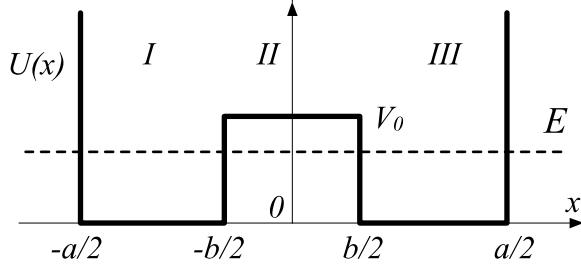
где $\omega^2 = -2mE$, $\Psi_0 = const.$ Подставляя это решение в уравнение (2.26) и интегрируя, получаем энергию (2.25) и соответственно $\omega = mg/\hbar$. Множитель $\Psi_0 = (2\omega^3/\pi)^{1/2}$ находится из условия нормировки квадрата функции $\Psi(p)$ на единицу. В координатном представлении (1.50), стр. 31 волновая функция равна:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} e^{-\frac{\omega}{\hbar}|x|}, \quad (2.28)$$

где $|x| = \theta(x)x - \theta(-x)x$ – модуль координаты и $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда (стр. 335). Используя свойства обобщённых функций: $\theta'(x) = \delta(x)$ и $|x''| = 2\delta(x)$, $|x'|^2 = 1$, можно проверить, что $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера (2.1).

5 Квазивырождение

Рассмотрим бесконечную потенциальную яму шириной a , внутри которой находится потенциальный барьер ширины b и высоты V_0 :



В силу симметрии, решение уравнения Шрёдингера достаточно искать на интервалах I и II , рассматривая ситуации, когда $E < V_0$ и $E > V_0$. Разберём более интересный случай с $E < V_0$:

$$\begin{aligned} \Psi_I'' + k^2 \Psi_I &= 0, & k = \sqrt{2mE}/\hbar, & -a/2 < x < -b/2, \\ \Psi_{II}'' - \gamma^2 \Psi_{II} &= 0, & \gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, & -b/2 < x < +b/2. \end{aligned}$$

Для первого интервала запишем решение удовлетворяющее граничному условию $\Psi_I(-a/2) = 0$:

$$\Psi_I(x) = A \sin(k(x + a/2)).$$

Для второго интервала волновая функция равна сумме экспонент $e^{\pm\gamma x}$. Так как потенциал симметричен, сразу запишем решение с фиксированной чётностью:

$$\Psi_{II}(x) = \alpha \left\{ e^{\gamma x} \pm e^{-\gamma x} \right\},$$

где плюс даёт чётную функцию, а минус – нечётную. Сошьём эти решения и их производные в точке $x = -b/2$:

$$A \sin(kc) = \alpha \left\{ e^{-\gamma b/2} \pm e^{\gamma b/2} \right\},$$

$$k A \cos(kc) = \gamma \alpha \left\{ e^{-\gamma b/2} \mp e^{\gamma b/2} \right\},$$

где $c = (a - b)/2$ – ширина каждого участка с нулевым потенциалом. Разделив условия сшивки получаем уравнения:

$$\operatorname{ctg}(kc) = -\frac{\gamma}{k} \frac{1 \mp e^{-\gamma b}}{1 \pm e^{-\gamma b}} \quad (2.29)$$

для определения дискретных уровней энергии.

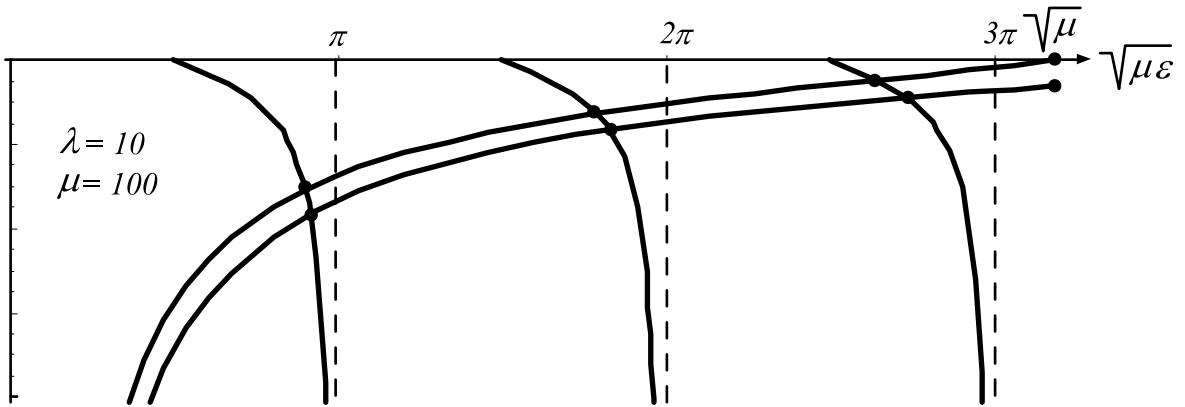
Будем их измерять в единицах высоты потенциального барьера V_0 и введём два безразмерных параметра λ и μ :

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0} < 1, \quad \lambda = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 b^2, \quad \mu = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 c^2 = \lambda \frac{c^2}{b^2}.$$

В результате, уравнение (2.29) принимает вид:

$$\operatorname{ctg}(\sqrt{\mu\varepsilon}) = -\sqrt{\frac{1}{\varepsilon} - 1} \cdot \frac{1 \mp e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}}}{1 \pm e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}}}. \quad (2.30)$$

Выясним, когда возможны связанные состояния с $\varepsilon < 1$. Для этого нарисуем левую и правую части (2.30) как функции $\sqrt{\mu\varepsilon}$:



Левая часть (2.30) разрывна в точках πn . Правая – монотонно растёт из минус бесконечности к нулю (верхний график на рисунке соответствует чётным состояниям, а нижний нечётным).

Правая часть (2.30) для чётных состояний равна нулю при $\varepsilon = 1$. Поэтому пересечения графиков (как функций $\sqrt{\mu\varepsilon}$) может происходить только на интервале от 0 до $\sqrt{\mu}$. Первое пересечение (для основного состояния) происходит при $\sqrt{\mu} \geq \pi/2$, или:

$$\mu \geq \frac{\pi^2}{4} \approx 2.5,$$

причём для $\mu = \pi^2/4$ энергия основного состояния равна высоте барьера ($\varepsilon = 1$), а первое возбуждённое состояние лежит выше барьера.

Таким образом, дискретные уровни энергии, меньшие V_0 , возникают только для достаточно высокого барьера (большие μ), разделяющего два “минимума” или больших областей с нулевым потенциалом, по сравнению с шириной барьера: $c = (a-b)/2 \gg b$. При этом, когда $\mu \geq \pi^2/4$ параметр λ может быть как больше, так и меньше единицы. При малых λ графики, соответствующие чётному и нечётному состоянию раздвигаются, а при больших λ , наоборот, сближаются.

▷ При больших λ возникает своеобразный эффект *квазивырождения* спектра, когда пары соседних уровней энергии чётных и нечётных состояний оказываются очень близкими друг к другу. Действительно, при больших λ правую часть (2.30) разложим по малой величине $e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}}$:

$$\operatorname{ctg}(\sqrt{\mu\varepsilon}) \approx -\sqrt{\frac{1}{\varepsilon} - 1} \cdot \left(1 \mp 2e^{-\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)}}\right) \rightarrow \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} - 1}.$$

В пределе $\lambda \rightarrow \infty$ решения этого уравнения для верхнего знака (чётные состояния) и нижнего знака (нечётные состояния) совпадают. При конечных, но больших λ они расщепляются, но идут парами близких значений. В таблице приведены решения трансцендентного уравнения для $\varepsilon < 1$ при различных значениях параметра λ и $\mu = 100$:

n	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 1$	$\lambda = 10$	$\lambda = 100$
0	0.03345	0.04723	0.06764	0.07996	0.08136
1	0.09772	0.09567	0.09017	0.08269	0.08136
2	0.22968	0.24480	0.27925	0.3155	0.32251
3	0.39087	0.38269	0.36064	0.3295	0.32256
4	0.62064	0.62849	0.64994	0.6886	0.70892
5	0.87946	0.86105	0.81133	0.7366	0.71010

▷ Когда λ мало, для чётных состояний в (2.30) обращается в ноль числитель, а для нечётных знаменатель. Это позволяет записать приближенное выражение для уровней энергии:

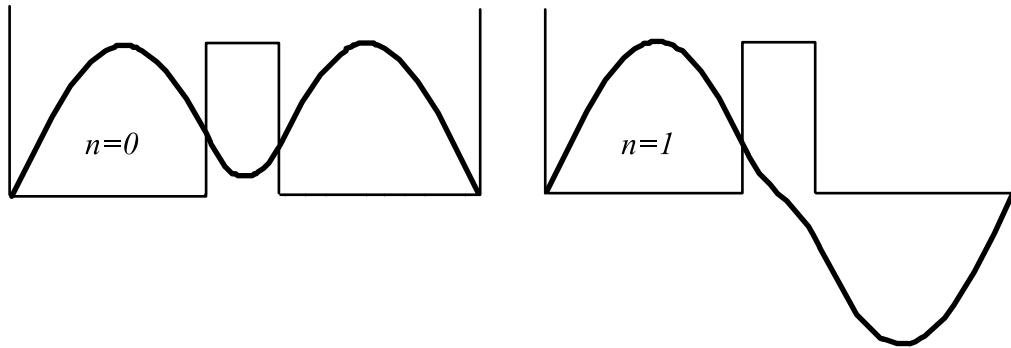
$$\varepsilon_n \approx \frac{\pi^2}{4\mu} (n+1)^2, \quad \lambda \ll 1, \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.31)$$

Так, при $\lambda = 0.01$ относительная погрешность этого соотношения (кроме основного состояния) меньше одного процента. Вообще говоря, это соотношение получено в предположении $\varepsilon < 1$ (энергия меньше барьера V_0). Впрочем, оно справедливо и при $\varepsilon > 1$. В частности, когда $\varepsilon \gg 1$, “частица не чувствует” барьера и (2.31) совпадает с энергией бесконечно глубокой ямы (2.15). Стоит проверить, что при $\varepsilon > 1$ уравнения для нахождения энергий имеют вид:

$$\operatorname{ctg}(\sqrt{\mu\varepsilon}) = -\sqrt{1 - \frac{1}{\varepsilon}} \operatorname{tg} \frac{\sqrt{\lambda(\varepsilon-1)}}{2}$$

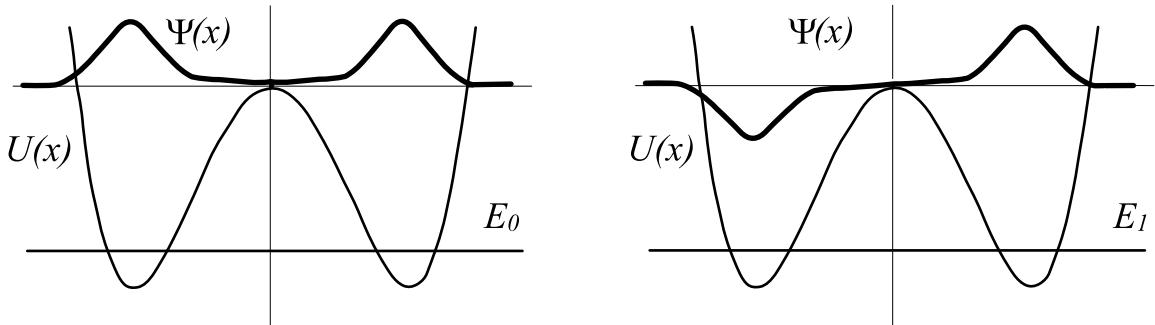
для чётных состояний и с плюс котангенсом в правой части для нечётных. Поэтому при $\lambda \rightarrow 0$ снова получим $\operatorname{ctg}(\sqrt{\mu\varepsilon}) = 0$ или $\operatorname{ctg}(\sqrt{\mu\varepsilon}) = \infty$.

▷ Ниже на рисунке приведены волновые функции основного и первого возбуждённого состояния для параметров $\mu = 100$, $\lambda = 10$:



Ширина ямы при этих параметрах равна 23.2, ширина барьера 3.1 и $2m = \hbar = V_0 = 1$. Энергии основного $E_0 = 0.080$ и первого возбуждённого состояния $E_1 = 0.083$ в 10 раз меньше высоты барьера.

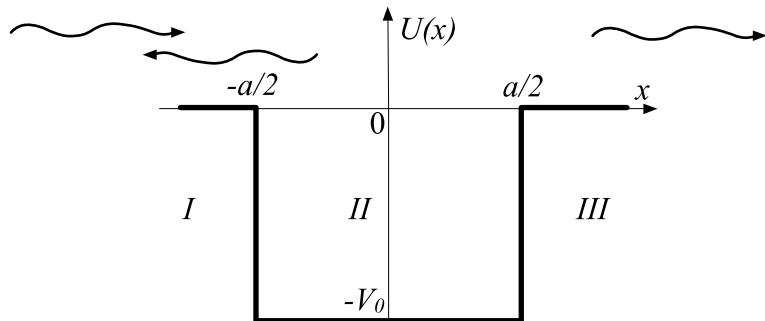
▷ Свойство квазивырождения типично для любых симметричных потенциалов обладающих минимумами. Действительно, пусть между минимумами есть высокий (по сравнению с энергией) потенциальный барьер. Тогда вероятность найти частицу под барьером мала и волновая функция локализована в каждом из минимумов. Так как потенциал симметричный (чётность сохраняется), в стационарном случае волновая функция $\Psi_n(x)$ должна быть симметричной или антисимметричной (равновероятно частица находится в каждом минимуме). В основном состоянии уравнению Шрёдингера удовлетворяет волновая функция вида $\Psi_0(x) \approx u(x) + u(-x)$, где $u(x)$ решение в окрестности правого минимума, убывающее в обе стороны, по мере удаления от него. Функция $\Psi_0(x)$ симметрична и не имеет нулей (левый рисунок):



Этому же уровню энергии соответствует антисимметричная функция $\Psi_1(x) \approx u(x) - u(-x)$, имеющая один ноль в точке $x = 0$. Она также удовлетворяет уравнению Шрёдингера и является волновой функцией первого (квазивырожденного) возбуждённого состояния. Аналогично для следующих пар уровней энергии.

6 Рассеяние на одномерной потенциальной яме

- Рассмотрим теперь непрерывный спектр, на примере одномерного рассеяния на потенциальной яме, когда энергия частицы больше, чем глубина ямы. Сдвинем отсчёт энергии так, чтобы вне ямы потенциал был равен нулю, а внутри $U(x) = -V_0 < 0$. Ширина ямы равна a :



Найдём частное решение стационарного уравнения Шрёдингера, которое можно интерпретировать как рассеяние частиц. Запишем уравнения вне ($|x| > a/2$) и внутри ямы ($x < -a/2$):

$$\begin{aligned} \Psi'' + k^2 \Psi &= 0, & k &= \sqrt{2mE}/\hbar, & |x| &> a/2, \\ \Psi'' + k_0^2 \Psi &= 0, & k_0 &= \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar, & |x| &< a/2. \end{aligned}$$

Решения этих уравнений представим в комплексном виде:

$$\begin{aligned} \Psi_I &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < -a/2, \\ \Psi_{II} &= \alpha e^{ik_0 x} + \beta e^{-ik_0 x} & |x| < a/2, \\ \Psi_{III} &= C e^{ikx} & x > a/2. \end{aligned}$$

Справа от ямы (Ψ_{III}) записана только одна экспонента с положительным знаком перед k . Такое решение соответствует ситуации в которой из $-\infty$ вдоль оси x на яму постоянно падают частицы с импульсом $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$. Их волновые функции (собственные функции оператора импульса) пропорциональны e^{ikx} . Часть частиц отражается от ямы создавая встречную волновую функцию e^{-ikx} . Их суперпозиция является функцией Ψ_I . Справа от ямы наблюдаются только прошедшие через неё частицы $\Psi_{III} = C e^{ikx}$. Предполагается, что при постоянно падающих на яму частицах со временем устанавливается равновесное состояние, которое и описывается стационарными функциями Ψ_I , Ψ_{II} , Ψ_{III} .

Чтобы определить коэффициенты при экспонентах, необходимо воспользоваться условиями сшивки функций и их производных в точках $x = -a/2$ и $x = a/2$ (стр. 51). Сошьём Ψ_{II} и Ψ_{III} в $x = a/2$:

$$\begin{cases} \alpha e^{i\omega_0} + \beta e^{-i\omega_0} = Ce^{i\omega}, \\ \alpha k_0 e^{i\omega_0} - \beta k_0 e^{-i\omega_0} = kCe^{i\omega}, \end{cases}$$

где $\omega = ka/2$ и $\omega_0 = k_0a/2$. Из этих уравнений выразим α и β через C :

$$\alpha = C \frac{k_0 + k}{2k_0} e^{-i(\omega_0 - \omega)}, \quad \beta = C \frac{k_0 - k}{2k_0} e^{i(\omega_0 + \omega)}.$$

Аналогично сошьём функции Ψ_I и Ψ_{II} в точке $x = -a/2$:

$$\begin{cases} A e^{-i\omega} + B e^{i\omega} = \alpha e^{-i\omega_0} + \beta e^{i\omega_0} \\ kA e^{-i\omega} - kB e^{i\omega} = k_0 \alpha e^{-i\omega_0} - k_0 \beta e^{i\omega_0}. \end{cases}$$

Решая уравнения относительно A , B и подставляя α , β , получаем:

$$\frac{A}{C} = e^{ika/2} \left[\cos(k_0a) - \frac{i}{2} \left(\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \right) \sin(k_0a) \right],$$

и

$$\frac{B}{C} = \frac{i}{2} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right) \sin(k_0a).$$

В одномерном случае поток вероятности (стр. 39) для частицы с волновой функцией $\Psi = \Psi_0 e^{ikx}$ равен:

$$j(\Psi) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi\Psi'^* - \Psi^*\Psi') = \frac{\hbar k}{m} |\Psi_0|^2.$$

Определим *коэффициент отражения* R как отношение потока вероятности отражённой волны к падающей, а *коэффициент прохождения* T , соответственно, как отношение потоков прошедшей волны к падающей:

$$R = \frac{|j(Be^{-ikx})|}{|j(Ae^{ikx})|} = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad T = \frac{|j(Ce^{ik_0x})|}{|j(Ae^{ikx})|} = \frac{k_0}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (2.32)$$

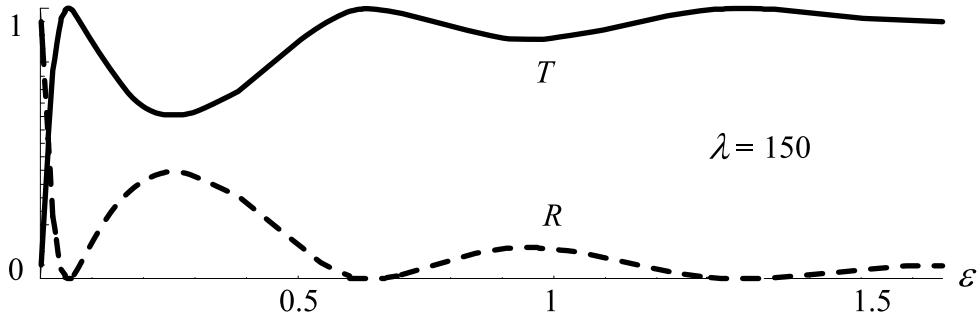
Подставляя определения k , k_0 и переходя к безразмерным величинам, получаем:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(\sqrt{\lambda(1+\varepsilon)})}{4\varepsilon(1+\varepsilon)} \right]^{-1}, \quad \varepsilon = \frac{E}{V_0}, \quad \lambda = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}. \quad (2.33)$$

Из соображений сохранения числа частиц, сумма отраженного и прошедшего потока должны равняться единице, поэтому $R = 1 - T$ (частицы либо проходят через яму, либо отражаются от неё).

При больших энергиях $\varepsilon = E/V_0$ (в единицах глубины ямы) коэффициент прохождения $T \rightarrow 1$, а отражения $R \rightarrow 0$. Это означает, что быстро движущаяся частица проскаивает яму не “заметив” её. При малых энергиях, наоборот, происходит активное взаимодействие с ямой, приводящее к отражению от неё частицы ($R \rightarrow 1$, $T \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$).

Если параметр λ достаточно велик (глубокая яма) коэффициент прохождения испытывает заметные колебания:



Энергии, при которых он достигает максимального значения $T = 1$, определяются из условия равенства нулю синуса в (2.33):

$$\sin(\sqrt{\lambda(1+\varepsilon)}) = 0,$$

откуда

$$\lambda(1+\varepsilon) = \pi^2 n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

или:

$$\varepsilon = \frac{\pi^2 n^2}{\lambda} - 1, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 - V_0. \quad (2.34)$$

Положительность энергии $\varepsilon > 0$ накладывает ограничение на минимальное значение n : $n > \sqrt{\lambda}/\pi$. Так, при $\lambda = 150$, целое число n начинается с четырёх и первый максимум возникает при энергии $\varepsilon = 0.05$.

Коэффициенты прохождения и отражения совпадают, когда их значения становятся равными $1/2$ (их сумма равна единице).

Если ширина ямы стремится к нулю ($a \rightarrow 0$), а глубина к бесконечности ($V_0 \rightarrow \infty$) так, что их произведение остаётся конечным: $aV_0 \rightarrow g = const$, получается потенциал в виде функции Дирака:

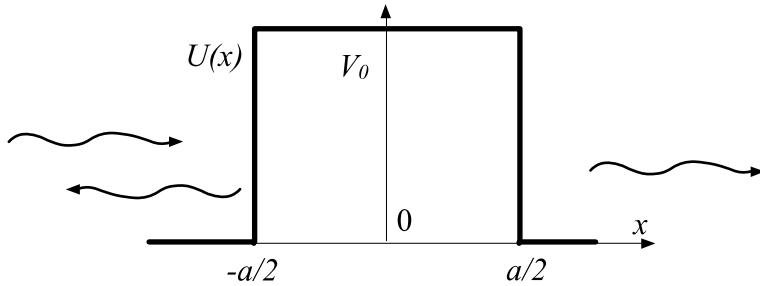
$$U(x) = -g \delta(x).$$

При этом $\lambda = 2mga/\hbar^2 \rightarrow 0$, поэтому синус в (2.33) можно заменить его аргументом:

$$T = \left[1 + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{g^2}{4E} \right]^{-1}. \quad (2.35)$$

В главе 12 этот же результат будет получен при помощи нестационарного подхода.

- Аналогичным образом можно рассмотреть рассеяние на потенциальном барьере, высотой V_0 :



В этой задаче необходимо рассмотреть две ситуации, когда энергия меньше высоты барьера ($0 < E < V_0$) и когда она больше ($E > V_0$).

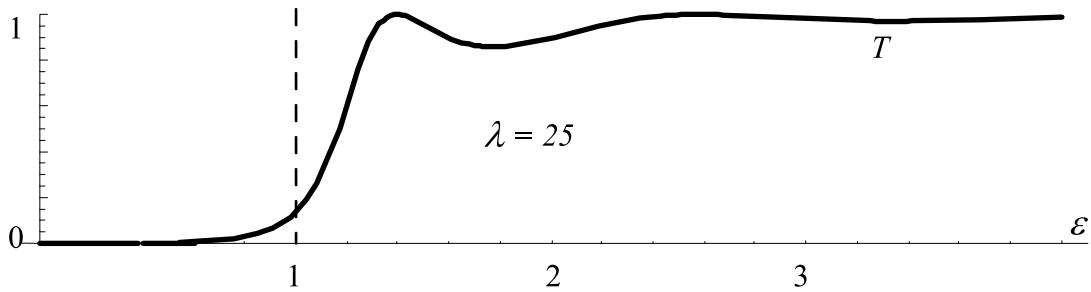
Если энергия меньше барьера ($0 < \varepsilon < 1$), то коэффициент прохождения выражается через гиперболический синус:

$$T = \left[1 + \frac{\operatorname{sh}^2(\sqrt{\lambda(1-\varepsilon)})}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \right]^{-1}. \quad (2.36)$$

При энергии частицы выше барьера ($\varepsilon > 1$), коэффициент прохождения имеет другой вид:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(\sqrt{\lambda(\varepsilon-1)})}{4\varepsilon(\varepsilon-1)} \right]^{-1}. \quad (2.37)$$

С ростом энергии коэффициент прохождения, испытывая колебания, стремится к единице. При этом когда синус обращается в ноль, он оказывается строго равный единице. При $\varepsilon = 1$ коэффициенты прохождения (2.36), (2.37) гладко сшиваются и равны $T = 1/(1 + \lambda/4)$:



Напомним, что классическая частица, имея энергию меньше высоты потенциального барьера, не способна его преодолеть и должна от него отразиться (коэффициент прохождения равен нулю). Квантовая частица за счёт своей “размазанности” может проникать под таким барьером. Это поведение называют *туннельным эффектом*.

7 Гармонический осциллятор

- Рассмотрим гамильтониан гармонического осциллятора:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2, \quad (2.38)$$

где m, ω – константы. Введём характерный для задачи масштаб длины L . Так как $\hbar \sim L p$ (соотношение неопределённостей) и $p^2/m \sim m\omega^2 L^2$ (равенство размерностей кинетической и потенциальной энергий), имеем

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (2.39)$$

Перейдём от эрмитовых операторов координаты и импульса к двум другим, “безразмерным” операторам \hat{a} и \hat{a}^+ :

$$\frac{\hat{x}}{L} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}}, \quad \frac{L}{\hbar} \hat{p} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{i\sqrt{2}}, \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{L} + i \frac{L}{\hbar} \hat{p} \right). \quad (2.40)$$

(эрмитово сопряжение \hat{a}^+ оператора \hat{a} имеет знак минус перед мнимой единицей). С их помощью перепишем гамильтониан в виде ($\lessdot H_{14}$):

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.41)$$

Несложно проверить, что

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \quad (2.42)$$

откуда следуют коммутаторы с гамильтонианом:

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega \hat{a}^+, \quad [\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}. \quad (2.43)$$

Подействуем ими на собственный вектор гамильтониана $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$:

$$\hat{H} \hat{a}^+ |E\rangle = (E + \hbar\omega) \hat{a}^+ |E\rangle, \quad \hat{H} \hat{a} |E\rangle = (E - \hbar\omega) \hat{a} |E\rangle.$$

Слева и справа стоят одинаковые векторы $\hat{a}^+ |E\rangle$ и $\hat{a} |E\rangle$. Поэтому эти уравнения также являются уравнениями на собственные значения \hat{H} . Оператор “рождения” \hat{a}^+ увеличивает на $\hbar\omega$ энергию состояния $|E\rangle$, а оператор “уничтожения” \hat{a} – на столько же её уменьшает. Так как спектр ограничен снизу ($\lessdot H_{15}$), существует *основное состояние* $|0\rangle$, для которого:

$$\hat{a} |0\rangle = 0, \quad \hat{H} |0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle$$

(не стоит путать $|0\rangle$ с нулевым гильбертовым вектором, стр. 352). Энергия основного состояния минимальна и равна $\hbar\omega/2$.

Каждый следующий уровень энергии на $\hbar\omega$ больше, поэтому дискретный спектр задачи равен:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (2.44)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ и векторы $|E_n\rangle$ для краткости обозначены как $|n\rangle$.

Будем нормировать собственные векторы на единицу: $\langle n|n\rangle = 1$. Действие на $|n\rangle$ оператора \hat{a} даёт собственные векторы, умноженные на некоторую константу C . Пусть она действительна и положительна:

$$\hat{a}|n\rangle = C |n-1\rangle, \quad \langle n| \hat{a}^+ = C \langle n-1|$$

(второе соотношение – это эрмитово сопряжение первого). Учтём (2.44):

$$n = \langle n| \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = C^2 \langle n-1|n-1\rangle = C^2,$$

откуда $C = \sqrt{n}$. Аналогично из $\hat{a} \hat{a}^+ = \hat{a}^+ \hat{a} + 1$ получается нормировочная константа для оператора \hat{a}^+ . В результате:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (2.45)$$

Действие оператора \hat{a}^+ на вектор основного состояния n раз, даёт n -тое возбуждённое состояние ($\lessdot H_{16}$):

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle. \quad (2.46)$$

Средние значения импульса и координаты по состоянию $|n\rangle$ равны нулю, см. (2.3), (2.4). Среднее квадрата координаты следует из вириальной теоремы (2.5), а импульса из гамильтониана:

$$E_n = m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle, \quad \langle \hat{p}^2 \rangle = 2mE_n - m^2\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle.$$

В основном состоянии ($n = 0$) соотношение неопределённостей (стр. 32) достигает своей нижней границы $1/2$:

$$\langle n| \hat{x}^2 |n\rangle \langle n| \hat{p}^2 |n\rangle = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (2.47)$$

т.е. гармонический осциллятор позволяет наиболее точно локализовать и координату, и импульс. Приведём также матричные элементы:

$$\frac{\sqrt{2}}{L} \langle k| \hat{x} |n\rangle = \sqrt{n} \delta_{k,n-1} + \sqrt{k} \delta_{k-1,n}, \quad (2.48)$$

$$\frac{2}{L^2} \langle k| \hat{x}^2 |n\rangle = (2n+1) \delta_{k,n} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} + \sqrt{k(k-1)} \delta_{k-2,n},$$

которые можно ($\lessdot H_{17}$) найти при помощи (2.45).

- В координатном представлении $\Psi_n(x) = \langle x | n \rangle$ оператор импульса равен $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. Решением уравнения $\hat{a}\Psi_0(x) = 0$ будет ($\ll H_{18}$) нормированная волновая функция основного состояния:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{L}} \exp\left(-\frac{x^2/L^2}{2}\right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0|^2 dx = 1. \quad (2.49)$$

Запишем n -тое состояние в виде

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{L}\right) \Psi_0(x), \quad H_0 = 1. \quad (2.50)$$

Из $\hat{a}^+ \Psi_{n-1} = \sqrt{n} \Psi_n$ и $\hat{a} \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}$ в координатном представлении получаем соотношения для полиномов Эрмита ($z = x/L$):

$$H_n(z) = 2z H_{n-1}(z) - H'_{n-1}(z), \quad H'_n(z) = 2n H_{n-1}(z). \quad (2.51)$$

Из первого следует:

$$e^{-z^2} H_n = -\left(e^{-z^2} H_{n-1}\right)' \Rightarrow H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n e^{-z^2}}{dz^n}. \quad (2.52)$$

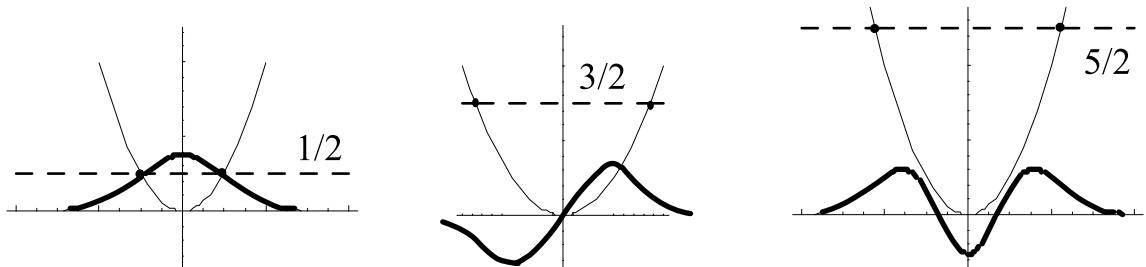
Для $n = 0, 1, 2, 3$ полиномы Эрмита равны:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2z, \quad H_2 = 4z^2 - 2, \quad H_3 = 8z^3 - 12z. \quad (2.53)$$

При выводе (2.51) из (2.45) предполагалось, что $\langle n|n \rangle = 1$ и волновая функция $\Psi_n(x)$ нормирована на единицу. Для полиномов Эрмита это означает:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) H_k(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nk}. \quad (2.54)$$

Приведём графики первых трёх волновых функций:



Тонкая линия – это потенциал, пунктир – энергия и $m = \omega = 1$. Чётность n -того возбуждённого состояния равна $P = (-1)^n$.

▷ Спектр гамильтониана осциллятора можно найти и непосредственно решая дифференциальное уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \Psi = E \Psi. \quad (2.55)$$

Будем искать волновую функцию в виде (2.50) (при больших $z = x/L$ она стремится к $\Psi \rightarrow e^{-z^2/2}$, что проверяется прямой подстановкой). Множители $H_n(z)$ удовлетворяют уравнению (оно же следует из (2.51)):

$$H_n''(z) - 2z H_n'(z) + 2n H_n(z) = 0, \quad (2.56)$$

где $n = (E/\hbar\omega) - 1/2$. Разложим функции $H_n(z)$ в ряд по z :

$$H_n(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k.$$

Подставляя его в (2.56) и сравнивая множители при одинаковых степенях z , имеем:

$$c_{k+2} = -\frac{2(n-k)}{(k+1)(k+2)} c_k. \quad (2.57)$$

В силу симметричности гамильтониана относительно замены $z \mapsto -z$ сохраняется чётность и собственные волновые функции являются чётными или нечётными, выражаясь через константы c_0 и c_1 :

$$c_2 = -\frac{2n}{2!} c_0, \quad c_3 = -\frac{2(n-1)}{3!} c_1, \quad c_4 = \frac{2^2 n(n-2)}{4!} c_0, \quad \dots$$

При $k \rightarrow \infty$ и $n = const$ из (2.57) следует $c_{k+2} \rightarrow 2c_k/k$ или в этом же пределе $c_{k+2} \rightarrow 2c_k/(k+2)$. Поэтому $c_{2k} \rightarrow c_0/k!$, что приводит к $H(z) \rightarrow e^{z^2}$. Такая функция растёт быстрее чем множитель $e^{-z^2/2}$ в (2.56) и граничные условия $\Psi(\pm\infty) = 0$ не удовлетворяются. Чтобы этого избежать, оборвём ряд на некоторой степени z . Пусть $n = 0, 1, 2\dots$, тогда $c_{n+2} = 0$ и получаются (с точностью до знака и нормировочного множителя) полиномы (2.53).

Ведущий по z член в n -м полиноме Эрмита имеет n -ю степень, а следующие слагаемые получаются из (2.57):

$$H_n(z) = (2z)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2z)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2z)^{n-4} + \dots$$

В нуле полиномы Эрмита для нечётных n равны нулю $H_{2k+1}(0) = 0$, а для чётных $H_{2k}(0) = (-1)^k (2k)!/k!$, что несложно получить из (2.52).

8 Ангармонический осциллятор

• В заключение, рассмотрим модель *ангармонического осциллятора*, которая не имеет точного аналитического решения:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} (\alpha \hat{x}^2 + \beta \hat{x}^4). \quad (2.58)$$

Параметрами модели являются m , α и β . Так как при $\beta = 0$ энергия пропорциональна $\omega = \sqrt{\alpha/m}$, размерности величин получим, приравняв размерности слагаемых в (2.58): $E \sim \sqrt{\alpha/m} \sim \alpha x^2 \sim \beta x^4$.

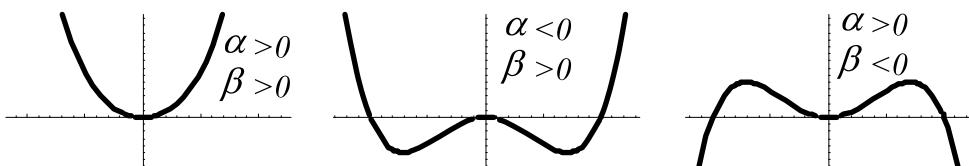
$$x \sim \frac{1}{(m\alpha)^{1/4}} \sim \frac{1}{(m\beta)^{1/6}}, \quad E \sim \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sim \left(\frac{\beta}{m^2}\right)^{1/3}, \quad \frac{\beta^2}{m\alpha^3} \sim 1. \quad (2.59)$$

Далее будем полагать $m = 1$. Наличие безразмерного отношения β^2/α^3 приводит к следующей зависимости энергии от параметров:

$$E = E(\alpha, \beta) = \sqrt{\alpha} f\left(\frac{\beta}{\alpha^{3/2}}\right) = \beta^{1/3} g\left(\frac{\alpha}{\beta^{2/3}}\right). \quad (2.60)$$

Соответственно, возможны приближенные методы в которых функция f раскладывается в ряд по β или функция g в ряд по α . Первый вариант называется *теорией возмущений* и имеет нулевым приближением ($\beta = 0$) точно решаемую задачу (гармонический осциллятор). Методы, позволяющие вычислять физические величины при больших β , называются *непертурбативными*. Из развернутого анализа следует, что при $\beta \rightarrow \infty$ энергия стремится к $E = \beta^{1/3} g(0) = \beta^{1/3} E(0, 1)$.

Изменение знака параметров приводит к качественной перестройке (*биfurкации*) потенциала:



Особенно сильная бифуркация происходит когда меняется знак параметра β . При $\beta > 0$ система имеет дискретный спектр, а при $\beta < 0$ – непрерывный. Поэтому можно ожидать, что $f(\beta) = E(1, \beta)$ неаналитическая функция на комплексной плоскости β в точке $\beta = 0$. Подобные эвристические соображения в квантовой электродинамике впервые были высказаны Фрименом Дайсоном и называются *аргументом Дайсона*. Особенность при $\beta = 0$ приводит к тому, что ряды теории возмущений по β расходятся и требуются определённые ухищрения для суммирования таких рядов (стр. 160).

▷ Приведём значения первых 6 уровней энергии ангармонического осциллятора, полученные численным интегрированием, при различных значениях параметров (α, β) :

n	(-10, 1)	(-1, 1)	(0, 1)	(1, 0.1)	(1, 0.5)	(1, 1)	(1, 5)	(1, 10)
0	-10.31679	0.32883	0.53018	0.53264	0.62093	0.69618	1.00917	1.22459
1	-10.31677	1.41727	1.89983	1.65343	2.02596	2.32440	3.50673	4.29949
2	-6.18977	3.08195	3.72785	2.87398	3.69845	4.32752	6.73386	8.31796
3	-6.18784	5.01932	5.82237	4.17634	5.55757	6.57840	10.40697	12.90312
4	-2.56642	7.18620	8.13091	5.54930	7.56842	9.02878	14.43749	17.94258
5	-2.48244	9.54285	10.61918	6.98496	9.70914	11.64871	18.76939	23.36452

Функция $f(\beta) = E(1, \beta)$ практически линейна при малых $\beta > 0$. На асимптотику она выходит довольно медленно и при $\beta = 10$ отношение $\beta^{-1/3} E(1, \beta)/E(0, 1)$ для основного состояния равно 1.07.

Функция $g(\alpha) = E(\alpha, 1)$ несколько быстрее выходит на асимптотическое значение $\sqrt{\alpha}(n + 1/2)$, соответствующее энергиям гармонического осциллятора. В окрестности нуля $g(\alpha)$ линейна по α :

$$E \approx \beta^{1/3} \left[E(0, 1) + K_n \frac{\alpha}{\beta^{2/3}} \right],$$

где наклоны (второе слагаемое) для первых шести уровней равны: $K_n \approx \{0.181, 0.451, 0.622, 0.779, 0.921, 1.053\}$. При $\alpha < 0$ энергетические уровни по-парно сближаются (происходит квазивырождение).

▷ Приведём также матричные элементы $2(E_n - E_0) |\langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle|^2$, играющие важную роль в теории функций Грина (стр. 267).

n	(-10, 1)	(-1, 1)	(0, 1)	(1, 0.1)	(1, 0.5)	(1, 1)	(1, 5)	(1, 10)
1	0.00014	0.97549	0.98878	0.99904	0.99597	0.99427	0.99118	0.99037
3	0.96741	0.02433	0.01116	0.00094	0.00400	0.00569	0.00876	0.00957
5	0.03094	0.00016	0.00005	0.00000	0.00001	0.00002	0.00003	0.00004

При любых β и $\alpha > 0$, основной вклад в сумму даёт первый матричный элемент. В силу симметрии они отличны от нуля только при нечётных значениях n и их сумма равна единице. Действительно, для гамильтониана $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(\hat{x})$ имеем $[\hat{x}, \hat{H}] = i\hat{p}/m$ ($\hbar = 1$). Поэтому для среднего по основному состоянию $|E_0\rangle$, имеем:

$$1 = i\langle \hat{p} \hat{x} - \hat{x} \hat{p} \rangle = m \langle 2\hat{x}\hat{H}\hat{x} - \hat{H}\hat{x}^2 - \hat{x}^2\hat{H} \rangle = 2m \langle \hat{x}\hat{H}\hat{x} - E_0 \hat{x}^2 \rangle$$

(первое равенство – среднее коммутатора $[\hat{x}, \hat{p}] = i$, затем вместо $i\hat{p}$ подставляем $m[\hat{x}, \hat{H}]$ и учитываем уравнение на собственные значения слева справа от \hat{H}). Вставляя между $\hat{x} \dots \hat{x}$ сумму по всем $|E_n\rangle\langle E_n|$, получаем требуемое утверждение.

Глава 3

Временная эволюция

В этой главе рассматриваются динамические задачи квантовой механики. Простейшим случаем является свободное движение, которое будет рассмотрено в представлениях Гейзенberга и Шрёдингера. Затем изучается гармонический осциллятор и на его примере строятся когерентные состояния, которые “движутся” по классической траектории.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Свободное движение

Рассмотрим одномерное, свободное движение частицы массой m с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$. В представлении Гейзенберга (стр. 28) операторы зависят от времени и удовлетворяют уравнению:

$$\imath\hbar \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}], \quad \hat{A}(t) = e^{\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}. \quad (3.1)$$

При равных временах операторы координаты и импульса коммутируют стандартным образом: $[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = \imath\hbar$, поэтому можно вычислить коммутаторы с гамильтонианом. Это даёт уравнения Гейзенберга, совпадающие с классическими уравнениями движения ($\hat{x}_t \equiv \hat{x}(t)$ и $\hat{p}_t \equiv \hat{p}(t)$):

$$\frac{d\hat{p}_t}{dt} = 0, \quad m \frac{d\hat{x}_t}{dt} = \hat{p}_t. \quad (3.2)$$

Их решения имеют вид:

$$\hat{p}_t = \hat{p}, \quad \hat{x}_t = \hat{x} + \frac{\hat{p}}{m} t, \quad (3.3)$$

где $\hat{x} = \hat{x}(0)$, $\hat{p} = \hat{p}(0)$ – операторы координаты и импульса в начальный момент времени (представление Шрёдингера). Операторы координаты в *различные* моменты времени не коммутируют:

$$[\hat{x}_t, \hat{x}_s] = -\frac{\imath\hbar}{m} (t - s), \quad (3.4)$$

а коммутаторы $[\hat{p}_t, \hat{p}_s] = 0$ и $[\hat{x}_t, \hat{p}_s] = \imath\hbar$ совпадают с представлением Шрёдингера. Так как:

$$\hat{x}_t^2 = \hat{x}^2 + (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) \frac{t}{m} + \hat{p}^2 \frac{t^2}{m^2},$$

можно найти как дисперсия координаты $D_x(t) = \langle(\hat{x}_t - \bar{x}_t)^2\rangle = \langle\hat{x}_t^2\rangle - \bar{x}_t^2$ меняется со временем:

$$D_x(t) = D_x + 2 \frac{D_{xp}}{m} t + \frac{D_p}{m^2} t^2, \quad (3.5)$$

где D_x и D_p – дисперсии координаты и импульса (стр. 24) в момент времени $t = 0$, и введена *ковариация* (также при $t = 0$):

$$D_{xp} = \frac{1}{2} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x} \rangle \langle \hat{p} \rangle. \quad (3.6)$$

Если существует распределение импульсов ($D_p \neq 0$), то дисперсия координаты квадратично по t растёт. При этом дисперсия импульса не меняется: $D_p(t) = D_p$ (импульс сохраняется, так как $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$).

▷ Для описания эволюции во времени состояния $|\Psi\rangle$ используется представление Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi, t\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi, t\rangle, \quad |\Psi, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi\rangle. \quad (3.7)$$

Рассмотрим, например, в координатном базисе, в начальный момент времени амплитуду $\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$. С течением времени она изменяется и получается амплитуда:

$$\Psi(t, x) = \langle x | \Psi, t \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | p \rangle \langle p | \Psi \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_p t} dp, \quad (3.8)$$

где $E_p = p^2/2m$ – энергия свободной частицы с импульсом p и вставлен единичный оператор как интеграл по импульсному базису $|p\rangle\langle p|$. Из (3.8) следует, что эволюция во времени полностью определяется амплитудой распределения импульсов $\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle$ в начальный момент:

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} px - \frac{i}{\hbar} E_p t} dp. \quad (3.9)$$

Множитель при этой амплитуде называется *волной де-Бройля*, а разложение по этим волнам – *волновому пакетом*. При $t = 0$ соотношение (3.9) даёт стандартную связь состояния $|\Psi\rangle$, записанного в координатном $\Psi(0, x) = \langle x | \Psi \rangle$ и импульсном $\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle$ базисах.

Выражение в показателе экспоненты волны де-Бройля можно переписать следующим образом:

$$px - E_p t = p(x - ut), \quad u = u(p) = \frac{E_p}{p} = \frac{p}{2m}.$$

Так как энергия свободной частицы нелинейно зависит от импульса, *фазовые скорости* $u = u(p)$ каждой волны в пакете различна. Говорят, что они обладают *дисперсией* (аналог дисперсии, как статистического разброса в измерениях физической величины). Именно дисперсия является причиной расплывания со временем волнового пакета, что установлено выше в представлении Гейзенберга (3.6). Этим волны де-Бройля отличаются от электромагнитных волн, для которых дисперсии нет.

Дисперсии приводит к тому, что для *свободного* движения невозможно получить состояние вида $\Psi(x - ut)$, для которого амплитуда двигается как целое со *групповой скоростью* u , не меняя свою форму во времени.

• Пусть в момент времени $t = 0$ у частицы измерена координата x_0 . Найдём амплитуду вероятности обнаружить частицу в координате x спустя время t . В момент измерения x_0 “возникает” состояние $|x_0\rangle$. Оно эволюционирует со временем (представление Шрёдингера), переходя в состояние $|x_0, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|x_0\rangle$. Поэтому амплитуда $\langle x | x_0, t \rangle$ равна:

$$\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} \langle x | p \rangle \langle p | x_0 \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t + \frac{i}{\hbar}p(x-x_0)}}{2\pi\hbar} dp,$$

где подставлены собственные функции импульса $\langle x | p \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}px}/\sqrt{2\pi\hbar}$ и $\langle p | x_0 \rangle = \langle x_0 | p \rangle^*$. Вычисляя гауссовый интеграл (стр. 394), получаем:

$$\langle x | x_0, t \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left\{i \frac{m(x-x_0)^2}{2\hbar t}\right\} \quad (3.10)$$

(несмотря на наличие мнимой единицы в экспоненте, формально этот интеграл можно брать, считая что $\alpha = it/\hbar m$ – действительная величина).

Плотность вероятности для (3.10) не зависит от координаты:

$$\frac{|\langle x | x_0, t \rangle|^2}{\langle x_0 | x_0 \rangle} = \frac{m}{2\pi\hbar\delta_x(0)t}. \quad (3.11)$$

Физически это понятно. Вектор $|x_0\rangle$ имеет смысл состояния в котором точно измерена координата частицы. Однако, в соответствии с соотношением неопределённостей, импульс частицы в этом состоянии полностью не определён. Равновероятно могут встречаться как малые, так и бесконечно большие импульсы. Это приводит к тому, что при последующих измерениях частица может оказаться “где угодно”.

Эксперимент в котором координата определяется сколь угодно точно, а дисперсия импульса бесконечна – является идеализацией. Рассмотрим, например, состояние $|\Psi\rangle$, зависящее от трёх констант x_0 , p_0 и D_p :

$$\langle p | \Psi \rangle = (2\pi D_p)^{-1/4} \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{4D_p} - \frac{i}{\hbar}x_0(p-p_0)\right\}. \quad (3.12)$$

Оно нормировано на единицу: $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Параметр D_p имеет смысл дисперсии измерения импульса, а p_0 – его среднее значение. Параметр x_0 – среднее значение координаты, которая также имеет гауссово распределение с дисперсией $D_x = \hbar^2/4D_p$ (стр. 38). При этом $D_x D_p$ равно нижней границе $\hbar^2/4$ соотношения неопределённостей (1.62), стр. 38.

Найдём амплитуду вероятности $\langle x|\Psi, t \rangle = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} t} |\Psi \rangle$ обнаружить координату x через время t у свободной частицы, “приготовленной” в таком состоянии:

$$\frac{(2\pi D_p)^{-1/4}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t - \frac{(p-p_0)^2}{4D_p} + \frac{i}{\hbar} p(x-x_0) + \frac{i}{\hbar} x_0 p_0\right\} dp.$$

Вычисляя гауссовый интеграл, получаем:

$$\langle x|\Psi, t \rangle = \left\{ \sqrt{2\pi D_x} \lambda_t \right\}^{-1/2} \exp\left\{-\frac{(x-\bar{x}_t)^2}{4D_x \lambda_t^2} + \frac{i}{\hbar} \left(p_0 x - \frac{p_0^2}{2m} t \right) \right\}, \quad (3.13)$$

где \bar{x}_t – классическая траектория свободной частицы, двигающейся со скоростью $v_0 = p_0/m$ и введена функция времени $\lambda_t = \lambda(t)$:

$$\bar{x}_t = x_0 + \frac{p_0}{m} t, \quad \lambda_t = 1 + \frac{i\hbar t}{2mD_x}, \quad D_x = \frac{\hbar^2}{4D_p}.$$

Плотность вероятности $|\langle x|\Psi, t \rangle|^2$ является гауссианой со средним значением координаты \bar{x}_t и дисперсией, зависящей от времени:

$$D_x(t) = D_x \lambda_t^* \lambda_t = D_x + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 D_x} = D_x + \frac{D_p}{m^2} t^2. \quad (3.14)$$

Сравнение с (3.5) приводит к выводу, что ковариация D_{xp} в состоянии (3.12) равен нулю, что можно проверить и явным его вычислением.

Увеличение неопределённости координаты при дисперсии импульсов имеет простую классическую интерпретацию. Пусть в данной “точке” находится совокупность частиц, имеющих разброс скоростей $v_0 \pm \Delta v$. Через время t более быстрые частицы смеются на расстояние $(v_0 + \Delta v)t$, а более медленные на $(v_0 - \Delta v)t$. В результате, совокупность частиц “расплывётся” на область $(\Delta x)_t = 2\Delta v t$. Если рассмотреть гауссов разброс скоростей, то классическая дисперсия координаты будет равна $(\Delta v)^2 t^2$.

Для частицы, двигающейся со скоростью v_0 и относительной ошибкой её измерения $\Delta v/v_0 = 10^{-3}$, неопределённость координаты (какой бы малой она не была изначально) увеличится до миллиметра $= 10^{-3}$ м (капля в камере Вильсона), при движении вдоль одного метра (с любой скоростью): $L = v_0 t = 10^3 \Delta v t = 10^3 \Delta x = 1$ м.

Заметим, что в начальный момент времени $t = 0$, при $D_x \rightarrow 0$ экспонента (3.13) становится очень узкой и высокой. Однако, она не стремится к функции Дирака $\langle x|x_0 \rangle = \delta(x - x_0)$, так как нормирована на единицу не амплитуда, а вероятность (квадрат амплитуды).

2 Гармонический осциллятор

▷ Рассмотрим теперь гармонический осциллятор с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2. \quad (3.15)$$

Уравнения Гейзенберга для него имеют вид:

$$m \frac{d\hat{x}_t}{dt} = \hat{p}_t, \quad \frac{d\hat{p}_t}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}_t, \quad (3.16)$$

где, как и раньше, $\hat{x}_t \equiv \hat{x}(t)$, $\hat{p}_t \equiv \hat{p}(t)$. Беря производную первого уравнения и подставляя во второе, получаем операторное уравнение формально совпадающее с классическим уравнением движения:

$$\frac{d^2\hat{x}_t}{dt^2} + \omega^2 \hat{x}_t = 0. \quad (3.17)$$

Оно линейно и легко решается (операторные “начальные условия” необходимо записывать в общем виде):

$$\hat{x}_t = \hat{x} \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin(\omega t), \quad \hat{p}_t = \hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t), \quad (3.18)$$

где $\hat{x} = \hat{x}(0)$, $\hat{p} = \hat{p}(0)$ – операторы в представлении Шрёдингера ($\prec H_{19}$).

Так как $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, используя (3.18), можно найти коммутаторы операторов в различные моменты времени t и s :

$$m\omega [\hat{x}_t, \hat{x}_s] = \frac{1}{m\omega} [\hat{p}_t, \hat{p}_s] = -i\hbar \sin \omega(t-s), \quad (3.19)$$

$$[\hat{x}_t, \hat{p}_s] = i\hbar \cos \omega(t-s). \quad (3.20)$$

При $t - s = 2\pi k/\omega$, где $k = 0, 1, \dots$ они переходят в коммутаторы представления Шрёдингера ($2\pi/\omega$ – период классических колебаний).

В отличии от свободного движения, от времени теперь зависит не только оператор координаты, но и оператор импульса. Впрочем, эта зависимость периодическая и волновые пакеты, находящиеся в поле осциллятора, то расплываются, то опять сжимаются. В общем случае ($\prec H_{20}$) дисперсия координаты имеет период π/ω :

$$D_x(t) = \frac{1}{2} \left(D_x + \frac{D_p}{m^2\omega^2} \right) + \frac{1}{2} \left(D_x - \frac{D_p}{m^2\omega^2} \right) \cos(2\omega t) + \frac{D_{xp}}{m\omega} \sin(2\omega t), \quad (3.21)$$

где ковариация D_{xp} определена в (3.6). Если он равен нулю и $D_p = m^2\omega^2 D_x$, то такой волновой пакет будет иметь неизменную форму, движаясь по классической траектории $\bar{x}_t = \bar{x} \cos(\omega t) + (\bar{p}/m\omega) \sin(\omega t)$.

▷ Зависимость координаты и импульса от времени можно выразить через операторы рождения и уничтожения (стр. 62):

$$\frac{\hat{x}(t)}{L} = \frac{\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t)}{\sqrt{2}}, \quad \frac{L}{\hbar} \hat{p}(t) = \frac{\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t)}{\imath \sqrt{2}}, \quad (3.22)$$

где $L = \sqrt{\hbar/m\omega}$ – квантовый масштаб длины системы. Как и любой оператор в представлении Гейзенберга, $\hat{a}(t)$ удовлетворяет уравнению:

$$\imath \hbar \frac{d\hat{a}(t)}{dt} = [\hat{a}(t), \hat{H}_0] = \hbar\omega \hat{a}(t), \quad (3.23)$$

где вычислен коммутатор с гамильтонианом $\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2)$. Это уравнение легко решается:

$$\hat{a}(t) = \hat{a} e^{-\imath\omega t}. \quad (3.24)$$

Обратим внимание, что в один момент времени коммутаторы представления Гейзенберга всегда совпадают с представлением Шрёдингера ($\lessdot H_{21}$). При этом, хотя оператор $\hat{a}(t)$ зависит от времени, сам гамильтониан (как сохраняющаяся величина) от времени не зависит ($\lessdot H_{22}$). Несложно проверить, что (3.24) и (3.22) согласуются с (3.18).

▷ Используя (3.22) и (3.24), вычислим среднее по n -тому возбуждённому состоянию гармонического осциллятора (стр. 63) от произведения операторов координат в различные моменты времени:

$$\frac{2}{L^2} \langle n | \hat{x}_t \hat{x}_s | n \rangle = \langle n | (\hat{a} e^{-\imath\omega t} + \hat{a}^+ e^{\imath\omega t}) (\hat{a} e^{-\imath\omega s} + \hat{a}^+ e^{\imath\omega s}) | n \rangle.$$

Перемножим скобки, оставив только ненулевые средние:

$$\frac{2}{L^2} \langle n | \hat{x}_t \hat{x}_s | n \rangle = \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle e^{\imath\omega(t-s)} + \langle n | \hat{a} \hat{a}^+ | n \rangle e^{-\imath\omega(t-s)}.$$

Так как $\hat{a}^+ \hat{a} = \hat{n}$, $\hat{a} \hat{a}^+ = \hat{n} + 1$ и $\hat{n} | n \rangle = n | n \rangle$, получаем:

$$\frac{2}{L^2} \langle n | \hat{x}_t \hat{x}_s | n \rangle = 2n \cos \omega(t-s) + e^{-\imath\omega(t-s)}. \quad (3.25)$$

Оператор \hat{x}_t – эрмитов, однако $(\hat{x}_t \hat{x}_s)^+ = \hat{x}_s \hat{x}_t \neq \hat{x}_t \hat{x}_s$, см. (3.19), поэтому среднее – комплексное число. В частном случае, при усреднении по основному состоянию:

$$\langle 0 | \hat{x}_t \hat{x}_s | 0 \rangle = \frac{L^2}{2} e^{-\imath\omega(t-s)}. \quad (3.26)$$

При $\omega \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$ получается бесконечность. При этом потенциал $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ “прижимается” к оси x , становясь “очень широким”. Частица может находиться где угодно, оказываясь практически свободной и $\langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle \rightarrow \infty$.

3 Амплитуда перехода для гармонического осциллятора

Найдём амплитуду вероятности перехода $\langle x|e^{-i\hat{H}t}|x_0\rangle$ из x_0 в x за время t для гармонического осциллятора [14]. Для краткости положим $\hbar = m = \omega = 1$, т.е. $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \hat{x}^2)/2$, $[\hat{x}, \hat{p}] = i$, а затем восстановим размерные константы.

▷ Для любых двух операторов \hat{A} и \hat{B} справедливо тождество (стр. 379):

$$\hat{C} = e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (3.27)$$

Оно доказывается, разложением в ряд по λ выражения $\hat{C}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda\hat{A}}$. Кроме этого $\hat{C}^n = e^{\hat{A}} \hat{B}^n e^{-\hat{A}}$, поэтому:

$$e^{\hat{C}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{A}}, \quad e^{\hat{B}} = e^{-\hat{A}} e^{\hat{C}} e^{\hat{A}}, \quad (3.28)$$

где второе соотношение получается умножением первого на $e^{-\hat{A}} \dots e^{\hat{A}}$.

▷ Пусть $\hat{A} = -ia\hat{x}\hat{p}$, $\hat{B} = \hat{p}$, где a – константа. Тогда $[\hat{A}, \hat{B}] = a\hat{B}$ и:

$$e^{-ia\hat{x}\hat{p}} \hat{p} e^{ia\hat{x}\hat{p}} = \left(1 + \frac{a}{1!} + \frac{a^2}{2!} + \dots\right) \hat{p} = e^a \hat{p}. \quad (3.29)$$

Умножим это соотношение слева на $e^{ia\hat{x}\hat{p}}$ и подействуем на собственный вектор оператора импульса $|p\rangle$:

$$\hat{p} \underline{e^{ia\hat{x}\hat{p}}} |p\rangle = e^a p \underline{e^{ia\hat{x}\hat{p}}} |p\rangle.$$

Слева и справа стоит одинаковый вектор $e^{ia\hat{x}\hat{p}} |p\rangle$, поэтому он является собственным вектором \hat{p} с собственным значением $e^a p$:

$$e^{ia\hat{x}\hat{p}} |p\rangle = |e^a p\rangle. \quad (3.30)$$

Проверим, что получившийся вектор имеет правильную норму:

$$\langle e^a p | e^a k \rangle = \langle p | e^{-ia\hat{p}\hat{x}} e^{ia\hat{x}\hat{p}} |k\rangle = \langle p | e^{-ia(\hat{x}\hat{p}-i)} e^{ia\hat{x}\hat{p}} |k\rangle = e^{-a} \langle p | k \rangle,$$

где учтено $(i\hat{x}\hat{p})^+ = -i\hat{p}\hat{x}$ и $\hat{p}\hat{x} = \hat{x}\hat{p} - i$. Так как $[\hat{x}\hat{p}, \hat{x}\hat{p}] = 0$, экспоненты с операторами можно сократить. С другой стороны, векторы непрерывного спектра нормированы на функцию Дирака: $\langle p | k \rangle = \delta(p - k)$, поэтому

$$\langle e^a p | e^a k \rangle = \delta(e^a p - e^a k) = e^{-a} \delta(p - k) = e^{-a} \langle p | k \rangle,$$

где применено правило вычисления функции Дирака (A.4), стр. 334.

▷ Обозначим для краткости $\tau = \imath t$. В соответствии с (3.27) имеем:

$$\hat{A} = a \hat{x}^2, \quad \hat{B} = -\tau \hat{H}, \quad \hat{C} = -\tau \hat{H} - \imath \tau a (\hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x}) + 2\tau a^2 \hat{x}^2.$$

Если положить $a = 1/2$, квадратичный по координате \hat{x}^2 член в \hat{C} скратится и, второе соотношение (3.28) даёт:

$$e^{-\tau \hat{H}} = \exp\left(-\frac{\hat{x}^2}{2}\right) \exp\left(-\tau \frac{\hat{p}^2}{2} - \imath \tau \hat{x} \hat{p} - \frac{\tau}{2}\right) \exp\left(\frac{\hat{x}^2}{2}\right),$$

где положено $\hat{p} \hat{x} = \hat{x} \hat{p} - \imath$. Аналогично избавимся от \hat{p}^2 , выбрав:

$$\hat{A} = b \hat{p}^2, \quad \hat{B} = -\tau \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \imath \hat{x} \hat{p}\right), \quad \hat{C} = \hat{B} - 2\tau b \hat{p}^2$$

и положив $b = -1/4$. Снова применяя второе соотношение (3.28), получаем следующую факторизацию экспоненты гамильтониана:

$$e^{-\tau \hat{H}} = e^{-\tau/2} \exp\left(-\frac{\hat{x}^2}{2}\right) \exp\left(\frac{\hat{p}^2}{4}\right) e^{-\imath \tau \hat{x} \hat{p}} \exp\left(-\frac{\hat{p}^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\hat{x}^2}{2}\right). \quad (3.31)$$

С её помощью несложно вычислить матричный элемент:

$$\langle x | e^{-\tau \hat{H}} | x_0 \rangle = e^{-(x^2 - x_0^2 + \tau)/2} \int e^{(k^2 - p^2)/4} \langle x | k \rangle \langle k | e^{-\imath \tau \hat{x} \hat{p}} | p \rangle \langle p | x_0 \rangle dp dk.$$

Учитывая (3.30), имеем $\langle k | e^{-\imath \tau \hat{x} \hat{p}} | p \rangle = \delta(k - p e^{-\tau})$, поэтому, интегрируя с функцией Дирака по k , приходим к гауссовому интегралу:

$$\langle x | e^{-\tau \hat{H}} | x_0 \rangle = e^{-(x^2 - x_0^2 + \tau)/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1 - e^{-2\tau}}{4} p^2 + \imath(x e^{-\tau} - x_0) p\right\} \frac{dp}{2\pi}.$$

Считая $\tau > 0$ и интегрируя при помощи (I.19), стр. 394, получаем:

$$\langle x | e^{-\tau \hat{H}} | x_0 \rangle = \{2\pi \operatorname{sh} \tau\}^{-1/2} \exp\left\{-\frac{(x^2 + x_0^2) \operatorname{ch} \tau - 2xx_0}{2\operatorname{sh} \tau}\right\}. \quad (3.32)$$

Сделаем аналитическое продолжение от положительных $\tau > 0$ к значению $\tau = \imath t$, $\operatorname{sh} \tau = \imath \sin t$, $\operatorname{ch} \tau = \cos t$ (см. также стр. 395) и восстановим размерные константы ($t \mapsto \omega t$, $x \mapsto x/L$):

$$\langle x | e^{-\frac{\imath}{\hbar} \hat{H} t} | x_0 \rangle = \frac{1}{L \sqrt{2\pi \imath \sin \omega t}} \exp\left\{\imath \frac{(x^2 + x_0^2) \cos \omega t - 2xx_0}{2L^2 \sin \omega t}\right\}. \quad (3.33)$$

Правая часть умножена на $1/L$, так как размерность амплитуды $1/L$ (при $t = 0$ она равна $\delta(x - x_0)$, интеграл от которой по dx равен единице).

4 Когерентные состояния осциллятора

▷ Вернёмся к соотношению (3.21) и построим состояние $|\alpha\rangle$ в котором дисперсия координаты не меняется со временем. При помощи разложений $\hat{x}/L = (\hat{a} + \hat{a}^+)/\sqrt{2}$ и $L\hat{p}/\hbar = (\hat{a} - \hat{a}^+)/i\sqrt{2}$, где $L = \sqrt{\hbar/m\omega}$, запишем ковариацию координаты и импульса (3.6) в состоянии $|\alpha\rangle$:

$$\frac{2i}{\hbar} D_{xp} = \langle \alpha | (\hat{a}^2 - \hat{a}^{+2}) | \alpha \rangle - \langle \alpha | (\hat{a} + \hat{a}^+) | \alpha \rangle \langle \alpha | (\hat{a} - \hat{a}^+) | \alpha \rangle.$$

Он будет равен нулю ($\ll H_{23}$), если $|\alpha\rangle$ – собственный вектор оператора понижения энергии \hat{a} :

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (3.34)$$

и $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. Так как \hat{a} не эрмитов – собственное значение α не будет действительным, поэтому: $\langle \alpha | \hat{a}^+ = \alpha^* \langle \alpha |$. Собственное значение (3.34) определяется средними значениями координаты и импульса:

$$\sqrt{2} \frac{\bar{x}}{L} = \langle \alpha | (\hat{a} + \hat{a}^+) | \alpha \rangle = \alpha + \alpha^*, \quad i\sqrt{2} \frac{L}{\hbar} \bar{p} = \langle \alpha | (\hat{a} - \hat{a}^+) | \alpha \rangle = \alpha - \alpha^*,$$

которые являются его действительной и мнимой частью:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{x}}{L} + i \frac{L \bar{p}}{\hbar} \right). \quad (3.35)$$

Аналогично находится дисперсия координаты D_x и импульса D_p (используем формулы $D_x = \langle \hat{x}^2 \rangle - \bar{x}^2$ и $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$):

$$D_x = \frac{L^2}{2}, \quad D_p = \frac{\hbar^2}{2L^2}. \quad (3.36)$$

Так как ковариация D_{xp} равна нулю и $D_p = m^2\omega^2 D_x$, дисперсия координаты (3.21) не зависит от времени. Кроме этого, $D_x D_p = \hbar^2/4$, что соответствует нижней границе соотношения неопределённостей. В связи с этим, вектор $|\alpha\rangle$ принято называть *когерентным состоянием*.

При выводе соотношений неопределённостей (1.52), стр. 32, нижняя граница достигается, если $(\alpha_0 \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B}) |\alpha\rangle = 0$, где $\alpha_0 = -\hbar/2D_A$ или для координаты и импульса:

$$\left[\frac{\hat{x} - \bar{x}}{2D_x} + \frac{i}{\hbar} (\hat{p} - \bar{p}) \right] |\alpha\rangle = 0. \quad (3.37)$$

В координатном представлении этому уравнению удовлетворяет (3.13) при $t = 0$ или её импульсный аналог (3.12). Эти же функции справедливы и для когерентного состояния гармонического осциллятора, но их эволюция во времени отлична от случая свободной частицы.

▷ Выразим вектор когерентного состояния через собственные векторы гамильтониана осциллятора, для которых $\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$. Для этого умножим (3.34) слева на $|n\rangle$ и учтём, что $\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$:

$$\sqrt{n+1} \langle n+1|\alpha\rangle = \alpha \langle n|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle.$$

Будем нормировать когерентное состояние на единицу:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha | n \rangle \langle n | \alpha \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^* \alpha)^n}{n!} |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 = e^{|\alpha|^2} |\langle 0 | \alpha \rangle|^2 = 1.$$

Таким образом, решение (3.34) можно разложить по базису $|n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \alpha \hat{a}^+\right\} |0\rangle, \quad (3.38)$$

где во втором равенстве учтено, что $|n\rangle = (\hat{a}^+)^n |0\rangle / \sqrt{n}$. Получившиеся векторы не ортогональны ($\prec H_{24}$):

$$\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = \exp\left\{-\frac{|\alpha_1|^2}{2} - \frac{|\alpha_2|^2}{2} + \alpha_1^* \alpha_2\right\} \quad (3.39)$$

и скалярное произведение $|\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle|^2 = \exp(-|\alpha_1 - \alpha_2|^2)$ стремится к нулю только, если $|\alpha_1 - \alpha_2| \gg 1$. Обратим внимание, что, несмотря на непрерывный спектр \hat{a} , норма его собственных векторов конечна.

Когерентные состояния $|\alpha\rangle$ образуют полную систему векторов, по которой можно разложить любой вектор гильбертового пространства:

$$\int |\alpha\rangle \langle \alpha| \frac{d^2\alpha}{\pi} = \hat{1}, \quad (3.40)$$

где для комплексного числа $\alpha = r e^{i\phi}$ элемент площади определён как и в полярных координатах: $d^2\alpha = r dr d\phi$. Для доказательства разложим каждый вектор $|\alpha\rangle$ по базису гармонического осциллятора (3.38):

$$= \sum_{n,k=0}^{\infty} |n\rangle \langle k| \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} \frac{r^{n+k+1}}{\sqrt{n!k!}} dr \int_0^{2\pi} d\phi e^{i(n-k)} = \sum_n |n\rangle \langle n| = 1,$$

где учтено, что интеграл по ϕ равен $2\pi \delta_{k,n}$, а интеграл по r выражается через гамма-функцию (F.1), стр. 400 ($r^2 = t$), которая сокращает факториал $n!$ в знаменателе.

▷ Так как $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2)$, среднее значение энергии в когерентном состоянии зависит от квадрата модуля параметра α :

$$E = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) = \frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \bar{x}^2. \quad (3.41)$$

Вероятность обнаружить в этом состоянии энергию E_n имеет пуассоновское распределение со средним значением $\bar{n} = |\alpha|^2$:

$$|\langle n | \alpha \rangle|^2 = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \quad (3.42)$$

и дисперсия в значениях энергии тем больше, чем больше \bar{n} ($\lessdot H_{25}$):

$$D_E = \langle \alpha | \hat{H}^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle^2 = \hbar^2 \omega^2 \bar{n}. \quad (3.43)$$

Классическая механика с *ненулевой* энергией соответствует пределу:

$$\hbar \rightarrow 0, \quad \bar{n} \rightarrow \infty, \quad \hbar \bar{n} \rightarrow \frac{E}{\omega} = \text{const.} \quad (3.44)$$

В таком пределе относительный разброс энергий стремится к нулю:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\sqrt{D_E}}{E} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\bar{n}}} \rightarrow 0.$$

▷ Получим ещё одно представление для когерентного состояния. Для этого воспользуемся тождеством, справедливым для любых двух операторов \hat{A} , \hat{B} коммутатор которых равен константе или в общем случае оператору, коммутирующему и с \hat{A} и с \hat{B} :

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]}, \quad [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (3.45)$$

Для его доказательства необходимо рассмотреть функцию $\hat{F}(\lambda) = e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}}$. Беря её производную по λ , имеем:

$$\hat{F}' = \hat{A}\hat{F} + \hat{F}\hat{B} = \hat{A}\hat{F} + e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} \hat{F} = (\hat{A} + \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}]) \hat{F},$$

где учтено, что $e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} = \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}]$, см. (3.27). Интегрируя по λ и полагая $\lambda = 1$, получаем (3.45). С его помощью перепишем (3.38):

$$|\alpha\rangle = \exp\{\alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a}\} |0\rangle, \quad (3.46)$$

где учтено, что $e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = |0\rangle$, т.к. $\hat{a} |0\rangle = 0$ ($\lessdot H_{26}$). Выражая \hat{a} , \hat{a}^+ через координату и импульс и учитывая (3.35), можно также написать:

$$|\alpha\rangle = \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} (\bar{p} \hat{x} - \bar{x} \hat{p}) \right\} |0\rangle = e^{-\frac{i}{2\hbar} \bar{x} \bar{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \hat{x}} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{x} \hat{p}} |0\rangle, \quad (3.47)$$

где снова применено тождество (3.45).

▷ Перейдём к временной эволюции и найдём вектор $|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\alpha\rangle$ в представлении Шрёдингера для (3.38):

$$e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n e^{-i\omega(n+1/2)t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{1}{2}i\omega t - \frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Таким образом, можно написать:

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{1}{2}i\omega t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle, \quad (3.48)$$

где в правой части стоит обычный вектор $|\alpha\rangle$, в котором число α умножено на $e^{-i\omega t}$. Теперь достаточно сделать замены:

$$\alpha \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{x}}{L} + i \frac{L \bar{p}}{\hbar} \right) e^{-i\omega t} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{x}_t}{L} + i \frac{L \bar{p}_t}{\hbar} \right) = \alpha_t,$$

где введены средние, зависящие от времени (стр. 74) и совпадающие с классической траекторией:

$$\bar{x}_t = \bar{x}_0 \cos(\omega t) + \frac{\bar{p}_0}{m\omega} \sin(\omega t), \quad \bar{p}_t = \bar{p}_0 \cos(\omega t) - m\omega \bar{x}_0 \sin(\omega t).$$

▷ Запишем в координатном представлении состояние (3.47):

$$\langle x|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{2\hbar} \bar{x}\bar{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p}x} e^{-\bar{x}d/dx} \langle x|0\rangle. \quad (3.49)$$

Для любой функции $f(x+a) = \exp(a d/dx) f(x)$, что проверяется разложением в ряд Тейлора по a функции $f(x+a)$ и экспоненты. Волновая функция гармонического осциллятора известна (стр. 64):

$$\langle x|0\rangle = \frac{e^{-x^2/2L^2}}{\pi^{1/4} \sqrt{L}}, \quad (3.50)$$

поэтому для волнового пакета можно сразу написать:

$$\langle x|\alpha, t\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{L}} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \bar{x}_t \bar{p}_t - i \frac{\omega t}{2} + \frac{i}{\hbar} \bar{p}_t x - \frac{1}{2L^2} (x - \bar{x}_t)^2 \right\}. \quad (3.51)$$

Со временем максимум плотности вероятности обнаружить частицу в точке x перемещается по классической траектории \bar{x}_t :

$$|\langle x|\alpha, t\rangle|^2 = \frac{1}{L\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -(x - \bar{x}_t)^2/L^2 \right\} \quad (3.52)$$

и распределение сохраняет свою форму. В классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ размерная квантовая длина L стремится к нулю, поэтому когерентный волновой пакет становится очень узким, что соответствует движению классической точечной частицы.

5 Уравнения для средних

▷ Рассмотрим одномерное “движение” частицы с массой m во внешнем поле $U(x)$. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$$

и уравнения Гейзенберга, соответственно, равны:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -U'(\hat{x})$$

(в этом разделе у операторов опускается зависимость от времени $\hat{x} \equiv \hat{x}_t$, т.е. они относятся к произвольному моменту времени, а не к $t = 0$ в представлении Шрёдингера). Беря производную первого уравнения и подставляя во второе, получаем операторное уравнение второго порядка:

$$m \frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = -U'(\hat{x}). \quad (3.53)$$

Пусть волновая функция $\Psi(x)$ отлична от нуля в окрестности среднего значения координаты \bar{x} и имеет небольшую дисперсию $D_x(t) = \langle (\hat{x} - \bar{x})^2 \rangle$. Тогда при вычислении среднего от производной оператора потенциала, его можно разложить в ряд Тейлора в окрестности \bar{x} :

$$U'(\hat{x}) = U'(\bar{x}) + U''(\bar{x})(\hat{x} - \bar{x}) + \frac{1}{2}U'''(\bar{x})(\hat{x} - \bar{x})^2 + \dots$$

Следовательно, среднее по состоянию $\Psi(x)$ равно:

$$\langle U'(x) \rangle = U'(\bar{x}) + \frac{1}{2}U'''(\bar{x}) \langle (\hat{x} - \bar{x})^2 \rangle + \dots$$

и среднее значение координаты удовлетворяет уравнению:

$$m \ddot{\bar{x}} = -U'(\bar{x}) - \frac{D_x(t)}{2} U'''(\bar{x}) + \dots \quad (3.54)$$

Пока дисперсия мала и потенциал гладкий (мала третья производная по сравнению с первой), вторым слагаемым можно пренебречь и получается уравнение классической динамики. Впрочем, малая дисперсия по координате влечёт большую дисперсию по импульсу (соотношение неопределённостей $D_x D_p \geq \hbar^2/4$), которая, даже из классических соображений, может приводить к разрушению пространственной локализации частицы. Поэтому классическое движение требует одновременно больших импульсов: $\bar{p}^2 \gg D_p$, чтобы *относительный* разброс импульсов был мал.

▷ Найдём как изменяется дисперсия координаты. Для этого вычислим сначала производную от квадрата оператора координаты:

$$\frac{d\hat{x}^2}{dt} = \hat{x} \frac{d\hat{x}}{dt} + \frac{d\hat{x}}{dt} \hat{x} = \frac{1}{m} (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}).$$

Обратим внимание, что так как \hat{x} и $d\hat{x}/dt$ не коммутируют, вычислять производную необходимо, как производную произведения: $\hat{x}^2 = \hat{x}\hat{x}$, сохраняя порядок операторов. Так как в представлении Гейзенберга векторы не зависят от времени, производная среднего равна среднему от производной:

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{x}}{dt} \right\rangle = \frac{\bar{p}}{m}.$$

В результате, для производной дисперсии $D_x(t) = \langle \hat{x}^2 \rangle - \bar{x}^2$ получаем уравнение:

$$\frac{dD_x(t)}{dt} = \frac{2}{m} \left\{ \frac{1}{2} \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle - \bar{x}\bar{p} \right\} = \frac{2}{m} D_{xp}(t). \quad (3.55)$$

Дисперсия координаты не будет изменяться со временем, если ковариация равна нулю. За редким случаем гармонического осциллятора (в когерентном состоянии), величина $D_{xp}(t)$ меняется со временем. Впрочем, эта функция может быть периодичной без постоянной составляющей и тогда изменение дисперсии будет также периодическим (ограниченным).

Подчеркнём, что $D_{xp}(t)$, в отличии от D_{xp} (3.6), взятой в начальный момент $t = 0$, зависит от времени. И даже если $D_{xp}(0) = D_{xp} = 0$, функция $D_{xp}(t)$ может быть отлична от нуля при $t > 0$. Например, для свободной частицы из (3.5) следует, что ковариация линейно увеличивается со временем (при ненулевой дисперсии импульсов):

$$D_{xp}(t) = D_{xy} + \frac{D_p}{m} t.$$

Для производной ковариации, аналогично (3.55), можно получить следующее уравнение:

$$\frac{dD_{xp}(t)}{dt} = \frac{D_p(t)}{m} - \left[\langle \hat{x} U'(\hat{x}) \rangle - \bar{x} \langle U'(\hat{x}) \rangle \right]. \quad (3.56)$$

Для осцилляторного потенциала выражение в квадратных скобках равно $m\omega^2 D_x(t)$ и в когерентном состоянии правая часть равна нулю. В общем случае волнового пакета с сохраняющейся формой и движущегося по классической траектории не получится. Впрочем, для финитных движений (в ограниченном пространстве) можно построить пакеты, которые периодически восстанавливают свою форму.

6 Оператор эволюции и функция Грина *

Рассмотрим состояние $|\Psi\rangle$ в два момента времени t_0 и t . В представлении Шрёдингера соответствующие ему векторы имеют вид ($\hbar = 1$):

$$|\Psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi\rangle, \quad |\Psi, t_0\rangle = e^{-i\hat{H}t_0} |\Psi\rangle.$$

Они связаны между собой следующим образом:

$$|\Psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\Psi, t_0\rangle = \hat{U}(t - t_0) |\Psi, t_0\rangle,$$

где введен *оператор эволюции*:

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}, \quad U_{xy}(t) = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | y \rangle, \quad (3.57)$$

матричные элементы $U_{xy}(t)$ которого, в координатном представлении определяют изменение волновой функции $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi, t \rangle$ во времени:

$$\Psi(x, t) = \int U_{x,x_0}(t - t_0) \Psi(x_0, t_0) dx_0. \quad (3.58)$$

Оператор эволюции, как и волновая функция, удовлетворяет уравнению шрёдингеровского типа:

$$i \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}, \quad \hat{U}(0) = \hat{1}, \quad (3.59)$$

которое можно записать в любом представлении. Матричные элементы оператора эволюции выражаются через собственные функции гамильтонiana в координатном представлении следующим образом:

$$U_{xx_0}(t) = \sum_n \langle x | E_n \rangle \langle E_n | x_0 \rangle e^{-iE_n t} = \sum_n \Psi_n(x) \Psi_n^*(x_0) e^{-iE_n t}. \quad (3.60)$$

Оператор эволюции можно также связать с резольвентой гамильтонiana (стр. 154):

$$\hat{R}(z) = (\hat{H} - z)^{-1} = i \int_0^\infty e^{-i(\hat{H}-z-i\epsilon)t} dt. \quad (3.61)$$

При этом z считается действительным, а ϵ – бесконечно малое число, которое *после* интегрирования необходимо устремить слева к нулю: $\epsilon \rightarrow +0$. Действительно, если вычислить матричные элементы этого соотношения, например, в энергетическом представлении, в правой части будет стоять интеграл от $e^{-i(E_n - z - i\epsilon)t}$. Его значение на нижнем пределе даст матричный элемент резольвенты, а на верхнем – будет равно нулю, благодаря множителю $e^{-\epsilon t}$.

▷ Пусть частица находится в точке x_0 в момент времени t_0 . Матричные элементы оператора эволюции $U_{xx_0}(t - t_0)$ определяют амплитуду вероятности обнаружить частицу в координате x в момент времени t . При этом предполагается, что $t > t_0$. Это отражает принцип *причинности*: следствие (нашли частицу в x в момент t) всегда возникает после его причины (измерили её координату x в момент t_0). Измерение является причиной, которая не может влиять на прошлые события. Чтобы это подчеркнуть, вводится *оператор Грина*:

$$\hat{G}(t - t_0) = \hat{U}(t - t_0) \theta(t - t_0), \quad (3.62)$$

где $\theta(t - t_0)$ – ступенчатая функция Хевисайда, равная единице, если $t > t_0$ и нулю, если $t < t_0$. Тем самым утверждается, что амплитуда “перемещения” частицы после измерения обратно во времени равна нулю.

Производная по времени от функции Хевисайда равна функции Дирака (стр. 335): $d\theta(t)/dt = \delta(t)$, поэтому:

$$\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} = -i\hat{H}\hat{G} + e^{-i\hat{H}(t-t_0)} \delta(t - t_0).$$

Так как $\delta(t - t_0)$ равна нулю при $t \neq t_0$, в множителе перед ней можно положить $t = t_0$ и уравнение для оператора Грина принимает вид:

$$i \frac{\partial \hat{G}(t - t_0)}{\partial t} - \hat{H} \hat{G}(t - t_0) = i \delta(t - t_0). \quad (3.63)$$

Матричные элементы оператора Грина в координатном представлении называются *функцией Грина*:

$$G_{xx_0}(t) = \langle x | \hat{G}(t) | x_0 \rangle = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | x_0 \rangle \theta(t). \quad (3.64)$$

Соответственно, эти элементы удовлетворяют уравнению:

$$i \frac{\partial G_{xx_0}(t - t_0)}{\partial t} - \int H_{xy} G_{yx_0}(t - t_0) dy = i \delta(t - t_0) \delta(x - x_0), \quad (3.65)$$

где учтено, что $\langle x | x_0 \rangle = \delta(x - x_0)$. Для гамильтониана частиц во внешнем поле $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{x})$ это дифференциальное уравнение:

$$i \frac{\partial G_{xx_0}(t - t_0)}{\partial t} - \left\{ -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} G_{xx_0}(t - t_0) = i \delta(t - t_0) \delta(x - x_0),$$

Подобным уравнениям удовлетворяют функции Грина в теории линейных дифференциальных уравнений (стр. 268), что оправдывает название для определения (3.62).

Глава 4

Момент импульса и спин

Важнейшими характеристиками частицы являются её момент импульса и спин. Хотя спин имеет вполне классическую аналогию момента собственного вращения объекта, его природа существенно квантовая. В частности, частицу со спином невозможно “раскрутить” сильнее, чем это сделала природа или тем более остановить такое “вращение”.

Сначала мы рассмотрим алгебраические соображения, позволяющие найти собственные значения момента импульса и матричные представления его операторов. Эти же формулы применимы и для спина. Затем операторы момента импульса будут записаны в сферической системе координат.

Оставшаяся часть главы посвящена спину частиц. Подробно будет рассмотрен спин $1/2$ и изучены трансформационные свойства спиновых волновых функций (спиноров) при вращении системы координат. Затем обсуждается алгебра сложения двух спинов.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Момент импульса в квантовой механике

В классической механике (как релятивистской, так и нерелятивистской) момент импульса (угловой момент) равен векторному произведению радиус-вектора частицы на её импульс. Соответственно, в квантовой механике эрмитов оператор (\hat{H}_{27}) момента импульса определяется следующим образом:

$$\hat{L}_i = [\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}]_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \quad (4.1)$$

где по повторяющимся индексам проводится суммирование от 1 до 3, ε_{ijk} – антисимметричный символ Леви-Чевита, $\hat{L}_1 = \hat{L}_x$, и т.д. Компоненты этого векторного оператора равны:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (4.2)$$

Найдём как они коммутируют между собой:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = i\hbar (-\hat{y}\hat{p}_x + \hat{x}\hat{p}_y).$$

Выражение в круглых скобках является проекцией момента импульса на ось z . Аналогично вычисляются остальные коммутаторы, которые получаются из $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ циклической перестановкой индексов:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x. \quad (4.3)$$

Эти соотношения можно записать в тензорном виде:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (4.4)$$

Квадрат момента импульса:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

коммутирует с каждой своей проекцией:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (4.5)$$

Несложно также проверить, что

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{x}_k, \quad [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k, \quad (4.6)$$

поэтому при движении частицы в центральном поле гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

коммутирует с $\hat{\mathbf{L}}$ и, следовательно, момент импульса сохраняется (и имеет с гамильтонианом общие собственные векторы).

• Найдём собственные значения момента импульса. Для этого введём ещё два оператора:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y, \quad (4.7)$$

которые удовлетворяют следующим соотношениям:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar \hat{L}_+, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar \hat{L}_- \quad (4.8)$$

и

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z. \quad (4.9)$$

Квадрат момента импульса и любая его компонента коммутируют между собой, поэтому имеют общие собственные векторы. Выберем пару $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z . Пусть

$$\hat{L}_z |L_z\rangle = L_z |L_z\rangle, \quad \hat{\mathbf{L}}^2 |L_z\rangle = \mathbf{L}^2 |L_z\rangle. \quad (4.10)$$

Действуя коммутаторами (4.8) на $|L_z\rangle$, получаем:

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm |L_z\rangle = (L_z \pm \hbar) \hat{L}_\pm |L_z\rangle.$$

Отсюда следует, что вектор $\hat{L}_\pm |L_z\rangle$ является собственным вектором оператора \hat{L}_z с собственным значением $L_z \pm \hbar$:

$$\hat{L}_\pm |L_z\rangle = C_\pm |L_z \pm \hbar\rangle, \quad (4.11)$$

где C_\pm – нормировочные константы, которые будут найдены чуть позже. Из этого соотношения следует, что собственные значения L_z отстоят друг от друга на целое число постоянных Планка.

Благодаря последнему соотношению (1.13), стр. 19, эрмитов оператор $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2$ соответствует положительно определённой физической величине. Поэтому собственные значения L_z при фиксированном \mathbf{L}^2 должны быть ограничены, причём в симметричном диапазоне от $-\hbar l$ до $\hbar l$, где l – некоторое число (инвариантность относительно $z \mapsto -z$):

$$L_z = \hbar m, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (4.12)$$

Так как квантовое число m изменяется на единицу, опять же из соображений симметрии, существуют только две возможности для значений числа l – целые 0, 1, 2, ... и полуцелые $1/2, 3/2, \dots$ Для углового момента реализуется первая возможность. Полуцелые квантовые числа возникают в случае “собственного момента вращения” частиц, который называется спином.

Так как число m меньше или равно l , а оператор \hat{L}_+ повышает его значение, при $l = m$ дальнейшее повышение должно быть не возможно:

$$\hat{L}_+ |L_z = \hbar l\rangle = 0. \quad (4.13)$$

Учитывая этот факт и соотношение (4.9), имеем:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |L_z = \hbar l\rangle = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |L_z = \hbar l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |L_z = \hbar l\rangle.$$

Удобно нумеровать собственные векторы операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z числами l и m . Первое определяет собственные значения $\hat{\mathbf{L}}^2$. Если оно фиксировано, то число m пробегает собственные значения \hat{L}_z от $-l$ до l с шагом 1. Таким образом, собственные значения оператора квадрата момента импульса и его проекции на ось z равны:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle. \quad (4.14)$$

Так как операторы $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z эрмитовы – их собственные векторы ортогональны:

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (4.15)$$

▷ Найдём коэффициенты C_{\pm} (4.11) при данном квантовом числе l (которое для краткости опустим). Они могут зависеть от m , поэтому:

$$\hat{L}_+ |m\rangle = C_+(m) |m+1\rangle, \quad \langle m | \hat{L}_- = C_+(m) \langle m+1|. \quad (4.16)$$

Второе соотношение получено из первого эрмитовым сопряжением и предполагается, что константа $C_+(m)$ действительна и положительна. Учитывая (4.9) и (4.15), имеем:

$$\langle m | \hat{L}_- \hat{L}_+ |m\rangle = \hbar^2 \{l(l+1) - m(m+1)\} = C_+^2(m).$$

Вычислим это же выражение, действуя последовательно операторами \hat{L}_+ и \hat{L}_- на правый вектор:

$$\langle m | \hat{L}_- \hat{L}_+ |m\rangle = C_+(m) \langle m | \hat{L}_- |m+1\rangle = C_+(m) C_-(m+1) = C_+^2(m).$$

Таким образом, $C_-(m+1) = C_+(m)$ или $C_-(m) = C_+(m-1)$ и следовательно (восстанавливая квантовое число l), окончательно, получаем:

$$\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle. \quad (4.17)$$

При этом \hat{L}_+ , действуя на вектор $|l, l\rangle$ даёт ноль, как и \hat{L}_- при действии на $|l, -l\rangle$, что автоматически отражается в множителе (4.17).

- Операторы момента импульса можно записать как матрицы в L_z -представлении. Оператор \hat{L}_z в этом представлении будет диагонален:

$$\langle m | \hat{L}_z | m' \rangle = \hbar m \delta_{mm'}$$

(по m нет суммы и для краткости опущено квантовое число l одинаковое в бра и кет векторах). Чтобы найти матрицы для \hat{L}_x и \hat{L}_y , выразим эти операторы через операторы повышения и понижения (4.7):

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-), \quad \hat{L}_y = -\frac{i}{2} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-).$$

Учитывая (4.17), получаем отличные от нуля матричные элементы:

$$\langle m | \hat{L}_x | m - 1 \rangle = \langle m - 1 | \hat{L}_x | m \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}, \quad (4.18)$$

$$\langle m | \hat{L}_y | m - 1 \rangle = -\langle m - 1 | \hat{L}_y | m \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}. \quad (4.19)$$

Запишем в явном виде матрицы $(\hat{L}_x)_{mm'}$, $(\hat{L}_y)_{mm'}$ и $(\hat{L}_z)_{mm'}$ для $l = 1$:

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где строчки и столбики нумеруются так, что m пробегает значения, начиная с 1 (т.е. $m = 1, 0, -1$). Естественно, ось z не является выделенной и собственные значения, например, оператора \hat{L}_x также равны $\hbar(l, l-1, \dots, -l)$. Для $l = 1$ обозначим векторы, соответствующие собственным значениям $S_x = \hbar, 0, -\hbar$, как $|S_x^+\rangle$, $|S_x^0\rangle$ и $|S_x^-\rangle$. В качестве упражнения предлагается проверить, что нормированные на единицу собственные векторы матрицы \hat{S}_x равны:

$$\langle S_z | S_x^+ \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \langle S_z | S_x^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \langle S_z | S_x^- \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}.$$

В состоянии $|S_x^0\rangle$, при измерении проекции момента S_z , нельзя обнаружить значения $S_z = 0$, а значения $S_z = \pm\hbar$ будут появляться равновероятно. В состоянии $|S_x^+\rangle$ возможны все три значения S_z , причём $S_z = 0$ будет обнаруживаться чаще, чем $S_z = \pm\hbar$.

2 Сферические координаты

Запишем оператор \hat{L}_z в координатном представлении в сферической системе координат:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (4.20)$$

Угол ϕ меняется от 0 до 2π , а θ – от 0 до π . Вычислим производные по ϕ от произвольной функции $f = f(x, y, z)$:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial z} = x \frac{\partial f}{\partial y} - y \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} (x \hat{p}_y - y \hat{p}_x),$$

где подставлены производные от (4.20). Таким образом:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (4.21)$$

Уравнение на собственные значения этого оператора даёт:

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi_m(\phi)}{\partial \phi} = \hbar m \Phi_m(\phi) \quad \Rightarrow \quad \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi},$$

где нормировочный множитель выбран так, чтобы при интегрировании по ϕ от 0 до 2π от $|\Phi_m(\phi)|^2$ получалась единица. Углы $\phi = 0$ и $\phi = 2\pi$ совпадают, поэтому $\Phi_m(0) = \Phi_m(2\pi)$. Отсюда следует, что m , а, следовательно и l , являются целыми числами. Собственные функции $\Phi_m(\phi)$ для эрмитового оператора, как всегда, ортогональны:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \delta_{mm'}. \quad (4.22)$$

Аналогично можно взять ($\ll H_{28}$) производную по θ и получить:

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\frac{c_\theta c_\phi}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + s_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad \hat{L}_y = i\hbar \left(\frac{c_\theta s_\phi}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} - c_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (4.23)$$

где $c_\theta = \cos \theta$ и т.д. Учитывая определение (4.7), имеем также:

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (4.24)$$

Наконец, квадрат оператора момента импульса равен:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{s_\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(s_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{s_\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}, \quad (4.25)$$

что проще проверить ($\ll H_{29}$) при помощи тождества (4.9).

В собственных функциях квадрата момента импульса можно разделить угловые переменные:

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi).$$

Будем их нормировать на единицу, интегрируя по телесному углу:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Собственные функции $\Phi_m(\phi)$ уже нормированы на единицу (4.22) и нормировочное условие для функции $\Theta_{lm}(\theta)$ имеет вид:

$$\int_0^\pi |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1. \quad (4.26)$$

Действие оператора \hat{L}_+ на $Y_{ll}(\theta, \phi) = \Theta_{ll}(\theta) e^{il\phi}/\sqrt{2\pi}$ должно давать ноль ($m = l$). Поэтому из (4.24) следует уравнение:

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta \Theta_{ll} = 0,$$

которое легко интегрируется:

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = \frac{(-i)^l}{l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^{2l+1}}} \sin^l \theta \frac{e^{il\phi}}{\sqrt{2\pi}},$$

где учтена ($\ll H_{30}$) нормировка (4.26) и по традиции выбран комплексный фактор $(-i)^l$. Действуя на Y_{ll} оператором понижения \hat{L}_- , получим $Y_{l,l-1}$ и т.д. Приведём явный вид нескольких функций ($Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^*$):

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} c_\theta, \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} s_\theta e^{i\phi},$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} c_\theta^2 - \frac{1}{2} \right), \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} s_\theta c_\theta e^{i\phi}, \quad Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} s_\theta^2 e^{2i\phi}.$$

Оператор инверсии \hat{P} координатных осей $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ коммутирует ($\ll H_{31}$) с оператором момента импульса, имея с ним общие волновые функции. При этом $\theta \mapsto \pi - \theta$, $\phi \mapsto \pi + \phi$, $Y_{ll} \mapsto (-1)^l Y_{ll}$, а \hat{L}_- не меняется:

$$\hat{P} Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4.27)$$

поэтому чётность состояния с квантовым числом l равна $(-1)^l$.

3 Спин электрона

В процессе становления квантовой механики, достаточно быстро выяснилось, что электрон и другие микрочастицы по-мимо момента импульса $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$ обладают собственным моментом, который был назван *спином*. В отличии от момента импульса, значение квадрата спина для данной частицы всегда *фиксировано*. Её собственное “вращение” нельзя “раскрутить” сильнее или “остановить”. Кроме этого, например, электрон является бесструктурным объектом, поэтому говорить о его вращении не приходится и спин следует считать внутренней степенью свободы частицы. Спин и момент импульса тесно связаны друг с другом и при наличии изотропности пространства сохраняется суммарный момент системы, равный сумме моментов импульсов частиц и их спинов.

Будем считать, что оператор спина удовлетворяет таким же коммутационным соотношениям, как и оператор момента импульса (стр. 88):

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z.$$

Тогда справедливы многие рассуждения первого раздела. В частности, квантовое число m по-прежнему изменяется на \hbar . Для электрона оно принимает два значения, поэтому, в силу симметрии, необходимо считать, что $m = \pm 1/2$. Соответственно l всегда фиксировано и равно $1/2$. Вместо числа m для обозначения векторов удобно использовать стрелочку вверх (по оси z) для $m = 1/2$ и стрелку вниз для $m = -1/2$:

$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad \hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle.$$

Таким образом мы будем использовать три эквивалентных обозначения $|1/2\rangle$, $|\uparrow\rangle$ и $|S_z^\uparrow\rangle$ для собственного вектора, соответствующего $S_z = \hbar/2$. Последнее обозначение удобно, когда рассматриваются собственные векторы не оператора \hat{S}_z , а, например, \hat{S}_x . В S_z -представлении матрица оператора \hat{S}_z диагональна:

$$(\hat{S}_z)_{mm'} = \langle m | \hat{S}_z | m' \rangle = \hbar m \delta_{mm'} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где m принято нумеровать от $+1/2$ до $-1/2$. Аналогично будет диагональна матрица квадрата спина (оператор которого коммутирует с \hat{S}_z):

$$\hat{\mathbf{S}}^2_{mm'} = \langle m | \hat{\mathbf{S}}^2 | m' \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где учтено, что собственные значения квадрата любого момента равны $\hbar^2 l(l+1)$ и $l = 1/2$.

Матрицы операторов остальных проекций можно найти при помощи общих формул (4.18), (4.19). Полагая в них $l = m = 1/2$, имеем:

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad (4.28)$$

где σ_i называются матрицами Паули:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Они удовлетворяют ($\ll H_{32}$) следующей алгебре (по k – сумма):

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (4.30)$$

умножив которую справа на матрицу σ_k и снова применив эту же алгебру, получим:

$$\sigma_i \sigma_j \sigma_k = \delta_{ij} \sigma_k - \delta_{ik} \sigma_j + \delta_{jk} \sigma_i + i \varepsilon_{ijk}. \quad (4.31)$$

След (сумма диагональных элементов) матриц Паули равен нулю, а след единичной матрицы равен 2. Поэтому из (4.30) и (4.31) следует:

$$\text{Tr } \sigma_i = 0, \quad \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}, \quad \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j \sigma_k) = 2i \varepsilon_{ijk}. \quad (4.32)$$

Умножая (4.31) на σ_l и беря след, получаем так же:

$$\text{Tr}(\sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l) = 2(\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (4.33)$$

▷ Собственные векторы матрицы \hat{S}_z имеют вид:

$$\langle S_z | S_z^\uparrow \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle S_z | S_z^\downarrow \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где бра-вектора $\langle S_z |$ пробегают значения $S_z = S_z^\uparrow, S_z^\downarrow$. Несложно найти ($\ll H_{33}$) и собственные векторы матрицы \hat{S}_x :

$$\langle S_z | S_x^\uparrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \langle S_z | S_x^\downarrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

где множитель поставлен для выполнения нормировки. Эти числа являются коэффициентами разложения собственных векторов оператора \hat{S}_x по базису оператора \hat{S}_z :

$$|S_x^\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z^\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z^\downarrow\rangle, \quad |S_x^\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z^\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z^\downarrow\rangle.$$

Учитывая ортогональность $\langle S_z^\uparrow | S_z^\downarrow \rangle = 0$, можно проверить, что эти векторы нормированы на единицу и ортогональны.

- Вместо осей декартовой системы координат рассмотрим произвольное направление, задаваемое единичным вектором с компонентами, зависящими от углов сферической системы координат:

$$\xi = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

Спроектируем оператора спина электрона на этот вектор:

$$\xi \hat{S} = \frac{\hbar}{2} \xi \sigma = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta).$$

Учитывая явный вид матриц Паули (4.29), запишем матрицу $\xi \sigma$ и найдём её собственные векторы и значения:

$$\xi \sigma = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad \xi \sigma w^{(s)} = s w^{(s)}. \quad (4.34)$$

Так как $(\xi \sigma)^2 = \xi^2 = 1$, собственные значения равны $s \pm 1$, а собственные значения проекции спина на ось ξ , как обычно, равны $\pm \hbar/2$. Собственные векторы $w^{(\pm)}$ эрмитовой матрицы ортогональны и их можно нормировать на единицу:

$$w^{(s)} w^{(\lambda)} = \delta_{s\lambda}. \quad (4.35)$$

Записывая их в виде $w^{(s)} = (\alpha \beta)^T$, подставляя в уравнение на собственные значения (4.34), получаем:

$$\alpha = \frac{s e^{-i\phi} \sin \theta}{1 - s \cos \theta} \beta, \quad \beta = \left(\frac{1 - s \cos \theta}{2} \right)^{1/2} e^{i\mu_s},$$

где β находится из нормировочного условия $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ и μ_s – произвольные фазы (вообще говоря различные для $s = 1$ и $s = -1$). Положим $\mu_{\pm} = (\varphi \pm \alpha)/2$, где α – некоторое действительное число (смысл которого прояснится в следующем разделе):

$$w^{(+)} = e^{\frac{i\alpha}{2}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{+\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad w^{(-)} = e^{-\frac{i\alpha}{2}} \begin{pmatrix} -e^{-\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{+\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

При $\theta = \phi = \alpha = 0$ получаем два столбика $(1 \ 0)^T$ и $(0 \ 1)^T$ (собственные векторы оператора S_z). Так как $w^{(+)} = \langle S_z | S_{\xi}^{\uparrow} \rangle$ и $w^{(-)} = \langle S_z | S_{\xi}^{\downarrow} \rangle$, несложно записать вероятности проекции спина по оси z , если он перед этим был измерен в направлении вектора ξ :

$$|\langle S_z^{\uparrow} | S_{\xi}^{\uparrow} \rangle|^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2}, \quad |\langle S_z^{\downarrow} | S_{\xi}^{\uparrow} \rangle|^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2}.$$

Чем ближе θ к 0, тем состояние $|S_{\xi}^{\uparrow}\rangle$ “ближе” к состоянию $|S_z^{\uparrow}\rangle$.

▷ Остановимся на свойствах полученных решений (4.36). Вычислим матрицу:

$$(w^{(+)} \otimes w^{(+)})_{ij} \equiv w_i^{(+)} w_j^{(+)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{+i\varphi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}_{ij} = \frac{1}{2} (1 + \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma})_{ij},$$

где второе равенство следует из сравнения с (4.34). Аналогично находится матрица при $s = -1$. В результате получается следующая *поляризационная матрица* (по s нет суммы, индексы опущены):

$$\rho = w^{(s)} \otimes w^{(s)} = \frac{1}{2} (1 + s \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma}). \quad (4.37)$$

С её помощью и тождеств (4.32) можно вычислить:

$$w^{(s)} \boldsymbol{\sigma} w^{(s)} = w_i^{(s)} \boldsymbol{\sigma}_{ij} w_j^{(s)} = \text{Tr}(\rho \boldsymbol{\sigma}) = s \boldsymbol{\xi}. \quad (4.38)$$

В приложениях встречается также матрица:

$$w^{(s)} \otimes w^{(\lambda)} = \frac{e^{is\alpha}}{2} (\boldsymbol{\kappa} + i s \boldsymbol{\xi} \times \boldsymbol{\kappa}) \boldsymbol{\sigma}, \quad s \neq \lambda, \quad (4.39)$$

где единичный вектор $\boldsymbol{\kappa}$ ортогонален $\boldsymbol{\xi}$ и повернут относительно него по углу θ на $\pi/2$, имея компоненты $\boldsymbol{\kappa} = \{\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta\}$.

▷ Фактически поляризационная матрица является *матрицей плотности*. Напомним (стр. 122), что если некоторый оператор \hat{S} имеет собственные векторы $|s\rangle$ (с дискретным или непрерывным спектром), то можно определить *оператор плотности* или матрицу плотности (в a -представлении собственных векторов оператора $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$):

$$\hat{\rho} = |s\rangle\langle s|, \quad \rho_{aa'} \equiv \langle a|\hat{\rho}|a'\rangle = \langle a|s\rangle\langle s|a'\rangle. \quad (4.40)$$

При помощи такого оператора, среднее значение в состоянии $|s\rangle$ некоторого оператора \hat{C} записывается следующим образом:

$$\langle s|\hat{C}|s\rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{C}\} \equiv \sum_{a,a'} \rho_{aa'} C_{a'a}. \quad (4.41)$$

Если рассматривается *смешанное состояние* (взвесь чистых состояний $|s\rangle$ с вероятностями W_s), то оператор плотности определяется следующим образом:

$$\hat{\rho} = \sum_s W_s |s\rangle\langle s|, \quad \sum_s W_s = 1, \quad \langle C \rangle = \sum_s W_s \langle s|C|s\rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{C}\}.$$

Выше $|s\rangle$ это $|S_\xi^\uparrow\rangle$ или $|S_\xi^\downarrow\rangle$, а $|a\rangle$, соответственно, $|S_z^\uparrow\rangle$ или $|S_z^\downarrow\rangle$. Для смешанного состояния поляризационная матрица (4.37) сохраняет свой вид, но вектор $\boldsymbol{\xi} \mapsto (W_+ - W_-) \boldsymbol{\xi}$, т.е. перестаёт быть единичным.

4 Спиноры и вращение

- Точечная бессpinовая частица имеет три степени свободы и описывается тремя коммутирующими декартовыми координатами $|\mathbf{x}\rangle$ или проекциями импульса $|\mathbf{p}\rangle$. Частица со спином обладает дополнительной степенью свободы, связанной с заданием проекции спина на некоторое направление (например, на ось z). Таким образом, частица со спином имеет 4 степени свободы, которые могут описываться, например, вектором $|\mathbf{x}, m\rangle$ с m изменяющимся от l до $-l$, где l для данной частицы всегда фиксирован (в отличии от углового момента).

Квантовое число m может входить в любой вектор состояния, если он является собственным вектором набора операторов, коммутирующих со спином. Например, если гамильтониан не зависит от спина, то можно рассматривать состояние $|E, m_0\rangle$. Тогда $\langle \mathbf{x}, m | E, m_0 \rangle$ будет волновой функцией в координатном представлении, для частицы у которой изменили энергию и проекцию спина m_0 на некоторое направление. В векторе может стоять квантовое число m , соответствующее проекции вектора спина, на вообще говоря другую ось или направление.

Запись $|\mathbf{x}, m\rangle \equiv |x, y, z, m\rangle$ с четырьмя индексами можно рассматривать как способ нумерации векторов гильбертового пространства. Так как координаты и спин независимые динамические переменные, можно расщепить гильбертово пространство на два – координатное $|\mathbf{x}\rangle$ и спиновое $|m\rangle$. Их объединение записывается в виде *прямого произведения*:

$$|\mathbf{x}, m\rangle = |\mathbf{x}\rangle \otimes |m\rangle, \quad |E, m_0\rangle = |E\rangle \otimes |m_0\rangle, \quad (4.42)$$

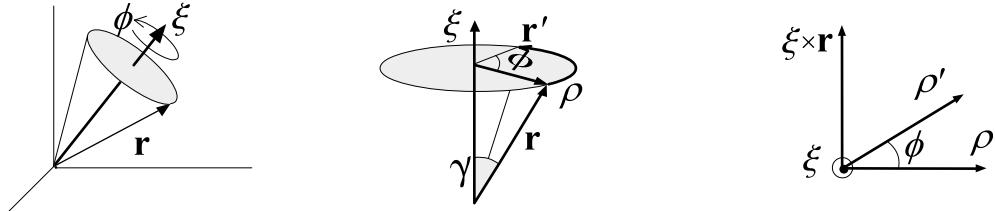
а скалярное произведение проводится независимо в каждом пространстве:

$$\langle \mathbf{x}, m | E, m_0 \rangle = \langle m | \otimes \langle \mathbf{x} | \cdot | E \rangle \otimes | m_0 \rangle = \langle \mathbf{x} | E \rangle \langle m | m_0 \rangle = \Psi_E(\mathbf{x}) \Phi_{m_0}(m).$$

Таким образом, в одно гильбертово пространство собираются векторы некоммутирующих между собой операторов (выше $\hat{\mathbf{x}}$ и \hat{H}), а во второе некоммутирующие между собой (например \hat{S}_x и \hat{S}_z), но коммутирующие со всеми операторами действующими в первом пространстве.

Величина $\Phi_{m_0}(m)$ называется *спиновой волновой функцией* или кратко *спинором*. Чтобы построить релятивистскую теорию частиц со спином, необходимо определить как спинор меняется при преобразованиях Лоренца. Тогда зная его в системе покоя частицы (нерелятивистская квантовая механика), можно выяснить его вид в любой системе отсчёта. Мы решим эту задачу в следующей части, а сейчас рассмотрим свойства спиноров при 3-вращениях системы координат.

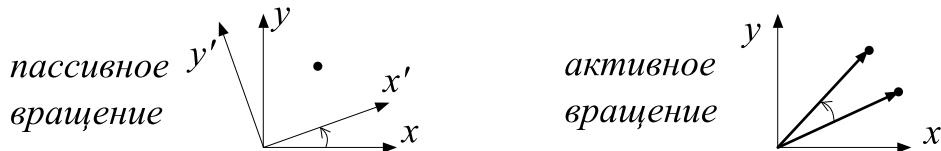
- Пусть с некоторым телом, вращающимся вокруг оси ξ (ниже первый рисунок) жёстко связан вектор \mathbf{r} . При повороте на угол ϕ он переходит в вектор \mathbf{r}' , скользя по перевёрнутому конусу (второй рисунок):



Обозначим проекцию \mathbf{r} на основание конуса через ρ , а проекцию \mathbf{r}' через ρ' . Вектор ρ , в результате поворота на угол ϕ , переходит в ρ' . Введём вектор $\xi \times \mathbf{r}$, лежащий в основании конуса перпендикулярно ρ (см. "вид сверху" на третьем рисунке). Его длина равна $|\xi \times \mathbf{r}| = r \sin \gamma = |\rho|$ (второй рисунок), поэтому:

$$\rho' = \rho \cos \phi + [\xi \times \mathbf{r}] \sin \phi. \quad (4.43)$$

Напомним, что при *активных* вращениях меняется (поворачивается) физический объект в данной фиксированной системе координат, а при *пассивных* вращениях – объект неизменен, но меняются его компоненты (координатное описание) в силу вращения системы координат:



Преобразования Лоренца описывают одно и тоже событие из различных систем отчёта, поэтому они являются пассивными преобразованиями. Для пространственных вращений мы также будем использовать пассивную интерпретацию. Несложно видеть, что поворот тела на угол ϕ относительно неподвижной системы координат эквивалентно повороту системы координат при неподвижном теле на угол $-\phi$. Поэтому сделаем в (4.43) замену $\phi \mapsto -\phi$. Кроме этого разложим:

$$\mathbf{r} = \rho + \xi (\xi \mathbf{r}), \quad \mathbf{r}' = \rho' + \xi (\xi \mathbf{r}'),$$

где $\xi (\xi \mathbf{r})$ направлен вдоль ξ и равен высоте конуса, кроме этого $\xi \mathbf{r} = \xi \mathbf{r}'$. В результате, окончательно:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \cos \phi + \xi (\xi \mathbf{r})(1 - \cos \phi) - [\xi \times \mathbf{r}] \sin \phi. \quad (4.44)$$

Для получения компонент радиус-вектора после поворота $\mathbf{r}' = \{x', y', z'\}$, это векторное уравнение необходимо расписать в компонентах (векторная запись является верной, но не совсем удачна с геометрической точки зрения, так как при пассивном вращении вектор \mathbf{r} не меняется).

• Относительно 3-вращений волновая функция бесспиновой частицы является скалярной функцией (в каждой точке 3-пространства определена амплитуда вероятности Ψ и это комплексное число не зависит от способа “нумерации” точек пространства). Рассмотрим бесконечно малый поворот системы координат вокруг вектора ξ на угол $d\phi$: $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - [\xi \times \mathbf{r}] d\phi$ или $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + [\xi \times \mathbf{r}'] d\phi$. При таком повороте значения функции не меняются, но меняется её функциональная форма:

$$\Psi'(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}' + \xi \times \mathbf{r}' d\phi) \approx \Psi(\mathbf{r}') + d\phi [\xi \times \mathbf{r}'] \nabla \Psi.$$

Опуская штрих у координат и вводя оператор углового момента в координатном представлении $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i[\mathbf{r} \times \nabla]$, ($\hbar = 1$), функциональное изменение можно записать следующим образом:

$$\Psi'(\mathbf{r}) \approx (1 + id\phi \xi \hat{\mathbf{L}}) \Psi(\mathbf{r}). \quad (4.45)$$

Волновая функция электрона двухкомпонентна и, вообще говоря, может менять свои значения при вращениях:

$$\Psi'_m(\mathbf{r}') = R_{mm'} \Psi_{m'}(\mathbf{r}),$$

где $R_{mm'}$ – матрица 2×2 и по m' ведётся суммирование. При малых углах поворота $R = 1 + id\phi \xi \mathbf{S}$, где \mathbf{S} – также матрица 2×2 . Поэтому изменение волновой функции электрона записывается следующим образом:

$$\Psi'(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) + id\phi \xi \mathbf{S} \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}' + \xi \times \mathbf{r}' d\phi) + id\phi \xi \mathbf{S} \Psi(\mathbf{r}'),$$

где в последнем слагаемом можно поставить у аргумента штрих, т.к. мы удерживаем первый порядок малости по $d\phi$. Разложим первое слагаемое в последнем равенстве в ряд Тейлора и опустим штрихи у радиус-вектора. В результате получим следующее изменение функционального вида двухкомпонентной волновой функции (индексы опущены):

$$\Psi'(\mathbf{r}) = \{1 + id\phi \xi (\hat{\mathbf{L}} + \mathbf{S})\} \Psi(\mathbf{r}). \quad (4.46)$$

Сумма $\hat{\mathbf{L}} + \mathbf{S}$ выглядит как полный момент, поэтому естественно предположить, что \mathbf{S} является спиновой матрицей, а компоненты спинора, меняются следующим образом:

$$R \approx 1 + id\phi \frac{\xi}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.47)$$

Осталось проверить, что эвристическое соображение, приведшее нас к (4.47) является верным.

Записывая $1 + \imath d\phi \boldsymbol{\xi} \mathbf{S} \approx \exp(\imath d\phi \boldsymbol{\xi} \mathbf{S})$ и перемножая матрицы последовательности бесконечно малых поворотов, получаем матрицу конечного поворота:

$$R = \exp\left(\imath \frac{\phi}{2} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma}\right) = \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + \imath \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.48)$$

где при разложении экспоненты во втором равенстве учтено, что для единичного вектора $(\boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma})^2 = 1$, $(\boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma})^3 = \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\sigma}$, и т.д.

Запишем в явном виде вращение вокруг оси z на угол α (напомним, что вращение проводится по правому винту в направлении оси):

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{+\imath \frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\imath \frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}.$$

Если исходные спиноры имели компоненты $w^{(+)} = (1 \ 0)^T$, $w^{(-)} = (0 \ 1)^T$, то после поворота они будут равны:

$$w^{(+)} = e^{+\imath \frac{\alpha}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^{(-)} = e^{-\imath \frac{\alpha}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Чтобы получить ситуацию в которой спинор, связанный с осью z стал соответствовать оси $\boldsymbol{\xi} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$, повернём систему координат сначала вокруг оси y на угол $-\theta$ (старая ось повернётся на θ в новых осях в плоскости x, z). Затем сделаем поворот на $-\phi$ вокруг z (исходная ось будет иметь сферические углы θ, ϕ в новой системе координат). Таким образом, необходимо вычислить матрицу поворота $R = R_z(-\phi)R_y(-\theta)$:

$$R = \begin{pmatrix} e^{-\imath \frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{+\imath \frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\imath \frac{\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-\imath \frac{\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{+\imath \frac{\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-\imath \frac{\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Действуя этой матрицей на (4.49), получаем компоненты спинора (4.36).

Вернёмся к соотношениям (4.49). Эти спиноры являются собственными векторами проекции спина на ось z . Тем не менее они “чувствуют” вращение вокруг оси z , при которых она “не меняется”. Не менее странным является то, что при полном повороте на $\alpha = 2\pi$ компоненты спинора изменяют свой знак, возвращаясь к исходным значениям только при $\alpha = 4\pi$. Такое необычное поведение спиноров при вращениях не сказывается на вероятностях (квадратах амплитуд). Однако свойства спиноров являются на столько богатыми в математическом плане и играют такую важную роль в релятивистской квантовой физике, что стоит считать подобное поведение вполне “реальным”. Его “непривычность” связана с нашим ограниченным, макроскопическим восприятием квантового мира.

5 Сложение спинов

- Интуитивно ясно, что при помощи двух частиц, имеющих спин $1/2$ (далее электрон) можно сформировать одну *векторную* частицу с единичным спином $l = 1$ (спины параллельны) или *скалярную* частицу с нулевым спином $l = 0$ (спины направлены в противоположные стороны).

Рассмотрим две частицы со спинами s_1 и s_2 как единую систему. Обозначим операторы спина частиц через $\hat{\mathbf{S}}^{(1)}$ и $\hat{\mathbf{S}}^{(2)}$, а суммарный спин системы через $\hat{\mathbf{S}}$:

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}.$$

Будем считать, что спины электронов это независимые динамические величины и их операторы коммутируют друг с другом:

$$[\hat{S}_i^{(1)}, \hat{S}_j^{(2)}] = 0.$$

Так как $S_z = \hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)}$, то для квантового числа m , нумерующего проекции суммарного спина на ось z , имеем $m = m_1 + m_2$. Его наибольшее значение равно $s_1 + s_2$, а наименьшее $-(s_1 + s_2)$. Так как

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}^{(1)})^2 + (\hat{\mathbf{S}}^{(2)})^2 + 2\hat{\mathbf{S}}^{(1)}\hat{\mathbf{S}}^{(2)},$$

оператор $\hat{\mathbf{S}}^2$ коммутирует с $(\hat{\mathbf{S}}^{(i)})^2$. Распишем скалярное произведение в компонентах и подставляя операторы повышения $\hat{S}_+^{(i)} = (\hat{S}_+^{(i)} + \hat{S}_-^{(i)})/2$ и понижения $\hat{S}_-^{(i)} = -i(\hat{S}_+^{(i)} - \hat{S}_-^{(i)})/2$, получаем:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}^{(1)})^2 + (\hat{\mathbf{S}}^{(2)})^2 + 2\hat{S}_z^{(1)}\hat{S}_z^{(2)} + \hat{S}_+^{(1)}\hat{S}_-^{(2)} + \hat{S}_-^{(1)}\hat{S}_+^{(2)}. \quad (4.50)$$

Обозначим через $|m_1, m_2\rangle \equiv |s_1, m_1; s_2, m_2\rangle$ общий собственный вектор операторов $(\hat{\mathbf{S}}^{(1)})^2, \hat{S}_z^{(1)}$ и $(\hat{\mathbf{S}}^{(2)})^2, \hat{S}_z^{(2)}$. Этот вектор не является собственным вектором оператора суммарного спина $\hat{\mathbf{S}}^2$, так как

$$\hat{\mathbf{S}}^2|m_1, m_2\rangle = \hbar^2\{s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1) + 2m_1m_2\} |m_1, m_2\rangle$$

$$+ \hbar^2\sqrt{(s_1 - m_1)(s_1 + m_1 + 1)(s_2 + m_2)(s_2 - m_2 + 1)} |m_1 + 1, m_2 - 1\rangle$$

$$+ \hbar^2\sqrt{(s_1 + m_1)(s_1 - m_1 + 1)(s_2 - m_2)(s_2 + m_2 + 1)} |m_1 - 1, m_2 + 1\rangle,$$

где $\hat{S}_{\pm}^{(1)}$ действуют на первое квантовое число m_1 , а $\hat{S}_{\pm}^{(2)}$ – на второе по формуле (4.17). Собственный вектор получается только для крайних значений квантовых чисел $|m_1 = s_1, m_2 = s_2\rangle$ и $|m_1 = -s_1, m_2 = -s_2\rangle$. Тем не менее, всегда можно построить линейную комбинацию векторов $|m_1, m_2\rangle$, которая окажется собственным вектором оператора квадрата суммарного спина. Числовые коэффициенты в этой линейной комбинации называется *коэффициентами Клебша-Гордана*.

Найдём эти коэффициенты в случае двух частиц со спином $1/2$. Пусть состояние с фиксированным спином всей системы описывается вектором $|l, m\rangle$. Обозначим через $|\uparrow\uparrow\rangle$ состояние в котором оба электрона имеют $m_i = 1/2$ и $|\downarrow\downarrow\rangle$ – со спинами вниз. Понятно, что:

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (4.51)$$

По (4.17) с $l = 1/2$ и $m = \pm 1/2$, для каждого электрона имеем:

$$\hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0, \quad \hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad \hat{S}_- |\downarrow\rangle = 0, \quad \hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle.$$

Поэтому из (4.50) имеем:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 |\uparrow\downarrow\rangle &= \hbar^2 |\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2 |\downarrow\uparrow\rangle, \\ \hat{\mathbf{S}}^2 |\downarrow\uparrow\rangle &= \hbar^2 |\downarrow\uparrow\rangle + \hbar^2 |\uparrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Чтобы построить собственными векторами квадрата суммарного момента, рассмотрим линейную комбинацию: $|l, 0\rangle = \alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle$ и потребуем чтобы $\hat{\mathbf{S}}^2 |l, 0\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, 0\rangle$:

$$l(l+1) \{ \alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle \} = (\alpha + \beta) \{ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \}.$$

Если $l = 0$ имеем $\alpha = \beta$, а при $l = 1 - \alpha = -\beta$. Нормируя получившиеся комбинации на единицу, получаем:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle, \quad (4.52)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle. \quad (4.53)$$

Обратим внимание, что состояния (4.51), (4.53) с единичным спином $|1, m\rangle$ не меняется при перестановке местами электронов, а состояние с нулевым спином (4.52) при этом изменяет свой знак.

В качестве упражнения, предлагается проверить, что при сложении спина 1 и $1/2$ получаются следующие спиновые функции (слева от равенства приводим l, m , а справа – только m_1 и m_2):

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle, & \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \left| -1, -\frac{1}{2} \right\rangle, \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{3} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{2}{3} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle, & \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{2}{3} \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{3} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{2}{3} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{2}{3} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle, & \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{3} \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{2}{3} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

Для сложения трёх спинов $\hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)} + \hat{\mathbf{S}}^{(3)}$ можно, воспользовавшись этим формализмом, сложить сначала $\hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}$, а затем добавить $\hat{\mathbf{S}}^{(3)}$.

Глава 5

Сферически симметричные задачи

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Трёхмерное движение

▷ Рассмотрим две частицы, взаимодействие между которыми описывается потенциалом $V(r)$, зависящим только от расстояния между частицами $r = |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$. Гамильтониан такой системы с шестью степенями свободы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(\hat{r}), \quad (5.1)$$

где пары координат и импульсов каждой частицы: \mathbf{x}_1 , \mathbf{p}_1 и \mathbf{x}_2 , \mathbf{p}_2 – независимые динамические переменные, коммутирующие между собой. Введём операторы суммарного и относительного импульсов:

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_1 \hat{\mathbf{p}}_2 - m_2 \hat{\mathbf{p}}_1}{m_1 + m_2}, \quad (5.2)$$

а также положение центра масс и относительный радиус-вектор:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}_2 - \hat{\mathbf{x}}_1. \quad (5.3)$$

Несложно проверить, что компоненты этих операторов также коммутируют как пара независимых координат и импульсов:

$$[\hat{R}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [\hat{R}_i, \hat{p}_j] = [\hat{x}_i, \hat{P}_j] = 0.$$

Запишем с их помощью гамильтониан (5.1):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{r}), \quad (5.4)$$

где M – суммарная масса частиц, а μ – приведенная масса:

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (5.5)$$

Так как $\hat{\mathbf{P}}$ коммутирует с $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{x}}$, гамильтониан (5.4) состоит из двух независимых (коммутирующих) слагаемых. Слагаемое $\hat{\mathbf{P}}^2/2M$ описывает свободное движение системы как целого, а остальные – это энергия взаимодействия частиц. Если взаимодействие приводит к связанным состояниям с дискретным спектром, то полная энергия будет суммой непрерывного и дискретного спектра.

Собственные векторы \hat{H} можно представить как прямое произведение $|\mathbf{P}\rangle \otimes |E\rangle$, где $\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{P}\rangle = \mathbf{P}|\mathbf{P}\rangle$ и $|E\rangle$ – собственные векторы гамильтониана с тремя степенями свободы: $\hat{\mathbf{p}}^2/2\mu + V(r)$. В координатном представлении это соответствует произведению волновых функций: $\Psi_{\mathbf{P}}(\mathbf{R})\Psi_E(\mathbf{x})$.

▷ Определим оператор радиального импульса \hat{p}_r , как эрмитову ($\triangleleft H_{34}$) проекцию импульса на единичный радиус-вектор:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} \right) = \frac{1}{r} \left(\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{i} \right). \quad (5.6)$$

Он сопряжен к длине радиус-вектора r ($\triangleleft H_{35}$):

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar. \quad (5.7)$$

Выразим через \hat{p}_r квадрат вектора момента импульса (стр. 88):

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = [\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}] [\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{p}_j = \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}$$

(по $j, k = 1, 2, 3$ – суммирование). В первом слагаемом переставлены местами $\hat{p}_k \hat{x}_j$, а во втором, \hat{x}_j перенесён вправо и \hat{x}_k влево через \hat{p}_k ($\triangleleft H_{36}$). С другой стороны, возводя определение (5.6) в квадрат, имеем:

$$(\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}})^2 = \hat{r} \hat{p}_r \hat{r} \hat{p}_r + 2i\hbar \hat{r} \hat{p}_r - \hbar^2 = \hat{r}^2 \hat{p}_r^2 + i\hbar \hat{r} \hat{p}_r - \hbar^2 = \hat{r}^2 \hat{p}_r^2 + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}},$$

Оператор момента $\hat{\mathbf{L}}$ коммутирует (стр. 88) с длиной радиус-вектора r , следовательно порядок $\hat{\mathbf{L}}$ и r не важен (шляпка над r далее опускается):

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2}. \quad (5.8)$$

▷ Оператор $\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}$, как скалярное произведение, не зависит от поворота системы координат. В частности, в сферических координатах $\hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}$ при действие на функцию $\Psi = \Psi(r, \theta, \phi)$ “замечает” только r :

$$\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}} \Psi = x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + z \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \left(x \frac{\partial r}{\partial x} + y \frac{\partial r}{\partial y} + z \frac{\partial r}{\partial z} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial r} = r \frac{\partial \Psi}{\partial r}.$$

Поэтому в координатном представлении:

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \quad (5.9)$$

а его квадрат равен:

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right).$$

Заметим, что оператор Лапласа в сферических координатах имеет вид:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(s_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 s_\theta^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

что согласуется с $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \Delta$, соотношением (5.8) и квадратом момента импульса в сферических координатах (4.25), стр. 92.

▷ Таким образом, трёхмерная система с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{r}), \quad \hat{r}^2 = \hat{\mathbf{x}}^2, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (5.10)$$

может быть записана в терминах квадрата момента импульса $\hat{\mathbf{L}}^2$ и оператора радиального импульса \hat{p}_r :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (5.11)$$

Так как момент импульса коммутирует с гамильтонианом, он имеет с ним общие собственные векторы, которые можно записать, разделяя радиальную и угловые переменные:

$$\langle r, \theta, \phi | E, l, m \rangle = \Psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (5.12)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$ – квантовое число характеризующее квадрат момента импульса $\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ и $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ определяет проекции момента на ось z : $L_z = \hbar m$, а $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – их общие собственные функции в сферической системе координат (стр. 93). Функция $R(r)$ – называется *радиальной волновой функцией*. Так как $Y_{lm}(\theta, \phi)$ нормированы на телесный угол $d\Omega$, в сферических координатах ($d^3\mathbf{x} = r^2 dr d\Omega$) нормировка радиальной волновой функции дискретного спектра (считаем её действительной) имеет вид:

$$\int_0^\infty R^2(r) r^2 dr = \int_0^\infty u^2(r) dr = 1. \quad (5.13)$$

Использование функции $u(r) = r R(r)$ удобно, так как:

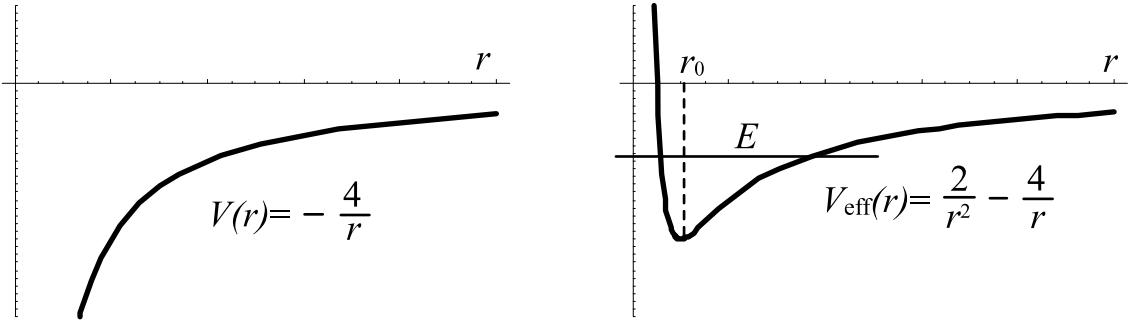
$$\hat{p}_r R = \frac{\hbar}{i} \left(\left(\frac{u}{r} \right)' + \frac{u}{r^2} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{u'}{r}, \quad \hat{p}_r^2 R = -\hbar^2 \frac{u''}{r}$$

и стационарное уравнение Шрёдингера $\hat{H} |E, l, m\rangle = E |E, l, m\rangle$ в координатном представлении сводится к одномерному уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r), \quad (5.14)$$

где выражение в квадратных скобках, по аналогии с (2.1), стр. 42, называется *эффективным потенциалом*, в котором частица может находиться только в области $r > 0$, поэтому $u(0) = 0$. В силу осцилляционной теоремы (стр. 44), функция $u(r)$ при $r > 0$ имеет $n_r = 0, 1, 2, \dots$ нулей.

▷ Пусть взаимодействие между частицами монотонно убывает с расстоянием и на бесконечности равно нулю: $V(\infty) = 0$. Для отрицательных потенциалов $V(r) < 0$ в классической механике возможны финитные движения, а, следовательно, в квантовой теории – связанные состояния:



Их энергии должны быть отрицательны $E < 0$, но большими, чем минимум эффективного потенциала $E > V_{\text{eff}}(r_0)$:

$$\hbar^2 l(l+1) = \mu r_0^3 V'(r_0), \quad E > V(r_0) + \frac{r_0}{2} V'(r_0). \quad (5.15)$$

Если же $E > 0$, то движение инфинитно и спектр непрерывный.

▷ При решении (5.14) для связанных состояний считаем $u(\infty) = 0$. Конкретное асимптотическое поведение $u(r)$ при $r \rightarrow \infty$ зависит от $V(r)$. Для потенциалов, убывающих быстрее $1/r$ ($C = \text{const}$):

$$r \rightarrow \infty : \quad u(r) \rightarrow C e^{-\sqrt{-2\mu E} r/\hbar}, \quad r V(r) \rightarrow 0, \quad (5.16)$$

что проверяется прямой подстановкой в уравнение. Если же на бесконечности $V(r) \rightarrow -\alpha/r$, то ($\ll H_{37}$):

$$r \rightarrow \infty : \quad u(r) \rightarrow C r^{\frac{\mu\alpha/\hbar}{\sqrt{-2\mu E}}} e^{-\sqrt{-2\mu E} r/\hbar}, \quad r V(r) \rightarrow -\alpha. \quad (5.17)$$

▷ Определим поведение $u(r)$ в нуле. Пусть $r^2 V(r) \rightarrow 0$, когда $r \rightarrow 0$. В этом случае, подстановка $u(r) = r^\lambda$ в (5.14) при $r \rightarrow 0$ даёт:

$$\lambda(\lambda-1) = l(l+1).$$

Из двух решений $\lambda = l+1$ и $\lambda = -l$ выбираем несингулярное в $r = 0$:

$$r \rightarrow 0 : \quad u(r) \rightarrow C' r^{l+1}, \quad R(r) \rightarrow C' r^l. \quad (5.18)$$

▷ Состояния с фиксированным значениями квантового числа l принято обозначать буквами латинского алфавита:

$$\begin{array}{ccccccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & S & P & D & F & G & H & I & K \end{array}$$

перед которой ставится либо число нулей радиальной волновой функции $R(r)$ (радиальное квантовое число n_r), либо другое целое число, характеризующее номер возбуждённого состояния, например $n_r + l + 1$.

2 Трёхмерный осциллятор

▷ Найдём уровни энергии трёхмерного гармонического осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2. \quad (5.19)$$

Он эквивалентен сумме трёх одинаковых, *несвязных*, одномерных осцилляторов ($\mathbf{x} = \{x, y, z\} \equiv \{x_1, x_2, x_3\}$, $r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$):

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \quad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2} x_i^2.$$

Волновую функцию $\Psi(x, y, z) = \langle \mathbf{x}|E\rangle$ стационарного уравнения Шредингера, можно записать в виде произведения:

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3), \quad (5.20)$$

где $\Psi_{n_i}(x_i)$ – собственные функции одномерных осцилляторов (стр. 62):

$$\hat{H}_i \Psi_{n_i}(x_i) = E_{n_i} \Psi_{n_i}(x_i), \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

Функция (5.20) является собственной функцией гамильтониана (5.19):

$$\hat{H} \Psi(x_1, x_2, x_3) = (E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}) \Psi(x_1, x_2, x_3),$$

с энергией, зависящей от суммы трёх целых чисел:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad n = n_1 + n_2 + n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (5.21)$$

Основное состояние ($n = 0$) имеет энергию $3\hbar\omega/2$. Следующий уровень $5\hbar\omega/2$ может возникать при трёх комбинациях квантовых чисел $\{n_1, n_2, n_3\}$: $\{1, 0, 0\}$, $\{0, 1, 0\}$ и $\{0, 0, 1\}$, поэтому это состояние трёхкратно вырождено. Аналогично, вырожден третий энергетический уровень $7\hbar\omega/2$, для которого возможны квантовые числа $\{2, 0, 0\}$, $\{1, 1, 0\}$ и все их перестановки. Чем выше энергия, тем больше вырождение и в общем случае ($\leq H_{38}$) его кратность равна $(n + 1)(n + 2)/2$.

Собственные векторы гамильтониана $|E\rangle$ нумеруются тремя целыми числами: $|\mathbf{n}\rangle \equiv |n_1, n_2, n_3\rangle$, а разделение переменных (5.20) эквивалентно рассмотрению прямого произведения (стр. 98) гильбертовых пространств:

$$|\mathbf{x}\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle, \quad |\mathbf{n}\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle.$$

Волновая функция $\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3)$ равна парному произведению векторов из каждого гильбертового пространства в прямом произведении.

▷ Рассмотрим ситуацию, когда вместе с энергией системы E измеряется её момент импульса (\mathbf{L}^2, L_z) , что “создаёт” базисные векторы $|E, l, m\rangle$. Гамильтониан в этом случае можно записать в виде:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2. \quad (5.22)$$

Сделаем преобразование $r \mapsto r r_0$, $\hat{p}_r \mapsto \hbar \hat{p}_r / r_0$, где

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \quad (5.23)$$

– константа размерности длины (стр. 62) и новые “безразмерные” операторы координаты и импульса имеют коммутатор: $[r, \hat{p}_r] = i$. В результате таких замен гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \hat{h}, \quad \hat{h} = \hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} + r^2.$$

Решим теперь стационарное уравнение Шрёдингера (5.14). Для безразмерного радиуса ($r \mapsto r r_0$) оно имеет вид:

$$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + r^2 - h \right] u, \quad (5.24)$$

где $E = (\hbar\omega/2) h$. На больших расстояниях $u(r) \rightarrow e^{-r^2/2}$. Возьмём произведение асимптотик в нуле и на бесконечности, умножив их на произвольную функцию:

$$u(r) = f(r) r^{l+1} e^{-r^2/2}.$$

Подстановка $u(r)$ в (5.24) даёт уравнение для $f(r)$:

$$f''(r) + 2 \left(\frac{l+1}{r} - r \right) f'(r) + (h - 2l - 3) f(r) = 0. \quad (5.25)$$

Оно не меняется при $r \rightarrow -r$, поэтому разложим $f(r)$ в ряд Тейлора только по вторым степеням: $f(r) = f_0 + f_1 r^2 + f_2 r^4 + \dots$, подставим в уравнение и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях r :

$$f_{k+1} = \frac{4k + 2l + 3 - h}{2(k+1)(2k+2l+3)} f_k. \quad (5.26)$$

При $h = 4n_r + 2l + 3$, где $n_r = 0, 1, 2 \dots$ ряды обрываются ($f_{n_r+1} = 0$). Если ряды не обрывать, то не получится условие $u(\infty) = 0$. Действительно, при $k \rightarrow \infty$ имеем $f_{k+1} \sim f_k / (k+1)$ или $f_k \rightarrow 1/k!$, т.е. $f(r) \rightarrow e^{-r^2}$. Её не подавит множитель $e^{-r^2/2}$ в $u(r)$.

▷ Значение параметра $h = 4n_r + 2l + 3$ соответствует следующим энергиям трёхмерного гармонического осциллятора:

$$E_{n_r, l} = \frac{\hbar\omega}{2} (4n_r + 2l + 3), \quad n_r, l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.27)$$

Они определяются двумя независимыми квантовыми числами n_r, l , которые связаны с n (5.21): $n = 2n_r + l$.

Когда $n_r = 0$, ряд обрывается на первой константе f_0 и получается волновая функция основного состояния при данном l ($R = u/r$):

$$R_{0l}(r) = \sqrt{\frac{2}{\Gamma(l + 3/2)}} r^l e^{-r^2/2}, \quad (5.28)$$

где учтено нормировочное условие (5.13). Первое возбуждённое (по n_r) состояние, имеет два слагаемых в полиноме ($n_r = 1$) и один ноль:

$$R_{1l}(r) = \sqrt{\frac{2(l + 3/2)}{\Gamma(l + 3/2)}} \left(1 - \frac{r^2}{l + 3/2}\right) r^l e^{-r^2/2}. \quad (5.29)$$

Сравнение (5.26) с (F.17), стр. 404 приводит к выводу, что $f(r)$ является вырожденной гипергеометрической функцией и волновая функция, с точностью до нормировочного множителя, в общем случае равна:

$$\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) = F_{l+3/2}^{-n_r}(r^2) r^l e^{-r^2/2} Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (5.30)$$

Функция $F_{l+3/2}^{-n_r}(r^2)$ имеет n_r нулей и при больших r стремится к r^{2n_r} .

▷ Одномерный гармонический осциллятор при чётных $n_i = 0, 2, 4, \dots$ имеет чётные волновые функции, а при нечётных $n_i = 1, 3, 5, \dots$ – нечётные. Поэтому чётность состояния $|\mathbf{n}\rangle \equiv |n_1, n_2, n_3\rangle$ при инверсии всех трёх осей $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ равна $(-1)^{n_1+n_2+n_3} = (-1)^n$.

В сферических координатах при инверсии осей радиус r не меняется. Волновая функция

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

благодаря $Y_{lm}(\theta, \phi)$, приобретает множитель $(-1)^l$ (стр. 93). Таким образом, чётностью состояния $|E, l, m\rangle \equiv |n_r, l, m\rangle$ равна

$$P = (-1)^l = (-1)^n \quad (5.31)$$

Так как $n = 2n_r + l$, число нулей n_r радиальной волновой функции не влияет на чётность.

▷ Подчеркнём, что решения $|n_1, n_2, n_3\rangle$ (три осциллятора) и $|n_r, l, m\rangle$ (эффективный потенциал) – это два *независимых* базиса. Их волновые функции имеют различную функциональную форму. Будем их различать аргументами: (x, y, z) – в первом базисе и (r, θ, ϕ) – во втором. Пусть $n_r = 0$ и $l = 1$. Тогда (стр. 93):

$$\Psi_{010}(r, \theta, \phi) = \frac{2^{1/2}}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2} r c_\theta, \quad \Psi_{01\pm}(r, \theta, \phi) = \frac{\mp 1}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2} r s_\theta (c_\phi \pm s_\phi).$$

Сравнивая их с собственными функциями гамильтониана одномерного осциллятора (стр. 64), получаем связь ($z = r c_\theta$ и т.д.):

$$\Psi_{010}(r, \theta, \phi) = \Psi_{001}(x, y, z), \quad \Psi_{010}(r, \theta, \phi) = \mp \{\Psi_{100}(x, y, z) \pm i\Psi_{010}(x, y, z)\}.$$

Так же можно разложить $\Psi_{n_r l m}(r, \theta, \phi)$ по сумме функций $\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z)$, для которых $n_1 + n_2 + n_3 = 2n_r + l$.

▷ Найдём ещё средние значения. Для чётных степеней r можно воспользоваться обобщённой вириальной теоремой (9.19), стр. 156, проложив в ней:

$$f(r) = r^{l+1}, \quad U(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} + r^2, \quad E = h = 4n_r + 2l + 3$$

(r в единицах r_0). Это даёт систему рекуррентных соотношений:

$$h(k+1) \langle r^k \rangle + k \left[\frac{k^2 - 1}{4} - l(l+1) \right] \langle r^{k-2} \rangle - (k+2) \langle r^{k+2} \rangle = 0. \quad (5.32)$$

Полагая $k = 0, 2, \dots$, имеем:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{h}{2}, \quad \langle r^4 \rangle = \frac{3(h^2 + 1)}{8} - \frac{l(l+1)}{2}. \quad (5.33)$$

Для нечётных степеней необходимо проводить интегрирование с волновой функцией. Например, при $n_r = 0$:

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+3/2)}, \quad \langle r \rangle = \frac{\Gamma(l+2)}{\Gamma(l+3/2)}. \quad (5.34)$$

Остальные степени снова можно получить из (5.32).

Отметим, что среднее значение квадрата радиуса можно получить также из формулы Фейнмана-Геллмана (стр. 45), дифференцируя энергию по частоте ω :

$$\frac{dE}{d\omega} = \langle E | \frac{d\hat{H}}{d\omega} | E \rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar}{2} h = \mu\omega \langle r^2 \rangle, \quad (5.35)$$

где вычисления проведены до перехода к безразмерным величинам.

3 Атом водорода: дискретный спектр

Рассмотрим теперь связанные состояния в кулоновском потенциале:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{\alpha}{r} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{\alpha}{r}. \quad (5.36)$$

Для атома водорода $\alpha = e^2$, где e – модуль заряда электрона. Такой же гамильтониан имеют сильно ионизированные атомы с одним электроном и зарядом ядра Z . Тогда $\alpha = Ze^2$.

Пусть r_B – характерная длина. Из $p \sim \hbar/r_B$ (соотношение неопределённостей) и равенства размерности кинетической и потенциальной энергий: $p^2/m \sim \alpha/r_B$, получаем размерный параметр длины и энергии:

$$r_B = \frac{\hbar^2}{\mu \alpha}, \quad E_B = \frac{\alpha}{2 r_B} = \frac{\mu \alpha^2}{2 \hbar^2}. \quad (5.37)$$

Первый называется радиусом боровской орбиты, а второй, как будет видно дальше, по модулю равен энергии основного состояния. Переходя к безразмерному радиусу $r \mapsto r_B r$ и импульсу $\hat{p}_r \mapsto \hbar \hat{p}_r / r_B$, имеем:

$$\hat{H} = E_B \left(\hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} \right). \quad (5.38)$$

Решим стационарное уравнение Шрёдингера (5.14), которое для безразмерного радиуса имеет вид:

$$u''(r) = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} + \frac{1}{n^2} \right] u(r),$$

где $E = -E_B/n^2$. Запишем волновую функцию $u(r) = r R(r)$ как произведение асимптотик при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$, умноженных на некоторую функцию: $u(r) = f(r) r^{l+1} e^{-r/n}$. Она удовлетворяет уравнению:

$$f'' + 2 \left(\frac{l+1}{r} - \frac{1}{n} \right) f' - \frac{2(l+1-n)}{nr} f = 0.$$

Раскладывая в ряд $f(r) = f_0 + f_1 r + f_2 r^2 \dots$ и приравнивая коэффициенты с одинаковыми степенями r , имеем:

$$f_{k+1} = \frac{(k+l+1-n)}{(k+1)(k+2l+2)} \frac{2}{n} f_k.$$

Как и для осциллятора, эти коэффициенты приводят к быстро растущему асимптотическому поведению, поэтому ряд необходимо оборвать.

При $n = n_r + l + 1$, где $n_r = 0, 1, 2, \dots$ имеем $f_{n_r+1} = 0$, что даёт энергии связанных состояний:

$$E_{n_r,l} = -\frac{E_B}{n^2}, \quad n = n_r + l + 1, \quad (5.39)$$

где n_r, l – независимые целые числа $0, 1, 2, \dots$, а натуральное $n = 1, 2, \dots$ называется *главным квантовым числом*.

При $n_r = 0$ полином состоит из константы и радиальная волновая функция основного состояния (при данном l) в нормировке (5.13) равна:

$$R_{0l}(r) = \left(\frac{2}{l+1}\right)^{l+3/2} \frac{1}{\sqrt{\Gamma(2l+3)}} r^l e^{-r/(l+1)} \quad (5.40)$$

(при нормировании используется гамма-функция (F.1), стр. 400). Первое возбуждённое по r состояние имеет вид:

$$R_{1l}(r) = \left(\frac{2}{l+2}\right)^{l+2} \frac{l+1}{\sqrt{\Gamma(2l+3)}} \left\{1 - \frac{r}{(l+1)(l+2)}\right\} r^l e^{-r/(l+2)}, \quad (5.41)$$

а второе:

$$R_{2l}(r) = N_{2,l} \left\{1 - \frac{2r}{(l+1)(l+3)} + \frac{2r^2}{(l+1)(2l+3)(l+3)^2}\right\} r^l e^{-r/(l+3)},$$

где нормировочная константа

$$N_{n_r,l} = \left(\frac{2}{l+n_r+1}\right)^{l+2} \frac{l+1}{\Gamma(2l+3)} \sqrt{\frac{\Gamma(2l+2+n_r)}{n_r!}}, \quad (5.42)$$

справедлива для любого возбуждённого состояния. В общем случае полиномы в фигурных скобках являются вырожденной гипергеометрической функцией и волновые функции можно записать в следующем виде:

$$\Psi_{n_r l m}(r, \theta, \phi) = N_{n_r,l} F_{2l+2}^{-n_r} \left(\frac{2r}{n}\right) r^l e^{-r/n} Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (5.43)$$

При больших r старшая степень полинома вырожденной гипергеометрической функции равна r^{n_r} , поэтому $R(r) \rightarrow r^{n-1} e^{-r/n}$, см. (5.17).

▷ Вырождение состояния с данной энергией ($n = const$) определяется вырождением по квантовому числу m ($2l+1$ значений). При данном n , орбитальное число принимает значения $l = 0, 1, \dots, n-1$, поэтому кратность суммарного вырождения равна n^2 (сумма $2l+1$ по всем l).

Уровни энергии принято перечислять при помощи главного квантового числа $n = n_r + l + 1$, ставя его перед буквой S, P, \dots , обозначающей значение орбитального числа l . Основное состояние $1S$ не вырождено. Первому возбуждённому состоянию соответствует 4 волновых функции $2S, 2P$ (во втором случае есть три значения $m = 0, \pm 1$) и т.д.

▷ Для вычисления средних воспользуемся обобщённой вироальной теоремой (стр. 156). Подставка в (9.19)

$$f(r) = r^{k+1}, \quad V = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}, \quad E = -\frac{1}{n^2}$$

приводит к рекуррентному уравнению

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle = \frac{k}{4} \{k^2 - 1 - 4l(l+1)\} \langle r^{k-2} \rangle + (2k+1) \langle r^{k-1} \rangle, \quad (5.44)$$

которое при $k = 0, 1, 2$ даёт следующие значения:

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{n^2}, \quad \langle r \rangle = \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)], \quad \langle r^2 \rangle = \frac{n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)].$$

Напомним, что r выражен в единицах боровского радиуса r_B , поэтому для его восстановления во всех формулах необходимо сделать замену $r \mapsto r/r_B$. Для атома водорода $r_B = 0.5 \text{ \AA} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ (стр. 14).

Сравним среднее значение $\langle r \rangle$ с минимумом эффективного потенциала (5.15): $r_{\min} = l(l+1)$. При $n_r = \text{const}$ и $l \rightarrow \infty$ среднее $\langle r \rangle$ стремится к r_{\min} . В этом квазиклассическом пределе эффективный потенциал становится очень глубоким и частица в основном находится на дне его минимума (на окружности радиуса r_{\min}).

▷ Изучим подробнее полученные волновые функции $\Psi_{n,lm}(r, \theta, \phi)$. В состоянии $1S$ (основное состояние с энергией $E = -E_B$ и нулевым орбитальным моментом) волновая функция сферически симметрична и имеет максимум при $r = 0$:

$$\Psi_{000}(r, \theta, \phi) = \frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}.$$

Это означает, что частица чаще находится в начале координат. Заметим, что при вычислении вероятности, плотность $|\Psi_{000}(r, \theta, \phi)|^2$ необходимо умножить на элемент объёма, который в сферической системе равен $dV = 4\pi r^2 dr$. В результате, вероятность обнаружить частицу в интервале $r, r+dr$ пропорциональна $r^2 e^{-2r} dr$. Эта величина равна нулю при $r = 0$ и достигает максимума на радиусе Бора: $r = 1$ (в безразмерных длинах). При этом $\langle r \rangle = 3/2$ несколько больше, что определяется “хвостом” функции $r^2 e^{-2r}$. То, что вероятность обнаружить частицу в интервале $r, r+dr$ имеет максимум не при $r = 0$, связано со свойством объёма в сферических координатах. Интервал $r, r+dr$ соответствует сферическому слою с площадью $4\pi r^2$ и толщиной dr . Объём этого слоя тем больше, чем больше r , поэтому вероятность в нём обнаружить частицу повышается с ростом r (пока экспонента e^{-2r} в квадрате волновой функции не начинает её понижать). Вероятность же обнаружить частицу в фиксированном объёме имеет максимум при $r = 0$.

▷ Следующий энергетический уровень $E = -E_B/4$ соответствует четырем состояниям. Состояние $2S$ ($n_r = 1, l = 0$) по-прежнему сферически симметрично:

$$\Psi_{2S} = \frac{e^{-r/2}}{\sqrt{8\pi}} \left\{ 1 - \frac{r}{2} \right\}.$$

Квадрат его модуля имеет основной максимум при $r = 0$ и более слабый и размытый при $r = 4$. На расстоянии $r = 2$ волновая функция равна нулю и частицу там встретить нельзя.

Три волновых функций состояния $2P$ ($n_r = 0, l = 1$) различаются значениями квантового числа $m = 0, \pm 1$:

$$\Psi_{2P}^{m=0} = \frac{e^{-r/2}}{\sqrt{32\pi}} z, \quad \Psi_{2P}^{m=\pm 1} = \mp \frac{e^{-r/2}}{\sqrt{64\pi}} (x \pm iy),$$

где $z = r c_\theta$ и т.д. Квадрат их модуля не зависит от знака m и обладает цилиндрической симметрией:

$$|\Psi_{2P}^{m=0}|^2 = \frac{e^{-r}}{32\pi} z^2, \quad |\Psi_{2P}^{m=\pm 1}|^2 = \frac{e^{-r}}{64\pi} (x^2 + z^2).$$

Смешанное состояние с равными весами по $m = 0, \pm 1$ обладает сферической симметрией.

▷ Волновая функция, соответствующая данной энергии $E = -E_B/n^2$, в общем случае может быть представлена в виде суперпозиции:

$$\Psi_n = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l c_{lm} R_{n-l-1,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Такое состояние имеет определённую чётность, если в сумме присутствуют только чётные или только нечётные значения орбитального квантового числа l . В противном случае чётность не определена.

Состояния $2P$, несмотря на отсутствие сферической симметрии, имеют чётность -1 и распределение заряда (плотность вероятности, умноженная на элементарный заряд) не обладает электрическим дипольным моментом. Однако, в состояниях не имеющих фиксированной чётности это возможно. Например для суперпозиции $2S$ и $2P$ ($m = 0$) состояний:

$$\Psi_2 = c_0 \Psi_{2S} + c_1 \Psi_{2P}^{m=0} = c_0 \frac{e^{-r/2}}{\sqrt{8\pi}} \left\{ 1 - \frac{r}{2} \right\} + c_1 \frac{e^{-r/2}}{\sqrt{32\pi}} z$$

среднее значение $\langle z \rangle$ за счёт интерференционного члена, отлично от нуля, что приводит к ненулевому дипольному моменту атома.

4 Потенциал воронки

Рассмотрим приближенные методы решения сферически симметричных задач, на примере *потенциала воронки*:

$$\hat{H} = \hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} + \lambda r. \quad (5.45)$$

Расстояния измеряются в радиусах Бора $r_B = \hbar/\sqrt{\mu\alpha}$, а энергия – в единицах $E_B = \mu\alpha^2/2\hbar^2$. Своё название потенциал получил за характерный графический вид, напоминающий воронку. Он используется в потенциальных моделях мезонов, состоящих из двух тяжёлых夸克ов (линейное взаимодействие моделирует эффект конфайнмента夸克ов).

Приведём численные значения энергий связанных состояний при различных значениях параметра λ :

n_r	l	$\lambda = 0.01$	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 1$	$\lambda = 10$	$\lambda = 100$
0	0	-0.98507	-0.85624	0.19484	6.8374	42.2299
0	1	-0.20244	0.13746	2.23816	13.3013	67.5702
1	0	-0.19270	0.22204	2.80250	16.3433	82.5448
0	2	-0.02140	0.51107	3.43174	18.0083	87.8867
1	1	-0.00453	0.62127	4.01511	20.8544	101.3711
2	0	0.00499	0.69993	4.51800	23.5275	114.4893
0	3	0.07077	0.76871	4.39110	22.0492	105.8389
1	2	0.09077	0.88014	4.94366	24.6818	118.1948
2	1	0.10670	0.98089	5.47323	27.2643	130.4351
3	0	0.11603	1.05550	5.93770	29.7089	142.3964

Горизонтальными линиями отделены группы состояний, которые при $\lambda = 0$ (кулоновская задача) вырождены. При больших λ энергии становятся положительными (спектр задачи не ограничен сверху) и состояние $(n_r, l) = (2, 0)$ имеет энергию больше, чем у $(0, 3)$ (при малых λ это не так). Если $n = n_r + l + 1 = const$, энергия тем больше, чем меньше орбитальное число l (и, соответственно, больше радиальное число n_r).

Применим теорию возмущений Релея-Шредингера (стр. 150) в первом порядке малости по λ . Учитывая значение $\langle r \rangle$ со стр. 116, имеем:

$$E_{n_r l} = -\frac{1}{(n_r + l + 1)^2} + \frac{1}{2} [3(n_r + l + 1)^2 - l(l + 1)] \lambda. \quad (5.46)$$

При $\lambda = 0.01$ для основного состояния эта формула даёт относительную ошибку порядка 0.01%, а для $(n_r, l) = (0, 1)$ и $(0, 1)$ порядка 1%. При более высоких квантовых числах и росте λ ошибка быстро растёт. Обобщённая вириальная теорема позволяет записать рекуррентные формулы для любой поправки к основному состоянию. Эти ряды будут расходиться, что можно ожидать в силу “аргумента Дайсона” (стр. 66) (при $\lambda < 0$ нет связанных состояний).

▷ Напомним, что спектр кулоновского потенциала вырожден. Для таких ситуаций теорию возмущений Релея-Шредингера модифицируют. Пусть состояние невозмущенной задачи k -вырождено. Обозначим собственные векторы \hat{H}_0 с данной энергией $E^{(0)}$ как $|i\rangle$, $i = 1, \dots, k$ и разложим по ним первую поправку к собственному вектору возмущённой задачи $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$:

$$|E\rangle = \sum_{j=1}^k c_j |j\rangle.$$

Подставляя его в уравнение на собственные значения $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ и умножая слева на $\langle i|$, получим:

$$\sum_{j=1}^k (V_{ij} - \langle i|j\rangle \varepsilon) c_j = 0, \quad V_{ij} = \langle i|\hat{V}|j\rangle, \quad E = E^{(0)} + \lambda \varepsilon, \quad (5.47)$$

где $\lambda \varepsilon$ – поправка к невозмущенной энергии $E^{(0)}$. В (5.47) не предполагается, что векторы $|i\rangle$ ортогональны (хотя при помощи процедуры Шмидта, стр. 353, их всегда можно ортогонализовать). Однородная система уравнений (5.47) относительно коэффициентов c_j будет иметь решение, если её определитель равен нулю (стр. 361):

$$\det(V_{ij} - \langle i|j\rangle \varepsilon) = 0. \quad (5.48)$$

Из этого уравнения, называемого *вековым*, можно найти ε . Если решений несколько, вырождение полностью или частично снимается.

Впрочем, такой подход имеет смысл, только если нельзя указать какой вектор $|i\rangle$ невозмущенной задачи соответствует искомому приближению к волновой функции возмущённого гамильтониана. При сферической симметрии мы ищем энергии, соответствующие данному значению орбитального квантового числа l , поэтому использование векового уравнения не всегда целесообразно.

Например, первое возбуждённое состояния кулоновского потенциала с энергией $E = -1/4$ двукратно вырождено по числам n_r, l (игнорируем квантовое число m). Если формально применить уравнение (5.48) к векторам $|1\rangle = |2P\rangle$ и $|2\rangle = |2S\rangle$ с матричными элементами:

$$V_{11} = 5, \quad V_{22} = 6, \quad V_{12} = V_{21} = -3\sqrt{3}, \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2},$$

получится квадратное уравнение $3 - 2\varepsilon + \varepsilon^2/4 = 0$ с решениями $\varepsilon = 2$ и 6. Второе решение совпадёт с результатом (5.46), имея ошибку 1% при $\lambda = 0.01$. А вот первое – нет и будет иметь ошибку 14%.

Глава 6

Матрица плотности

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Смешанные состояния

Смешанное состояние – это смесь чистых состояний (описываемых векторами) с различными весами w_n . Например, можно взять N квантовых систем из которых N_1 находятся в чистом состоянии $|\Psi_1\rangle$, ещё N_2 в состоянии $|\Psi_2\rangle$ и т.д. Затем “случайно их перемешать”. Совокупность таких систем образует *смешанный квантовый ансамбль* в котором с вероятностью $w_n = N_n/N$ можно обнаружить квантовую систему в чистом состоянии $|\Psi_n\rangle$.

В смешанном состоянии среднее значение физической величины A определяется при помощи суммы квантовых средних $\langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_n \rangle$ в состояниях $|\Psi_n\rangle$, умноженных на вероятности w_n этих состояний:

$$\langle A \rangle = \sum_n w_n \langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_n \rangle, \quad \sum_n w_n = 1. \quad (6.1)$$

Для описания смешанных состояний вводится *оператор плотности*:

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|. \quad (6.2)$$

Так как веса w_n действительны, оператор плотности – эрмитов:

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}. \quad (6.3)$$

Разложим каждое состояние $|\Psi_n\rangle$ по базису $|\mu\rangle$ (μ -представление):

$$|\Psi_n\rangle = \sum_\mu |\mu\rangle \langle \mu | \Psi_n \rangle.$$

Тогда среднее значение (6.1) физической величины A будет равно:

$$\langle A \rangle = \sum_{n,\mu} w_n \langle \Psi_n | \hat{A} | \mu \rangle \langle \mu | \Psi_n \rangle = \sum_\mu \langle \mu | \hat{\rho} \hat{A} | \mu \rangle,$$

где $\langle \mu | \Psi_n \rangle$ перенесено в начало произведения и учтено определение (6.2). В более лаконичной форме это выражение записывается следующим образом:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}) \quad (6.4)$$

(под знаком следа операторы можно переставлять местами ($\lessdot H_{39}$), что учтено во втором равенстве).

▷ Рассмотрим некоммутирующие операторы $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] \neq 0$, спектр которых содержит по два собственных значения ± 1 , а собственные векторы равны $|S_x^\pm\rangle$ и $|S_y^\pm\rangle$. Пусть в состоянии $|S_x^+\rangle$ можно с равной вероятностью обнаружить значения величины $S_y = \pm 1$. Физическим примером являются проекции спина электрона (делённого на $\hbar/2$) на ортогональные оси (стр. 94). Сравним две, различным образом подготовленные системы:

- 1) Создадим пучок электронов с проекцией спина вдоль оси x , отобрав электроны с $S_x = +1$.
- 2) Измеряя S_y , построим два пучка одинаковой интенсивности с $S_y = +1$ и $S_y = -1$, а затем смешаем их в один.

В обоих случаях значения $S_y = \pm 1$ будут встречаться равновероятно. Однако это две совершенно различные физические системы. Первая – чистое состояние, которое описывается вектором $|S_x^+\rangle$. Вторая – это смешанное состояние и ему не соответствует вектор состояния. Обратим внимание, что смешанные состояния могут содержать чистые состояния, относящиеся к собственным векторам некоммутирующих операторов. Например, $\hat{\rho} = (1/2) \{ |S_x^+\rangle\langle S_x^+| + |S_y^+\rangle\langle S_y^+| \}$.

▷ Диагональные элементы матрицы плотности определяют вероятность обнаружить систему в состоянии $|\mu\rangle$:

$$\rho_{\mu\mu} = \langle \mu | \hat{\rho} | \mu \rangle = \sum_n w_n |\langle \mu | \Psi_n \rangle|^2.$$

При этом сумма всех диагональных элементов означает единичную вероятность обнаружить систему в каком либо состоянии $|\mu\rangle$:

$$\text{Tr}(\rho) = 1. \quad (6.5)$$

Равенство следа единице и условие эрмитовости (6.3) приводят к тому, что для конечного μ -базиса с N векторами $|\mu\rangle$, матрица плотности $\rho_{\mu\nu}$ определяется $N^2 - 1$ действительными параметрами ($\lessdot H_{40}$).

Для чистого состояния в определении (6.2) есть только одно слагаемое: $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. В этом случае, оператор плотности является *проекционным* (стр. 364), так как $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. В частности $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$. В смешанном состоянии это уже не так:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_{n,k,\mu} w_n w_k \langle \mu | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | \mu \rangle = \sum_{n,k} w_n w_k |\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle|^2 \neq 1.$$

Например, если $\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle = \delta_{nk}$, то сумма квадратов $w_1^2 + w_2^2 + \dots$ не может равняться единице, если $w_1 + w_2 + \dots = 1$ и $w_k > 0$.

▷ Рассмотрим два коммутирующих оператора \hat{A} и \hat{B} , имеющих общие собственные векторы $|a, b\rangle$ и образующие полный набор (стр. 34). Если измерено $A = a$ и $B = b$ – система описывается вектором $|a, b\rangle$. Что происходит, если измерена только физическая величина A ? Пусть в ансамбле у каждой системы $A = a$. Так как полного возможного задания состояния не произошло, ансамбль находится в смешанном состоянии:

$$\hat{\rho} = \sum_b w_b |a, b\rangle\langle a, b|, \quad (6.6)$$

где сумма ведётся по всем возможным значениям величины B . Вероятности w_b вкладов чистых состояний зависят от “конструкции” макроприбора при помощи которого была измерена величина A . Они могут быть одинаковыми или различными, зависящими от значения a .

При последующем измерении величины $B = b$ происходит *редукция* матрицы плотности (6.6) к чистому состоянию $|a, b\rangle$. Поэтому, когда мы говорим о векторе $|\Psi\rangle$ в котором находится система, подразумевается, что у неё измерены все величины из полного набора.

Подчеркнём, что макроскопический прибор не может находиться в чистом состоянии. Любой прибор имеет ненулевую температуру и состоит из большого числа составных частей. Поэтому он всегда описывается непроективной матрицей плотности.

Рассмотрим макросистему, состоящую из большого числа не взаимодействующих микросистем. Каждая из них может иметь определённую энергию E_n с вероятностью (распределение Гиббса):

$$w_n = Z^{-1}(\beta) \exp(-\beta E_n).$$

Множитель $Z(\beta)$ находится из равенства единице сумме всех w_n , а термодинамический параметр $\beta = 1/k_B T$ связан с температурой T макросистемы (k_B – постоянная Больцмана). В этом случае её состояние может быть описано оператором плотности:

$$\hat{\rho} = Z^{-1}(\beta) \sum_n \exp(-\beta E_n) |E_n\rangle\langle E_n| = Z^{-1}(\beta) \exp(-\beta \hat{H}),$$

где учтено, что $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ и сумма по $|E_n\rangle\langle E_n|$ равна единичному оператору.

Описание взаимодействия макроприбора и микросистемы, в результате которого происходит редукция матрицы плотности или вектора состояния является непростой проблемой. Мы вернёмся к этому вопросу в главе 8.

• Найдём уравнение, которому подчиняется оператор плотности $\hat{\rho}$, если векторы $|\Psi_n\rangle$ зависят от времени (представление Шрёдингера), а веса w_n – нет. Беря производную определения (6.2), имеем:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \sum_n w_n \left\{ \frac{\partial |\Psi_n\rangle}{\partial t} \langle \Psi_n | + |\Psi_n\rangle \frac{\partial \langle \Psi_n |}{\partial t} \right\}$$

или, учитывая уравнение Шрёдингера $i\hbar \partial |\Psi_n\rangle / \partial t = \hat{H} |\Psi_n\rangle$ (1.42), получаем операторное уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}, \hat{H}] = 0. \quad (6.7)$$

Обратим внимание, что оно имеет обратный знак по сравнению с эволюцией операторов в представлении Гейзенберга (1.36).

▷ В классической механике можно ввести функцию, являющуюся аналогом квантовомеханической матрицы плотности. На практике, даже в классической теории, измерение координаты и импульса частицы содержит некоторую ошибку. Пусть они известны неточно и описываются распределением вероятности в фазовом пространстве (для n степеней свободы это $2n$ -мерное пространство точки которого имеют координаты $\{q, p\} = \{q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n\}$):

$$dW(t, q, p) = \rho(t, q, p) dq dp,$$

где плотность вероятности ρ нормирована на единицу:

$$\int \rho(t, q, p) dq dp = 1.$$

Можно представлять ρ как функцию, пропорциональную плотности точек в фазовом пространстве (совокупность невзаимодействующих частиц). Полное число частиц должно сохраняться, поэтому выполняется уравнение непрерывности (аналогично плотности заряда):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0,$$

где $\mathbf{V} = (\dot{q}_i, \dot{p}_i)$ – скорость точки в фазовом пространстве. Поэтому, с учётом уравнений Гамильтона (1.29), получаем уравнение для плотности:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H, \rho\}_c = 0. \quad (6.8)$$

Использование правила (1.32) приводит к (6.7). В качестве упражнения, стоит решить ($\ll H_{41}$) уравнение (6.8) для свободной частицы.

Глава 7

Тождественные частицы

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Бозоны и фермионы

Рассмотрим гамильтониан, описывающий N одинаковых частиц, которые попарно взаимодействуют при помощи потенциала $W(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и находятся во внешнем поле $U(\mathbf{x})$:

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{x}}_i) \right\} + \sum_{i < j} W(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{x}}_j). \quad (7.1)$$

В первой сумме индекс i пробегает значения от 1 до N . Второе суммирование по двум индексам проводится так, что индекс i остаётся все время меньше индекса j . Это обеспечивает отсутствие самодействия и учитывает взаимодействие двух частиц только один раз. Например, для трёх частиц, при $U = 0$, имеем:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_3^2}{2m} + W_{12} + W_{13} + W_{23}.$$

Парное взаимодействие предполагается симметричным относительно перестановки частиц: $W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = W_{ij} = W_{ji}$. Например, потенциал может зависеть от расстояния между частицами: $W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$. Примером гамильтониана (7.1) является атом, в котором электроны взаимодействуют с ядром и друг с другом:

$$U(\hat{\mathbf{x}}_i) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{x}_i|}, \quad W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|},$$

где Ze – заряд ядра. Сумму по $i < j$ в (7.1) можно записать также следующим образом:

$$\sum_{i < j} W_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W_{ij},$$

где суммирование по i и j в правой части ведётся уже независимым образом от 1 до N , но отбрасываются слагаемые для которых $i = j$.

Для трансляционно инвариантных гамильтонианов (не меняющихся при сдвиге начала координат: $\mathbf{x}_i \mapsto \mathbf{x}_i + \mathbf{a}$) сохраняется (коммутирует с \hat{H}) полный импульс системы:

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_i \hat{\mathbf{p}}_i = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 + \dots + \hat{\mathbf{p}}_N.$$

Естественно, импульсы и координаты *различных* частиц между собой также коммутируют. Гамильтониан (7.1) будет трансляционно инвариантным, если отсутствует внешнее поле $U(\mathbf{x}) = 0$ и парное взаимодействие зависит от расстояния между частицами.

- Введём оператор перестановки \hat{P}_{ij} , который меняет местами i -ю и j -ю частицы. Например, его действие на 3-частичную волновую функцию имеет вид:

$$\hat{P}_{13}\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \Psi(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1).$$

Он имеет два собственных значения, равных ± 1 , а собственные функции являются симметричными или антисимметричными относительно перестановки частиц. Действительно:

$$\hat{P}_{ij}^2 \Psi(\dots \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots) = \hat{P}_{ij} \Psi(\dots \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots) = \Psi(\dots \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots).$$

С другой стороны, из уравнения на собственные значения для квадрата оператора:

$$\hat{P}_{ij}^2 \Psi(\dots \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots) = P_{ij}^2 \Psi(\dots \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots),$$

следует, что $P_{ij}^2 = 1$ или $P_{ij} = \pm 1$.

Если $W_{ij} = W_{ji}$, гамильтониан (7.1) инвариантен относительно операции перестановки любых двух частиц местами и оператор перестановки коммутирует с гамильтонианом, имея с ним общие волновые функции. Опыт показывает, что все частицы делятся на два класса – *бозоны* и *фермионы*. Система состоящая из бозонов имеет симметричные волновые функции:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_1) = \Psi(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1),$$

а система состоящая из фермионов – антисимметричные:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_1) = -\Psi(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$$

(плюс возникает при чётных перестановках).

В нашем мире к фермионам относятся, например, электрон, протон и нейtron. Примерами бозонов являются – фотон, π -мезон, α -частица. Фундаментальные частицы могут образовывать связанные состояния, которые выступают как самостоятельные частицы. Связанное состояние чётного числа фермионов становится бозоном. Так, α -частица (ядро гелия) является связанным состоянием двух протонов и двух нейтронов. Связанное состояние нечётного числа фермионов снова приводит к фермионам. Любое число бозонов всегда образует бозон.

Использование гамильтониана (7.1) и волновой функции $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ требует явным образом указывать число частиц. В ситуациях, когда они могут рождаться и уничтожаться, это не удобно и необходим иной подход. Этот подход называется квантовой теорией поля, которая может быть как релятивистской, так и нерелятивистской. Последняя рассматривается в следующей главе.

• Разная симметрия волновых функций фермионов и бозонов приводит к различному поведению коллектива, состоящего из таких частиц. Рассмотрим, например, две невзаимодействующие частицы, находящиеся в поле гармонического осциллятора (одномерный случай). Гамильтониан системы является суммой гамильтонианов каждой частицы:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2.$$

Так как гамильтониан распадается на сумму двух независимых частей, можно решить задачу на собственные значения для каждой его части:

$$\hat{H}_1 \Psi_{n_1}(x_1) = E_{n_1} \Psi_{n_1}(x_1), \quad \hat{H}_2 \Psi_{n_2}(x_2) = E_{n_2} \Psi_{n_2}(x_2).$$

Полная энергия системы равна сумме энергий каждой частицы $E_{n_1, n_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$, а волновая функция является произведением собственных волновых функций каждой части гамильтониана. Однако, при этом необходимо учесть свойства симметрии. Например, для фермионов имеем:

$$\Psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) - \Psi_{n_2}(x_1) \Psi_{n_1}(x_2) \}. \quad (7.2)$$

Очевидно, что $\Psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = -\Psi_{n_1, n_2}(x_2, x_1)$, а множитель введен для сохранения нормировки на единицу волновой функции:

$$\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm} \quad \Rightarrow \quad \int |\Psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = 1.$$

Подобная антисимметрия волновой функции приводит к тому, что фермионы в осцилляторе не могут иметь одинаковой энергии. Действительно, если $n_1 = n_2$, то волновая функция равна нулю. Для бозонов в (7.2) должен стоять знак плюс, и подобного ограничения нет. В общем случае волновую функцию N невзаимодействующих фермионов можно записать при помощи определителя:

$$\Psi_{n_1 \dots n_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{n_1}(x_1) & \Psi_{n_2}(x_1) & \dots & \Psi_{n_N}(x_1) \\ \Psi_{n_1}(x_2) & \Psi_{n_2}(x_2) & \dots & \Psi_{n_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{n_1}(x_N) & \Psi_{n_2}(x_N) & \dots & \Psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix},$$

который обеспечивает правильные свойства антисимметрии (меняет знак при перестановке любых двух строк), а факториальный множитель – единичную нормировку.

На самом деле, кроме энергетических квантовых чисел n_1 и n_2 для фермионов существуют ещё квантовые числа, связанные со спином. Как было показано при анализе сложения спинов (стр.102), система из двух электронов может иметь нулевой ($l = 0$) или единичный ($l = 1$) спин. В первом случае спиновая функция $|l, m\rangle$ антисимметрична:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (S_1^\uparrow S_2^\downarrow - S_1^\downarrow S_2^\uparrow).$$

Поэтому координатная часть волновой функции должна быть симметрична:

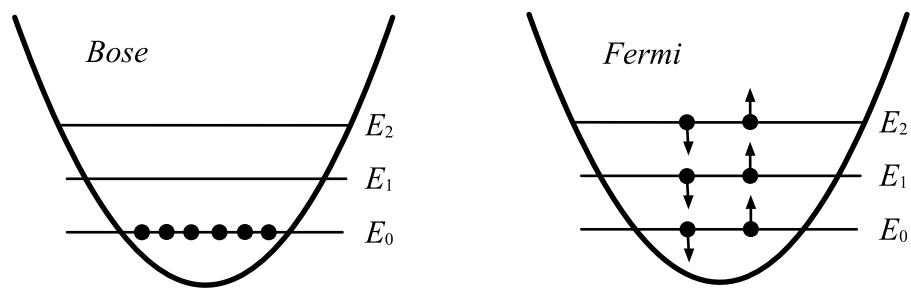
$$\Psi_{n_1, n_2}^{l=0, m=0}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left\{ \Psi_{n_1}(x_1)\Psi_{n_2}(x_2) + \Psi_{n_2}(x_1)\Psi_{n_1}(x_2) \right\} \cdot \left\{ S_1^\uparrow S_2^\downarrow - S_1^\downarrow S_2^\uparrow \right\}.$$

Для единичного спина спиновые волновые функции симметричны, поэтому антисимметричной должна быть пространственная часть:

$$\Psi_{n_1, n_2}^{l=1, m=0}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left\{ \Psi_{n_1}(x_1)\Psi_{n_2}(x_2) - \Psi_{n_2}(x_1)\Psi_{n_1}(x_2) \right\} \cdot \left\{ S_1^\uparrow S_2^\downarrow + S_1^\downarrow S_2^\uparrow \right\}.$$

Два любых фермиона не могут иметь одинаковых наборов квантовых чисел (выше пары n, m). Этот фундаментальный запрет, следующий из квантовой теории, называется *принципом Паули*.

Например, основное состояние с *нулевым* спином 6 α -частиц (слева) и 6 электронов (справа) в поле гармонического осциллятора выглядит следующим образом:



Волновая функция α -частиц в основном состоянии является произведением $\Psi_0(x_1)\dots\Psi_0(x_6)$. Фермионы собраться в одном основном одиночественном состоянии не могут. На нём “помещается” только два электрона, отличающихся направлением проекции спина. В случае N частиц, энергии основного состояния будут равны (считаем N чётным):

$$E_{bose} = \frac{\hbar\omega}{2} N, \quad E_{fermi} = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{N^2}{2}.$$

Таким образом, энергия системы даже невзаимодействующих между собой тождественных частиц, зависит от их типа.

2 Молекула водорода

• Симметрия волновой функции лежит в основе объяснения многих наблюдаемых явлений. Рассмотрим в качестве примера молекулу водорода H_2 , которая содержит два атома. Запишем волновую функцию электрона в атоме водорода:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r},$$

где расстояние измеряется в радиусах боровской орбиты $a = \hbar^2/me^2$. Её квадрат $-\psi^2(r)$ можно интерпретировать как распределения заряда электрона внутри атома (будем считать заряд электрона равным минус единице). Внутри сферы радиуса R попадает заряд:

$$Q = -\frac{4\pi}{\pi} \int_0^R e^{-2r} r^2 dr = -1 + (1 + 2R + 2R^2) e^{-2R},$$

поэтому потенциал, создаваемый положительно заряженным ядром и электронным облаком имеет вид:

$$\varphi(R) = (1 + 2R + 2R^2) \frac{e^{-2R}}{R}.$$

Рассмотрим второй атом водорода также в основном состоянии, находящийся от первого на расстоянии R . Его ядро будет отталкиваться от первого атома, а электронная оболочка притягивается. Если вычислить энергию их взаимодействия, то та малых расстояниях она будет положительной $\sim 1/R$ (атомы отталкиваются), а на больших отрицательной (атомы притягиваются). Так как при $R \rightarrow \infty$ энергия взаимодействия стремится к нулю, то при некотором R_0 она имеет минимальное значение. Двум атомам энергетически выгодно оказаться на этом расстоянии и образовать молекулу H_2 . Раз два атома притягиваются, то к ним может притянуться третий атом, образовав H_3 и т.д. Однако этого не происходит и в природе молекулы водорода состоят всегда из двух атомов. Описанная выше простая модель распределения заряда этого объяснить не способна.

Электроны в молекуле, являясь тождественными частицами, не локализованы возле “своего” атома. Пусть в нулевом приближении ядра расположены на фиксированном расстоянии R , а волновая функция электронов молекулы равна произведению волновых функций атомов водорода. В зависимости от направления спинов электронов эта функция относительно перестановки координат частиц симметрична (противоположные спины) или антисимметрична (соправленные спины).

Пусть \mathbf{x}_i – положения электронов и первый атом находится в начале координат, а второй в фиксированной точке \mathbf{R} . Тогда

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(\mathbf{x}_1)\psi(\mathbf{x}_2 - \mathbf{R}) \pm \psi(\mathbf{x}_2)\psi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{R}) \}.$$

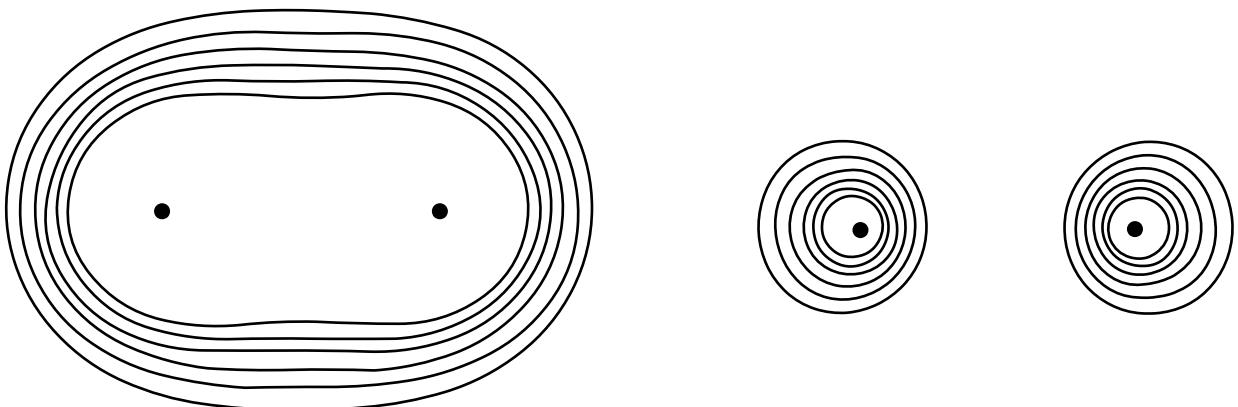
Распределение заряда для симметричного и антисимметричного случаев радикально отличаются. Чтобы их записать, возведём $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ в квадрат и проинтегрируем по координатам второго электрона:

$$\rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \psi^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \psi^2(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \pm S(R) \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x} - \mathbf{R}),$$

где

$$S(R) = \int \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x} - \mathbf{R}) d^3\mathbf{x} = (1 + R + R^2/3) e^{-R}.$$

Нарисуем линии одинаковой плотности заряда в плоскости, проходящей через ядра атомов:



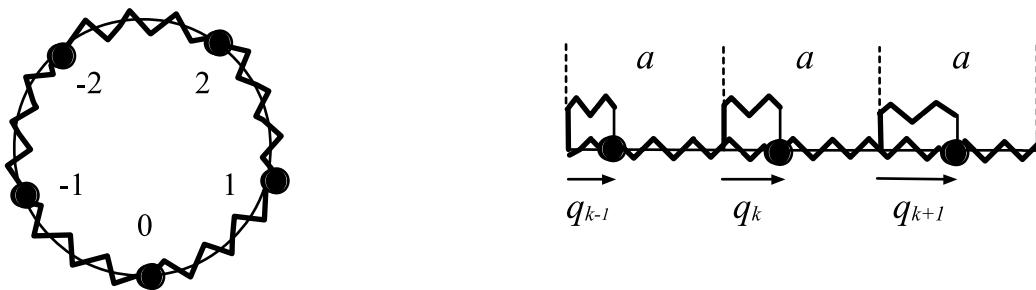
Левый рисунок соответствует симметричной, а правый – антисимметричной волновой функции. Симметричная волновая функция приводит к распределению заряда, достаточное количество которого находится между ядрами для обеспечения экранирования их отталкивания. В результате такая система на некотором расстоянии R находится в электростатическом равновесии (образуется т.н. *ковалентная связь*). В антисимметричном случае заряд окружает ядра, но соответствующие облака смещены в противоположные стороны. Это приводит к отталкиванию и такая система не обладает устойчивостью.

Таким образом, в молекуле водорода электроны должны иметь противоположные спины. Если к такой молекуле пытается присоединиться ещё один атом, в зависимости от направления спина его электрона, он будет к одному атому притягиваться, а от второго отталкиваться и система не будет обладать устойчивостью. Эти, достаточно качественные соображения, подтверждаются решением уравнения Шрёдингера для двух и трёх атомов.

3 Колебания в системе осцилляторов

Тождественные частицы могут возникать как некие эффективные возбуждения в системе, состоящей в том числе и не из тождественных частиц. В этом разделе мы рассмотрим простую классическую модель, которая является образом одномерной кристаллической решетки и дискретным аналогом релятивистского скалярного поля. В следующем разделе будет проведено её квантование.

Пусть частицы расположены на ободе кольца и соединены между собой “пружинками”. Под пружинками понимаются линейные силы (потенциал квадратичен) которые действуют *только* между двумя соседними частицами.



Пусть в состоянии равновесия (когда силы нулевые) частицы равномерно расположены по кольцу и расстояние между ними равно a . Будем считать, что число частиц N и радиус кольца велики, поэтому в окрестности данной частицы её соседи находятся практически на прямой (второй рисунок). Обозначим через q_n отклонение n -той частицы от положения равновесия. Тогда лагранжиан системы имеет вид:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_n \dot{q}_n^2 - \frac{\gamma^2}{2a^2} \sum_n (q_n - q_{n-1})^2, \quad (7.3)$$

где $\dot{q}_n = dq_n/dt$ и константа a введена, чтобы параметр γ имел размерность скорости (масса частиц $m = 1$). Будем считать, что число частиц N нечетно и их нумерация в суммах происходит от $-(N-1)/2$ до $(N-1)/2$. При этом частица с нулевым индексом является как-бы началом системы индексного отсчёта. При $n = -(N-1)/2$ индекс в сумме для q_{n-1} предполагается циклически сдвинутым и равным $n = (N-1)/2$. Вместо индекса n , нумерацию частиц на кольце можно проводить при помощи координат равновесного положения $x = na$, где $aN = L$ – длина кольца.

Чтобы решить уравнения движения для системы (7.12) необходимо лагранжиан преобразовать к диагональному виду, в котором отсутствует сцепление координат соседних частиц в потенциальной энергии. Для этого вместо исходных N координат q_n введём N других координат Q_n :

$$Q_j = \frac{1}{N} \sum_n q_n e^{-i\frac{2\pi}{N} nj}, \quad q_n = \sum_j Q_j e^{i\frac{2\pi}{N} nj}. \quad (7.4)$$

Второе соотношение получается благодаря формуле:

$$\frac{1}{N} \sum_r e^{i\frac{2\pi}{N} r(n-j)} = \delta_{n,j}. \quad (7.5)$$

Докажем её. Пусть $\lambda = e^{i\frac{2\pi}{N}(n-j)}$, тогда сумма по r в (7.5) имеет вид:

$$\lambda^{-(N-1)/2} + \dots + 1 + \dots + \lambda^{(N-1)/2} = \lambda^{-(N-1)/2}(1 + \lambda + \dots + \lambda^{N-1}).$$

Выражение в скобках является суммой геометрической прогрессии S_N , которую можно переписать в виде

$$S_N = 1 + \lambda + \dots + \lambda^{N-1} = 1 + \lambda(S_N - \lambda^{N-1}) \Rightarrow S_N = \frac{1 - \lambda^N}{1 - \lambda}.$$

Так как $\lambda^N = e^{2\pi i(n-j)} = 1$ (число $n - j$ – целое), сумма S_N при $n \neq j$ (когда $\lambda \neq 1$) равна нулю. Если же $n = j$, то сумма (7.5) равна N .

Далее для сокращения формул введём дискретный “волновой вектор” и координату равновесного положения частиц:

$$k = \frac{2\pi}{aN} j = \frac{2\pi}{L} j, \quad x = a n, \quad \frac{2\pi}{N} j n = kx \quad (7.6)$$

и в суммах будем писать k вместо целого числа j , а вместо n , соответственно x , подразумевая суммирование по всем их значениям. В частности в этих обозначениях (7.5) имеет вид:

$$\frac{1}{N} \sum_k e^{ik(x-y)} = \delta_{x,y}, \quad \frac{1}{N} \sum_x e^{i(k-q)x} = \delta_{k,q}. \quad (7.7)$$

а лагранжиан равен:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_x \dot{q}_x^2 - \frac{\gamma^2}{2a^2} \sum_x (q_x - q_{x-a})^2. \quad (7.8)$$

Отметим наличие периодических условий $q_{x+L} = q_x$, которые заложены в кольцевой характер системы и явным образом следуют из (7.4).

Подставляя разложение по волновому вектору (7.4) в лагранжиан (7.9), получаем

$$\mathcal{L} = \frac{N}{2} \sum_k (\dot{Q}_k \dot{Q}_{-k} - \omega_k^2 Q_k Q_{-k}), \quad (7.9)$$

где введен параметр, который, как мы увидим ниже, определяет частоту колебаний в системе:

$$\omega_k = \frac{\gamma}{a} \sqrt{2(1 - \cos ka)}. \quad (7.10)$$

Подкоренное выражение на всём интервале изменения волнового вектора k от $-\pi(N-1)/aN$ до $\pi(N-1)/aN$ положительно. Приведём соответствующие вычисления, для потенциальной энергии:

$$\sum_x (q_x - q_{x-a})^2 = \frac{1}{N} \sum_{x,k,q} \{Q_k e^{ikx} - Q_k e^{ik(x-a)}\} \{Q_q e^{iqx} - Q_q e^{iq(x-a)}\}.$$

Вынесем общие множители. Сумма по x даст символ Кронекера $\delta_{q,-k}$, суммирование с которым по q приводит к:

$$\sum_{x,k,q} Q_k Q_q e^{i(k+q)x} \{1 - e^{-ika}\} \{1 - e^{-iqa}\} = N \sum_k Q_k Q_{-k} \{1 - e^{-ika}\} \{1 - e^{ika}\}.$$

Произведение фигурных скобок по формуле Эйлера даёт $2(1 - \cos ka)$.

Уравнения Лагранжа с лагранжианом (7.9) приводят к следующим уравнениям движения:

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0,$$

решения которых для $k \neq 0$ запишем в виде:

$$Q_k(t) = A_k e^{-\omega_k t} + B_k e^{\omega_k t},$$

где A_k и B_k – константы интегрирования, вообще говоря, зависящие от волнового вектора k .

При $k = 0$ частота ω_k равна нулю и нулевая мода $Q_0(t)$ удовлетворяет уравнению свободного движения. Величина Q_0 является координатой центра масс системы (частицы имеют одинаковые единичные массы):

$$Q_0(t) = \frac{1}{N} \sum_x q_x = Q_0(0) + \dot{Q}_0(0) t,$$

который может двигаться с постоянной скоростью. Далее будем считать его неподвижным: $Q_0 = \dot{Q}_0 = 0$.

Подставим решения для $Q_k(t)$ в разложение (7.4):

$$q_x(t) = \sum_{k \neq 0} \left\{ A_k e^{\imath(kx - \omega_k t)} + A_k^* e^{-\imath(kx - \omega_k t)} \right\},$$

где во втором члене индекс суммирования k заменен на $-k$ и вместо B_{-k} записано A_k^* , так как координата действительна: $q_x^* = q_x$. Подобная динамика координат отклонения частиц от положения равновесия означает, что в системе возможны продольные волны распространяющиеся по кольцу. Например, если $A_k = A_k^*$ и все константы равны нулю, кроме пары соответствующей некому фиксированному $k = p$, то

$$q_x(t) = 2A_p \cos(px - \omega_p t) = 2A_p \cos(p(x - V_p t)),$$

где $V_p = \omega_p/p$ – фазовая скорость волны в системе. В общем случае амплитуды колебаний A_k можно выразить через начальные отклонения и скорости частиц. Для этого решения $Q_k(t)$ в соответствии с (7.4) запишем в виде:

$$Q_k(t) = A_k e^{-\imath\omega_k t} + A_{-k}^* e^{\imath\omega_k t} = \frac{1}{N} \sum_x q_x(t) e^{-\imath kx}.$$

Беря производную по t при $t = 0$ несложно получить:

$$A_k = \frac{1}{2N} \sum_x \left\{ q_x(0) + \imath \frac{\dot{q}_x(0)}{\omega_k} \right\} e^{-\imath kx}.$$

Пусть, например, в начальный момент времени все частицы расположены в точках их равновесия $q_x(0) = 0$ и имеют нулевую скорость, кроме частицы в $x = 0$ которая отклонилась от положения равновесия на $q_0(0) = q_0$. В этом случае $A_k = q_0/2N$:

$$q_x(t) = \frac{q_0}{N} \sum_{k \neq 0} \cos(kx - \omega_k t),$$

Такое решение приводит к расходящимся в противоположные стороны возбуждениям частиц на кольце.

Групповая и фазовая скорости волн следующим образом зависят от волнового вектора:

$$V_g = \frac{d\omega_k}{dk} = \gamma \cos \frac{ka}{2}, \quad V_p = \frac{\omega_k}{k} = \frac{2\gamma}{ak} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (7.11)$$

При малых k обе эти скорости стремятся к константе γ . При максимальных $k \approx \pm\pi/a$ групповая скорость равна нулю, а фазовая скорость понижается до $2\gamma/\pi$.

4 Фононы

- Перейдём к квантованию, описанной в предыдущем разделе системы. Её гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_x \hat{p}_x^2 + \frac{\gamma^2}{2a^2} \sum_x (\hat{q}_x - \hat{q}_{x-a})^2, \quad (7.12)$$

Заметим, что хотя все массы частиц и параметры “пружинок” γ одинаковы, этот гамильтониан не инвариантен относительно перестановки двух частиц. Запишем для операторов координат и импульсов разложения:

$$\hat{q}_x = \sum_k Q_k e^{ikx}, \quad \hat{p}_x = \frac{1}{N} \sum_k P_k e^{-ikx}. \quad (7.13)$$

Благодаря минусу в экспонентах для операторов импульсов и множителю $1/N$, операторы \hat{Q}_k и \hat{P}_k коммутируют обычным образом ($\hbar = 1$):

$$[\hat{Q}_k, \hat{Q}_q] = [\hat{P}_k, \hat{P}_q] = 0, \quad [\hat{Q}_k, \hat{P}_q] = i \delta_{kq}. \quad (7.14)$$

Действительно:

$$[\hat{q}_x, \hat{p}_y] = \frac{1}{N} \sum_{k,q} [\hat{Q}_k, \hat{P}_q] e^{ikx - iqy} = \frac{i}{N} \sum_k e^{ik(x-y)} = i \delta_{x,y}.$$

Заметим, однако, что \hat{Q}_k и \hat{P}_k при $k \neq 0$ не вполне “нормальные” операторы координат и импульсов, так как они не являются эрмитово самосопряженными в отличие от исходных операторов \hat{q}_x и \hat{p}_x :

$$\hat{Q}_k^+ = \hat{Q}_{-k}, \quad \hat{P}_k^+ = \hat{P}_{-k}, \quad (7.15)$$

что следует из эрмитовости \hat{q}_x , после замены в правой части k на $-k$:

$$\hat{q}_x^+ = \hat{q}_x \quad \Rightarrow \quad \sum_k \hat{Q}_k^+ e^{-ikx} = \sum_k \hat{Q}_k e^{ikx}.$$

Подстановка разложений (7.13) в гамильтониан (7.12), аналогично классическому случаю, даёт:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_0^2}{2N} + \frac{1}{2N} \sum_{k \neq 0} \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + \frac{N}{2} \sum_{k \neq 0} \omega_k^2 \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k}, \quad (7.16)$$

где введена чётная функция волнового вектора:

$$\omega_k = \frac{\gamma}{a} \sqrt{2(1 - \cos ka)} = 2 \frac{\gamma}{a} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (7.17)$$

и выделена нулевая мода энергии движения системы как целого.

Введём ещё один набор операторов для $k \neq 0$:

$$\hat{Q}_k = \frac{1}{\sqrt{2N\omega_k}} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^+), \quad \hat{P}_k = \imath \sqrt{\frac{N\omega_k}{2}} (\hat{a}_k^+ - \hat{a}_{-k}). \quad (7.18)$$

Благодаря (7.15), оператор \hat{a}_k^+ является эрмитовым сопряжением оператора \hat{a}_k . Эти операторы удовлетворяют “бозонным” коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_q] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_q^+] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_q^+] = \delta_{kq}. \quad (7.19)$$

Гамильтониан теперь можно записать в диагональном виде:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_0^2}{2N} + \sum_{k \neq 0} \omega_k \left(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right). \quad (7.20)$$

Первое слагаемое является энергией движения системы частиц как целиком с суммарной массой N (каждая частица имеет единичную массу). Начальные отсчёты равновесных положений частиц произвольны. От этих положений q_x могут быть отклонены как угодно сильно (но разница $\hat{q}_x - \hat{q}_{x-a}$ конечна). Оператор \hat{P}_0 равен суммарному импульсу частиц, а \hat{Q}_0 – это координата центра инерции:

$$\hat{P}_0 = \sum_x p_x, \quad \hat{Q}_0 = \frac{1}{N} \sum_x q_x, \quad [\hat{Q}_0, \hat{P}_0] = \imath.$$

Так как суммарный импульс \hat{P}_0 коммутирует с гамильтонианом \hat{H} , он может быть измерен точно одновременно с энергией. В этом случае неопределённость в значении координаты центра масс Q_0 бесконечна и в частности $\langle E | \hat{Q}_0^2 | E \rangle = \infty$.

Второй член в (7.20) является суммой N гамильтонианов гармонических осцилляторов с частотами ω_k . Энергия системы является суммой энергий каждого осциллятора. Обратим внимание, что эти осцилляторы не имеют отношения к колебаниям конкретной частицы, а являются колебанием всей системы, которые можно образно представить как возбуждение продольных волн, возникающих на кольце. Как мы видели при рассмотрении классической версии этой задачи, каждому волновому вектору соответствуют продольные колебания с частотой ω_k . В квантовой теории их энергий квантуется, а такие возбуждения называются *фононами*. Групповая скорость при малых k определяется упругими свойствами среды γ , что типично для распространения классических звуковых волн в воздухе. Поэтому эти *квазичастицы* также называются *акустическими фононами*.

- Основное состояние $| \rangle$ гамильтониана не содержит фононов. Как обычно, предполагаем, что для любого k :

$$\hat{a}_k | \rangle = 0, \quad \langle | \hat{a}_k^+ = 0, \quad \langle | \rangle = 1. \quad (7.21)$$

Энергия основного состояния равна:

$$E_0 = \sum_k \frac{\omega_k}{2} = \sum_k \frac{\gamma}{a} \left| \sin \frac{ak}{2} \right|.$$

Если $N \rightarrow \infty$ и $L = aN \rightarrow \infty$ то минимальное изменение $\Delta k = 2\pi/L$ в (7.6) мало и сумму можно заменить интегралом (k меняется в интервале $\pm(2\pi/aN)(N-1)/2$, который при $N \rightarrow \infty$ равен $\pm\pi/a$):

$$\sum_k f_k = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} f(k) dk.$$

Поэтому энергия основного состояния в расчёте на единицу длины кольца (плотность энергии) равна

$$\frac{E_0}{L} = \frac{2\gamma}{2\pi a} \int_0^{\pi/a} \sin \left(\frac{ak}{2} \right) dk = \frac{2}{\pi} \frac{\gamma}{a^2}. \quad (7.22)$$

Она тем больше, чем меньше равновесное расстояние между частицами.

Если действовать на основное состояние оператором рождения \hat{a}_k^+ :

$$| k \rangle = \hat{a}_k^+ | \rangle, \quad (7.23)$$

то получится состояние, соответствующее энергии $E_0 + \omega_k$. Говорят, что в таком состоянии находится одна квазичастица (один фонон). Два фонона с энергией $E_0 + \omega_k + \omega_q$ соответствуют состоянию

$$| k, p \rangle = \hat{a}_k^+ \hat{a}_p^+ | \rangle. \quad (7.24)$$

Так как ω_k является чётной функцией, энергия фонона с волновым вектором $-k$ равна энергии фонона с волновым вектором k . При $k \rightarrow 0$ энергия фонона равна $\omega_k \approx \gamma k$.

Фононы в данной модели между собой не взаимодействуют. Однако, если мы учтём, например, ангармонические поправки во взаимодействии частиц, то гамильтониан перестанет быть квадратичным по операторам \hat{a}_k . В нём появятся слагаемые типа $\hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}$, которые приведут к эффектам взаимодействия фононов. Анализ подобной физики мы оставим до рассмотрения релятивистской теории поля.

- Запишем выражение для исходных операторов координат через операторы рождения и уничтожения:

$$\hat{q}_x = \hat{Q} + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{\sqrt{2N\omega_k}} (\hat{a}_k e^{\imath kx} + \hat{a}_k^+ e^{-\imath kx}), \quad (7.25)$$

где во втором слагаемом сделана замена $k \mapsto -k$. Среднее значение координаты в основном и возбуждённых состояниях равно нулю. Аналогичное разложение для импульсов:

$$\hat{p}_x = \frac{\hat{P}}{N} + \frac{1}{\imath} \sum_{k \neq 0} \sqrt{\frac{\omega_k}{2N}} (\hat{a}_k e^{\imath kx} - \hat{a}_k^+ e^{-\imath kx}) \quad (7.26)$$

приводит к равенству нулю среднего значения импульса. Так как в основном состоянии (вакуум фононов) $\langle \hat{a}_p \hat{a}_q^+ \rangle = \delta_{pq}$, возводя в квадрат $\hat{q}_x - \hat{Q}$, находим:

$$\langle |(\hat{q}_x - \hat{Q})^2| \rangle = \sum_{k \neq 0} \frac{1}{2N\omega_k}.$$

Если бы мы не выделили оператор центра масс системы \hat{Q} выражение для $\langle |\hat{q}_x^2| \rangle$ получилось бы бесконечным. При большом L и малом a можно перейти от суммы к интегралу:

$$\langle |(\hat{q}_x - \hat{Q})^2| \rangle \approx \frac{2L}{2\pi} \int_{2\pi/L}^{\pi/a} \frac{a dk}{4N\gamma \sin(ka/2)} \approx \frac{a}{2\pi\gamma} \ln \frac{2L}{\pi a},$$

где на нижнем пределе взято минимальное ненулевое значение k и в последнем равенстве записан ведущий член по $L \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$. Среднее разности координат по основному состоянию равно:

$$\langle |(\hat{q}_x - \hat{q}_{x-a})^2| \rangle = \frac{a^2}{2N\gamma^2} \sum_k \omega_k \approx \frac{2a}{\pi\gamma}.$$

Аналогично можно найти среднее по однофононному состоянию:

$$\langle k | (\hat{q}_x - \hat{Q})^2 | k \rangle = \langle |(\hat{q}_x - \hat{Q})^2| \rangle + \frac{1}{N\omega_k}. \quad (7.27)$$

где учтено, что

$$\langle k | \hat{a}_p^+ \hat{a}_q | k \rangle = \delta_{kp} \delta_{kq}, \quad \langle k | \hat{a}_p \hat{a}_q^+ | k \rangle = \delta_{pq} + \delta_{kp} \delta_{kq},$$

а остальные средние равны нулю.

- Суммарный импульс частиц \hat{P}_0 к импульсу фононов прямого отношения не имеет. Оператора суммарного импульса фононов должен иметь форму:

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_k f_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k.$$

При любом f_k этот оператор коммутирует с \hat{H} . Естественно предположить, что f_k является нечётной функцией и линейна при малых значениях k . Несложно проверить, что выражение

$$\hat{\mathcal{P}} = -\frac{1}{2a} \sum_x \hat{p}_x (\hat{q}_{x+a} - \hat{q}_{x-a}) = -\frac{1}{2a} \sum_x (\hat{p}_x - \hat{P}_0/N) (\hat{q}_{x+a} - \hat{q}_{x-a}). \quad (7.28)$$

коммутирует с исходным гамильтонианом (7.12) (второе равенство справедливо, так как \hat{P}/N можно вынести за сумму, а сумма от $q_{x+a} - q_{x-a}$ равна нулю). Выражение в круглых скобках имеет вид:

$$\hat{q}_{x+a} - \hat{q}_{x-a} = \sum_{k \neq 0} \frac{2\imath}{\sqrt{2N\omega_k}} \sin(ka) (\hat{a}_k e^{\imath kx} - \hat{a}_k^+ e^{-\imath kx}).$$

Запишем (7.28) через операторы рождения и уничтожения, воспользовавшись вторым равенством (7.28):

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{a} \sum_k \sin(ka) a_k^+ a_k,$$

где члены типа $\sin(ka)a_k a_{-k}$ при суммировании по k равны нулю в силу антисимметричности функции под суммой. Будем интерпретировать $f_k = \sin(ka)/a \approx k$ как импульс фонара с волновым вектором k .

- При малых расстояниях между частицами ($a \rightarrow 0$) выражение в потенциала гамильтониана (7.12) стремиться к производной:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{q_x - q_{x-a}}{a} = \frac{dq_x}{dx} \equiv q'_x.$$

Поэтому

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_x \hat{p}_x^2 + \frac{\gamma^2}{2a^2} \sum_x (\hat{q}_x - \hat{q}_{x-a})^2 \rightarrow \int_{-L/2}^{L/2} \left\{ \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \gamma^2 \frac{\hat{q}_x'^2}{2} \right\} \frac{dx}{a}.$$

Введём полевые операторы,

$$\hat{\varphi}(x) = \frac{q_x}{\sqrt{a}}, \quad \hat{\pi}(x) = \frac{p_x}{\sqrt{a}}$$

которые коммутируют на функцию Дирака:

$$[\hat{\varphi}(x), \hat{\pi}(y)] = i\delta(x - y) = \frac{i}{a} \delta_{x,y}.$$

Записанная выше связь функции Дирака от координат с символом Кронекера $\delta(x - y) = \delta_{x,y}/a$ связана со значением функции Дирака в нуле при интегрировании по k ($a \rightarrow 0$):

$$\delta(x = 0) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} e^{i0k} = \frac{1}{a}.$$

В таких полевых операторах гамильтониан и суммарный импульс фононов при $L \rightarrow \infty$ можно записать следующим образом:

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\hat{\pi}^2}{2} + \gamma^2 \frac{\hat{\varphi}'^2}{2} \right\} dx, \quad \hat{\mathcal{P}} = - \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\pi} \hat{\varphi}' dx. \quad (7.29)$$

При $\gamma = 1$ получится гамильтониан релятивистского скалярного поля с нулевой массой, который будет рассмотрен в следующей главе. При этом плотность энергии основного состояния такого гамильтониана при $a \rightarrow 0$ будет бесконечной:

$$\frac{E_0}{L} = \frac{2/\pi}{a^2}.$$

Заметим, что в модели кольца конечные выражения получались благодаря наличию *двух* “обрезающих” параметров L и a .

Часть II

Приближённые методы

Глава 9

Теория возмущений для дискретного спектра

Точно решаемых задач в квантовой механике не так много. Поэтому приходится использовать различные приближенные методы. В этой главе рассматриваются основные методы получения энергий, волновых функций и средних значений для стационарных задач. Их эффективность различна в разных диапазонах изменения параметров.

Хотя большинство этих методов применимо и для многомерных задач, для иллюстрации будут использоваться одномерные системы. В качестве подобной модели выступает ангармонический осциллятор.

Сначала мы рассмотрим различные варианты теории возмущений в которой гамильтониан разбивается на точно решаемую часть и “возмущение”, которое в некотором смысле считается малым. Получаемые ряды по параметру возмущения для энергии, обычно, оказываются расходящимися. Тем не менее, существуют некоторые способы получения при помощи этих рядов осмысленных результатов.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Теория возмущений Релея–Шредингера

Наиболее разработанными являются различные варианты теории возмущений, в которой предполагается малость параметра β . Напомним сначала теорию возмущений Релея–Шредингера.

Пусть гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ системы состоит из двух частей, где \hat{V} считается малой, а спектр \hat{H}_0 известен:

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle, \quad \hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle.$$

Запишем ($\prec H_{42}$) уравнение на собственные значения \hat{H} в энергетическом представлении:

$$(E_n - \varepsilon_k) c_{kn} = \sum_m V_{km} c_{mn}, \quad (9.1)$$

где использованы матричные обозначения:

$$c_{kn} = \langle k | E_n \rangle, \quad V_{km} = \langle k | \hat{V} | m \rangle.$$

Будем искать неизвестные величины в виде рядов по степеням взаимодействия:

$$E_n = \varepsilon_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad c_{kn} = \delta_{kn} + c_{kn}^{(1)} + c_{kn}^{(2)} + \dots \quad (9.2)$$

Если обозначить тильдой величины одного порядка малости, то в этих разложениях предполагается, что $E_n^{(s)} \sim c_{kn}^{(s)} \sim E_n^{(s-p)} c_{kn}^{(p)} \sim (V_{km})^s$ и т.д. Когда $V = 0$ матрица c_{kn} равна символу Кронекера, так как в этом случае $c_{kn} = \langle k | n \rangle = \delta_{kn}$. Будем далее считать элементы c_{kn} действительными. Это означает, что используется базис действительных волновых функций исходной $\langle x | E_n \rangle$ и невозмущенной задачи $\langle x | n \rangle$. Запишем условие нормировки в базисе $\hat{H}_0 |m\rangle = \varepsilon_m |m\rangle$:

$$\langle E_n | E_n \rangle = \sum_m \langle E_n | m \rangle \langle m | E_n \rangle = \sum_m c_{mn}^2 = 1$$

и подставим в него разложение (9.2):

$$\sum_m \left[\delta_{mn} + c_{mn}^{(1)} + c_{mn}^{(2)} + \dots \right]^2 = \sum_m \left[\delta_{mn}^2 + 2\delta_{mn} c_{mn}^{(1)} + 2\delta_{mn} c_{mn}^{(2)} + (c_{mn}^{(1)})^2 + \dots \right] = 1,$$

где при возведении в квадрат удержаны слагаемые с точностью до V^2 (первое слагаемое нулевого порядка по V , второе – первого и два последних – второго).

Суммируя с символом Кронекера, и приравнивая величины одного порядка малости, находим значения диагональных элементов матрицы:

$$c_{nn}^{(1)} = 0, \quad c_{nn}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_m (c_{mn}^{(1)})^2. \quad (9.3)$$

Подставим теперь разложения (9.2) в уравнение (9.1):

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_k + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots)(\delta_{kn} + c_{kn}^{(1)} + c_{kn}^{(2)} + \dots) = V_{kn} + \sum_m V_{km} c_{mn}^{(1)} + \dots$$

Перемножая скобки и снова приравнивая величины одного порядка малости, получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} \delta_{kn} + (\varepsilon_n - \varepsilon_k) c_{kn}^{(1)} &= V_{kn}, \\ E_n^{(2)} \delta_{kn} + (\varepsilon_n - \varepsilon_k) c_{kn}^{(2)} + E_n^{(1)} c_{kn}^{(1)} &= \sum_m V_{km} c_{mn}^{(1)}, \\ \dots \end{aligned}$$

При $k = n$ из первого и второго уравнения следуют поправки к энергии (учитываем, что $c_{nn}^{(1)} = 0$):

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad E_n^{(2)} = \sum_m V_{nm} c_{mn}^{(1)}.$$

Если же $k \neq n$, получаем недиагональные элементы матрицы ($c_{kn} \neq c_{nk}$):

$$c_{kn}^{(1)} = -\frac{V_{kn}}{\varepsilon_k - \varepsilon_n}, \quad c_{kn}^{(2)} = \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_n} \left[V_{nn} c_{kn}^{(1)} - \sum_m V_{km} c_{mn}^{(1)} \right]. \quad (9.4)$$

В результате, с точностью до 2-го порядка малости по V , энергия равна (сумма по всем m не равным n):

$$E_n = \varepsilon_n + V_{nn} - \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} + \dots \quad (9.5)$$

Далее нам также понадобится матрица оператора координаты. Обозначая матричные элементы в базисе невозмущенного гамильтониана H_0 как $x_{kn} = x_{nk} = \langle k | \hat{x} | n \rangle$, в базисе полного гамильтониана, имеем:

$$\begin{aligned} \langle E_k | \hat{x} | E_n \rangle &= \sum_{m,r} c_{mk} x_{mr} c_{rn} = \sum_{m,r} (\delta_{mk} + c_{mk}^{(1)} + c_{mk}^{(2)}) x_{mr} (\delta_{rn} + c_{rn}^{(1)} + c_{rn}^{(2)}) \\ &= x_{kn} + \sum_m [x_{km} c_{mn}^{(1)} + x_{nm} c_{mk}^{(1)}] + \sum_m [x_{km} c_{mn}^{(2)} + x_{nm} c_{mk}^{(2)}] + \sum_{m,r} c_{mk}^{(1)} x_{mr} c_{rn}^{(1)}, \end{aligned}$$

где отброшены величины более, чем второго порядка по V .

- Применим теорию возмущений для ангармонического осциллятора (стр. 66), рассматривая $\hat{V} = (\beta/2) \hat{x}^4$ как возмущение. Для этого необходимо вычислить матричные элементы V_{kn} , что проще сделать при помощи операторов рождения и уничтожения ($\alpha = \omega^2$, $\hbar = m = 1$):

$$(2\omega)^2 \hat{x}^4 = (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 = (\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + 2\hat{n} + 1)^2,$$

где выделен оператор $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$. Возводя в квадрат и перенеся \hat{a} вправо и \hat{a}^+ влево ($\ll H_{43}$), получаем:

$$(2\omega)^2 \hat{x}^4 = 6\hat{n}^2 + 6\hat{n} + 3 + (4\hat{n} + 6)\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2}(4\hat{n} + 6) + \hat{a}^4 + \hat{a}^{+4}.$$

При помощи этого соотношения, второго правила (2.45) и его эрмитово сопряжённой версии, теперь несложно найти матричные элементы:

$$\begin{aligned} (2\omega)^2 (x^4)_{kn} &= 3(2n^2 + 2n + 1) \delta_{k,n} \\ &+ 2(2n - 1) \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} + 2(2k - 1) \sqrt{k(k-1)} \delta_{k-2,n} \\ &+ \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{k,n-4} + \sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)} \delta_{k-4,n}. \end{aligned} \quad (9.6)$$

Первая поправка к энергии равна $V_{nn} = (\beta/2) 3(2n^2 + 2n + 1)/(2\omega)^2$. Для получения второй поправки заметим, что матричные элементы $(x^4)_{kn}$ симметричны и отличны от нуля, для равных индексов ($\delta_{k,n}$) или когда индексы отличаются на 2 ($\delta_{k,n-2}$, $\delta_{k-2,n}$) или на 4 ($\delta_{k,n-4}$, $\delta_{k-4,n}$). Поэтому:

$$\sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} = \frac{V_{n,n+2}^2}{2\omega} - \frac{V_{n,n-2}^2}{2\omega} + \frac{V_{n,n+4}^2}{4\omega} - \frac{V_{n,n-4}^2}{4\omega}, \quad (9.7)$$

где подставлены энергии гармонического осциллятора $\varepsilon_n = \omega(n + 1/2)$. В результате, с точностью до второго порядка по β , имеем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{E_n}{\omega} &= n + \frac{1}{2} + \frac{3}{8} (2n^2 + 2n + 1) \frac{\beta}{\omega^3} \\ &- \frac{1}{32} (2n + 1) (17n^2 + 17n + 21) \left(\frac{\beta}{\omega^3}\right)^2 + \dots \end{aligned} \quad (9.8)$$

Аналогичным образом можно найти следующие поправки к энергии. Впрочем, на практике методом Релея-Шредингера обозримые вычисления получаются только для первых поправок. Высокие же поправки удобнее искать другими методами, один из которых будет рассмотрен чуть позже (стр. 157).

• Получим при помощи теории возмущений матричные элементы координаты, относительно основного состояния $|E_0\rangle$. В первом порядке:

$$\langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle = x_{0n} + \sum_m \left[x_{0m} c_{mn}^{(1)} + x_{nm} c_{m0}^{(1)} \right] + \dots$$

Учтём, что элементы матрицы x_{kn} (2.48) не равны нулю только при индексах отличающихся на единицу и пропорциональны корню из большего индекса. Поэтому в сумме по m выживают слагаемые с $m = 1$, $m = n+1$ и $m = n-1$:

$$\sqrt{2\omega} \langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle = \delta_{n,1} + c_{1n}^{(1)} + \sqrt{n+1} c_{n+1,0}^{(1)} + \sqrt{n} c_{n-1,0}^{(1)}.$$

Полагая $n = 1$, имеем:

$$\sqrt{2\omega} \langle E_0 | \hat{x} | E_1 \rangle = 1 + \sqrt{2} c_{20}^{(1)},$$

где отброшены диагональные элементы $c_{nn}^{(1)}$, равные нулю. Оставшийся элемент вычисляется по формуле (9.4):

$$c_{20}^{(1)} = -\frac{V_{20}}{2\omega} = -\frac{3\sqrt{2}}{8} \xi,$$

где $\xi = \beta/\omega^3$. Аналогичным образом ($\ll H_{44}$) находятся поправки второго порядка:

$$\sqrt{2\omega} \langle E_0 | \hat{x} | E_1 \rangle = 1 - \frac{3}{4} \xi + \frac{189}{64} \xi^2 + \dots, \quad (9.9)$$

$$\sqrt{2\omega} \langle E_0 | \hat{x} | E_3 \rangle = \frac{\sqrt{6}}{8} \xi \left(1 - \frac{39}{4} \xi \right) + \dots, \quad (9.10)$$

$$\sqrt{2\omega} \langle E_0 | \hat{x} | E_5 \rangle = \frac{\sqrt{30}}{32} \xi^2 + \dots \quad (9.11)$$

Все остальные элементы $\langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle$ в этом приближении равны нулю. Обратим внимание, что с ростом n , элемент матрицы при малом отношении $\xi = \beta/\omega^3$ уменьшается. Это свойство типично и вне рамок теории возмущений, о чём свидетельствуют численные вычисления (стр. 67). Отметим также, что

$$\begin{aligned} 2(E_1 - E_0) |\langle E_0 | \hat{x} | E_1 \rangle|^2 &= \left(1 + \frac{3\xi}{2} - \frac{9\xi^2}{2} \right) \left(1 - \frac{3\xi}{2} + \frac{207\xi^2}{32} \right) = 1 - \frac{9}{32} \xi^2, \\ 2(E_3 - E_0) |\langle E_0 | \hat{x} | E_3 \rangle|^2 &= \frac{9}{32} \xi^2. \end{aligned}$$

Сумма этих величин, как и должно быть (стр. 67), равна единице.

2 Резольвента *

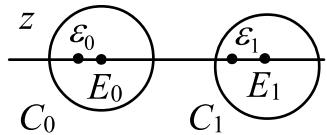
Резольвентой гамильтониана \hat{H} называется следующий оператор, зависящий от комплексной переменной z :

$$\hat{R}(z) = (z - \hat{H})^{-1}. \quad (9.12)$$

Считая, что гамильтониан \hat{H} имеет дискретный спектр $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$, умножим резольвенту на единичный оператор:

$$\hat{R}(z) = \sum_n \hat{R}(z)|E_n\rangle\langle E_n| = \sum_n \frac{|E_n\rangle\langle E_n|}{z - E_n}. \quad (9.13)$$

От сюда следует, что резольвента имеет полюсы при $z = E_n$. Поэтому, по теореме Коши (стр. 386), интеграл в комплексной плоскости z по замкнутому контуру C_n , окружющему *только одно* собственное значение E_n , равен *проекционному оператору*:



$$\hat{P}_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_n} \hat{R}(z) dz = |E_n\rangle\langle E_n|. \quad (9.14)$$

Отметим также тождество $\hat{R}(z) - \hat{R}(w) = (w - z)\hat{R}(z)\hat{R}(w)$, которое доказывается умножением его слева на $z - \hat{H}$, а справа на $w - \hat{H}$.

▷ Пусть гамильтониан разбивается на две части: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ (спектр \hat{H}_0 считается известным: $\hat{H}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$, а взаимодействие \hat{V} малым). Тогда резольвенту можно найти по теории возмущений. Действительно:

$$\hat{R}(z) = (z - \hat{H})^{-1} = [(z - \hat{H}_0)\{1 - (z - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}\}]^{-1} = [1 - \hat{R}_0\hat{V}]^{-1}\hat{R}_0,$$

где $\hat{R}_0 = \hat{R}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$ – резольвента “невозмущенной” задачи. Учитывая ряд $(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + \dots$, имеем:

$$\hat{R}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} (\hat{R}_0\hat{V})^k \hat{R}_0 = \hat{R}_0 + \hat{R}_0\hat{V}\hat{R}_0 + \hat{R}_0\hat{V}\hat{R}_0\hat{V}\hat{R}_0 + \dots \quad (9.15)$$

Соответственно, матричные элементы $R_{kn}(z) = \langle k|\hat{R}(z)|n\rangle$ в базисе $|n\rangle$, для которого $\hat{R}_0(z)|n\rangle = (z - \varepsilon_n)^{-1}|n\rangle$, равны:

$$R_{kn}(z) = \frac{\delta_{kn}}{z - \varepsilon_n} + \frac{V_{kn}}{(z - \varepsilon_k)(z - \varepsilon_n)} + \sum_m \frac{V_{km}V_{mn}}{(z - \varepsilon_k)(z - \varepsilon_m)(z - \varepsilon_n)} + \dots,$$

где $V_{kn} = \langle k|\hat{V}|n\rangle$ – матричные элементы оператора взаимодействия.

▷ Благодаря (9.14), спектр гамильтониана \hat{H} выражается через средние в невозмущенном базисе:

$$E_n = \frac{\langle n|\hat{H}|E_n\rangle\langle E_n|n\rangle}{\langle n|E_n\rangle\langle E_n|n\rangle} = \frac{\langle n|\hat{H}\hat{P}_n|n\rangle}{\langle n|\hat{P}_n|n\rangle} = \varepsilon_n + \frac{\langle n|\hat{V}\hat{P}_n|n\rangle}{\langle n|\hat{P}_n|n\rangle}. \quad (9.16)$$

При помощи (9.15), теорию возмущений Релея-Шрёдингера можно сформулировать довольно изящным образом. Действительно, вычислим:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{V}\hat{P}_n|n\rangle &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_n} \langle n|\hat{V}\hat{R}_0 + \hat{V}\hat{R}_0\hat{V}\hat{R}_0 + \dots|n\rangle dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_n} \left[\frac{V_{nn}}{z - \varepsilon_n} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mn}}{(z - \varepsilon_m)(z - \varepsilon_n)} + \dots \right] dz = V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm}V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} + \dots \end{aligned}$$

В последнем равенстве учтено, что невозмущенные энергии ε_n при малых V , расположены сколь угодно близко к точным значениям E_n и, следовательно, попадают внутрь контура C_n . Поэтому первое слагаемое имеет полюс первого порядка с вычетом V_{nn} . Во втором слагаемом, если $m = n$ – получается полюс второго порядка с нулевым вычетом, а при $m \neq n$ – первого с вычетом $V_{nm}V_{mn}/(z - \varepsilon_m)|_{z=\varepsilon_n}$.

Аналогично вычисляется в (9.16) знаменатель:

$$\langle n|\hat{P}_n|n\rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_n} \left[\frac{1}{z - \varepsilon_n} + \frac{V_{nn}}{(z - \varepsilon_n)^2} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mn}}{(z - \varepsilon_m)(z - \varepsilon_n)^2} + \dots \right] dz.$$

Интеграл от первого слагаемого равен единице, от второго нулю (двойной полюс, с нулевым вычетом). В третьем слагаемом, когда $m = n$ получается ноль (тройной полюс с нулевым вычетом), а при $m \neq n$:

$$\langle n|\hat{P}_n|n\rangle = 1 - \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm}V_{mn}}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} + \dots \quad (9.17)$$

Так как числитель вычислен с точностью до V^2 и ведущим членом имеет V , деление на знаменатель приведёт к поправкам третьего порядка. В результате получается соотношение (9.5), стр. 151.

Таким образом, теория возмущений, сформулированная при помощи резольвенты, определяется отношением двух рядов по степеням взаимодействия. До проведения интегрирования по z каждый член этих рядов имеет простую, повторяющуюся структуру. После интегрирования и деления рядов возникают достаточно громоздкие слагаемые (для высших приближений) теории Релея-Шрёдингера.

3 Теория возмущений для средних

Повторим вычисления, приведшие к вириальной теореме (2.5), стр. 45 и вычислим коммутатор гамильтониана $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ с произвольной функцией $f(\hat{x})$. Учитывая, что $[f(\hat{x}), \hat{p}] = \imath f'(\hat{x})$ ($\hbar = 1$), имеем:

$$2m [f(\hat{x}), \hat{H}] = [f(\hat{x}), \hat{p}^2] = [f(\hat{x}), \hat{p}] \hat{p} + \hat{p} [f(\hat{x}), \hat{p}] = 2\imath f'(\hat{x}) \hat{p} + f''(\hat{x}),$$

где переставлены операторы: $\hat{p} f' = f' \hat{p} - \imath f''$. Среднее коммутатора по собственному вектору гамильтониана $|E\rangle$ равно нулю (2.2), поэтому:

$$\langle f'(\hat{x}) \hat{p} \rangle = \frac{\imath}{2} \langle f''(\hat{x}) \rangle. \quad (9.18)$$

Аналогично вычислим коммутатор \hat{H} с оператором $f(\hat{x}) \hat{p}$:

$$2m [f(\hat{x}) \hat{p}, \hat{H}] = 2\imath f'(\hat{x}) \hat{p}^2 + f''(\hat{x}) \hat{p} - 2m \imath f(\hat{x}) U'(\hat{x}).$$

Подставим $\hat{p}^2 = 2m(\hat{H} - U(\hat{x}))$, усредним по $|E\rangle$ и учтём (9.18):

$$E \langle f'(\hat{x}) \rangle + \frac{1}{8m} \langle f'''(\hat{x}) \rangle = \langle f'(\hat{x}) U(\hat{x}) \rangle + \frac{1}{2} \langle f(\hat{x}) U'(\hat{x}) \rangle. \quad (9.19)$$

Это соотношение между средними обобщает вириальную теорему (2.5). Положим $f(x) = x^k$:

$$kE \langle \hat{x}^{k-1} \rangle + \frac{k(k-1)(k-2)}{8m} \langle \hat{x}^{k-3} \rangle = k \langle \hat{x}^{k-1} U(\hat{x}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{x}^k U'(\hat{x}) \rangle$$

и применим это соотношение для гармонического осциллятора с потенциалом $U(x) = \alpha x^2/2$, $m = 1$:

$$2E k \langle \hat{x}^{k-1} \rangle + \frac{k(k-1)(k-2)}{4} \langle \hat{x}^{k-3} \rangle = \alpha (k+1) \langle \hat{x}^{k+1} \rangle.$$

Полагая $k = 1, 3, 5$ имеем:

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{E}{\alpha}, \quad \langle \hat{x}^4 \rangle = \frac{3}{2} \frac{E}{\alpha} \langle \hat{x}^2 \rangle + \frac{3}{8\alpha}, \quad \langle \hat{x}^6 \rangle = \frac{5}{3} \frac{E}{\alpha} \langle \hat{x}^4 \rangle + \frac{5}{2\alpha} \langle \hat{x}^2 \rangle.$$

Так как энергия осциллятора известна: $E = \sqrt{\alpha} \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n = n + 1/2$, сразу получаем значения для средних:

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\varepsilon_n}{\sqrt{\alpha}}, \quad \langle \hat{x}^4 \rangle = \frac{3}{8\alpha} (1 + 4\varepsilon_n^2), \quad \langle \hat{x}^6 \rangle = \frac{5}{8\alpha^{3/2}} \varepsilon_n (5 + 4\varepsilon_n^2). \quad (9.20)$$

Их прямое вычисление, например, при помощи операторов \hat{a} , \hat{a}^+ , оказалось бы существенно более громоздким.

• Если не ставить задачу нахождения векторов состояния, то можно построить более простую теорию возмущений, по сравнению с теорией Релея-Шрёдингера (стр. 150). Запишем вироальную теорему (9.19) для ангармонического осциллятора с потенциалом $U(x) = (\alpha x^2 + \beta x^4)/2$:

$$\alpha(k+1)\langle\hat{x}^{k+1}\rangle + \beta(k+2)\langle\hat{x}^{k+3}\rangle = 2E k\langle\hat{x}^{k-1}\rangle + \frac{k(k-1)(k-2)}{4}\langle\hat{x}^{k-3}\rangle,$$

В силу симметрии при $x \mapsto -x$ (чётность сохраняется), средние от нечётных степеней координаты равны нулю. Поэтому положим $k = 1, 3, 5, \dots$:

$$\begin{aligned} 2\alpha\langle\hat{x}^2\rangle + 3\beta\langle\hat{x}^4\rangle &= 2E, \\ 4\alpha\langle\hat{x}^4\rangle + 5\beta\langle\hat{x}^6\rangle &= 6E\langle\hat{x}^2\rangle + \frac{3}{2}, \\ 6\alpha\langle\hat{x}^6\rangle + 7\beta\langle\hat{x}^8\rangle &= 10E\langle\hat{x}^4\rangle + 15\langle\hat{x}^2\rangle, \\ \dots \end{aligned} \tag{9.21}$$

Разложим энергию и средние в ряд по β :

$$E = E^{(0)} + E^{(1)}\beta + E^{(2)}\beta^2 + \dots, \quad \langle\hat{x}^k\rangle = X_0^k + X_1^k\beta + X_2^k\beta^2 + \dots \tag{9.22}$$

В нулевом приближении (осциллятор) $E^{(0)} = \sqrt{\alpha}\varepsilon_n = \alpha X_0^2$, а X_0^k для $k = 2, 4, 6$ записаны в (9.20). Для получения замкнутой системы, воспользуемся теоремой Фейнмана-Геллмана (2.6), стр. 45:

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{1}{2}\langle\hat{x}^4\rangle. \tag{9.23}$$

Подставляя в неё разложения (9.22) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях β , имеем

$$E^{(k)} = \frac{1}{2k}X_{k-1}^4. \tag{9.24}$$

В частности, первая поправка к энергии по теории возмущений равна:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}X_0^4 = \frac{3}{16\alpha}(1 + 4\varepsilon_n^2).$$

Подставляя разложения (9.22) в систему (9.21) и приравнивая коэффициенты при первой степени β , имеем:

$$\begin{aligned} 2\alpha X_1^2 + 3X_0^4 &= 2E^{(1)} = X_0^4, \\ 4\alpha X_1^4 + 5X_0^6 &= 6(E^{(0)}X_1^2 + E^{(1)}X_0^2) = 6\alpha X_0^2 X_1^2 + 3X_0^4 X_0^2. \end{aligned}$$

Отсюда находим

$$X_1^2 = -\frac{1}{\alpha}X_0^4, \quad X_1^4 = -\frac{1}{4\alpha}(5X_0^6 + 3X_0^2 X_0^4)$$

и по (9.24) поправку $E^{(2)}$. Естественно, при этом получается тот же результат, что и методом Релея-Шрёдингера (9.8).

• Простота этих вычислений, позволяет записать рекуррентные формулы для нахождения произвольной поправки к энергии и средним. Пусть есть два ряда:

$$A = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots, \quad B = \sum_{k=0}^{\infty} b_k x^k = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots$$

Их произведение, сгруппированное по возрастающим степеням x , равно:

$$C = A \cdot B = a_0 b_0 + (a_0 b_1 + a_1 b_0) x + (a_0 b_2 + a_1 b_1 + a_2 b_0) x^2 + \dots = c_0 + c_1 x + \dots,$$

или в компактном виде:

$$c_k = \sum_{r=0}^k a_r b_{k-r}.$$

Если необходимо, например, разложить в ряд $1/A = B$, записываем $AB = 1$. После этого выражаем коэффициенты b_k через a_k и, найденные на предыдущих итерациях b_k :

$$b_0 = \frac{1}{a_0}, \quad b_k = -\frac{1}{a_k} \sum_{r=1}^k a_r b_{k-r}.$$

В нашем случае ($\alpha = 1$):

$$E \langle \hat{x}^{k+1} \rangle = \left(\sum_{i=0}^{\infty} E^{(i)} \beta^i \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} X_j^{k+1} \beta^j \right) = \sum_{i=0}^{\infty} \beta^i \sum_{j=0}^i E^{(j)} X_{i-j}^{k+1}.$$

Поэтому:

$$(k+1) X_i^{k+1} + (k+2) X_{i-1}^{k+3} = 2k \sum_{j=0}^i E^{(j)} X_{i-j}^{k+1} + \frac{k(k-1)(k-2)}{4} X_i^{k-3},$$

откуда находим X_i^{k+1} . В результате получаем систему рекуррентных уравнений:

$$\begin{aligned} X_i^0 &= \delta_i^0, \\ X_i^{k+1} &= \frac{1}{k+1} \left[2k \sum_{j=0}^i E_j X_{i-j}^{k+1} + \frac{k(k-1)(k-2)}{4} X_i^{k-3} - (k+2) X_{i-1}^{k+3} \right], \\ E^{(i+1)} &= \frac{X_i^4}{2(i+1)}. \end{aligned} \tag{9.25}$$

При этом необходимо, начиная с $k = 0$ до $k = k_{\max} - 1$ вычислять каждый раз X_k^{q+1} для $q = [1, \dots, 2(k_{\max} - k + 1)]$ с шагом 2. В конце каждой итерации по k вычисляется $E^{(k+1)}$.

Приведём первые 15 поправок к энергии основного состояния ангармонического осциллятора $E = E^{(0)} + E^{(1)}\beta + E^{(2)}\beta^2 + \dots$ при $\alpha = 1$:

k	$E^{(k)}$	
0	$1/2$	0.5
1	$3/2^3$	0.4
2	$-21/2^5$	-1
3	$333/2^7$	3
4	$-30\ 885/2^{11}$	-15
5	$916\ 731/2^{13}$	112
6	$-65\ 518\ 401/2^{16}$	-10^3
7	$2\ 723\ 294\ 673/2^{18}$	10^4
8	$-1\ 030\ 495\ 099\ 053/2^{23}$	-10^5
9	$54\ 626\ 982\ 511\ 455/2^{25}$	10^6
10	$-6\ 417\ 007\ 431\ 590\ 595/2^{28}$	-10^7
11	$413\ 837\ 985\ 580\ 636\ 167/2^{30}$	10^8
12	$-116\ 344\ 863\ 173\ 284\ 543\ 665/2^{34}$	-10^{10}
13	$8\ 855\ 406\ 003\ 085\ 477\ 228\ 503/2^{36}$	10^{11}
14	$-1\ 451\ 836\ 748\ 576\ 538\ 293\ 163\ 705/2^{39}$	-10^{12}
15	$127\ 561\ 682\ 802\ 713\ 500\ 067\ 360\ 049/2^{41}$	10^{14}

В последней колонке дан порядок численного значения коэффициента. Получающийся ряд расходится, что свидетельствует (как и бифуркация потенциала, стр. 66) о неаналитичности энергии, как функции параметра β .

Отметим, что из вириальной теоремы (при $f = x$) и связи (9.24) следует, что:

$$\langle x^2 \rangle_k = -(3k - 1) E^{(k)}, \quad \langle x^4 \rangle_k = 2(k + 1) E^{(k+1)}.$$

Аналогично можно записать выражения для средних координаты с более высокой степенью.

Численная аппроксимация [7] приводит к следующему асимптотическому поведению k -той поправки к основному состоянию:

$$E_a^{(k)} \approx (-1)^{k+1} \sqrt{\frac{6}{\pi^3}} \Gamma\left(k + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{3}{2}\right)^k$$

($E^{(k)}/E_a^{(k)}$ для $k = 10, 100, 200$ равны 0.832, 0.987, 0.993). Этот же результат получается аналитически при использовании метода перевала Липатова.

Чтобы получать осмысленную информацию из таких расходящихся рядов, необходимо применять специальные методы. Мы рассмотрим их в следующем разделе.

4 Асимптотические ряды

В 18-м веке среди математиков развернулась дискуссия о значении суммы бесконечного ряда: $S = 1 - 1 + 1 - 1 + 1 - 1 + \dots$ В зависимости от количества слагаемых, его частичные суммы равны 1 или 0 и в обычном смысле этот ряд расходится. Леонард Эйлер первый заметил, что прежде чем вычислять значение суммы ряда, необходимо договориться как определять его сумму. Вместо числового ряда он предложил рассматривать степенные ряды, которые можно свернуть в функцию. Например:

$$S(x) = \frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + x^4 + \dots$$

При $x = 1$ получается числовой ряд со значением суммы $S = S(1) = 1/2$. Таким образом, по определению Эйлера “*сумма бесконечного ряда есть конечное выражение, из разложения которого возникает этот ряд.*” При этом, хотя область сходимости $S(x)$ находится внутри круга единичного радиуса $|x| < 1$ (на комплексной плоскости), свернув ряд в функцию мы аналитически продолжаем её к значению $x = 1$.

Эта же идея лежит и в основе суммирования расходящихся рядов, возникающих в физике. Такие ряды обычно связаны с существованием особой точки по параметру разложения. Её игнорирование и совершение в результате некорректных действий, приводит к появлению расходящегося ряда. Если он сворачивается в конечную функцию, то можно надеяться на восстановление исходного (или близкого к нему) выражения для физической величины. Впрочем, обычно получается только несколько слагаемых ряда и его сворачивание в функцию обладает заметным произволом и часто переходит в разряд математического искусства.

Ряды теории возмущений являются асимптотическими. Степенной ряд функции $f(x)$ называется *асимптотическим*, если для каждого фиксированного N :

$$\lim_{x \rightarrow +0} \frac{1}{x^N} \left(f(x) - \sum_{k=0}^N a_k x^k \right) = 0.$$

Другими словами, асимптотический ряд хорошо аппроксимирует $f(x)$ при сколь угодно малом x . Любая функция имеет не более одного асимптотического ряда, но, к сожалению, один и тот же ряд может соответствовать двум различным функциям. Если асимптотический ряд имеет нулевой радиус сходимости, то при конечном x простое суммирование не приведёт к конечным результатам и необходимо применять специальные методы для получения осмысленного результата.

• Приведём простой модельный пример в котором появляется расходящийся асимптотический ряд в результате достаточно “невинных” действий. Рассмотрим интеграл, зависящий от двух параметров α и β :

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2 - \beta x^4} dx. \quad (9.26)$$

Используя определение гамма-функции (стр. 400), несложно найти его значение в двух предельных случаях:

$$I(\alpha, 0) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad I(0, \beta) = \frac{\Gamma(1/4)}{2\beta^{1/4}}. \quad (9.27)$$

Разложим функцию под интегралом в ряд Тейлора:

$$I = 2 \int_0^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} x^{4k} e^{-\alpha x^2} dx = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} 2 \int_0^{\infty} x^{4k} e^{-\alpha x^2} dx.$$

Во втором равенстве произведена перестановка бесконечной суммы и интеграла. На самом деле такая операция в общем случае незаконна (хотя допустима для конечных сумм). Именно это приводит к появлению асимптотического ряда. Действительно, интегрируя (стр. 400), имеем:

$$I = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{-\beta}{\alpha^2} \right)^k \frac{\Gamma(2k + 1/2)}{\sqrt{\pi} k!}.$$

Выпишем в числовом виде коэффициенты при членах разложения:

$$\frac{I(\alpha, \beta)}{I(\alpha, 0)} = \sum_{k=0}^n c_k \left(\frac{-\beta}{\alpha^2} \right)^k = \left\{ 1 - 0.75 \frac{\beta}{\alpha^2} + 3.3 \frac{\beta^2}{\alpha^4} - 27 \frac{\beta^3}{\alpha^6} + 330 \frac{\beta^4}{\alpha^8} + \dots \right\}.$$

Видно, что они растут. Из формулы Стирлинга (F.13), стр. 402, следует такое их поведение при $k \rightarrow \infty$:

$$c_k = \frac{\Gamma(2k + 1/2)}{\sqrt{\pi} k!} \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{4k}{e} \right)^k \rightarrow \infty.$$

Заменой $x = \sqrt{\alpha/\beta} \operatorname{sh}(\phi/4)$ интеграл (9.26) может быть преобразован к модифицированной функции Бесселя [3]:

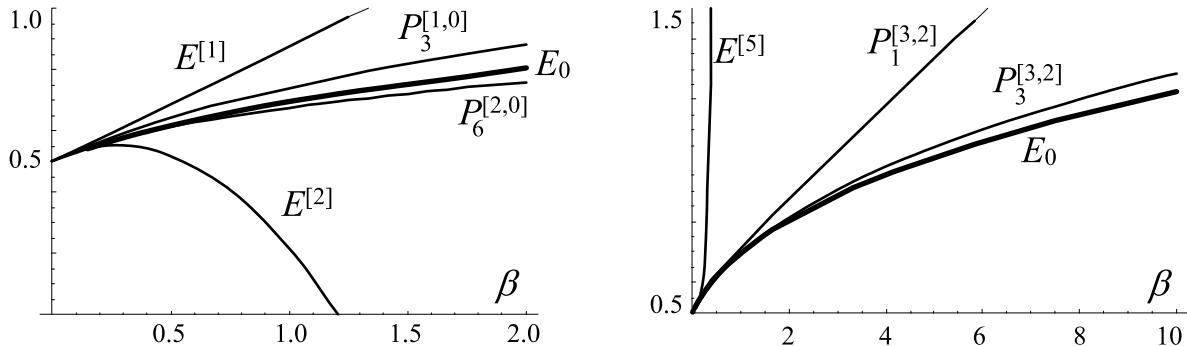
$$I(a, \beta) = \sqrt{\frac{2z}{\alpha}} e^z K_{1/4}(z), \quad z = \frac{\alpha^2}{8\beta}. \quad (9.28)$$

Она имеет существенную особую точку в $\beta = 0$. Это также следует из аргумента Дайсона (при $\beta > 0$ интеграл конечен, а при $\beta < 0$ – расходится). Изменение знака параметра α приводит к более слабой бифуркации и ряд по α оказывается ($\ll H_{45}$) сходящимся.

• Рассмотрим теперь способы суммирования асимптотических рядов. Энергия ангармонического осциллятора при больших β ведёт себя как $\beta^{1/3}$ (стр. 66). Поэтому перепишем ряд теории возмущений для основного состояния $E_0 = 1/2 + (3/8) \beta - (21/32) \beta^2 + \dots$ следующим образом ($\omega = 1$):

$$P_3^{[1,0]} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{9}{4} \beta \right)^{1/3}, \quad P_6^{[2,0]} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{9}{2} \beta + \frac{9}{16} \beta^2 \right)^{1/6}, \quad (9.29)$$

Эти функции имеют асимптотику $\beta^{1/3}$, в первом и втором порядках по β совпадают с рядом теории возмущений. Ниже, на первом рисунке изображены графики частичных сумм $E^{[k]} = E^{(0)} + E^{(1)} \beta + \dots + E^{(k)} \beta^k$ и аппроксимантов (9.29). Жирная линия – это численное “точное” значение:



Видно, что учёт асимптотики энергии существенно улучшает результаты. Обобщением этой идеи является *аппроксимация Паде*, при которой асимптотический ряд записывается в виде отношения двух рядов, разложение которого даёт исходный ряд:

$$P_\nu^{[n,m]} = 1 + c_1 \beta + \dots + c_{n+m} \beta^{n+m} \approx \left[\frac{1 + a_1 \beta + \dots + a_n \beta^n}{1 + b_1 \beta + \dots + b_m \beta^m} \right]^{1/\nu}. \quad (9.30)$$

Слева и справа находится одинаковое число коэффициентов. Возводя равенство в степень ν , умножая на знаменатель $1 + b_1 \beta + \dots + b_m \beta^m$ и приравнивая члены при одинаковых степенях β , можно выразить a_i, b_i через c_i . Степени полиномов n, m и параметр ν выбираются так, чтобы при $\beta \rightarrow \infty$ получить наиболее близкую асимптотику исходной величины $\beta^{(n-m)/\nu}$. В отличии от исходного ряда, аппроксиманты Паде, могут стремится к конечному значению. Выше на втором рисунке приведены аппроксиманты Паде для основного состояния, вычисленного с точностью до β^5 . В частности:

$$P_3^{[3,2]} = \frac{1}{2} \left[\frac{2161664 + 30363648 \beta + 105661628 \beta^2 + 84100887 \beta^3}{2161664 + 25499904 \beta + 53150588 \beta^2} \right]^{1/3}.$$

Таким образом, данный метод позволяет даже выйти за область малых значений β (теория возмущений).

• Ещё один способ суммирования асимптотических рядов основан на преобразовании *Бореля-Леруа*. Используя определение гамма-функции (стр. 400), перепишем ряд в следующем виде:

$$f(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \beta^k = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\mu-1} F(t\beta) dt, \quad (9.31)$$

где μ – некоторая константа и функция:

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c_k z^k}{\Gamma(k+\mu)} \quad (9.32)$$

называется борелевским образом функции $f(\beta)$. Гамма-функция $\Gamma(k+\mu)$ в знаменателе новых коэффициентов может сделать ряд для борелевского образа сходящимся, а интеграл от $F(z)$ – конечной функцией. Заметим, что выше произведена перестановка интеграла и бесконечной суммы. Так как асимптотический ряд теории возмущений возникает при подобной перестановке (стр. 161), можно надеяться что обратная перестановка устраняет расходимость ряда.

Использование этого метода в физических приложениях осложняется тем, что, обычно, известно только несколько слагаемых ряда по теории возмущений. Если их просто проинтегрировать в соответствии с (9.31), то снова получится исходный асимптотический ряд. Поэтому предварительно необходимо, тем или иным образом, модифицировать стоящую под интегралом сумму $F(z)$. Например, для борелевского образа $F(z)$ можно использовать аппроксиманты Паде $P_1^{[N,L]}$ (обычно хорошие результаты дают полиномы с близкими степенями $N \approx L$). Наличие свободного параметра μ также даёт дополнительный маневр для ускорения сходимости $F(z)$. Возможны и другие преобразования функции $F(z)$ [9].

Иногда кроме первых коэффициентов c_k асимптотического ряда известен их аналитический вид \tilde{c}_k при больших k . В этом случае можно [8] попытаться получить конечную функцию, построенную на основе \tilde{c}_k и тем самым улучшить сходимость ряда для первых N его слагаемых:

$$\tilde{f}(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{c}_k \beta^k, \quad f(\beta) = \tilde{f}(\beta) + \sum_{k=0}^N (c_k - \tilde{c}_k) \beta^k$$

Частичные суммы, по-прежнему будут расходиться и для их суммирования необходимо использовать, например, аппроксимацию Паде. Однако, учёт в $\tilde{f}(\beta)$ бесконечной части ряда, может дать улучшение результата.

5 Вариационный метод

Универсальным непертурбативным методом поиска энергии связанных состояний является вариационный метод. Рассмотрим *нормированный* на единицу, вектор $|\Psi\rangle$. Средняя энергия в этом состоянии равна:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_n E_n \langle \Psi | E_n \rangle \langle E_n | \Psi \rangle \geq E_0 \sum_n |\langle E_n | \Psi \rangle|^2 = E_0, \quad (9.33)$$

где вставлено разложение по полной системе собственных функций гамильтониана $\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$ и учтено, что $E_0 < E_1 < \dots$. В последнем равенстве использована нормировка $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ в энергетическом представлении. Таким образом:

$$\bar{H} \equiv \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq E_0. \quad (9.34)$$

Идея вариационного метода, основана на этом неравенстве и состоит в следующем. Выбирается нормированный вектор $|\Psi\rangle$, зависящий от некоторых параметров. Эти параметры подбираются так, чтобы достичь минимального значения \bar{H} .

Если энергия основного состояния оценена хорошо и ближе к E_0 , чем к E_1 , то можно получить интервал энергии в который попадает E_0 :

$$\langle \Psi | (\hat{H} - \bar{H})^2 | \Psi \rangle = \sum_n (E_n - \bar{H})^2 |\langle E_n | \Psi \rangle|^2 \geq (E_0 - \bar{H})^2 \sum_n |\langle E_n | \Psi \rangle|^2,$$

где \bar{H} определен в (9.34). При этом повторяются предыдущие рассуждения и предполагается, что $(E_0 - \bar{H})^2 < (E_1 - \bar{H})^2 < \dots$ Таким образом:

$$\langle \Psi | (\hat{H} - \bar{H})^2 | \Psi \rangle = \langle \hat{H}^2 \rangle - \bar{H}^2 \geq (E_0 - \bar{H})^2,$$

т.е. отклонение энергии основного состояния \bar{H} , полученной вариационным методом, от точного значения E_0 не превышает:

$$|\bar{H} - E_0| \leq \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \bar{H}^2}. \quad (9.35)$$

Аналогично можно *оценить* энергию первого возбуждённого состояния. Для этого выбирается нормированный вектор $|\Psi_1\rangle$, ортогональный $|\Psi_0\rangle$ снова решается задача минимизации среднего:

$$E_1 = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle = \min, \quad \langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (9.36)$$

Действительно, если в (9.33) $|E_0\rangle$ заменить на $|\Psi_0\rangle$, первое слагаемое, в силу ортогональности, будет равно нулю. Поэтому все энергии в сумме необходимо уже заменить на E_1 .

• Применим вариационный метод к ангармоническому осциллятору. Пусть $|\Psi\rangle$ – это собственный вектор n -того возбуждённого состояния гармонического осциллятора: $\hat{H}_\mu = (\hat{p}^2 + \mu^2 \hat{x}^2)/2$. Средние по этому состоянию равны (см. (2.48), (9.6)):

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{2n+1}{2\mu}, \quad \langle \hat{x}^4 \rangle = \frac{3(2n^2 + 2n + 1)}{4\mu^2}.$$

Поэтому для ангармонического осциллятора:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}(\alpha \hat{x}^2 + \beta \hat{x}^4) = \hat{H}_\mu + \frac{\alpha - \mu^2}{2} \hat{x}^2 + \frac{\beta}{2} \hat{x}^4$$

несложно вычислить среднее значение энергии:

$$\bar{H}(\mu) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{2n+1}{4} \left(\mu + \frac{\alpha}{\mu} + \frac{\nu\beta}{2\mu^2} \right), \quad \nu = 3 \frac{2n^2 + 2n + 1}{2n + 1}.$$

Взятие производной по μ и приравнивание её нулю, даёт уравнение для определения оптимального значения параметра:

$$\mu^3 - \alpha \mu - \nu\beta = 0. \quad (9.37)$$

Если $\beta = 0$ (гармонический осциллятор) – $\mu = \sqrt{\alpha}$ и получается точное значение энергии. Запишем решение уравнение (9.37) при больших β в виде разложения по α :

$$\mu = (\nu\beta)^{1/3} \left[1 + \frac{\alpha}{3(\nu\beta)^{2/3}} + \dots \right].$$

Подставляя его в $\bar{H}(\mu)$, получаем оценку энергии ангармонического осциллятора вариационным методом:

$$E = \frac{3(2n+1)}{8} (\nu\beta)^{1/3} \left[1 + \frac{2}{3} \frac{\alpha}{(\nu\beta)^{2/3}} + \dots \right]. \quad (9.38)$$

При $\alpha = 0$ для основного состояния имеем $E_0 = 0.5408\dots\beta^{1/3}$, что, с точностью до 2% совпадает с численным значением $E(0, 1) = 0.53018\beta^{1/3}$ (стр. 176). Коэффициент при α равен $1/(4 \cdot 3^{1/3}) = 0.173$, что также близко к численному значению 0.181.

Заметим, что для возбуждённых состояний используются собственные векторы гамильтониана \hat{H}_μ с *различным* параметром μ . При этом векторы для $n = 0$ и $n = 1$ ортогональны другу, а, например, $n = 2$ и $n = 1$ – нет (это несложно проверить в координатном представлении при помощи полиномов Эрмита (стр. 64)). Тем не менее, (9.38) хорошо работает и при больших n . В частности $E_n/\beta^{1/3} \rightarrow (3n)^{4/3}/4 = 1.08169 n^{4/3}$, что чуть меньше точного коэффициента 1.0925, который может быть получен методом ВКБ (стр. 170).

6 Сходящиеся ряды теории возмущений

В соответствии с аргументом Дайсона, расходящиеся ряды теории возмущений возникают из-за сильной бифуркации гамильтониана по параметру разложения. Кроме этого, не всегда существует подходящее, точно решаемое нулевое приближение. Например, если $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \beta x^4)/2$, положив просто $\beta = 0$ мы не получим гамильтониана с дискретным спектром. В связи с этим удобен метод, в котором как нулевое приближение, так и параметр разложения выбираются специальным образом. Рассмотрим в качестве нулевого приближения гамильтониан [10]:

$$\hat{H}_0 = \frac{2\beta}{\Omega^4} \left[\frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \Omega^2 \hat{x}^2) \right]^2.$$

С точностью до множителя, он является квадратом гамильтониана гармонического осциллятора с частотой Ω , спектр и собственные векторы которого хорошо известны. Множитель выбран таким образом, чтобы по координате при $x \rightarrow \infty$ получить асимптотику, совпадающую с ангармоническим осциллятором $\beta x^4/2$. Соответственно, полный гамильтониан с существенной ангармоничностью ($\alpha = 0$) теперь имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \beta x^4) - \frac{2\beta}{\Omega^4} \left[\frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \Omega^2 \hat{x}^2) \right]^2.$$

Фактически мы прибавили и вычли \hat{H}_0 . Тем не менее, будем считать, что \hat{V} мал и построим по нему теорию возмущений, используя в качестве базиса собственные векторы $|n\rangle$ гармонического осциллятора с частотой Ω . В этом случае:

$$\frac{1}{2} \langle k | \hat{p}^2 | n \rangle = \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{kn} - \frac{\Omega^2}{2} \langle k | \hat{x}^2 | n \rangle.$$

Поэтому, учитывая (2.48) и (9.6), запишем матричные элементы для оператора взаимодействия:

$$\begin{aligned} V_{n,n} &= \frac{\Omega}{4} \left[2n + 1 - \frac{1}{2Z} (10n^2 + 10n + 1) \right], \\ V_{n,n+2} &= \frac{\Omega}{4} \left[\frac{2n+3}{Z} - 1 \right] \sqrt{(n+2)(n+1)}, \\ V_{n,n+4} &= \frac{\Omega}{8Z} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}, \end{aligned}$$

где введено безразмерное отношение $Z = \Omega^3/\beta$ и энергии невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 равны:

$$\varepsilon_n = \frac{2\Omega}{Z} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2, \quad \varepsilon_n - \varepsilon_0 = \frac{2\Omega}{Z} n(n+1).$$

Теперь воспользуемся соотношениями (9.5), (9.7).

В первом порядке по теории возмущений энергия основного состояния равна:

$$E_0^{[1]} = \varepsilon_0 + V_{00} = \frac{\beta^{1/3}}{8} \left[3Z^{-2/3} + 2Z^{1/3} \right]. \quad (9.39)$$

Для фиксации произвольного параметра $Z = \Omega^3/\beta$ воспользуемся *принципом минимальной чувствительности* [11]. Точная энергия от Z не зависит (соответствующий член прибавлен и вычен из гамильтониана). Поэтому для Z выбирается такой диапазон, при котором энергия (в данном порядке по теории возмущений) наименее чувствительна к изменению Z . В частности, можно определять Z из условия

$$\frac{\partial E}{\partial \Omega} = 0. \quad (9.40)$$

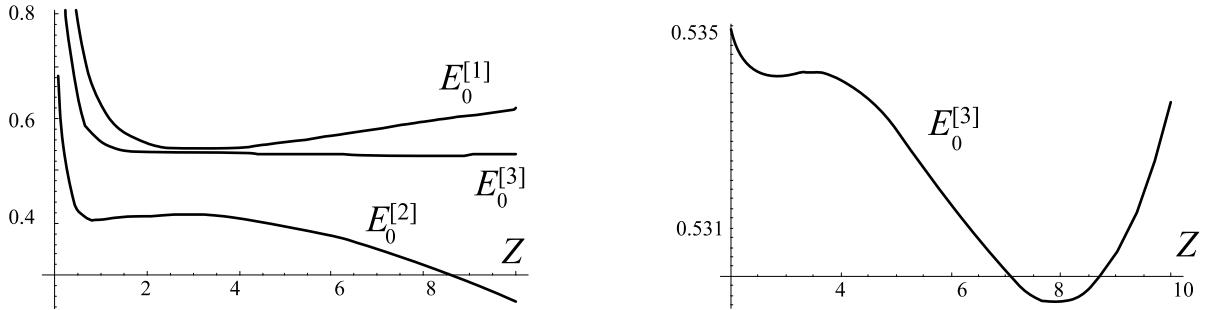
Для первой поправки по $E^{[1]} = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle$ этот критерий совпадает с вариационным методом и имеет *непертурбативный* характер. Однако, цель теперь стоит не в поиске минимума энергии (который для произвольной поправки по теории возмущений может быть сколь угодно низкий), а области стабильности по Z . Так, во втором порядке (сумма нулевого, первого и второго приближений) энергия равна:

$$E_0^{[2]} = \frac{\beta^{1/3}}{16} \left[\frac{37}{20} Z^{-2/3} + 5Z^{1/3} - \frac{1}{3} Z^{4/3} \right], \quad (9.41)$$

а в третьем [11]:

$$E_0^{[3]} = \frac{\beta^{1/3}}{128} \left[\frac{573}{20} Z^{-2/3} + \frac{2253}{50} Z^{1/3} - \frac{41}{15} Z^{4/3} + \frac{1}{9} Z^{7/3} \right]. \quad (9.42)$$

Приведём соответствующие графики, как функции Z :



Каждая следующая поправка в диапазоне $Z = 2 \dots 10$ сходится к точно-му значению 0.53018 и $E_0^{[3]}$ имеет три экстремума (правый рисунок). Из принципа минимальной чувствительности, следует, что энергия находится в интервале от 0.529 (минимум) до 0.534 (максимум).

Можно строго доказать [10], что, получаемые таким методом поправки к энергии ангармонического осциллятора, образуют сходящийся ряд.

Глава 10

Квазиклассические приближения

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Метод ВКБ

Метод Венцеля-Крамерса-Брюллюэна является приближённым, квазиклассическим способом получения волновой функции и уровней энергии. Последние находятся из условия квантования Бора-Зоммерфельда, записанного ещё до открытия уравнения Шрёдингера.

Определим логарифмическую производную волновой функции:

$$C(x) = \hbar \frac{u'(x)}{u(x)} = \hbar (\ln u)', \quad u(x) = \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int C(x) dx \right]. \quad (10.1)$$

Одномерное уравнение Шрёдингера $\hbar^2 u'' = 2m(U(x) - E)u$ для $C(x)$ имеет вид нелинейного уравнения Риккати первого порядка:

$$\hbar C' + C^2 = 2m(U - E). \quad (10.2)$$

В n -м возбуждённом состоянии волновая функция $u(x)$ имеет n нулей (осцилляционная теорема, стр. 44). Поэтому представим её в виде:

$$u(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n) f(x) \Rightarrow C(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\hbar}{x - x_k} + \hbar \frac{f'(x)}{f(x)},$$

где $f(x)$ не обращается в ноль. Так как функция $C(x)$ имеет n простых нулей, в силу теоремы Коши, можно написать *условия квантования*:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} C(z) dz = \hbar n, \quad (10.3)$$

где замкнутый контур Γ в комплексной плоскости охватывает все нули волновой функции, лежащие между точками поворота. Разложим энергию и логарифмическую производную в ряд по постоянной Планка:

$$E = E_0 + E_1 \hbar + \dots, \quad C(x) = C_0(x) + C_1(x) \hbar + \dots$$

При этом будем предполагать выполнения следующего предельного перехода к классической механике:

$$\hbar \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \quad \hbar n = const \sim \hbar^0. \quad (10.4)$$

Это означает, что условия квантования (10.3) имеют вид:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} C_0(z) dz = \hbar n, \quad \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} C_k(z) dz = 0, \quad k > 0. \quad (10.5)$$

Найдём при помощи этих соотношений спектр системы.

В нулевом приближении по \hbar имеем:

$$C_0 = -\sqrt{2m(U - E_0)}, \quad U(x) > E_0,$$

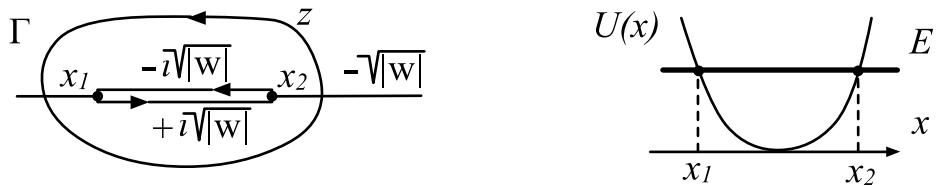
где знак при извлечении корня выбран так, чтобы при больших x волновая функция $u(x)$ (10.1) убывала. Поэтому условие квантования (10.5) принимает вид:

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \sqrt{2m(U(z) - E_0)} dz = \hbar n.$$

Перепишем его через интеграл по действительной переменной. Пусть потенциал $U(x)$ имеет две точки поворота $x_1 < x_2$, которые находятся из уравнения:

$$U(x_i) = E_0 \quad \Rightarrow \quad x_1, x_2. \quad (10.6)$$

Тогда $U(x) - E_0 = U'(x_i)(x - x_i) + \dots$ и функция $C_0(x)$ имеет в точках x_i ветвления, являясь двузначной. Проведём на комплексной плоскости z разрез между точками поворота и стянем контур Γ к этому разрезу:



Вдоль разреза $U(z) < E_0$. Так как мы выбрали при $U(z) > E_0$ для корня множитель минус, по аналогии со стр. 390, на верхнем берегу разреза $C_0 = -i\sqrt{E_0 - U(x)}$, а на нижнем $C_0 = i\sqrt{E_0 - U(x)}$ (это второй лист римановой плоскости). Поэтому ($w = 2m(U - E_0)$):

$$\oint_{\Gamma} \sqrt{w} dz = -i \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{|w|} dx + i \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{|w|} dx = 2i \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{|w|} dx$$

и мы приходим к условию *квантования Бора*:

$$\frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E_0 - U(x))} dx = \hbar n. \quad (10.7)$$

Из этого условия находится спектр дискретных энергий в одномерном потенциале $U(x)$. Он будет тем ближе к точному значению, чем больше квантовое число n . Найдём первую поправку по \hbar к этому нулевому приближению.

Подставляя разложения по постоянной Планка в уравнение (10.2), в первом приближении имеем:

$$C_1 = -\frac{C'_0}{2C_0} - \frac{mE_1}{C_0}.$$

Так как интеграл (10.5) по контуру Γ от C_1 равен нулю, можно написать:

$$\oint_{\Gamma} \frac{mE_1}{C_0} dz = - \oint_{\Gamma} \frac{C'_0}{2C_0} dz = -\frac{1}{4} \oint_{\Gamma} \frac{U'(z)}{U(z) - E_0} dz = \frac{2\pi i}{2},$$

В последнем интеграле функция имеет два простых полюса: $U(z) - E_0 = U'(z_i)(z - z_i)$ с единичными вычетами, что по теореме Коши даёт финальный результат. Это соотношение позволяет получить E_1 . Однако, более удобно заметить, что

$$-\sqrt{2m(U - E)} = -\sqrt{2m(U - E_0 - E_1\hbar - \dots)} = C_0 - \frac{mE_1}{C_0}\hbar + \dots$$

Проинтегрируем правую и левую части по контуру Γ и стянем его к берегам разреза (слева и справа от отличается, т.к. точки ветвления будут определяться различными уравнениями $U(x) = E$ и $U(x) = E_0$). Интегралы в правой части пропорциональны n и $1/2$, в результате чего получается *условие квантования Бора-Зомерфельда*:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (10.8)$$

Для ангармонического осциллятора с $\alpha = 0$, $\beta = 1$ точка поворота равны $-x_1 = x_2 = x_0$, где $2E = x_0^4$ или $x_0 = (2E)^{1/4}$. Поэтому:

$$2 \int_0^{(2E)^{1/4}} \sqrt{2E - x^4} dx = 2(2E)^{3/4} \int_0^1 \sqrt{1 - x^4} dx = 2(2E)^{3/4} \frac{\sqrt{\pi}}{6} \frac{\Gamma(1/4)}{\Gamma(3/4)}.$$

Или выражая энергию, окончательно:

$$E = \frac{1}{2} \left[3\sqrt{\pi} \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^{4/3} = 1.09253465 \left(n + \frac{1}{2}\right)^{4/3} \quad (10.9)$$

Относительные ошибки этой формулы в нулевом и первом приближении по \hbar при различных n равны:

n	0	1	2	10	100
$n^{4/3}$	-	-42%	-26%	-6%	-0.7%
$(n + 1/2)^{4/3}$	-18%	-1.3%	-0.6%	-0.03%	-0.0004%

Таким образом, поправка Зомерфельда ($n \mapsto n + 1/2$) существенно повышает точность формулы.

- Можно также рассмотреть следующий предельный переход [16], [17]:

$$\hbar \rightarrow 0, \quad n = const, \quad \hbar n \sim \hbar^1, \quad (10.10)$$

который будет хорошо работать при малых n . Соответствующий метод получил название *\hbar -разложение*. В одномерном случае он эквивалентен обычной теории возмущений и требует наличия осцилляторного слагаемого в разложении потенциала в окрестности его минимума. В качестве нулевого приближения по \hbar для энергии выбирается минимум потенциала, который далее будем считать расположенным в нуле. Поэтому $C_0^2(x) = 2U(x) = \omega^2 x^2 + \dots$ ($m = 1$) или, учитывая граничные условия,

$$C_0(x) = -\omega x \sqrt{1 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots} = -\omega x - \frac{\beta}{2\omega} x^3 + \dots,$$

где второе равенство записано для потенциала ангармонического осциллятора $U = (\omega^2 x^2 + \beta x^4)/2$. Для предельного перехода (10.10) отличным от нуля условием квантования будет:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} C_1(z) dz = n. \quad (10.11)$$

Запишем для логарифмической производной ряд в окрестности минимума потенциала $x = 0$:

$$C_1 = -\frac{C'_0}{2C_0} - \frac{E_1}{C_0} \sim -\frac{1}{2x} \left(1 + \frac{3\beta}{2\omega^3} x^2 + \dots \right) + \frac{E_1}{\omega x} \left(1 + \frac{\beta}{2\omega^3} x^2 + \dots \right).$$

Вычеты равны

$$-\frac{1}{2} + \frac{E_1}{\omega} = n,$$

что даёт энергию гармонического осциллятора. Аналогично находится первая поправка:

$$C_2 = -\frac{C'_1 + C_1^2 + 2E_2}{2C_0} \sim \dots + \left[\frac{E_2}{\omega} - \frac{3\beta (1 + 4E_1^2/\omega^2)}{16\omega^3} \right] \frac{1}{x} + \dots$$

Поэтому:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} C_2(z) dz = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{E_2}{\omega} = \frac{3\beta}{16\omega^3} (1 + 4E_1^2/\omega^2) \quad (10.12)$$

и т.д. Фактически, используя в качестве нулевого приближения минимум потенциала и правило (10.10), мы получаем теорию возмущения по степеням ангармоничности. При помощи этого алгоритма несложно записать рекуррентные формулы для нахождения произвольной поправки по теории возмущения.

2 \hbar -разложение

Рассмотрим подробнее предельный переход (10.10) на примере радиального уравнения Шрёдингера. Пусть волновая функция имеет n нулей (в этом разделе индекс r опускаем). Кроме классического предельного перехода $\hbar \rightarrow 0$, $\hbar n = const$, логически возможен (стр. 173) вариант $\hbar \rightarrow 0$, $\hbar n \rightarrow 0$, который соответствует основному классическому состоянию (частица покоится в точке минимума потенциала). В трёхмерном случае существует ещё одно, орбитальное квантовое число l . Эффективный потенциал имеет минимум, если $l \neq 0$. Поэтому рассмотрим следующий предел:

$$\hbar \rightarrow 0, \quad n = const, \quad l \rightarrow \infty \quad \hbar n \rightarrow 0, \quad \hbar l = const. \quad (10.13)$$

Такое квазиклассическое приближение называется \hbar -разложением. Квадрат углового момента $\Lambda = \hbar^2 l(l+1)$ при (10.13) стремится к константе $\Lambda \rightarrow \Lambda_0$ и может, как и энергия, записан в виде ряда по степеням \hbar :

$$\Lambda = \Lambda_0 + \Lambda_1 \hbar + \Lambda_2 \hbar^2 + \dots, \quad E = E_0 + E_1 \hbar + E_2 \hbar^2 + \dots \quad (10.14)$$

В классическом пределе частица движется по окружности радиуса r_0 , находясь в точке минимума эффективного потенциала V_{eff} :

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\Lambda_0}{2\mu r^2}, \quad \mu r_0^3 V'(r_0) = \Lambda_0, \quad (10.15)$$

с энергией, равной значению этого минимума:

$$E_0 = V(r_0) + \frac{\Lambda_0}{2\mu r_0^2} = V(r_0) + \frac{r_0}{2} V'(r_0). \quad (10.16)$$

В уравнении (10.2) для логарифмической производной $C(r) = \hbar u'(r)/u(r)$:

$$\hbar C'(r) + C^2(r) = \frac{\Lambda}{r^2} + 2\mu \{V(r) - E\} \quad (10.17)$$

разложим в ряд по \hbar функцию $C(r) = C_0(r) + C_1(r) \hbar + C_2(r) \hbar^2 + \dots$, что в нулевом приближении даёт:

$$C_0(r) = \pm \sqrt{\frac{\Lambda_0}{r^2} + 2\mu \{V(r) - E_0\}}, \quad \begin{aligned} &+ \text{при } r < r_0 \\ &- \text{при } r > r_0, \end{aligned}$$

где знаки при извлечении корня выбраны так, чтобы удовлетворить граничным условиям для функции $u(r)$.

Разложим эффективный потенциал в ряд по степеням относительного отклонения от точки минимума $x = (r - r_0)/r_0$:

$$\frac{\Lambda_0}{r^2} + 2\mu \{V(r) - E_0\} = \frac{\omega^2 x^2}{r_0^2} (1 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots),$$

где

$$\frac{\omega^2}{2\mu r_0^2} = V_2 + \frac{3}{2} V_1, \quad a_k = \frac{2\mu r_0^2}{\omega^2} \left(V_{k+2} + (-1)^k \frac{k+3}{2} V_1 \right), \quad V_k = \frac{r_0^k}{k!} V^{(k)}(r_0).$$

Для для логарифмической производной в нулевом приближении :

$$C_0(x) = -\frac{\omega}{r_0} x \sqrt{1 + a_1 x + a_2 x^2 \dots} = -\frac{\omega}{r_0} x \left\{ 1 + a_1 \frac{x}{2} + (4a_2 - a_1^2) \frac{x^2}{8} + \dots \right\}.$$

Подставляя разложения $C = C_0 + C_1 \hbar + C_2 \hbar^2 + \dots$ и (10.14) в уравнение (10.17) и приравнивая величины одного порядка по \hbar , получаем ($k > 0$):

$$\frac{1}{r_0} C'_{k-1}(x) + \sum_{i=0}^k C_i(x) C_{k-i}(x) = \frac{\Lambda_k}{r_0^2 (1+x)^2} - 2\mu E_k. \quad (10.18)$$

Предельный переход (10.13) для условия квантования логарифмической производной (10.3), стр. 170 приводит к:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint C_k(r) dr = n \delta_{1,k}, \quad \text{Res } C_k(x) = \frac{n}{r_0} \delta_{1,k}. \quad (10.19)$$

Так как $C_0(0) = 0$, функция $C_1(x)$ имеет простой полюс:

$$C_1(x) = \frac{1}{2C_0(x)} \left[\frac{\Lambda_1}{r_0^2 (1+x)^2} - 2\mu E_1 - \frac{C'_0(x)}{r_0} \right] = -\frac{r_0}{2\omega x} \left[\frac{\Lambda_1 + \omega}{r_0^2} - 2\mu E_1 \right] + \dots$$

Приравнивая в нём вычет n/r_0 , получаем первую поправку:

$$2\mu r_0^2 E_1 = \Lambda_1 + \omega (2n + 1). \quad (10.20)$$

Она соответствует осцилляторным колебаниям в окрестности минимума эффективного потенциала. Зная E_1 , получаем $C_1(x)$, находим $C_2(x)$ и снова применяем условия квантования (10.19):

$$2\mu r_0^2 E_2 = \Lambda_2 - \frac{\Lambda_1^2}{\omega^2} + \frac{3s \Lambda_1}{2\omega} (1 + a_1) - \frac{15s^2 + 7}{32} a_1^2 + \frac{3s^2 + 3}{8} a_2, \quad (10.21)$$

где $s = 2n + 1 = 1, 3, 5, \dots$ и n – радиальное квантовое число (нули волновой функции). Аналогично можно ($\lessdot H_{46}$) получить рекуррентные формулы для вычисления любой поправки к энергии.

▷ Рассмотрим в качестве примера степенной потенциал ($A \nu > 0$):

$$V(r) = A r^\nu. \quad (10.22)$$

Для него, определённые выше, коэффициенты равны ($\mu = 1/2$, $\hbar = 1$):

$$r_0^{\nu+2} = \frac{2\Lambda_0}{A\nu}, \quad \omega = \sqrt{(\nu+2)\Lambda_0}, \quad a_1 = \frac{\nu-5}{3}, \quad a_2 = \frac{\nu^2 - 8\nu + 27}{12}.$$

До сих пор параметры Λ_k были произвольны. Энергия связанных состояний является их функцией $E = E(\Lambda_0, \Lambda_1, \dots)$ и подходящим выбором Λ_k можно добиваться ускорения сходимости рядов \hbar -разложения. Пусть:

$$\Lambda_1 = -s \sqrt{(\nu+2)\Lambda_0}, \quad \Lambda_2 = \frac{s^2(\nu+2)-1}{4}. \quad (10.23)$$

При таком Λ_1 происходит обнуление первой поправки E_1 (10.20), а значение Λ_2 приводит к тому, что вторая поправка для кулонна ($\nu = -1$) и осциллятора ($\nu = 2$) также обращается в ноль:

$$E = \frac{A r_0^\nu}{2} \left[\nu + 2 - \frac{\nu(\nu+1)(\nu-2)}{72\Lambda_0} (6n^2 + 6n + 1) \right]. \quad (10.24)$$

Оставшуюся константу Λ_0 определим из условия $l(l+1) = \Lambda_0 + \Lambda_1 + \Lambda_2$:

$$\Lambda_0 = \frac{1}{4} (2l+1 + (2n+1)\sqrt{\nu+2})^2. \quad (10.25)$$

Для $\nu = -1$, $A = -2$, $r_0 = \Lambda_0 = (l+n+1)^2$ и формула (10.24) даёт точное выражение для энергии $E = -1/\Lambda_0$ кулоновского потенциала. Аналогичная ситуация для трёхмерного осциллятора: $\nu = 2$, $A = 1$ и $r_0^4 = \Lambda_0 = (2l+4n+3)^2/4$, $E = 2l+4n+3$. Обратим внимание, что вырождение снимается только для этих двух случаев. При других значениях ν энергия не зависит от суммы n и l с целыми коэффициентами.

Ниже приведены численные значения уровней энергии для линейного потенциала $V(r) = r$ при различных n и l . В скобках указана относительная ошибка формулы (10.24) в процентах:

n	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	$l=4$
0	2.33811 (0.0)	3.36125 (0.0)	4.24818 (0.0)	5.05093 (0.0)	5.79442 (0.0)
1	4.08795 (0.5)	4.88445 (0.2)	5.62971 (0.1)	6.33212 (0.1)	6.99926 (0.0)
2	5.52056 (0.7)	6.20762 (0.4)	6.86888 (0.2)	7.50465 (0.1)	8.11726 (0.1)
3	6.78671 (0.9)	7.40567 (0.5)	8.00970 (0.3)	8.59712 (0.2)	9.16833 (0.2)

Ошибка основных состояний ($n = 0$ при данном l) – менее одной сотой процента. С ростом орбитального квантового числа l при данном n ошибка уменьшается. Таким образом, (10.24) является очень хорошим приближением к энергиям даже вне пределов (10.13).

▷ Энергия E является функцией углового квантового числа l или эквивалентно квадрата углового момента $\Lambda = \hbar^2 l(l + 1)$. Зависимость $E = E(\Lambda)$ можно обратить, получив функцию $\Lambda = \Lambda(E)$, называемую *траекторией Редже*. Она играет важную роль в физике частиц и теории рассеяния. Метод \hbar -разложения позволяет легко получать подобные функции. Для этого достаточно считать параметры Λ_k искомыми, а коэффициенты E_k заданными. В простейшем случае все $E_k = 0$ кроме $E_0 = E$. Возможны и другие выборы, ускоряющие сходимость рядов.

Вместо $\Lambda = \Lambda(E)$ для траекторий Редже более привычной является запись $\alpha = \alpha(E) = \hbar l$, так, что $\Lambda = \alpha^2 + \hbar\alpha$. С параметрами Λ_k коэффициенты разложения траектории Редже $\alpha(E) = \alpha_0(E) + \alpha_1(E)\hbar + \dots$ связаны следующим образом:

$$\alpha_0 = \sqrt{\Lambda_0}, \quad \alpha_1 = \frac{\Lambda_1}{2\alpha_0} - \frac{1}{2}, \quad \alpha_2 = \frac{\Lambda_2 - \alpha_1 - \alpha_1^2}{2\alpha_0}.$$

Приведём в качестве примера траекторию Режде ($E = E_0$) степенного потенциала $V(r) = A r^\nu$ с точностью до второго порядка по \hbar :

$$\alpha(E) = \alpha_0(E) - \left(1 + (2n + 1)\sqrt{\nu + 2}\right) \frac{\hbar}{2} + \frac{(\nu - 2)(\nu + 1)}{144\alpha_0(E)} (6n^2 + 6n + 1) \hbar^2,$$

где нулевое приближение равно:

$$\alpha_0(E) = \sqrt{\frac{A\nu}{2}} \left[\frac{2E}{A(\nu + 2)} \right]^{(\nu+2)/2\nu}.$$

Для кулоновского потенциала ($\nu = -1$) и осцилляторного ($\nu = 2$) это выражение даёт точный результат.

При подстановке в траекторию Редже энергий связанных состояний получаются целые числа в единицах постоянной Планка: $\alpha(E_{nk}) = \hbar l$, что даёт возможность, решая уравнение $\alpha(E) = \hbar l$, находить энергию.

Запишем ещё одно простое выражение для логарифмического потенциала $V(r) = \ln r$:

$$\alpha(E) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{E-1/2} - \left(2n + 1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \hbar - \frac{6n^2 + 6n + 1}{36} e^{-E+1/2} \hbar^2 \right].$$

При радиальных квантовых числах $n = 0 - 2$ оно существенно точнее, чем результат, получаемый при помощи формулы Бора (10.7), стр. 171 (метод ВКБ). Таким образом, \hbar -разложение дополнителен к методу ВКБ и вместе они покрывают все диапазоны радиальных квантовых чисел n : как малых (\hbar -разложение), так и больших (метод ВКБ).

Часть III

Рассеяние, переходы и распады

Глава 11

Теория рассеяния

Квантовая теория поля

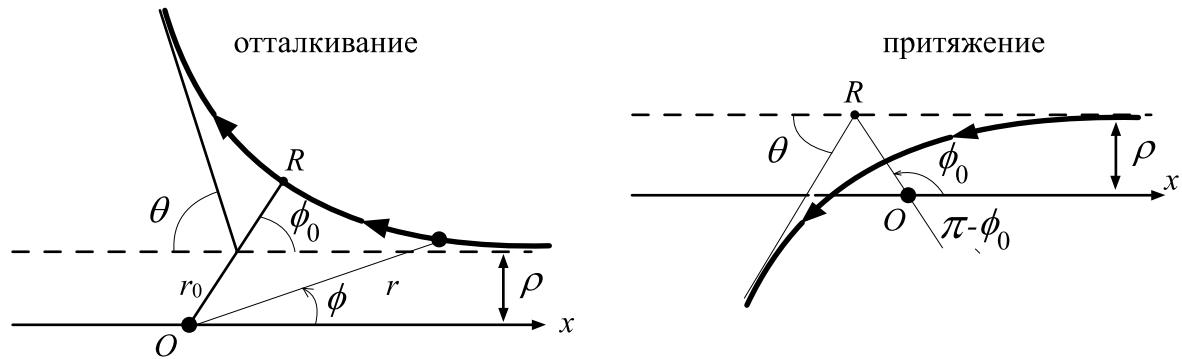
Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Рассеяние в классической механике

Рассмотрим классическое трёхмерное движение частицы во внешнем поле. Предположим, что источник поля находится в точке O , а частица движется со скоростью v_∞ из бесконечности против оси x , отстоя от неё на *прицельное расстояние* ρ . Поле $U(\mathbf{x})$ изменяет направление движения. В результате траектория частицы асимптотически стремится к прямой, наклонённой к оси x на *угол рассеяния* θ :



Если потенциал монотонно убывает с расстоянием, то угол рассеяния тем больше, чем меньше прицельное расстояние ρ или скорость частицы v_∞ . В стационарном поле *энергия* частицы постоянна и на бесконечности скорость частицы вернётся по модулю к начальному значению, но изменит направление на угол θ . В центральном поле, потенциал которого является функцией расстояния от центра поля, сохраняется также *момент импульса* $L = |\mathbf{L}|$. Энергия и момент импульса выражаются через скорость частицы на бесконечности v_∞ и прицельное расстояние ρ :

$$E = \frac{mv_\infty^2}{2}, \quad L = mrv \sin \phi \rightarrow m \rho v_\infty. \quad (11.1)$$

Рассмотрим движение частицы в полярных координатах (r, ϕ) . Обозначая $c_\phi = \cos \phi$, и т.д., имеем:

$$\mathbf{r} = r c_\phi \mathbf{i} + r s_\phi \mathbf{j},$$

$$\mathbf{v} = (\dot{r} c_\phi - r \dot{\phi} s_\phi) \mathbf{i} + (\dot{r} s_\phi + r \dot{\phi} c_\phi) \mathbf{j},$$

где \mathbf{i} , \mathbf{j} – единичные ортогональные векторы декартового базиса. Из этих соотношений несложно получить:

$$\mathbf{v}\mathbf{r} = rr\dot{\phi}, \quad \mathbf{v}^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2, \quad [\mathbf{r} \times \mathbf{v}] = r^2\dot{\phi} \mathbf{k}, \quad (11.2)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{i} \times \mathbf{j}$ – единичный вектор, направленный вдоль оси z (перпендикулярно рисунку). В силу последнего соотношения туда же направлен вектор момента импульса \mathbf{L} (т.к. $\dot{\phi} = d\phi/dt > 0$).

Поэтому сохраняющаяся энергия (в данном случае $E > 0$) равна:

$$E = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + U(r) = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r). \quad (11.3)$$

Значение $\dot{r} = 0$ соответствует “точке поворота” r_0 , в которой $r(t)$ перестаёт уменьшаться при приближении к центру поля и после неё начинает увеличиваться. Уравнение для энергии позволяет найти r_0 :

$$E = \frac{L^2}{2mr_0^2} + U(r_0). \quad (11.4)$$

На рисунках выше, точке поворота соответствует угол ϕ_0 . Последнее соотношение (11.2) можно переписать в виде:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{L}{mr^2}. \quad (11.5)$$

Найдём траекторию $r = r(\phi)$. Для этого исключим из (11.3), (11.5) время dt и запишем скорость изменения r при монотонном увеличении угла ϕ :

$$\frac{dr}{d\phi} = \pm \frac{\sqrt{2m(E - U(r)) - L^2/r^2}}{L/r^2}. \quad (11.6)$$

Знак минус соответствует уменьшению r (при приближении к точке поворота $\phi < \phi_0$), а плюс – увеличению ($\phi > \phi_0$). Независимо от знака в правой части стоит одна и та же функция r , следовательно траектория симметрична относительно прямой OR , проведённой из центра поля O ($\phi = \phi_0$). Симметричны также и обе асимптотики траектории относительно прямой OR , поэтому:

$$\theta = \pm(\pi - 2\phi_0), \quad (11.7)$$

где плюс соответствует полю отталкивания, а минус – притяжению.

При движении справа налево в интервале $\phi < \phi_0$ в (11.6) выберем знак минус. Разделяя переменные и интегрируя от $r = r_0$ до $r = \infty$, учитывая что $\phi(r_\infty) = 0$, а $\phi(r_0) = \phi_0$, получаем:

$$\phi_0 = \int_{r_0}^{\infty} \frac{(L/r^2) dr}{\sqrt{2m(E - U(r)) - L^2/r^2}}.$$

Подставляя соотношения (11.1) и делая замену $\xi = \rho/r$, имеем:

$$\phi_0 = \int_0^{\rho/r_0} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2 - 2U(\rho/\xi)/mv_\infty^2}}. \quad (11.8)$$

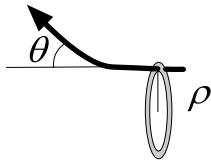
Это уравнение связывает угол ϕ_0 (а, следовательно, по (11.7) и θ) с прицельным расстоянием ρ и скоростью налетающей частицы v_∞ .

- На опыте часто изучают рассеяние на внешнем поле потока частиц, падающих параллельно с одинаковой скоростью и *различными* прицельными расстояниями ρ . Предполагается, что такой поток частиц однороден в плоскости, перпендикулярной к скорости. В этом случае измеряют *сечение рассеяния* $d\sigma$, равное отношению:

$$\frac{\text{Число рассеянных частиц в единицу времени в телесный угол } d\Omega}{\text{Число падающих частиц в единицу времени через единицу площади}}.$$

Знаменатель делает величину $d\sigma$ независимой от интенсивности падающего потока. Телесный угол равен $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ (сейчас мы используем сферическую систему координат, ось z которой направлена вдоль скорости падающих частиц, угол θ отсчитывается от неё, а ϕ – полярный угол в перпендикулярной плоскости, отличный от ϕ , применявшегося выше).

Для монотонно убывающих потенциалов связь между θ и ρ однозначна. Поэтому интервал углов $\theta, \theta + d\theta$ соответствует интервалу $\rho, \rho + d\rho$. Число падающих частиц, попадающих в этот интервал, пропорционально площади $2\pi\rho d\rho$ кольца радиуса ρ и шириной $d\rho$. Если плотность числа падающих частиц в единицу времени через единицу площади равна j , то



$$d\sigma = \frac{j \cdot 2\pi\rho d\rho}{j} = 2\pi\rho d\rho. \quad (11.9)$$

Переходя к углу θ и считая далее, что $\rho = \rho(\theta)$, имеем:

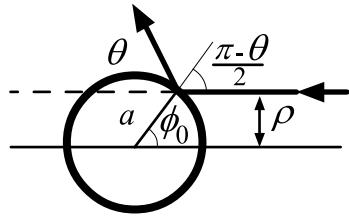
$$d\sigma = 2\pi\rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\theta = \frac{\rho}{\sin \theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\Omega. \quad (11.10)$$

Модуль поставлен, т.к. обычно $d\rho/d\theta < 0$ (чем больше ρ , тем меньше θ).

Полное сечение рассеяния σ получается интегрированием по телесному углу. Эта величина имеет размерность площади (благодаря знаменателю в определении $d\sigma$). Однако, если потенциал, убывая, ни где не обращается строго в ноль, полное сечение равно бесконечности. Действительно, оно эквивалентно интегралу $\rho d\rho$ в (11.9) от 0 до бесконечности. Если при любых ρ происходит хотя бы небольшое изменение траектории (т.е. рассеяние), то этот интеграл расходится.

Измеряемое на практике полное сечение конечно, так как размер сечения падающего потока ограничен ($\rho < \rho_{max}$). Кроме этого, при измерении дифференциального сечения $d\sigma$, отбрасываются значения $\theta \approx 0$, т.к. при малых углах нельзя отделить рассеявшуюся частицы от нерассеянных (соответствующих большим ρ).

▷ Полное сечение конечно (даже для неограниченного потока), если потенциал на больших расстояниях в точности равен нулю. Рассмотрим в качестве примера случай рассеяния на абсолютно твёрдом, очень тяжёлом шарике радиуса a (потенциал при $r < a$ равен бесконечности, а при $r > a$ – нулю). Так как при упругом соударении угол падения равен углу отражения, имеем:



$$\rho = a \sin(\phi_0) = a \cos \frac{\theta}{2},$$

$$d\sigma = \frac{a^2}{4} d\Omega.$$

Несложно видеть, что полное сечение равняется площади сечения шарика $\sigma = \pi a^2$, и соответствует частицам в падающем потоке, которые провзаимодействовали с шариком и рассеялись. Эти частицы должны были иметь прицельное расстояние $\rho < a$. Результат $\sigma = \pi a^2$ можно сразу получить по формуле (11.9).

▷ В качестве второго примера найдём сечение рассеяния для кулоновского потенциала $U(r) = \alpha/r$. Введём безразмерный параметр

$$\lambda = \frac{\alpha/\rho}{mv_\infty^2}$$

и найдём из уравнения (11.4) точку поворота: $\rho/r_0 = \sqrt{\lambda^2 + 1} - \lambda$. Угол поворота в соответствии с (11.8) равен:

$$\phi_0 = \int_0^{\rho/r_0} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \xi^2 - 2\lambda\xi}} = \int_{-\lambda}^{\sqrt{\lambda^2 + 1}} \frac{d\xi'}{\sqrt{1 + \lambda^2 - \xi'^2}} = \arccos \frac{\lambda}{\sqrt{1 + \lambda^2}},$$

где $\xi' = \xi + \lambda$. Таким образом $\sin(\theta/2) = \lambda/\sqrt{1 + \lambda^2}$ или

$$\rho = \frac{\alpha}{mv_\infty^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}.$$

Подставляя эту зависимость прицельного расстояния ρ и угла рассеяния θ в (11.10), получаем формулу Резерфорда:

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha}{2mv_\infty^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (11.11)$$

Сечение не зависит от знака α и одинаково для поля отталкивания и притяжения. Так как кулоновский потенциал ни где в точности не обращается в ноль, полное сечение равно бесконечности ($d\sigma$ сингулярно при $\theta = 0$). С ростом кинетической энергии частицы $E = mv_\infty^2/2$ сечение рассеяния убывает как E^{-2} .

2 Рассеяние в квантовой теории

В квантовой механике возможно два подхода к описанию рассеяния частицы на внешнем поле. Их можно назвать стационарным и нестационарным. В этой главе рассматривается первый подход, а второму посвящена следующая глава.

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера на большом расстоянии от центра рассеяния частицы при $E > 0$ (потенциал убывает на бесконечности $rU(r) \rightarrow 0$):

$$\Delta\Psi + k^2\Psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Его частным решением является плоская волна $\Psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$, где $\mathbf{k}^2 = k^2$.

Кроме этого, уравнение можно решить в сферических координатах. На больших расстояниях угловая часть лапласиана (момент импульса) убывает как $1/r^2$ и ею, также как и потенциалом, можно пренебречь, поэтому (стр. 107):

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\Psi}{\partial r} + k^2\Psi = 0.$$

Это уравнение имеет два независимых решения:

$$\Psi = A \frac{e^{\pm ikr}}{r},$$

где A – не зависит от r , но может зависеть от сферических углов θ и ϕ . Решение со знаком плюс называется расходящейся от центра сферической волной, а минус – сходящейся.

В общем случае асимптотическое решение стационарного уравнения Шрёдингера строится следующим образом:

$$\Psi = e^{ikz} + A(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (11.12)$$

Первое слагаемое соответствует падающей плоской волне частицы, имеющей волновой вектор k , направленный вдоль оси z . Второе слагаемое – это сферическая волна (удаляющиеся от центра рассеянные частицы). Сферическая волна имеет амплитуду $A(\theta)$, зависящую от угла θ с осью z , что отражает различную интенсивность рассеяния под различными углами. Подобное решение соответствует физической ситуации, когда устанавливается стационарное равновесное состояние суперпозиции *постоянно* падающих на центр частиц и частиц рассеянных в результате взаимодействия с полем. Если потенциал не сферически симметричен, то функция $A(\theta, \phi)$, может также зависеть от угла ϕ .

При вычислении плотностей потоков вероятностей мы будем пренебречь интерференцией падающей и рассеянной волны, вычисляя их независимым образом. Это означает, что падающий пучок ограничен конечной но небольшой диафрагмой и при регистрации рассеянных частиц в детектор не попадают частицы из падающего потока.

Поток вероятности (стр. 39) для волновой функции равен:

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \right\}.$$

Для падающей плоской волны e^{ikz} от нуля отлична только z -компоненты: $\mathbf{j} = \{0, 0, \hbar k/m\}$. Поток расходящейся сферической волны вычислим в сферических координатах, в которых

$$\nabla = \mathbf{n}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathbf{n}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\mathbf{n}_\phi}{rs_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

где $\mathbf{n}_r = \mathbf{r}/r$, \mathbf{n}_θ , \mathbf{n}_ϕ – ортогональные единичные векторы криволинейной системы [2]:

$$\mathbf{j} = \{j_r, j_\theta, j_\phi\} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ -2ik \frac{|A|^2}{r^2}, \frac{AA'^* - A^*A'}{r^3}, 0 \right\}.$$

Компонента потока $j_\phi = 0$, а j_θ убывает как $1/r^3$, поэтому на больших расстояниях от центра ею можно пренебречь. В результате остаётся только радиальная компонента:

$$j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{|A(\theta)|^2}{r^2}.$$

Так как $\mathbf{j} d\mathbf{S} = j_r dS$ – пропорционально числу частиц, проходящих в единицу времени через площадку $dS = r^2 d\Omega$ на сфере, то $j_r r^2 d\Omega$ – число частиц рассеянных в единицу времени в телесный угол $d\Omega$. Деля их на поток падающих частиц $j = \hbar k/m$ через единичную площадь, получаем сечение, которое полностью определяется *амплитудой рассеяния* $A(\theta)$:

$$d\sigma = |A(\theta)|^2 d\Omega. \quad (11.13)$$

Соответственно полное сечение (если оно конечно), равно интегралу:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |A(\theta)|^2 \sin \theta d\theta.$$

Когда амплитуда от углов не зависит $A(\theta) = A_0 = const$, полное сечение равно $\sigma = 4\pi|A_0|^2$. Сравнивая с классическим сечением рассеянием на шарике, можно сказать, что $2|A_0|$ в этом случае характеризует типичный радиус взаимодействия.

3 Парциальное разложение

При рассеянии частицы падают с различными прицельными расстояниями и, следовательно, имеют различные угловые моменты. Поэтому, решая стационарное уравнение Шрёдингера, мы должны записать решение в виде суперпозиции:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

и подобрать такое частное решение, которое имеет асимптотическое поведение в форме (11.12). Собственные функции момента импульса $Y_{lm}(\theta, \phi)$ запишем при $m \geq 0$ в виде:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m i^l \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}},$$

где $P_l^m(z)$ – т.н. присоединённые полиномы Лежандра. При $m = 0$ они равны полиномам Лежандра: $P_l^0(z) = P_l(z)$. Первые полиномы имеют вид (см. также стр. 93, 406):

$$P_0 = 1, \quad P_1 = z, \quad P_2 = \frac{1}{2} (3z^2 - 1), \quad P_3 = \frac{1}{2} (5z^3 - 3z).$$

Для сферически симметричного потенциала решение не должно зависеть от угла ϕ и можно отбросить все слагаемые с $m \neq 0$:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l R_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (11.14)$$

В результате, задача стоит в определении коэффициентов C_l , которые приводят к волновой функции (11.12).

Решение радиального уравнения Шрёдингера удобно записывать в виде действительной функции $R_l(r)$ (перенося комплексную фазу на коэффициенты разложения C_l). На больших расстояниях такая действительная функция должна быть суммой двух частных решений в виде сферических волн с одинаковыми амплитудами $R_l \approx (Ce^{ikr} + C^* e^{-ikr})/r$. Полагая $C = e^{i\beta}$, получаем $R_l \approx 2 \cos(kr + \beta)/r$ или:

$$R_l(r) \approx 2 \frac{\sin(kr + s_l - l\pi/2)}{r}, \quad (11.15)$$

где вместо фазы β введены параметры s_l , вообще говоря, зависящие от орбитального квантового числа l .

Плоскую волну можно разложить по полиномам Лежандра и при больших r это разложение имеет вид (стр. 406):

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right).$$

Поэтому из (11.12), (11.14), (11.15) имеем:

$$A(\theta) = r \{ \Psi(r, \theta) - e^{ikz} \} e^{-ikr} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta),$$

где

$$A_l = 2C_l e^{-ikr} \sin\left(kr + s_l - \frac{l\pi}{2}\right) - \frac{i^l}{k} (2l+1) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) e^{-ikr}.$$

Это выражение не должно зависеть от r . Поэтому, применяя формулу Эйлера для синусов и $i^l = e^{il\pi/2}$, получаем:

$$C_l = \frac{2l+1}{2k} i^l e^{is_l}.$$

Соответственно, разложение амплитуды рассеяния по полиномам Лежандра преобразует вид:

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2is_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (11.16)$$

Таким образом, амплитуда полностью определяется числами s_l . Они являются функциями l и энергии частицы $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Возводя в квадрат и интегрируя по телесному углу, с учётом ортогональности полиномов Лежандра, получаем полное сечение рассеяния:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 s_l. \quad (11.17)$$

Каждое слагаемое в этой сумме называется *парциальным* сечением рассеяния частицы с данным орбитальным моментом l .

Глава 12

Представление взаимодействия

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 S -оператор

- Пусть, гамильтониан системы можно разбить на две части:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где \hat{H}_0 называется *свободным гамильтонианом*, а \hat{V} – взаимодействием. В этом случае удобно ввести *представление взаимодействия* ($\hbar = 1$):

$$\hat{A}_I(t) = e^{\imath \hat{H}_0 t} \hat{A}(0) e^{-\imath \hat{H}_0 t}. \quad (12.1)$$

Будем считать, что \hat{H}_0 и \hat{V} являются операторами в представлении Шрёдингера и не зависят от времени (в представлении Гейзенberга \hat{H}_0 и \hat{V} по-отдельности зависят от времени: $\hat{V}(t) = e^{\imath \hat{H} t} \hat{V}(0) e^{-\imath \hat{H} t}$, хотя \hat{H} постоянен). Тогда в представлении взаимодействия оператор $\hat{A}_I(t)$ удовлетворяет уравнению:

$$\imath \frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_0]. \quad (12.2)$$

Если свободный гамильтониан \hat{H}_0 достаточно прост, это уравнение можно решить, получив эволюцию оператора со временем.

Подставляя в (12.1) соотношение (1.38) (умножив его слева на $e^{-\imath \hat{H} t}$, а справа на $e^{\imath \hat{H} t}$), получаем связь операторов в представлении взаимодействия $\hat{A}_I(t)$ и в представлении Гейзенберга $\hat{A}(t)$:

$$\hat{A}_I(t) = e^{\imath \hat{H}_0 t} e^{-\imath \hat{H} t} \hat{A}(t) e^{\imath \hat{H} t} e^{-\imath \hat{H}_0 t}. \quad (12.3)$$

В представлении взаимодействия от времени зависят как операторы, так и векторы состояния:

$$\langle \Phi | \hat{A}(t) | \Phi \rangle = \langle \Phi | e^{\imath \hat{H} t} e^{-\imath \hat{H}_0 t} \hat{A}_I(t) e^{\imath \hat{H}_0 t} e^{-\imath \hat{H} t} | \Phi \rangle = \langle \Phi, t | \hat{A}_I(t) | \Phi, t \rangle_I,$$

где вектор в представлении взаимодействия равен

$$| \Phi, t \rangle_I = e^{\imath \hat{H}_0 t} e^{-\imath \hat{H} t} | \Phi \rangle. \quad (12.4)$$

Дифференцируя это соотношение по времени:

$$\imath \frac{\partial | \Phi, t \rangle_I}{\partial t} = e^{\imath \hat{H}_0 t} (-\hat{H}_0 + \hat{H}) e^{-\imath \hat{H} t} | \Phi \rangle = e^{\imath \hat{H}_0 t} \hat{V}(0) e^{-\imath \hat{H} t} | \Phi \rangle,$$

получаем уравнение, похожее на уравнение Шрёдингера:

$$\imath \frac{\partial | \Phi, t \rangle_I}{\partial t} = \hat{V}_I(t) | \Phi, t \rangle_I, \quad (12.5)$$

но в котором стоит оператор $\hat{V}_I(t)$ в *представлении взаимодействия*.

- Введём оператор, зависящий от двух моментов времени:

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{\imath \hat{H}_0 t} e^{-\imath \hat{H} (t-t_0)} e^{-\imath \hat{H}_0 t_0}. \quad (12.6)$$

При совпадающих временах этот оператор становится единичным, а его эрмитово сопряжение переставляет местами времена:

$$\hat{S}(t_0, t_0) = \hat{1}, \quad \hat{S}^+(t, t_0) = \hat{S}(t_0, t). \quad (12.7)$$

Кроме этого, выполняется очень полезное свойство перемножения:

$$\hat{S}(t_1, t_2) \hat{S}(t_2, t_3) = \hat{S}(t_1, t_3). \quad (12.8)$$

При помощи S -оператора можно записать связь (12.4) векторов в представлении взаимодействия и Гейзенберга:

$$|\Phi, t\rangle_I = \hat{S}(t, 0) |\Phi\rangle. \quad (12.9)$$

Обратное преобразование имеет вид:

$$|\Phi\rangle = \hat{S}(0, t) |\Phi, t\rangle_I, \quad (12.10)$$

где учтено, что $\hat{S}(0, t) \hat{S}(t, 0) = \hat{S}(0, 0) = \hat{1}$. Из последних двух соотношений несложно найти, как связаны векторы представления взаимодействия в разные моменты времени:

$$|\Phi, t\rangle_I = \hat{S}(t, t_0) |\Phi, t_0\rangle_I, \quad (12.11)$$

где сделано преобразование $\hat{S}(t, 0) \hat{S}(0, t_0) = \hat{S}(t, t_0)$. Учитывая (12.5), можно сразу записать уравнение которому удовлетворяет S -оператор:

$$\imath \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{V}_I(t) \hat{S}(t, t_0). \quad (12.12)$$

Это уравнение можно получить и непосредственно дифференцируя определение (12.6). В общем случае $[\hat{H}_0, \hat{V}] \neq 0$, поэтому в определении $\hat{V}_I(t) = e^{\imath \hat{H}_0 t} \hat{V}(0) e^{-\imath \hat{H}_0 t}$ экспоненту нельзя перенести через $\hat{V}(0)$, и оператор $\hat{V}_I(t)$ зависит от времени.

Отметим также связь операторов в представлении взаимодействии и Гейзенберга (12.3):

$$\hat{A}_I(t) = \hat{S}(t, 0) \hat{A}(t) \hat{S}(0, t) \quad (12.13)$$

(везде выше время $t = 0$ соответствует представлению Шрёдингера).

2 Теория возмущений для S -оператора

- Найдём решение уравнения (12.12), считая, что оператор $\hat{V}_I(t)$ в некотором смысле мал (например, умножен на малую константу). Запишем ряд:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{1} + \hat{S}^{(1)} + \hat{S}^{(2)} + \dots,$$

где $\hat{S}^{(k)}$ имеет порядок малости $(\hat{V}_I)^k$ и подставим его в (12.12):

$$\imath \frac{\partial \hat{S}^{(1)}}{\partial t} + \imath \frac{\partial \hat{S}^{(2)}}{\partial t} + \dots = \hat{V}_I(t) + \hat{V}_I(t) \hat{S}^{(1)} + \hat{V}_I(t) \hat{S}^{(2)} + \dots$$

Приравнивая члены одного порядка малости, получаем:

$$\imath \frac{\partial \hat{S}^{(k)}}{\partial t} = \hat{V}_I(t) \hat{S}^{(k-1)}, \quad (12.14)$$

где $k = 1, 2, \dots$ и $\hat{S}^{(0)} = \hat{1}$ – единичный оператор. Это уравнение легко интегрируется:

$$\hat{S}^{(k)}(t, t_0) = -\imath \int_{t_0}^t V_I(\tau) \hat{S}^{(k-1)}(\tau, t_0) d\tau,$$

где начальное условие $\hat{S}(t_0, t_0) = \hat{1}$ уже выделено в нулевом приближении, поэтому $\hat{S}^{(k)}(t_0, t_0) = 0$ при $k > 0$. Таким образом:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{1} - \imath \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) + (-\imath)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_2) + \dots \quad (12.15)$$

Введём ступенчатую функцию Хевисайда $\theta(t)$, стр. 376, при помощи которой верхний предел интеграла в последнем слагаемом (12.15) заменим на t :

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \theta(t_1 - t_2) \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2). \quad (12.16)$$

При $t_2 > t_1$ функция $\theta(t_1 - t_2) = 0$, поэтому, хотя интегрирование по t_2 ведётся от t_0 до t , вклад в интеграл даёт только исходный диапазон $[t_0, t_1]$. Аналогично сделаем одинаковыми верхние пределы в интегралах для последующих приближений:

$$\hat{S}^{(k)}(t, t_0) = (-\imath)^k \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_k \theta(t_1 - t_2) \dots \theta(t_{k-1} - t_k) \hat{V}_I(t_1) \dots \hat{V}_I(t_k).$$

Этому выражению можно придать более компактный вид.

Для этого определим символ $T\{\dots\}$ хронологического порядка произведения операторов:

$$T\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\} = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2), & t_1 > t_2, \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1), & t_2 > t_1. \end{cases} \quad (12.17)$$

(операторы с большим временем всегда стоят левее операторов с меньшим временем). При помощи функции Хевисайда это произведение записывается следующим образом:

$$T\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\} = \theta(t_1 - t_2) \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) + \theta(t_2 - t_1) \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1).$$

При $t_1 = t_2$ хронологическое произведение требует доопределения (см., например, стр. ??). Впрочем, для использования $T\{\dots\}$ под интегралом, значение в одной точке роли не играет.

В случае в хронологического произведения k операторов они также стоят в порядке убывания времён в их аргументах. При записи такого произведения при помощи функции Хевисайда, необходимо написать $k!$ слагаемых со всеми возможными перестановками времён в произведении $\hat{A}_1(t_1)\dots\hat{A}_k(t_k)$, умноженные на $k - 1$ функций Хевисайда:

$$T\{\hat{A}_1(t_1)\dots\hat{A}_k(t_k)\} = \theta(t_1 - t_2)\theta(t_2 - t_3)\dots\theta(t_{k-1} - t_k) \hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)\dots\hat{A}_k(t_k) + \dots$$

Переименуем переменные интегрирования в правой части (12.16), переставив их местами (т.е. вместо t_1 пишем t_2 и наоборот). После этого сложим два таких *равных* интеграла, разделив сумму на 2:

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \theta(t_1 - t_2) \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T\{\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2)\}.$$

Аналогично, произвольный член ряда равен:

$$\hat{S}^{(k)}(t, t_0) = (-i)^k \frac{1}{k!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_k T\{\hat{V}_I(t_1) \dots \hat{V}_I(t_k)\}, \quad (12.18)$$

где деление на $k!$ соответствует симметризации (по всем перестановкам) k времён в переменных интегрирования. Сумму таких слагаемых можно формально записать в следующем виде:

$$\hat{S}(t, t_0) = T\left\{ \exp\left(-i \int_{t_0}^t \hat{V}_I(\tau) d\tau \right) \right\}. \quad (12.19)$$

При этом предполагается, что $T\{A + B\} = T\{A\} + T\{B\}$. Выражение (12.19) является решением уравнения (12.12) в виде бесконечного ряда (обычно приходится работать не с экспонентой, а с её разложением).

3 S -оператор в энергетическом представлении

Найдём матричные элементы S -оператора $\hat{S}(t, t_0)$ в базисе “свободного” гамильтониана \hat{H}_0 , спектр которого будем считать дискретным:

$$\hat{H}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \quad \langle k|n\rangle = \delta_{kn}, \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}.$$

Результат, впрочем, не зависит от этого предположения. Например, для свободной частицы $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ спектр непрерывный. В этом случае, вместо базисных векторов $|n\rangle$ необходимо везде поставить собственные векторы оператора импульса $|\mathbf{p}\rangle$, а суммы по n заменить на интегралы по $d^3\mathbf{p}$. Непрерывный случай широко используется при описании рассеяния частиц и будет проиллюстрирован в следующем разделе.

Запишем сначала матричные элементы оператора взаимодействия в представлении взаимодействия. При этом будем считать, что в представлении Шрёдингера элементы $V_{kn} = \langle k|\hat{V}|n\rangle$ не зависят от времени (как и выше $\hbar = 1$):

$$\langle k|\hat{V}_I(t)|n\rangle = \langle k|e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t}|n\rangle = e^{i(E_k - E_n)t} V_{kn}, \quad (12.20)$$

В первом порядке по взаимодействию (12.15) для S -оператора имеем:

$$\langle k|\hat{S}^{(1)}|n\rangle = -i \int_{t_0}^t \langle k|\hat{V}_I(t_1)|n\rangle dt_1 = -i V_{kn} \int_{t_0}^t e^{i(E_k - E_n)t} dt.$$

Во многих задачах (особенно при описании рассеяния) интересуются пределом $t \rightarrow \infty$ и $t_0 \rightarrow -\infty$. В этом случае, интегрирование охватывает весь диапазон времени и интеграл пропорционален функции Дирака (A.21), стр. 340:

$$\langle k|\hat{S}_{\infty}^{(1)}|n\rangle = -2\pi i \delta(E_k - E_n) V_{kn}. \quad (12.21)$$

Для второй поправки воспользуемся выражением (12.16) без хронологического упорядочивания (но с θ -функцией):

$$\langle k|\hat{S}_{\infty}^{(2)}|n\rangle = (-i)^2 \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \theta(t_1 - t_2) \langle k|V_I(t_1)|q\rangle \langle q|V_I(t_2)|n\rangle,$$

где между потенциалами вставлен единичный оператор (сумма по $|q\rangle\langle q|$).

Воспользуемся интегральным представлением функции Хевисайда (A.6):

$$\theta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i e^{-iEt}}{E + i\epsilon} \frac{dE}{2\pi}, \quad (12.22)$$

которое несложно (стр. 335) проверить при помощи теоремы Коши (стр. 386). Кроме этого, подставим матричные элементы (12.20):

$$\langle k | \hat{S}_{\infty}^{(2)} | n \rangle = (-i)^2 \sum_q V_{kq} V_{qn} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \frac{e^{-iE(t_1-t_2)+i(E_k-E_q)t_1+i(E_q-E_n)t_2}}{E + i\epsilon} \frac{i dE}{2\pi}$$

и проинтегрируем по временам:

$$= (-i)^2 i \frac{(2\pi)^2}{2\pi} \sum_q V_{kq} V_{qn} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(E_k - E_q - E) \delta(E_q - E_n + E)}{E + i\epsilon} dE.$$

Наконец, проводя интегрирование по E , получаем:

$$\langle k | \hat{S}_{\infty}^{(2)} | n \rangle = -2\pi i \delta(E_k - E_n) \sum_q \frac{V_{kq} V_{qn}}{E_k - E_q + i\epsilon}. \quad (12.23)$$

Аналогично находится следующая поправка:

$$\langle k | \hat{S}_{\infty}^{(3)} | n \rangle = -2\pi i \delta(E_k - E_n) \sum_{q,m} \frac{V_{kq} V_{qm} V_{mn}}{(E_k - E_q + i\epsilon)(E_k - E_m + i\epsilon)}. \quad (12.24)$$

Несложно видеть, что все члены ряда умножаются на функцию Дирака $\delta(E_k - E_n)$, что отражает закон сохранения энергии. Поэтому удобно её выделить:

$$\langle k | \hat{S}_{\infty} | n \rangle \equiv \langle k | \hat{S}(\infty, -\infty) | n \rangle = \delta_{kn} - 2\pi i \delta(E_k - E_n) A_{kn}, \quad (12.25)$$

где введены матричные элементы:

$$A_{kn} = V_{kn} + \sum_q \frac{V_{kq} V_{qn}}{E_k - E_q} + \sum_{q,m} \frac{V_{kq} V_{qm} V_{mn}}{(E_k - E_q)(E_k - E_m)} + \dots, \quad (12.26)$$

где для краткости опущен комплексный сдвиг $+i\epsilon$ полюсов в знаменателях. Последующие члены разложения имеют такую же структуру: в числителе добавляются множители $V_{qq'}$, а в знаменателе множители $E_k - E_{q'} + i\epsilon$. По всем промежуточным энергиям (отличным от E_k и E_n) производится суммирование.

4 Рассеяние на потенциале $V(x) = -g \delta(x)$

• Повторим вычисления коэффициента прохождения для одномерного рассеяния на потенциале $V(x) = -g \delta(x)$ (стр. 58), используя нестационарный подход. Пусть в начальный момент времени t_0 частица находилась в состоянии $|p\rangle$. Вектор $|p\rangle$ эволюционирует в соответствии с уравнением Шрёдингера и спустя время $T = t - t_0$ становится равным:

$$|p, T\rangle = e^{-i\hat{H}T} |p\rangle.$$

Соответственно, амплитуда вероятности обнаружить у частицы импульс k равна $\langle k | p, T \rangle$. Чтобы получить вероятность, необходимо учесть, что вектор $|p, T\rangle$ не нормирован на единицу:

$$\langle p, T | p, T \rangle = \langle p | p \rangle = \delta(0).$$

Поэтому вероятность измерить импульс в интервале $(k, k + dk)$ необходимо вычислять при помощи следующей формулы:

$$dW_k = \frac{|\langle k | p, T \rangle|^2}{\langle p, T | p, T \rangle} dk. \quad (12.27)$$

Действительно, интеграл этого выражения по всем значениям k даёт единицу (суммарная вероятность):

$$\int dW_k = \int \frac{\langle p, T | k \rangle \langle k | p, T \rangle}{\langle p, T | p, T \rangle} dk = \frac{\langle p, T | p, T \rangle}{\langle p, T | p, T \rangle} = 1.$$

Перепишем амплитуду вероятности через S -оператор (12.6):

$$\langle k | p, T \rangle = \langle k | e^{-i\hat{H}T} | p \rangle = \langle k | e^{-i\hat{H}_0 t} \hat{S}(t, t_0) e^{i\hat{H}_0 t_0} | p \rangle.$$

Так как $\hat{H}_0 |p\rangle = E_p |p\rangle$, получаем с точностью до фазового множителя, матричные элементы S -оператора:

$$\langle k | p, T \rangle = e^{-iE_k t + iE_p t_0} \langle k | \hat{S}(t, t_0) | p \rangle. \quad (12.28)$$

Будем считать, что начальный момент времени относился к отдалённому прошлому $t_0 = -\infty$, а конечный происходил в будущем $t = \infty$ и воспользуемся результатами предыдущего раздела. Для этого найдём матричные элементы потенциала взаимодействия $\hat{V} = g \delta(\hat{x})$ в базисе свободного гамильтониана $\hat{H}_0 = \hat{p}^2$ ($m = 1/2$):

$$V_{kp} = \langle k | \hat{V} | p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g \delta(x) \langle k | x \rangle \langle x | p \rangle dx = \frac{g}{2\pi},$$

где вставлен интеграл по базису оператора координаты $|x\rangle\langle x|$ и учтены значения собственных векторов оператора импульса (1.59).

В соответствии с (12.25) имеем:

$$\langle k | \hat{S}_\infty | p \rangle = \delta(k - p) - 2\pi i \delta(E_k - E_p) A_{kp},$$

где вместо символа Кронекера поставлена функция Дирака (непрерывный спектр). Функцию Дирака от разности энергий можно переписать следующим образом (A.4), стр. 334:

$$\delta(E_k - E_p) = \delta(k^2 - p^2) = \frac{\delta(k - p) + \delta(k + p)}{2|k|},$$

что проверяется интегрированием с произвольной функцией $f(k)$. Далее будем интересоваться вероятностью прохождения частицы через потенциал (импульс частицы равен исходному $k = p > 0$). Поэтому вторую функцию Дирака можно опустить. Для получения матричных элементов (12.26):

$$A_{kp} = \frac{g}{2\pi} + \frac{g^2}{(2\pi)^2} \int \frac{dq}{k^2 - q^2} + \frac{g^3}{(2\pi)^3} \left[\int \frac{dq}{k^2 - q^2} \right]^2 + \dots,$$

осталось вычислить простой интеграл (вспоминаем о сдвиге $+i\epsilon$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{k^2 - q^2 + i\epsilon} = - \oint_C \frac{dq}{(q - k - i\epsilon)(q + k + i\epsilon)} = \frac{-2\pi i}{q + k + i\epsilon} \Big|_{q=k+i\epsilon} = -\frac{i\pi}{k}.$$

В первом равенстве контур интегрирования замкнут на бесконечности в верхней комплексной полуплоскости q , так как подынтегральная функция там равна нулю. Кроме этого, знаменатель переписан эквивалентным образом (в пределе $\epsilon \rightarrow +0$ произведение $2k\epsilon$ при конечном $k > 0$ можно заменить на ϵ и $\epsilon^2 \ll \epsilon$). Во втором равенстве применена теорема Коши (стр. 386). Таким образом:

$$A_{kp} = \frac{g}{2\pi} \left[1 - \frac{i g}{2k} + \left(\frac{i g}{2k} \right)^2 - \dots \right] = \frac{g}{2\pi} \left[1 + \frac{i g}{2k} \right]^{-1}.$$

Собирая всё вместе, получим матричные элементы S -оператора:

$$\langle k | \hat{S}_\infty | p \rangle = \delta(k - p) \left[1 + \frac{i g}{2k} \right]^{-1}. \quad (12.29)$$

При возведении в квадрат амплитуды (12.27) возникает квадрат функции Дирака: $\delta^2(k - p) = \delta(k - p) \delta(0)$. Интегрируя по dk в окрестности импульса p , получаем, вероятность обнаружить импульс p (частица прошла через потенциал, $k^2 = E$):

$$W = \left[1 + \frac{g^2}{4E} \right]^{-1}, \quad (12.30)$$

что совпадает с выражением (2.35), полученным стационарным методом.

5 Сечение рассеяния

- Разобъём гамильтониан на свободную часть \hat{H}_0 и собственно взаимодействие (потенциал):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r).$$

Пусть в начальный момент времени t_0 мы измерили импульс частицы и получили значение \mathbf{k} . Так как $[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] \neq 0$, состояние $|\mathbf{k}, \rangle$ эволюционирует со временем. Амплитуда вероятности получить через время $t - t_0$ при измерении импульса значение \mathbf{p} , равна:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{k}, t - t_0 \rangle = \langle \mathbf{p} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{p} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{S}(t, t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0} | \mathbf{k} \rangle,$$

где введен *оператор эволюции*:

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0}. \quad (12.31)$$

Несложно проверить, что:

$$\hat{S}(t_0, t_0) = \hat{1}, \quad \hat{S}(t_1, t_2) \hat{S}(t_2, t_3) = \hat{S}(t_1, t_3), \quad \hat{S}^+(t, t_0) = \hat{S}(t_0, t).$$

Продифференцируем оператор $\hat{S}(t, t_0)$ по времени t :

$$\frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} (\hat{H}_0 - \hat{H}) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0}.$$

Отсюда следует, что оператор эволюции должен удовлетворять следующему дифференциальному уравнению:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{V}_I(t) \hat{S}(t, t_0), \quad (12.32)$$

где введен оператор потенциала в *представлении взаимодействия*:

$$\hat{V}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}. \quad (12.33)$$

Аналогично в этом представлении определяется любой оператор:

$$\hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{A}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t},$$

где $\hat{A}(0)$ – оператор в представлении Шрёдингера. Оператор $\hat{A}_I(t)$ удовлетворяет уравнению Гейзенберга в котором стоит не полный гамильтониан \hat{H} , а его первая часть \hat{H}_0 :

$$i\hbar \frac{d \hat{A}_I}{dt} = [\hat{A}_I, \hat{H}_0]. \quad (12.34)$$

Свяжем матричные элементы оператора эволюции с сечением рассеяния.

Векторы $|\mathbf{p}\rangle$ и $|\mathbf{k}\rangle$ являются собственными векторами гамильтониана свободной частицы $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$. Обозначая $E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m$, имеем:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{k}, t - t_0 \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}}t - E_{\mathbf{k}}t_0)} \langle \mathbf{p} | \hat{S}(t, t_0) | \mathbf{k} \rangle.$$

Пусть начальный импульс \mathbf{k} измерялся в очень отдалённом прошлом ($t_0 \rightarrow -\infty$), а итоговый импульс \mathbf{p} – в будущем ($t \rightarrow +\infty$). Соответствующий оператор будем помечать значком бесконечности: $\hat{S}_{\infty} = \hat{S}(\infty, -\infty)$. Вместо него удобно определить матричные элементы *амплитуды рассеяния* \hat{A}_{∞} при помощи следующего соотношения:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - 2\pi i \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) \langle \mathbf{p} | \hat{A}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle. \quad (12.35)$$

Первое слагаемое соответствует нерассеявшимся частицами, а во втором выделена функция Дирака $\delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})$, отражающая закон сохранения кинетической энергии частицы до и после рассеяния. Множитель $2\pi i$ введен для удобства.

Функция $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k})$ имеет размерность импульса в минус третьей степени: $1/P^3$ (интеграл от импульсного объёма с δ -функцией даёт единицу). Эту же размерность имеет $\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle$. Функция Дирака от энергии имеет размерность $1/E$, поэтому из (12.35) следует, что амплитуда рассеяния $\langle \mathbf{p} | \hat{A}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle$ имеет размерность E/P^3 .

В первом порядке по \hat{V}_I решение уравнения (12.32) имеет вид:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_I(\tau) d\tau + \dots,$$

что проверяется прямой подстановкой и отбрасыванием слагаемого квадратичного по потенциалу. В результате:

$$2\pi\hbar \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) \langle \mathbf{p} | \hat{A}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \mathbf{p} | \hat{V}_I | \mathbf{k} \rangle d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}})\tau} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle d\tau,$$

где во втором слагаемом подставлено определение (12.33). Так как оператор \hat{V} не зависит от времени, его матричный элемент можно вынести за интеграл. Этот интеграл пропорционален функции Дирака, поэтому в этом приближении матрица амплитуды рассеяния равна потенциалу в импульсном представлении:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{A}_{\infty} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle. \quad (12.36)$$

Последующие поправки к амплитуде рассеяния будут получены в конце раздела.

• На опыте измеряется импульс рассеянных частиц, поэтому мы будем опускать в (12.35) первое слагаемое. Это означает, что регистрируются только те частицы, которые изменили направление своего импульса, т.е. $\mathbf{p} \neq \mathbf{k}$. Так как мы имеем дело с непрерывными собственными значениями оператора импульса, соответствующие собственные векторы нормированы не на единицу, а на функцию Дирака. При $T = 0$ полная вероятность получить любой конечный импульс \mathbf{p} для амплитуды вероятности $\langle \mathbf{p} | \mathbf{k}, T \rangle$ равна:

$$\int |\langle \mathbf{p} | \mathbf{k} \rangle|^2 d^3\mathbf{p} = \int \delta^2(\mathbf{p} - \mathbf{k}) d^3\mathbf{p} = \delta(\mathbf{0}) = \int e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \cdot \mathbf{0}} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3},$$

где V – объём “всего пространства”, равный “бесконечности”. Поэтому для единичной нормировки вероятности квадрат амплитуды необходимо разделить на $V/(2\pi\hbar)^3$: В результате, вероятность рассеяться равна

$$dW_{\mathbf{p}} = \frac{|\langle \mathbf{p} | \mathbf{k}, T \rangle|^2}{V/(2\pi\hbar)^3} d^3\mathbf{p} = \frac{(2\pi)^5 \hbar^3}{V} \delta^2(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) |\langle \mathbf{p} | A_{\infty} | \mathbf{k} \rangle|^2 d^3\mathbf{p}.$$

Перейдём к сферическим координатам в импульсном пространстве с элементарным объёмом $d^3\mathbf{p} = p^2 dp d\Omega_{\mathbf{p}}$. Вместо длины импульса введём кинетическую энергию частицы, сделав замену $p = \sqrt{2mE_{\mathbf{p}}}$. В результате:

$$dW_{\mathbf{p}} = \frac{(2\pi)^5 \hbar^3}{2V} \delta^2(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) |\langle \mathbf{p} | A_{\infty} | \mathbf{k} \rangle|^2 (2m)^{3/2} \sqrt{E_{\mathbf{p}}} dE_{\mathbf{p}} d\Omega_{\mathbf{p}}.$$

Энергия сохраняется, поэтому проинтегрируем по всем значениям $E_{\mathbf{p}}$ от 0 до бесконечности. Так как под интегралом стоит с δ -функцией, имеем:

$$dW_{\Omega} = \frac{(2\pi)^5 \hbar^3}{2V} (2m)^{3/2} \delta(0) \sqrt{E_{\mathbf{k}}} |\langle \mathbf{p} | A_{\infty} | \mathbf{k} \rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}$$

(у вероятности изменен индекс на Ω , чтобы подчеркнуть, что это вероятность рассеяться в телесный угол).

В силу интегрального представления функции Дирака при $E = 0$ справедливо следующее выражение:

$$\delta(0) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} e^{\frac{i}{\hbar} t \cdot 0} \frac{dt}{2\pi\hbar} \rightarrow \frac{T}{2\pi\hbar},$$

где T – интервал “всего времени” в течении которого проводится измерение начиная с $t_0 = -\infty$ до $t = \infty$. Естественно, при $T \rightarrow \infty$, мы как и положено, получим $\delta(0) = \infty$. Однако пока мы считаем время T , как и выше объём V , очень большим, но конечным.

При изучении рассеяния рассматриваются не одиночные измерения, а поток постоянно падающих на источник поля частиц с импульсом \mathbf{k} . Поэтому вероятность рассеяться отнесём к единице времени $T = t - t_0$:

$$\frac{dW_\Omega}{T} = \frac{8\pi^4 \hbar^2 (2m)^{3/2}}{V} \sqrt{E_{\mathbf{k}}} |\langle \mathbf{p} | A_\infty | \mathbf{k} \rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}.$$

Время T , прошедшее между двумя измерениями импульсов, сокращается с тем же временем, находящимся в выражении для $\delta(0)$. Умножение этого выражения на число частиц N даст числитель в определении сечения $d\sigma$. В знаменателе определения стоит поток частиц j через единицу площади в единицу времени. Выделим в падающем потоке цилиндр, ось которого ориентирована вдоль скорости частиц v . За время T основание цилиндра S пересекут частицы, находящиеся на расстоянии от основания на vT . Поэтому, если плотность частиц равна $\rho = N/V$, то поток и сечение рассеяния равны

$$j = \frac{\rho S T v}{T S} = \rho v = \frac{N}{V} v, \quad d\sigma = \frac{N dW_\Omega / T}{(N/V) v}.$$

В результате, объём V сокращается (цилиндр может быть выбран сколь угодно большим, равным объёму “всего пространства” V) и мы окончательно получаем:

$$d\sigma = 16\pi^4 \hbar^2 m^2 |\langle \mathbf{p} | A_\infty | \mathbf{k} \rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (12.37)$$

где скорость v выражена через энергию $E_{\mathbf{k}} = mv^2/2$. Таким образом, матричные элементы амплитуды рассеяния полностью определяют сечение.

В первом приближении по потенциалу \hat{V} , амплитуда рассеяния определяется соотношением (12.36). Матричные элементы $V_{\mathbf{pk}} = \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle$ потенциала взаимодействия равны

$$V_{\mathbf{pk}} = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle d^3 \mathbf{r} = \int e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \frac{d^3 \mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (12.38)$$

где $V(r)$ – обычная функция координат (потенциал в координатном представлении). Таким образом, сечение рассеяния равно:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \approx \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \right|^2. \quad (12.39)$$

Это выражение называют *борновским приближением*. Оно достаточно хорошо работает, если потенциал в некотором смысле мал (или скорость частиц велика).

6 Теория возмущения для S -оператора

- Обозначая $V_{\mathbf{pk}} = \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle$, запишем импульсные матричные элементы потенциала взаимодействия $V(\mathbf{x})$ в представлении взаимодействия:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{V}_I(t) | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{p} | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} | \mathbf{k} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) t} V_{\mathbf{pk}}.$$

В первом порядке матричные элементы оператора \hat{S}_{∞} равны:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty}^{(1)} | \mathbf{k} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) t} V_{\mathbf{pk}} dt = -2\pi i \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{k}}) V_{\mathbf{pk}}, \quad (12.40)$$

где учтено интегральное представление для функции Дирака. Для второй поправки воспользуемся выражением (??) без хронологического упорядочивания (но с θ -функцией):

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty}^{(2)} | \mathbf{k} \rangle = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \theta(t_1 - t_2) \langle \mathbf{p} | V_I(t_1) | \mathbf{q} \rangle \langle \mathbf{q} | V_I(t_2) | \mathbf{k} \rangle d^3 \mathbf{q},$$

где между потенциалами вставлен единичный оператор (интеграл по \mathbf{q}). Подставим матричные элементы для \hat{V}_I , и для θ -функции (??) её интегральное представление (интеграл по $\omega = E/\hbar$):

$$\left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E(t_1 - t_2) + \frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}}) t_1 + \frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}) t_2}}{E/\hbar + i\epsilon} V_{\mathbf{pq}} V_{\mathbf{qk}} d^3 \mathbf{q} \frac{idE}{2\pi\hbar}.$$

Интегрируя по временам, получаем:

$$\left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 i \frac{(2\pi\hbar)^2}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}} - E) \delta(E_{\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + E)}{E/\hbar + i\epsilon} V_{\mathbf{pq}} V_{\mathbf{qk}} d^3 \mathbf{q} dE.$$

Наконец, проводя интегрирование по E , окончательно имеем:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty}^{(2)} | \mathbf{k} \rangle = -2\pi i \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{V_{\mathbf{pq}} V_{\mathbf{qk}}}{E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}} + i\epsilon} d^3 \mathbf{q}, \quad (12.41)$$

где $\hbar\epsilon$ заменено на ϵ , т.к. по этому параметру берётся предел $\epsilon \rightarrow 0$. Абсолютно аналогично находится следующая поправка:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_{\infty}^{(3)} | \mathbf{k} \rangle = -2\pi i \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}}) \int \frac{V_{\mathbf{pq}_1} V_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} V_{\mathbf{q}_2 \mathbf{k}} d^3 \mathbf{q}_1 d^3 \mathbf{q}_2}{(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}_1} + i\epsilon)(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}_2} + i\epsilon)} \quad (12.42)$$

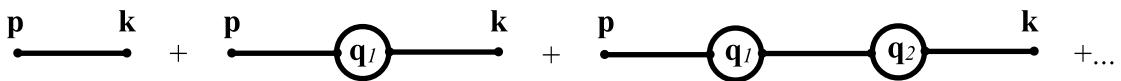
Несложно видеть, что все члены ряда умножаются на $\delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})$, что отражает закон сохранения энергии.

Таким образом, амплитуда рассеяния (12.35), с точностью до третьего порядка малости по $V_{\mathbf{p}\mathbf{k}}$, имеет вид:

$$\langle \mathbf{p} | \hat{A}_\infty | \mathbf{k} \rangle = V_{\mathbf{p}\mathbf{q}} + \int \frac{V_{\mathbf{p}\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}\mathbf{k}} d^3\mathbf{q}}{E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}} + i\epsilon} + \int \frac{V_{\mathbf{p}\mathbf{q}_1} V_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2} V_{\mathbf{q}_2\mathbf{k}} d^3\mathbf{q}_1 d^3\mathbf{q}_2}{(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}_1} + i\epsilon)(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}_2} + i\epsilon)}.$$

Последующие члены разложения имеют такую же структуру: в числителе добавляются множители $V_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$, а в знаменателе множители $E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}'} + i\epsilon$. По всем импульсам, отличным от начального \mathbf{k} и конечного \mathbf{p} проводится интегрирование.

Полученный ряд можно изобразить графически в виде следующей диаграммы:



где каждому элементу (отрезку и окружности) соответствуют следующие множители:

$$\begin{array}{ccc} \text{---} & & \text{---} \\ \mathbf{p} & \text{---} & \mathbf{k} \\ \text{---} & & \text{---} \end{array} = V_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \quad \text{---} \circ \text{---} = \frac{d\mathbf{q}}{E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}} + i\epsilon}$$

Приведём ряд потенциалов для которых матричные элементы в импульсном представлении $V_{\mathbf{p}\mathbf{k}} = V(\mathbf{p} - \mathbf{k})$ получаются в результате несложного интегрирования.

Экранированный кулоновский потенциал ($\ll H??$):

$$V(\mathbf{x}) = \frac{\alpha}{r} e^{-\lambda r} \quad \Rightarrow \quad V(\mathbf{p}) = \frac{\alpha/(2\pi^2\hbar)}{\mathbf{p}^2 + \lambda^2\hbar^2}.$$

Если устремить λ к нулю, получим фурье-образ обычного кулоновского потенциала, который приводит к формуле Резерфорда (11.11) в борновском приближении (12.39).

Экспоненциальный потенциал:

$$V(\mathbf{x}) = \alpha e^{-\lambda r} \quad \Rightarrow \quad V(\mathbf{p}) = \frac{\alpha\lambda\hbar/\pi^2}{(\mathbf{p}^2 + \lambda^2\hbar^2)^2}.$$

Его импульсное представление получается из экранированного кулоновского потенциала дифференцированием по параметру λ .

Потенциальная яма радиуса a и глубиной V_0 (при $r < a$, $V(\mathbf{x}) = -V_0$):

$$V(\mathbf{p}) = \frac{V_0 a / (2\pi^2\hbar)}{\mathbf{p}^2} \left[\cos\left(\frac{ap}{\hbar}\right) - \frac{\hbar}{ap} \sin\left(\frac{ap}{\hbar}\right) \right].$$

В качестве упражнения ($\ll H??$) стоит получить сечение рассеяния на такой яме в борновском приближении.

Часть IV

Нерелятивистская теория поля

Глава 14

Нерелятивистская теория поля

Эта глава посвящена квантовой теории поля в нерелятивистской квантовой механике. Сначала мы рассмотрим систему тождественных частиц и покажем, как можно записать её гамильтониан без явного указания числа частиц. Для этого потребуется, вместо операторов координаты и импульса, ввести полевые операторы. Эти операторы, действуя на вакуумный вектор (состояние в котором нет частиц), создают состояния с требуемым числом частиц.

Затем будет изучена полевая модель Т.Д. Ли (1954), в которой число частиц не сохраняется и возможны реакции распада и синтеза. Эта модель отражает многие свойства реальных квантово-полевых теорий и при этом может быть точно решена. На её примере введётся понятие перенормировки массы.

Последние два раздела посвящены понятию квазичастиц, которые возникают в системе связанных осцилляторов. Мы рассмотрим простейшую модель твёрдого тела в которой могут возникать фононы – кванты тепловых возбуждений. Поля часто могут рассматриваться как классические функции координат и времени, а их кванты (после квантования поля) являются аналогом фононов в физике твёрдого тела.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

1 Полевой формализм

- Введём полевой оператор $\hat{\varphi}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}$, где \mathbf{x} – это обычная координата, нумерующая совокупность операторов $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}$, заданных в каждой точке пространства. Это отличает их, например, от оператора потенциала $U(\hat{\mathbf{x}})$, который является функцией оператора координаты $\hat{\mathbf{x}}$. Кроме этого, введём вектор *вакуумного состояния* $| \rangle$, соответствующего отсутствию частиц. По определению, состояние в котором находятся N частиц с координатами $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$, получается из вакуумного, действием на него эрмитово сопряженных полевых операторов:

$$|\mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_1\rangle = \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_N}^+ \dots \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ | \rangle. \quad (14.1)$$

Будем считать, что полевые операторы бозонов (тождественные частицы) удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}] = [\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+] = 0, \quad [\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \equiv \delta_{\mathbf{xy}}. \quad (14.2)$$

Первые два коммутатора приводят к правильными свойствами симметрии вектора состояния N тождественных частиц. Например:

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ | \rangle = \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ | \rangle \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle = |\mathbf{y}, \mathbf{x}\rangle.$$

Дополнительно будем предполагать, что полевой оператор без эрмитового сопряжения, действуя на вакуумное состояние, даёт ноль и вакуумный вектор нормирован на единицу:

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{x}} | \rangle = 0, \quad \langle | \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ = 0, \quad \langle | \rangle = 1 \quad (14.3)$$

(второе соотношение получается из первого при помощи эрмитового сопряжения и оператор $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+$ действует налево).

Запишем следующий оператор Гамильтона ($\hbar = 1$):

$$\hat{H} = \int \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \left(-\frac{\Delta}{2m} + U(\mathbf{x}) \right) \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} d^3\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y}, \quad (14.4)$$

где оператор Лапласа Δ действует на координаты полевого оператора $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}$ и $W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} = W(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ – симметричный потенциал парного взаимодействия частиц: $W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} = W_{\mathbf{y}, \mathbf{x}}$. Покажем, что (14.4), с учётом коммутационных соотношений (14.2), эквивалентен обычному гамильтониану системы N частиц (7.1).

Рассмотрим два бозона и запишем уравнение на собственные значения гамильтониана в координатном представлении:

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle, \quad \Psi_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | E \rangle = \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}| E \rangle.$$

Полевые операторы стоят без эрмитового сопряжения, так как:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | = |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 \rangle^+ = \left(\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ | \right)^+ = \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}|.$$

Найдём $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H} | E \rangle$. Для сокращения обозначений введём оператор

$$\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} = -\frac{\Delta}{2m} + U(\mathbf{x}), \quad (14.5)$$

действующий на координаты полевого оператора. Кроме этого, разобьём гамильтониан на две части $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$, описывающие невзаимодействующие частицы: \hat{H}_0 и их взаимодействие: \hat{W} . Вычислим:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = \int \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}| E \rangle d^3 \mathbf{x}.$$

Для этого поменяем местами операторы $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}$, $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+$, учитывая коммутационные соотношения (14.2):

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = \int \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} (\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} + \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{x}}) \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}| E \rangle d^3 \mathbf{x}.$$

В первом слагаемом снова поменяем местами $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}$, $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+$ и, учитывая второе соотношение (14.3), получаем:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = \int \langle |(\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} \delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}} + \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{x}}) \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}| E \rangle d^3 \mathbf{x}.$$

Интегрируя с функцией Дирака, окончательно имеем:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = (\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_2}) \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}| E \rangle = (\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_2}) \Psi_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2).$$

Также проводятся вычисления для члена взаимодействия $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{W}_0 | E \rangle$:

$$\frac{1}{2} \int (\delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}} \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{y}} + \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{x}} \delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{y}}) W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}| E \rangle d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} = W_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2} \Psi_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2).$$

В результате получается обычный двухчастичный гамильтониан:

$$(\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_2} + W_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2}) \Psi_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E \Psi_E(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (14.6)$$

Аналогичные вычисления для трёх и более частиц приводят к соответствующим N -частичным уравнениям на собственные значения.

- В полевом подходе фермионы описываются аналогично бозонам, но операторы поля удовлетворяют не коммутационным, а антисимметрическим соотношениям:

$$\{\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}\} = \{\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+\} = 0, \quad \{\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \equiv \delta_{\mathbf{xy}}, \quad (14.7)$$

где $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$. Остальные определения остаются без изменений. Благодаря антисимметрированию, получаются антисимметричные векторы состояний относительно перестановки частиц. Например, для двух фермионов имеем:

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ | \rangle = -\hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ | \rangle \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle = -|\mathbf{y}, \mathbf{x}\rangle.$$

Построение N -частичных уравнений для фермионов из гамильтониана (14.4) проводится точно также как и для бозонов. Так, для части гамильтониана $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle$ получаем:

$$\int \langle | \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} | E \rangle d^3 \mathbf{x} = \int \langle | \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} (-\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} + \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{x}}) \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} | E \rangle d^3 \mathbf{x},$$

где во втором равенстве полевые функции переставлены в соответствии с антисимметрическими соотношениями (14.7), что дало знак минус. В первом слагаемом снова меняем местами $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}, \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+$ так, чтобы оператор $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+$ добрался до левого вакуумного состояния и уничтожился:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = \int \langle | (-\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} \delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}} + \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \delta_{\mathbf{x}_2 \mathbf{x}}) \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} | E \rangle d^3 \mathbf{x}.$$

Проинтегрируем с функциями Дирака:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = -\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} \langle | \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} | E \rangle + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_2} \langle | \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2} | E \rangle$$

и переставим операторы в первом слагаемом в правильном порядке (со знаком минус!):

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{H}_0 | E \rangle = (\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} + \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_2}) \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | E \rangle.$$

Заметим, что мы записываем координаты внутри вектора состояния в том порядке, в котором действуют операторы на вакуумный вектор. При этом происходит как-бы проталкивание вперёд координат:

$$\varphi_{\mathbf{x}}^+ \varphi_{\mathbf{y}}^+ \varphi_{\mathbf{z}}^+ | \rangle = \varphi_{\mathbf{x}}^+ \varphi_{\mathbf{y}}^+ | \mathbf{z} \rangle = \varphi_{\mathbf{x}}^+ | \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = | \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle.$$

Для фермионов важным является порядок операторов гамильтониана (14.4), в члене взаимодействия частиц. Если бы вместо $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}$ стояло $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}$ мы бы получили неверный знак в двухчастичном уравнении Шрёдингера. Предлагается это проверить в качестве упражнения.

• Преимущество полевого подхода состоит в том, что в гамильтониане не фиксируется число частиц и он справедлив для любого их количества. Кроме этого, полевой подход оказывается единственным возможным в релятивистской теории, когда при взаимодействии частицы могут рождаться и уничтожаться. В этом случае их количество не сохраняется и отсутствие в гамильтониане явного указания числа частиц становится очень удобным при описании физики соответствующих процессов.

В нерелятивистской теории, обычно, число частиц сохраняется. Введём оператор *числа частиц*:

$$\hat{N} = \int \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x} \quad (14.8)$$

и найдём его действие на одиночастичное состояние бозона:

$$\hat{N} |\mathbf{x}_1\rangle = \int \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ |\rangle d^3 \mathbf{x} = \int \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ (\hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} + \delta_{\mathbf{x}\mathbf{x}_1}) |\rangle d^3 \mathbf{x} = |\mathbf{x}_1\rangle,$$

где учтено, что $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}} |\rangle = 0$ и проведено интегрирование с функцией Дирака. Аналогично можно проверить, что

$$\hat{N} |\mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_1\rangle = N |\mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_1\rangle. \quad (14.9)$$

Оператор числа частиц (14.8) коммутирует с гамильтонианом (14.4):

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0, \quad (14.10)$$

что и отражает факт сохранения числа частиц.

Ещё одна сохраняющаяся величина системы частиц – это полный импульс, оператор которого в полевом формализме имеет вид:

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \varphi_{\mathbf{x}}^+ (-i\nabla) \varphi_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x}. \quad (14.11)$$

Проводя вычисления, аналогичные вычислениям матричных элементов гамильтониана, имеем:

$$\langle \mathbf{x}_1 | \hat{\mathbf{P}} | \mathbf{P} \rangle = \hat{\mathbf{p}}_1 \langle \mathbf{x}_1 | \mathbf{P} \rangle, \quad \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{\mathbf{P}} | \mathbf{P} \rangle = (\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2) \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{P} \rangle,$$

где $\hat{\mathbf{p}}_i = -i\nabla^{(i)}$ – дифференциальный оператор импульса одной частицы. Если гамильтониан системы частиц обладает трансляционной инвариантностью, то

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0. \quad (14.12)$$

Это в частности происходит, когда потенциал парного взаимодействия зависит от расстояния между частицами: $W(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = W(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$ и нет внешнего поля $U(\mathbf{x})$.

2 Импульсное представление

Полевой формализм может быть развит не только в координатном, но и в импульсном представлении. Для этого совершается преобразование Фурье операторов поля $\hat{\varphi}(\mathbf{x})$, при помощи которого мы переходим к новым полевым операторам $\hat{a}(\mathbf{p})$:

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}) = \int \hat{a}(\mathbf{p}) e^{\imath \mathbf{p}\mathbf{x}} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^{3/2}} \quad \hat{a}(\mathbf{p}) = \int \hat{\varphi}(\mathbf{x}) e^{-\imath \mathbf{p}\mathbf{x}} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (14.13)$$

Несложно прямой подстановкой преобразований друг в друга, с учётом интегрального представления функции Дирака (стр. 334), проверить их согласованность. Новые операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}} \equiv \hat{a}(\mathbf{p})$ удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}] = [\hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] = 0, \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) \equiv \delta_{\mathbf{p}\mathbf{k}}, \quad (14.14)$$

где $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k})$ – функция Дирака. Действительно, например, для последнего коммутатора имеем:

$$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] = \int [\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+] e^{-\imath(\mathbf{p}\mathbf{x}-\mathbf{k}\mathbf{y})} \frac{d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^3} = \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) e^{-\imath(\mathbf{p}\mathbf{x}-\mathbf{k}\mathbf{y})} \frac{d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^3}.$$

Интегрируя по \mathbf{y} с функцией Дирака, получаем интегральное представление для $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k})$, которая стоит в коммутаторе (14.14).

Чтобы сохранилось соотношение $\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}| \rangle = 0$, вакуумный вектор должен обладать следующими свойствами:

$$\hat{a}_{\mathbf{p}}| \rangle = 0, \quad \langle | \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ = 0, \quad \langle | \rangle = 1. \quad (14.15)$$

Вектор состояния в котором N частиц имеют импульсы $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ равен:

$$|\mathbf{p}_N, \dots, \mathbf{p}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}_{\mathbf{p}_N}^+ \dots \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ | \rangle, \quad (14.16)$$

где поставлен нормировочный множитель, смысл которого проясниться ниже. Вычислим норму этого состояния на примере двух бозонов:

$$\langle \mathbf{p}_4, \mathbf{p}_3 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{2} \langle | \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ | \rangle = \frac{1}{2} \langle | \hat{a}_{\mathbf{p}_4} (\hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3} + \delta_{\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3}) \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ | \rangle,$$

где операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}_3}$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+$ переставлены местами с учётом (14.14). Продолжая перенос операторов уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{p}_3}, \hat{a}_{\mathbf{p}_4}$ к правому вакуумному вектору (а операторы рождения – к левому), получаем:

$$\langle \mathbf{p}_4, \mathbf{p}_3 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{2} (\delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3} \delta_{\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_4} + \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3}).$$

Аналогично проводятся вычисления в N -частичном случае.

Покажем, что вектор (14.16) является собственным вектором оператора полного импульса. Для этого выразим его через полевые операторы фурье-разложения:

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{1}{i} \int \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ e^{-i\mathbf{px}} \nabla \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kx}} \frac{d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} = \int \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{x}(\mathbf{p}-\mathbf{k})} \frac{d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3}.$$

Интеграл по $d^3\mathbf{x}$ даёт функцию Дирака $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k})$, интегрирование с которой приводит к соотношению:

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} d^3\mathbf{p}. \quad (14.17)$$

Действие этого оператора на (14.16) выглядит следующим образом:

$$\hat{\mathbf{P}} |\mathbf{p}_N, \dots, \mathbf{p}_1\rangle = (\mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_N) |\mathbf{p}_N, \dots, \mathbf{p}_1\rangle. \quad (14.18)$$

Например, для двух частиц, опуская нормировочный множитель, имеем:

$$\hat{\mathbf{P}} |\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1\rangle = \int \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ |\rangle d^3\mathbf{p} = \int \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ (\delta_{\mathbf{pp}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ + \delta_{\mathbf{pp}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+) |\rangle d^3\mathbf{p},$$

где во втором равенстве $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ при помощи коммутаторов (14.14) перенесен в вакуумному вектору. Интегрируя с δ -функциями, получаем $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$.

Запишем волновую функцию однчастичного состояния:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \langle |\hat{\varphi}_{\mathbf{x}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+| \rangle = \int \langle |\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+| \rangle e^{i\mathbf{kx}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{e^{i\mathbf{px}}}{(2\pi)^{3/2}}.$$

где учтено, что $\langle |\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+| \rangle = \langle |\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{pk}}| \rangle = \delta_{\mathbf{pk}}$. Аналогично, для двухчастичного состояния с различными импульсами:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \langle |\hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+| \rangle e^{i(\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2)} \frac{d^3\mathbf{k}_1 d^3\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3}.$$

Вычисляя среднее по вакуумному состоянию, получаем двухчастичную волновую функцию с правильной для бозонов симметрией при перестановке частиц:

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{x}_1) \Psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{x}_2) + \Psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{x}_1) \Psi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{x}_2) \}.$$

Эта функция нормирована на квадрат объёма пространства ($\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$):

$$\int |\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1 \rangle|^2 d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 = \int |\Psi_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{x}_1)|^2 |\Psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{x}_2)|^2 d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 = \frac{V^2}{(2\pi)^6},$$

где V – интеграл по $d^3\mathbf{x}$ от единицы.

- Запишем другие операторы в импульсном представлении. Оператор числа частиц находится также как и оператор импульса:

$$\hat{N} = \int \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^- d^3\mathbf{x} = \int \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^- d^3\mathbf{p}. \quad (14.19)$$

Гамильтониан системы частиц имеет вид:

$$\hat{H} = \int \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^- d^3\mathbf{p} + \int U_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^- d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{k} + \hat{W}, \quad (14.20)$$

где оператор взаимодействия для потенциала, зависящего от расстояния между частицами $W(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = W(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$ равен:

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \int W(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4) \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3}^- \hat{a}_{\mathbf{p}_4}^- d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{p}_3 d^3\mathbf{p}_4$$

и фурье-образы потенциала внешнего поля и поля двухчастичного взаимодействия имеют вид:

$$U(\mathbf{p}) = \int U(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{px}} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3}, \quad W(\mathbf{p}) = \int W(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{px}} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3}. \quad (14.21)$$

Действительно, для невзаимодействующих частиц оператор Лапласа в $\hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}}$, действуя на одну из экспонент даёт квадрат импульса:

$$\hat{H}_0 = \int a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{p}}^- \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{x}) \right) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{k})\mathbf{x}} \frac{d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3}$$

Интеграл по $d^3\mathbf{x}$ в первом слагаемом даёт $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k})$, а второе слагаемое записывается при помощи фурье-представления потенциала (14.21). Для интегралов в операторе взаимодействия:

$$\int W(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3}^- \hat{a}_{\mathbf{p}_4}^- e^{-i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4)\mathbf{x} - i(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3)\mathbf{y}} \frac{d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{p}_3 d^3\mathbf{p}_4 d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^6}$$

сделаем замену переменных $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$, $\mathbf{v} = \mathbf{y}$ или $\mathbf{x} = \mathbf{u} + \mathbf{v}$, $\mathbf{y} = \mathbf{v}$. Якобиан равен единице и оператор взаимодействия в новых переменных интегрирования принимает вид:

$$\int W(\mathbf{u}) \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3}^- \hat{a}_{\mathbf{p}_4}^- e^{-i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4)\mathbf{u} - i(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)\mathbf{v}} \frac{d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{p}_3 d^3\mathbf{p}_4 d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{v}}{(2\pi)^6}.$$

Интеграл по $d^3\mathbf{v}/(2\pi)^3$ даёт $\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)$, а интеграл по $d^3\mathbf{u}/(2\pi)^3$ определяет фурье-преобразование потенциала взаимодействия.

• Иногда удобно использовать дискретное импульсное представление. Рассмотрим “большой” куб со стороной L , охватывающий “всё пространство” объёмом $V = L^3$. Пусть одночастичная собственная волновая функция оператора импульса удовлетворяет периодическим условиям на границах куба (его центр в начале координат). Так, вдоль оси x имеем:

$$\Psi_{p_x}(x) = \frac{e^{ip_xx}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \Psi_{p_x}(-L/2) = \Psi_{p_x}(L/2).$$

Это требование приводит к дискретным значениям импульса:

$$e^{ip_x L} = 1 \quad \Rightarrow \quad p_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Изменение соседних значений импульса равны $\Delta p_x = 2\pi/L$, поэтому элементарный объём в импульсном пространстве равен $d^3\mathbf{p} = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi)^3/V$, где V – объём обычного пространства. В результате, интегралы можно заменить суммами при помощи следующего правила:

$$\int f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} \quad \mapsto \quad \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}). \quad (14.22)$$

Сумма по \mathbf{p} подразумевает суммирование по целым числам n_x, n_y, n_z . Введение периодических граничных условий является достаточно формальной процедурой, обычно не имеющей особого физического смысла. Если устремить объём V к бесконечности, то мы вернёмся к непрерывному случаю и граничные условия перестанут играть свою роль.

Функция Дирака от импульсов в дискретной версии пропорциональна символу Кронекера:

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) = \int e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}} \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}} \quad (14.23)$$

(если $\mathbf{p} = \mathbf{k}$ интеграл по $d^3\mathbf{x}$ даёт объём пространства V). Вместо фурье-операторов $\hat{a}(\mathbf{p})$ можно ввести операторы для дискретного случая $\hat{a}_{\mathbf{p}}$:

$$\hat{a}(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{V}}{(2\pi)^{3/2}} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad \hat{\varphi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}.$$

При этом “дискретные” операторы коммутируют на символ Кронеккера: $[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+] = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$, а, например, оператор числа частиц в непрерывных и дискретных обозначениях имеет вид:

$$\hat{N} = \int \hat{a}^+(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \quad (14.24)$$

(сейчас мы различаем $\hat{a}(\mathbf{p})$ с $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ и $\delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}}$ – символ Кронеккера, а не Дирака).

3 Представление Гейзенберга

Выше мы рассматривали полевой формализм в представлении Шрёдингера. В представлении Гейзенберга операторы поля, как и любые операторы, зависят от времени: $\hat{\varphi}_x \equiv \hat{\varphi}(t, \mathbf{x})$ и удовлетворяют уравнению:

$$\imath \frac{\partial \hat{\varphi}_x}{\partial t} = [\hat{\varphi}_x, \hat{H}] \quad (14.25)$$

(так как операторы зависят не только от времени, но и от координат, используется частная производная). Формальное решение уравнения Гейзенберга (14.25) можно, как обычно, записать следующим образом:

$$\hat{\varphi}(t, \mathbf{x}) = e^{\imath \hat{H}t} \hat{\varphi}(0, \mathbf{x}) e^{-\imath \hat{H}t} \equiv e^{\imath \hat{H}t} \hat{\varphi}_x e^{-\imath \hat{H}t}, \quad (14.26)$$

где $\hat{\varphi}(0, \mathbf{x}) \equiv \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\varphi}_x$ – оператор в представлении Шрёдингера. Полевые операторы в представлении Гейзенберга в *один* момент времени коммутируют (антикоммутируют для фермионов) также как и в представлении Шрёдингера:

$$[\hat{\varphi}(t, \mathbf{x}), \hat{\varphi}(t, \mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\varphi}(t, \mathbf{x}), \hat{\varphi}^+(t, \mathbf{y})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (14.27)$$

в чём несложно убедиться, используя решение (14.26). В различные моменты времени, вообще говоря, эти коммутационные соотношения неверны и зависят от гамильтониана (явного вида решений уравнения Гейзенберга), см., например, стр. ??.

Аналогичным образом проверяется, что операторы *сохраняющихся* физических величин в обоих представлениях одинаковым образом зависят от полевых операторов. Например, для оператора числа частиц, имеем:

$$\int \hat{\varphi}_x^+ \hat{\varphi}_x d^3\mathbf{x} = \int e^{\imath \hat{H}t} \hat{\varphi}_x^+ e^{-\imath \hat{H}t} e^{\imath \hat{H}t} \hat{\varphi}_x e^{-\imath \hat{H}t} d^3\mathbf{x}.$$

Произведение экспонент между полевыми операторами сокращается, а внешние экспоненты можно вынести за интеграл и учесть определение оператора числа частиц в представлении Шрёдингера:

$$= e^{\imath \hat{H}t} \left[\int \hat{\varphi}_x^+ \hat{\varphi}_x d^3\mathbf{x} \right] e^{-\imath \hat{H}t} = e^{\imath \hat{H}t} \hat{N} e^{-\imath \hat{H}t} = \hat{N},$$

где на последнем этапе учтено, что $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. Аналогичные вычисления можно провести с оператором полного импульса $\hat{\mathbf{P}}$ и с самим гамильтонианом. Подчеркнём ещё раз, что неизменность вида этих операторов связана с сохранением соответствующих им физических величин.

Кроме уравнения Гейзенберга (14.25), выполняется похожее на него уравнение, но с оператором полного импульса:

$$-\imath \nabla \hat{\varphi}_x = [\hat{\varphi}_x, \hat{\mathbf{P}}], \quad (14.28)$$

где, как и в (14.25), слева и справа операторы имеют одинаковое время. Действительно, учитывая определение (14.11), записанное для операторов в представлении Гейзенберга, имеем:

$$[\hat{\varphi}_x, \hat{\mathbf{P}}] = \int [\hat{\varphi}_x, \hat{\varphi}_y^+ \frac{\nabla_y}{\imath} \hat{\varphi}_y] d^3 y = \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\nabla_y}{\imath} \hat{\varphi}_y d^3 y = \frac{\nabla_x}{\imath} \hat{\varphi}_x.$$

Отметим, что подобные вычисления справедливы как для бозонных полевых операторов, так и для фермионных. В последнем случае, при вычислении коммутатора, необходимо пользоваться тождеством:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\} \hat{C} - \hat{B} \{\hat{A}, \hat{C}\}. \quad (14.29)$$

Уравнения (14.25) и (14.28) можно обледенить в одно:

$$\imath \partial_\mu \hat{\varphi}_x = [\hat{\varphi}_x, \hat{P}_\mu], \quad (14.30)$$

где, несмотря на отсутствие релятивистской динамики, используются ковариантные обозначения: $\partial_\mu = \{\partial/\partial t, \nabla\}$ и $\hat{P}^\mu = \{\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}\}$. Решение этого уравнения, аналогично (14.26) можно записать следующим образом:

$$\hat{\varphi}(t, \mathbf{x}) = e^{\imath \hat{P} \cdot \mathbf{x}} \hat{\varphi}(0, \mathbf{0}) e^{-\imath \hat{P} \cdot \mathbf{x}}, \quad (14.31)$$

где $\hat{P} \cdot \mathbf{x} \equiv \hat{H}t - \hat{\mathbf{P}}\mathbf{x}$ – ковариантная свёртка “4-векторов”.

Запишем уравнение Гейзенберга (14.25) для гамильтониана (14.4):

$$\imath \frac{\partial \hat{\varphi}_x}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2m} + U(\mathbf{x}) \right) \hat{\varphi}_x + \int W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \hat{\varphi}_y^+ \hat{\varphi}_y \hat{\varphi}_x d^3 y. \quad (14.32)$$

Если взаимодействия между частицами нет ($W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} = 0$), то это уравнение формально совпадает с уравнением Шрёдингера для волновой функции частицы во внешнем поле $U(\mathbf{x})$. Поэтому иногда (не вполне удачно) полевой подход называют *методом вторичного квантования*. Естественно, никакого повторного квантования теория поля не производит. Она является лишь одним из возможных методов описания квантовых систем. Этот метод альтернативен подходу, основанному на операторах координаты и импульса с явным указанием числа частиц системы. При этом он оказывается более общим и применим также при несохранении числа частиц. Рассмотрим соответствующую *нерелятивистскую модель* в которой это происходит.

4 Модель Ли *

Пусть потенциал парного взаимодействия между частицами $W(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$ отличен от нуля только на малых расстояниях и можно положить $W(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, где g – некоторая константа (при $g > 0$ частицы отталкиваются). Тогда:

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \int W(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} = \frac{g}{2} \int (\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}^+)^2 (\hat{\varphi}_{\mathbf{x}})^2 d^3 \mathbf{x}. \quad (14.33)$$

Взаимодействие, при котором аргументы всех операторов поля в произведении одинаковые (относятся к одной точке пространства), называется *локальным*. В релятивистской квантовой теории поля, обычно, рассматривают локальные взаимодействия с произвольным числом операторов в произведении.

Примером локальной теории является модель Ли, для которой возможно получить точное решение, что для квантовой теории поля большая редкость. Рассмотрим три вида частиц с массами m_a , m_b и m_c . Соответствующие им полевые операторы обозначим как $\hat{A}_{\mathbf{x}} \equiv \hat{A}(\mathbf{x})$, $\hat{B}_{\mathbf{x}} \equiv \hat{B}(\mathbf{x})$ и $\hat{C}_{\mathbf{x}} \equiv \hat{C}(\mathbf{x})$. Пусть частицы являются бозонами:

$$[\hat{A}_{\mathbf{x}}, \hat{A}_{\mathbf{y}}^+] = \delta_{\mathbf{xy}}, \quad [\hat{B}_{\mathbf{x}}, \hat{B}_{\mathbf{y}}^+] = \delta_{\mathbf{xy}}, \quad [\hat{C}_{\mathbf{x}}, \hat{C}_{\mathbf{y}}^+] = \delta_{\mathbf{xy}} \quad (14.34)$$

(все остальные коммутаторы, включая $[\hat{A}_{\mathbf{x}}, \hat{B}_{\mathbf{y}}^+]$ и т.д. – равны нулю). Операторы числа частиц каждого сорта равны:

$$\hat{N}_a = \int \hat{A}_{\mathbf{x}}^+ \hat{A}_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x}, \quad \hat{N}_b = \int \hat{B}_{\mathbf{x}}^+ \hat{B}_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x}, \quad \hat{N}_c = \int \hat{C}_{\mathbf{x}}^+ \hat{C}_{\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x}. \quad (14.35)$$

В гамильтониане свободных (невзаимодействующих) частиц, дополнительно к кинетической энергии, будем учитывать релятивистскую энергию покоя, равную массе частицы ($\hbar = c = 1$):

$$\hat{H}_0 = \int \left\{ \hat{A}_{\mathbf{x}}^+ \left(m_a - \frac{\Delta}{2m_a} \right) \hat{A}_{\mathbf{x}} + \hat{B}_{\mathbf{x}}^+ \left(m_b - \frac{\Delta}{2m_b} \right) \hat{B}_{\mathbf{x}} + \hat{C}_{\mathbf{x}}^+ \left(m_c - \frac{\Delta}{2m_c} \right) \hat{C}_{\mathbf{x}} \right\} d^3 \mathbf{x}.$$

Гамильтониан взаимодействия запишем в следующем локальном виде:

$$\hat{W} = g \int \left\{ \hat{A}_{\mathbf{x}}^+ \hat{B}_{\mathbf{x}} \hat{C}_{\mathbf{x}} + \hat{A}_{\mathbf{x}} \hat{B}_{\mathbf{x}}^+ \hat{C}_{\mathbf{x}}^+ \right\} d^3 \mathbf{x} = \hat{W}_I + \hat{W}_I^+. \quad (14.36)$$

Это модель, поэтому никакой физической мотивации в выборе такого гамильтониана нет. Отметим, только, что второе слагаемое в \hat{W} записано так, чтобы гамильтониан был эрмитов: $\hat{W}^+ = \hat{W}$.

Как мы увидим далее, из-за точечности взаимодействия между частицами, при вычислениях будут появляться расходящиеся (бесконечные) выражения. Поэтому сделаем модель “немного нелокальной” переписав гамильтониан взаимодействия (14.36) следующим образом:

$$\hat{W} = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) (\hat{A}_{\mathbf{x}}^+ \hat{B}_{\mathbf{x}} \hat{C}_{\mathbf{y}} + \hat{A}_{\mathbf{x}} \hat{B}_{\mathbf{x}}^+ \hat{C}_{\mathbf{y}}^+) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y}, \quad (14.37)$$

Если функция $G(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ равна $g \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, то снова получается локальное взаимодействие (14.36). В любом случае, будет предполагаться, что $G(\mathbf{x})$ быстро убывает, а интеграл от неё по $d^3 \mathbf{x}$ равен параметру модели g . В частности для преобразования Фурье:

$$g(\mathbf{k}) = \int G(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^3 \mathbf{x}, \quad G(\mathbf{x}) = \int g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3},$$

имеем $g(0) = g$. При локальном взаимодействии $G(\mathbf{x}) = g \delta(\mathbf{x})$, функция $g(\mathbf{k})$ постоянная и равна g при любом \mathbf{k} . Заметим, что если $G(\mathbf{x})$ действительна (именно это предполагается в (14.37)) и зависит от модуля $r = |\mathbf{x}|$, то можно проверить, что и $g(\mathbf{k})$ будет действительной. Приведём несколько примеров “размазывающих” взаимодействие функций. Так, обрезание “импульса” в фурье-интеграле приводит к убывающей с осцилляциями функции $G(\mathbf{x})$:

$$g(\mathbf{k}) = \begin{cases} g, & |\mathbf{k}| < Q, \\ 0, & |\mathbf{k}| > Q, \end{cases}, \quad G(\mathbf{x}) = g \frac{\sin(Qr) - Qr \cos(Qr)}{2\pi^2 r^3}.$$

Другой пример – гауссовые функции:

$$g(\mathbf{k}) = g \exp\left\{-\frac{\mathbf{k}^2}{2Q^2}\right\}, \quad G(\mathbf{x}) = \frac{g Q^3}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{Q^2 r^2}{2}\right\}.$$

В обоих случаях в точке $r = 0$ “потенциалы” $G(\mathbf{x})$ имеют конечное значение, пропорциональное gQ^3 . Чем шире функция $g(\mathbf{k})$ (при больших Q), тем уже “потенциал” $G(\mathbf{x})$ и его характерный радиус пропорционален $1/Q$ (подобное свойство фурье-преобразования аналогично соотношению неопределённости для координаты и импульса).

При наличии нелокальности параметрами модели кроме масс m_a , m_b , m_c и константы взаимодействия g , становится характерный радиус взаимодействия частиц A , B с частицей C , который задаётся параметром Q . Теория, основанная на взаимодействии (14.37) будет “моделе-независимой”, если её физические предсказания не будут существенно зависеть от вида функции $G(\mathbf{x})$ и для её характеристики достаточно только двух параметров g и Q .

- Перейдём к импульсному представлению при помощи 3-мерного фурье-интеграла (14.13). Для “свободной” части гамильтониана имеем:

$$\hat{H}_0 = \int \left\{ \omega_a(\mathbf{p}) \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}} + \omega_b(\mathbf{p}) \hat{B}_{\mathbf{p}}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}} + \omega_c(\mathbf{p}) \hat{C}_{\mathbf{p}}^+ \hat{C}_{\mathbf{p}} \right\} d^3 \mathbf{p},$$

где энергии *свободных* частиц равны

$$\omega_i(\mathbf{p}) = m_i + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_i}$$

(соответственно с массами m_a , m_b и m_c). Часть гамильтониана, ответственная за взаимодействие, имеет вид:

$$\hat{W} = \int g(\mathbf{k}) (\hat{A}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}} \hat{C}_{\mathbf{k}} + \hat{A}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{p}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+) \frac{d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (14.38)$$

Действительно, например, для первого слагаемого в (14.37), подставляя для каждого оператора поля фурье-интеграл, получаем:

$$\hat{W}_I = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{A}_{\mathbf{q}}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}} \hat{C}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) + i\mathbf{y}\mathbf{k}} \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y}.$$

Сделаем в интеграле по \mathbf{x} замену $\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ или $\mathbf{x} = \mathbf{z} + \mathbf{y}$:

$$\hat{W}_I = \int G(\mathbf{z}) \hat{A}_{\mathbf{q}}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}} \hat{C}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{z}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) + i\mathbf{y}(\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q})} \frac{d^3 \mathbf{q} d^3 \mathbf{p} d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{9/2}} d^3 \mathbf{z} d^3 \mathbf{y}.$$

Интеграл по $d^3 \mathbf{y}$ даёт $(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q})$, а интегрирование по \mathbf{z} приводит к фурье-образу $g(\mathbf{p} - \mathbf{q})$. Интегрируя с функцией Дирака по \mathbf{q} , приходим к соотношению (14.38) (напомним, что $g(-\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})$).

Оператор полного импульса системы, как и в предыдущих разделах, определим следующим образом:

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \left\{ \hat{A}_{\mathbf{x}}^+ (-i\nabla) \hat{A}_{\mathbf{x}} + \hat{B}_{\mathbf{x}}^+ (-i\nabla) \hat{B}_{\mathbf{x}} + \hat{C}_{\mathbf{x}}^+ (-i\nabla) \hat{C}_{\mathbf{x}} \right\} d^3 \mathbf{x},$$

или в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \mathbf{p} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}} + \hat{B}_{\mathbf{p}}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}} + \hat{C}_{\mathbf{p}}^+ \hat{C}_{\mathbf{p}} \right\} d^3 \mathbf{x}. \quad (14.39)$$

Этот оператор коммутирует гамильтонианом, а следовательно, полный импульс сохраняется. Предлагается это проверить в импульсном представлении, при помощи коммутаторов

$$[\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{k}}^+] = \delta_{\mathbf{pk}}, \quad [\hat{B}_{\mathbf{p}}, \hat{B}_{\mathbf{k}}^+] = \delta_{\mathbf{pk}}, \quad [\hat{C}_{\mathbf{p}}, \hat{C}_{\mathbf{k}}^+] = \delta_{\mathbf{pk}}$$

(остальные коммутаторы равны нулю).

Стоит обратить внимание, что по отдельности импульс частиц каждого типа ($\mathbf{p} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}}$ и т.д.) не коммутирует с \hat{W} и сохраняется только полный (суммарный) импульс системы. Это означает, что частицы разных типов взаимодействуют, в результате чего меняется их импульсы.

Любопытным свойством модели является несохранение числа частиц и, несмотря на нерелятивистскую динамику, возможно их рождение и уничтожение. Действительно, найдём коммутатор операторов (14.35) с полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$:

$$[\hat{H}, \hat{N}_a] = -\hat{W}_I + \hat{W}_I^+, \quad [\hat{H}, \hat{N}_b] = \hat{W}_I - \hat{W}_I^+, \quad [\hat{H}, \hat{N}_c] = \hat{W}_I - \hat{W}_I^+,$$

где \hat{W}_I и \hat{W}_I^+ – два слагаемых в операторе \hat{W} . Из этих коммутаторов следует, что выполняются следующие законы сохранения:

$$N_1 = N_a + N_b = \text{const}, \quad N_2 = N_a + N_c = \text{const}. \quad (14.40)$$

По-отдельности ни один вид частиц при взаимодействии не сохраняется. Это означает, например, возможность распада $A \mapsto B + C$ (до и после такой реакции сохраняющиеся числа N_1, N_2 одинаковы и равны 1). Ещё один пример: $A + C \mapsto B + 2C$ (в этом случае: $N_1 = 1, N_2 = 2$).

Благодаря правилу $\hat{A}_{\mathbf{x}} | \rangle = \hat{B}_{\mathbf{x}} | \rangle = \hat{C}_{\mathbf{x}} | \rangle = 0$, вакуумный вектор (отсутствие частиц) является собственным вектором гамильтониана с нулевой энергией:

$$\hat{H} | \rangle = E_{vac} | \rangle, \quad E_{vac} = 0. \quad (14.41)$$

Это же состояние является собственным вектором гамильтониана свободных частиц: $\hat{H}_0 | \rangle = 0$ (в релятивистской теории поля появляются античастицы и вакуумные состояния свободного и полного гамильтониана, вообще говоря, различаются). Минимальными возбуждениями над вакуумом являются одночастичные состояния (в пространстве есть одна частица того или иного сорта). Вектор, соответствующий такому состоянию, получается действием на вакуумный вектор оператора рождения. Например, состояние с одной B -частицей, имеющей импульс \mathbf{p} , равно $\hat{B}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$, а с одной C -частицей: $\hat{C}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$. Они являются собственными состояниями полного гамильтониана со “свободными” энергиями:

$$\hat{H} \hat{B}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle = \omega_b(\mathbf{p}) \hat{B}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle, \quad \hat{H} \hat{C}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle = \omega_c(\mathbf{p}) \hat{C}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$$

(действие на вакуумный вектор операторов уничтожения других частиц в члене взаимодействия \hat{W} , даёт ноль). Иная ситуация с состоянием $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$, которое не является собственным вектором \hat{H} . Тем не менее, в следующем разделе мы покажем, что существует состояние, близкое к $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$ и являющееся при этом собственным вектором \hat{H} .

5 Перенормировка массы *

Подействуем полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ на вектор $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle$:

$$\hat{H} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle = \omega_a(\mathbf{p}) \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle + \int g(\mathbf{k}) \hat{A}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{q}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle \frac{d^3\mathbf{q} d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}}$$

(первое слагаемое в \hat{W} равно нулю, т.к. $\hat{B}_{\mathbf{q}} \hat{C}_{\mathbf{k}} |\rangle = 0$). Перенося в последнем слагаемом $\hat{A}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}$ к вакуумному вектору, получаем:

$$\hat{H} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle = \omega_a(\mathbf{p}) \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle + \int g(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ |\rangle \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}},$$

где учтено, что $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} = \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} + \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k})$ и проинтегрировано по \mathbf{q} . Таким образом, состояние с одной частицей A “портится” частицами B и C . Если мы хотим построить собственный вектор гамильтониана, необходимо некоторым образом вычесть двухчастичное состояние $B+C$. Поэтому будем искать решение в следующем виде:

$$|\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle = Z^{1/2} \left[\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ |\rangle d^3\mathbf{k} \right], \quad (14.42)$$

где Z – нормировочная константа, f – некоторая функция. Задача состоит в подборе такой f , чтобы состояние (14.42) было собственным вектором гамильтониана с энергией $E(\mathbf{p})$, которую также необходимо найти:

$$\hat{H} |\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle = E(\mathbf{p}) |\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle, \quad \hat{\mathbf{P}} |\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle = \mathbf{p} |\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle. \quad (14.43)$$

Заметим, что состояние $|\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle$ автоматически учитывает закон сохранения импульса и при любой f вектор $|\tilde{A}\rangle$ является собственным вектором оператора полного импульса $\hat{\mathbf{P}}$. Кроме этого, каждый вектор в суперпозиции (14.42) соответствует одинаковым сохраняющимся величинам (14.40): $N_1 = N_2 = 1$. Это следствие т.н. *правила суперотбора*: суперпозиция состояний, в квантовой теории не может нарушать законы сохранения.

Вектор (14.42) в некотором смысле описывает “одетую” частицу A , модифицируя “голое” одночастичное состояние $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ |\rangle$. Если импульс системы равен \mathbf{p} , а энергия $E(\mathbf{p})$, то при измерениях мы будем наблюдать либо частицу A , либо пару частиц $B+C$ (суперпозиция двух состояний). Они как бы переходят всё время друг в друга $A \leftrightarrow B+C$. Функция $f(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ характеризует вероятность этих переходов и распределение относительного импульса \mathbf{k} частиц B и C . Таким образом, хотя в исходную модель была заложена частица A , фактически она не может быть обнаружена в свободном виде и существует только в виде некой суперпозиции (14.42).

Невзаимодействующая часть \hat{H}_0 гамильтониана \hat{H} для частицы B , при действии на вектор $\hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle$ даёт:

$$\int \omega_b(\mathbf{q}) \hat{B}_{\mathbf{q}}^+ \hat{B}_{\mathbf{q}}^- \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle d^3\mathbf{q} = \omega_b(\mathbf{p} - \mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle$$

(необходимо “протащить” оператор $\hat{B}_{\mathbf{q}}$ к вакуумному вектору). Для частицы C получается аналогичный результат с множителем $\omega_c(\mathbf{k})$. Для частицы A действие \hat{H}_0 на $\hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle$ даёт ноль ($\hat{A}_{\mathbf{q}} | \rangle = 0$). По этой же причине равен нулю результат действия второго слагаемого в гамильтониане взаимодействия \hat{W} :

$$\int g(\mathbf{w}) \hat{A}_{\mathbf{s}+\mathbf{w}}^+ \hat{B}_{\mathbf{s}}^- \hat{C}_{\mathbf{w}}^- \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle \frac{d^3\mathbf{s} d^3\mathbf{w}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{g(\mathbf{k})}{(2\pi)^{3/2}} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle$$

(при проносе $\hat{B}_{\mathbf{s}}$ и $\hat{C}_{\mathbf{w}}$ к $| \rangle$, получаем $\mathbf{s} = \mathbf{p} - \mathbf{k}$ и $\mathbf{w} = \mathbf{k}$). В результате, уравнение на собственные значения $\hat{H} |\tilde{A}_{\mathbf{p}} \rangle = E(\mathbf{p}) |\tilde{A}_{\mathbf{p}} \rangle$ имеет вид:

$$\begin{aligned} & \omega_a(\mathbf{p}) \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle + \int g(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \\ & - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \left[\{\omega_b(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + \omega_c(\mathbf{k})\} \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle + \frac{g(\mathbf{k})}{(2\pi)^{3/2}} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle \right] d^3\mathbf{k} \\ & = E(\mathbf{p}) \left[\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ | \rangle - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ | \rangle d^3\mathbf{k} \right]. \end{aligned}$$

Равенство коэффициентов при одинаковых операторах рождения $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+$ и $\hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^+$, даёт уравнения для определения неизвестных функций:

$$E(\mathbf{p}) = \omega_a(\mathbf{p}) - \int g(\mathbf{k}) f(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (14.44)$$

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \frac{g(\mathbf{k})/(2\pi)^{3/2}}{\omega_b(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + \omega_c(\mathbf{k}) - E(\mathbf{p})}. \quad (14.45)$$

Подставив (14.45) в (14.44), получаем интегральное уравнение для определения $E(\mathbf{p})$:

$$E(\mathbf{p}) = \omega_a(\mathbf{p}) - \int \frac{g^2(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}/(2\pi)^3}{\omega_b(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + \omega_c(\mathbf{k}) - E(\mathbf{p})}. \quad (14.46)$$

В этом уравнении функции $g(\mathbf{k})$ и $\omega_i(\mathbf{k})$ заданы. Найдя $E(\mathbf{p})$, при помощи (14.45), получаем амплитуду вероятности значений относительного импульса частиц B и C , двигающихся как целое с импульсом \mathbf{p} .

- Будем называть массой состояния $|\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle$ его энергию при нулевом импульсе:

$$M = E(\mathbf{0}) = m_a - \int \frac{2\mu g^2(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}/(2\pi)^3}{2\mu(m_b + m_c - M) + \mathbf{k}^2}, \quad (14.47)$$

где $\mu = m_b m_c / (m_b + m_c)$ – имеет смысл *приведенной массы* частиц B и C . Далее будем считать, что параметры модели таковы, что $m_b + m_c > M$ и в знаменателе под интегралом не возникает полюс.

Если взаимодействие полностью локально ($g(\mathbf{k}) = g = \text{const}$), то интеграл будет расходиться при больших \mathbf{k} (в сферических координатах $d^3\mathbf{k} = 4\pi k^2 dk$). Для нелокального взаимодействия эта масса конечна, но тем больше, чем больше параметр Q , определяющий убывание функции $g(\mathbf{k})$. Например, если $g(\mathbf{k}) = 0$ при $|\mathbf{k}| > Q$, то:

$$M = m_a - \frac{\mu g^2}{\pi^2} \int_0^Q \frac{k^2 dk}{\eta^2 + k^2},$$

где $\eta^2 = 2\mu(m_b + m_c - M)$ и произведен переход к сферическим координатам с *обрезанием* импульса. Если в числителе подынтегральной функции добавить и вычесть η^2 , то окончательно получим:

$$m_a = M + \frac{g^2 \mu}{\pi^2} Q - \frac{g^2 \mu}{2\pi} \sqrt{2\mu(m_b + m_c - M)} + O(Q^{-1}). \quad (14.48)$$

Важно понимать, что смысл имеют не параметры модели (m_a , m_b , m_c и g), а физически наблюдаемые величины. Массы m_b и m_c таковыми являются (они равны минимальной энергии B и C состояний). Параметр же m_a непосредственного физического смысла не имеет, так как масса “ \tilde{A} -состояния” равна M и m_a необходимо через неё выразить.

Если бы мы стартовали от модели с локальным взаимодействием (14.36), то при появлении расходящегося выражения, пришлось бы тем или иным образом его *регуляризовать* (т.е. сделать конечным), а затем “спрятать” расходящиеся члены в физически наблюдаемые величины. Такая процедура называется *перенормировкой* и сплошь и рядом встречается в квантовой теории поля. Если все расходящиеся величины можно спрятать а конечное число физически измеримых параметров, то теория называется *перенормируемой*.

Из (14.48) следует, что при конечной массе M , параметр m_a является большой положительной величиной ($Q \rightarrow \infty$). В связи с этим, в исходном гамильтониане можно пренебречь слагаемым $A_{\mathbf{x}}^+ \Delta A_{\mathbf{x}}^- / 2m_a$ или в (14.46) заменить $\omega_a(\mathbf{p})$ на m_a . В модели Ли также пренебрегают и кинетическим слагаемым частицы B (иначе теория получится неперенормируемой).

• “Квазиодночастичное состояние” $|\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle$, как и любое одночастичное состояние, будем нормировать на функцию Дирака. Для скалярного произведения $\langle A_{\mathbf{p}}|A_{\mathbf{p}'}\rangle$ имеем:

$$Z \langle | \left[A_{\mathbf{p}} - \int f^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}} d^3\mathbf{k} \right] \left[A_{\mathbf{p}'}^+ - \int f(\mathbf{p}', \mathbf{q}) \hat{B}_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^+ \hat{C}_{\mathbf{q}}^+ d^3\mathbf{q} \right] | \rangle = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}.$$

Вычисляя это среднее (как обычно, перенося операторы уничтожения к правому вакуумному вектору), получаем нормировочный множитель:

$$Z^{-1} = 1 + \int |f(\mathbf{p}, \mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k} = 1 + F_{\mathbf{p}}. \quad (14.49)$$

Вероятность обнаружить пару частиц $B + C$ с относительным импульсом в диапазоне $\mathbf{k}, \mathbf{k}+d\mathbf{k}$ равна $Z |f(\mathbf{p}, \mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k}$. Соответственно, вероятность обнаружить пару $B + C$ вместо частицы A равна:

$$W_{B+C} = Z \int |f(\mathbf{p}, \mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k} = \frac{F_{\mathbf{p}}}{1 + F_{\mathbf{p}}}. \quad (14.50)$$

Вероятность же зарегистрировать частицу A равна: $W_A = 1 - W_{B+C}$. В частности, при минимальной энергии ($\mathbf{p} = 0$), имеем:

$$F_0 = \int |f(\mathbf{0}, \mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k} = \int \frac{4\mu^2 g^2(\mathbf{k})/(2\pi)^3}{[2\mu(m_b + m_c - M) + \mathbf{k}^2]^2} d^3\mathbf{k}.$$

Для полностью локального взаимодействия $g(\mathbf{k}) = g$, имеем конечное значение:

$$F_0 = \frac{\mu^2 g^2 / 2\pi}{\sqrt{2\mu(m_b + m_c - M)}}. \quad (14.51)$$

Чем ближе M к $m_b + m_c$, тем более вероятно присутствие частиц $B + C$. Если же $m_b \gg M - m_c$, то $F_0 \rightarrow 0$ и более вероятно обнаружить частицу сорта A . Эксперимент (если бы модели Ли соответствовала реальная физическая система) при помощи соотношений (14.50), (14.51), позволяет определить константу взаимодействия g . При этом вероятность нечувствительна к степени нелокальности взаимодействия (в нулевом приближении не зависит от Q , а соответствующие поправки будут порядка $1/Q$).

В модели Ли можно вычислять и другие эффекты. Например, несложно видеть, что двухчастичное состояние $|\hat{B}_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{p}}\rangle$ не является собственным вектором \hat{H} , хотя $|\hat{B}_{\mathbf{k}}\rangle$ и $|\hat{C}_{\mathbf{p}}\rangle$, по-отдельности, таковыми являются. Это означает, что частицы B и C взаимодействуют и это взаимодействие приводит к эффекту их рассеяния друг на друге. Аналогично можно рассчитывать рассеяние “квазиодночастичного состояния” $|\tilde{A}_{\mathbf{p}}\rangle$ на частице C и т.д.

6 Представление Гейзенберга для полей

• До сих пор мы работали в представлении Шрёдингера и полевые операторы не зависели от времени. Рассмотрим теперь представление Гейзенберга. Напомним, что, если гамильтониан не зависит от времени, произвольное состояние Ψ в представлении Шрёдингера удовлетворяет *уравнению Шрёдингера* и изменяется со временем следующим образом:

$$\imath\hbar \frac{d|\Psi, t\rangle}{dt} = \hat{H}|\Psi, t\rangle, \quad \Rightarrow \quad |\Psi, t\rangle = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi, 0\rangle, \quad (14.52)$$

где состояние $|\Psi, 0\rangle$ соответствует начальному моменту времени $t = 0$. Среднее значение любого оператора может меняться со временем:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi, t | \hat{A}(0) | \Psi, t \rangle = \langle \Psi | e^{\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A}(t) | \Psi \rangle,$$

где введен оператор, зависящий от времени:

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (14.53)$$

который удовлетворяет *уравнению Гейзенберга*:

$$\imath\hbar \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}]. \quad (14.54)$$

В *представлении Шрёдингера* операторы не зависят от времени $\hat{A} = \hat{A}(0)$, а вектора состояния – зависят $|\Psi, t\rangle$. В *представлении Гейзенберга* ситуация обратная – операторы становятся динамическими величинами $\hat{A}(t)$, а вектора состояния неизменны: $|\Psi\rangle = |\Psi, 0\rangle$.

Перейдём к представлению Гейзенберга в полевой теории. Умножая коммутационные соотношения (14.2) слева на $e^{\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}$, а справа $e^{-\frac{\imath}{\hbar}\hat{H}t}$, несложно убедится, что для одного момента времени они сохраняют свой вид и в представлении Гейзенберга:

$$[\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},t}] = [\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}^+, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},t}^+] = 0, \quad [\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},t}^+] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (14.55)$$

Уравнение Гейзенберга для $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ получается в результате вычисления коммутатора:

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] = \int [\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ \hat{\varepsilon}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+] d^3\mathbf{x}_1 + \frac{1}{2} \int W_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2} [\hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_1} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}_2}] d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2.$$

Проведя несложные вычисления, получаем:

$$\imath\hbar \frac{\partial \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}}{\partial t} = \hat{\varepsilon} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}} + \left\{ \int W_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \hat{\varphi}_{\mathbf{y}}^+ \hat{\varphi}_{\mathbf{y}} d^3\mathbf{y} \right\} \hat{\varphi}_{\mathbf{x}}, \quad (14.56)$$

где времена во всех полевых операторах одинаковы и опущены.

В отсутствии взаимодействия $W = 0$ это уравнение похоже на уравнение Шрёдингера в координатном представлении. Поэтому иногда полевой подход называют *вторичным квантованием*, хотя этот термин не вполне удачен, так как никакого “второго” квантования не проводится.

Для свободных частиц полевое уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\varphi}$$

легко решается. Действительно, запишем фурье-преобразование:

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int \hat{a}(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.$$

Операторы $\hat{a}(\mathbf{p}, t)$ удовлетворяют уравнению:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{a}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}(\mathbf{p}, t) \quad \Rightarrow \quad \hat{a}(\mathbf{p}, t) = \hat{a}(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\mathbf{p}} t},$$

где $E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m$. Поэтому, окончательно:

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int \hat{a}(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x} - \frac{i}{\hbar} E_{\mathbf{p}} t} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.$$

Операторы фурье-разложения коммутируют в соответствии с (14.14) так, чтобы в один момент времени операторы поля $\hat{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяли коммутаторам (14.55). Найдём как выглядят эти коммутаторы при различных временах. Однотипные коммутаторы по-прежнему коммутируют:

$$[\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},\tau}] = [\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}^+, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},\tau}^+] = 0. \quad (14.57)$$

Для коммутатора поля и его сопряжения, имеем:

$$[\hat{\varphi}_{\mathbf{x},t}, \hat{\varphi}_{\mathbf{y},\tau}^+] = \int e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) - \frac{i}{2\hbar m} \mathbf{p}^2(t-\tau)} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = D(t-\tau, \mathbf{x}-\mathbf{y}).$$

Функция $D(t, \mathbf{x})$ является обобщённой функцией, отличной при $t \neq 0$ от функции Дирака. Взяв среднее от коммутатора по вакуумному состоянию $|\rangle$, приходим к выводу, что эта функция имеет смысл амплитуды вероятности перехода частицы из точки \mathbf{y} в точку \mathbf{x} за время $t - \tau$:

$$D(t - t_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \langle \mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 \rangle = \left(\frac{m/2\pi i}{t - t_0} \right)^{3/2} \exp \left\{ \frac{im}{2} \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{t - t_0} \right\}.$$

Квадрат её модуля не зависит от разности координат $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$, что связано с полной неопределённостью импульса в состоянии $|\mathbf{x}_0\rangle$, допускающим в нерелятивистской квантовой механике и бесконечные значения импульса, а, следовательно, и скорости частицы.

7 Сверхтекучесть

Рассмотрим в объёме $V \rightarrow \infty$ больше число бозонов $N \rightarrow \infty$, концентрация $n = N/V$ которых конечна. Будем использовать дискретное импульсное представление (стр. 225). Если взаимодействия между бозонами нет:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}},$$

в основном состоянии с минимальной энергией:

$$|E_0\rangle = a_{\mathbf{0}}^{+N} | \rangle \quad (14.58)$$

все импульсы частиц и суммарная энергия равны нулю. При наличие взаимодействия, гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4} W_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4}. \quad (14.59)$$

В этом случае оператор числа частиц с нулевым импульсом $\hat{N}_{\mathbf{0}} = \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}$ не коммутирует с полным гамильтонианом:

$$[\hat{N}_{\mathbf{0}}, \hat{H}] \neq 0,$$

поэтому (14.58) не является собственным вектором \hat{H} . Тем не менее при достаточно слабом взаимодействии, естественно предположить, что *среднее число* бозонов с нулевым импульсом $N_{\mathbf{0}}$ велико и сравнимо с общим числом частиц N . Выделим в суммах (14.59) нулевые импульсы:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum'_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{W_{\mathbf{0}}}{2V} \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{0}} + \frac{W_{\mathbf{0}}}{2V} \sum'_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{0}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{p}}) \\ & + \frac{1}{2V} \sum'_{\mathbf{p}} W_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{0}} + \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{0}}) + \dots, \end{aligned}$$

где штрихи над суммами означают пропуск нулевых значений импульсов и многоточием обозначены члены в которых присутствует три или четыре оператора с ненулевым импульсом. Второе слагаемое в \hat{H} получается когда в члене взаимодействия все импульсы равны нулю. Три импульса нулю равны не могут, так как при этом символ Кронекера равен нулю при оставшемся ненулевом импульсе. Когда равны нулю 2 импульса возможно 6 вариантов. Первые два: $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_4 = 0$ и $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 = 0$ записаны в первой строке (третье слагаемое), остальные 4 – во второй. При этом предполагается, что $W_{\mathbf{p}}$ является чётной функцией: $W_{-\mathbf{p}} = W_{\mathbf{p}}$.

Пусть $N_0 = \langle E_0 | \hat{N}_0 | E_0 \rangle$ – это среднее число частиц с нулевым импульсом в основном состоянии и $\Delta N = N - N_0$ мал по сравнению с N . Запишем средние значения по основному состоянию

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \rangle = N_0, \quad \sum_{\mathbf{p}}' \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = N - N_0 = \Delta N.$$

Из этих соотношений можно сделать вывод, что оператор $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ мал и имеет порядок $\sqrt{\Delta N}$. Оператор $\hat{a}_{\mathbf{0}}$, наоборот, велик (порядка $\sqrt{N_0}$). Его можно записать в виде

$$\hat{a}_{\mathbf{0}} = \sqrt{N_0} + \hat{A}_{\mathbf{0}},$$

где $\hat{A}_{\mathbf{0}}$ малый по сравнению с $\sqrt{N_0}$ оператор и учесть вклад от $\hat{A}_{\mathbf{0}}$ по теории возмущений. Мы рассмотрим ведущее приближение, в котором $\hat{a}_{\mathbf{0}}$ можно считать единичными операторами, умноженными на $\sqrt{N_0}$. В этом приближении второе и третье слагаемое в выражении для \hat{H} равны:

$$\hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \hat{a}_{\mathbf{0}} + 2\hat{a}_{\mathbf{0}}^+ \hat{a}_{\mathbf{0}} \sum_{\mathbf{p}}' \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \approx N_0^2 + 2N_0 (\hat{N} - N_0) = \hat{N}^2 - \Delta \hat{N}^2. \quad (14.60)$$

Первое слагаемое в \hat{H} имеет порядок ΔN , а суммы во второй строчке имеют порядок малости $N_0 \Delta N = N \Delta N - (\Delta N)^2$. Не выписанные суммы, помеченные многоточием, с одним нулевым импульсом имеют порядок $\sqrt{N_0}(\Delta N)^{3/2}$, а без него $(\Delta N)^2$.

Пренебрежём членами порядка $(\Delta N/N)^{3/2}$ и выше. В рамках этой точности можно в (14.60) отбросить $(\Delta N)^2$, а в суммах во второй строчке \hat{H} заменить $\hat{a}_{\mathbf{0}}^2$ на N , а не на N_0 . В результате имеем следующий гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{n^2}{2} V W_{\mathbf{0}} + \sum_{\mathbf{p}}' \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{p}}' W_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+), \quad (14.61)$$

где $n = N/V$ – концентрация частиц и

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + n W_{\mathbf{p}}. \quad (14.62)$$

Заметим, что этот гамильтониан коммутирует с оператором частиц с нулевым импульсом \hat{N}_0 , поскольку все суммы от операторов $\hat{a}_{\mathbf{0}}$ не зависят. Степень точности использованных приближений мы выясним, когда найдём основное состояние этого гамильтониана и вычислим в нём значение $\Delta N/N$.

Чтобы найти спектр гамильтониана (14.61), его необходимо привести к диагональному виду

$$\hat{H} = E_0 + \sum'_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}} \quad (14.63)$$

с операторами, удовлетворяющими перестановочным соотношениям:

$$[\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{k}}] = [\hat{A}_{\mathbf{p}}^+, \hat{A}_{\mathbf{k}}^+] = 0, \quad [\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{k}}^+] = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}. \quad (14.64)$$

Тогда $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+$ будут иметь смысл операторов рождения частиц с энергией $E_{\mathbf{p}}$, а константа E_0 равняется энергии вакуума (когда этих частиц нет). Так как $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+$ не равняются $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$, то подобные частицы отличны от исходных бозонов и мы будем называть их “квазичастицами”.

Для решения поставленной задачи запишем линейную связь между старыми и новыми операторами:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = \hat{a}_{\mathbf{p}} \operatorname{ch} \beta_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ \operatorname{sh} \beta_{\mathbf{p}}, \quad (14.65)$$

где $\beta_{\mathbf{p}}$ некоторая функция импульса, которую будем считать чётной: $\beta_{\mathbf{p}} = \beta_{-\mathbf{p}}$, чтобы выполнялись (14.64). Несложно также написать обратное к (14.65) преобразование:

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = \hat{A}_{\mathbf{p}} \operatorname{ch} \beta_{\mathbf{p}} - \hat{A}_{-\mathbf{p}}^+ \operatorname{sh} \beta_{\mathbf{p}}. \quad (14.66)$$

Соотношения (14.65), (14.66) называют *каноническим преобразованием Боголюбова*, так как данную модель разработал Н.Н. Боголюбов в 1946 г.

Запишем теперь произведение, входящее в (14.63):

$$\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}} = \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \operatorname{ch}^2 \beta_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ \operatorname{sh}^2 \beta_{\mathbf{p}} + (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+) \operatorname{sh} \beta_{\mathbf{p}} \operatorname{ch} \beta_{\mathbf{p}}.$$

Будем считать функцию $E_{\mathbf{p}}$ чётной, поэтому при суммировании по \mathbf{p} член $E_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+$ можно заменить на $E_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+$. В результате имеем:

$$\hat{H} = E_0 + \sum'_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ \frac{\operatorname{ch}(2\beta_{\mathbf{p}}) - 1}{2} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \operatorname{ch}(2\beta_{\mathbf{p}}) + \frac{1}{2} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+) \operatorname{sh}(2\beta_{\mathbf{p}}) \right\},$$

где учтено, что $2 \operatorname{sh}^2 \beta = \operatorname{ch}(2\beta) - 1$, $\operatorname{ch}^2 \beta + \operatorname{sh}^2 \beta = \operatorname{ch}(2\beta)$ и т.д. Если положить:

$$E_{\mathbf{p}} \operatorname{ch}(2\beta_{\mathbf{p}}) = \varepsilon_{\mathbf{p}}, \quad E_{\mathbf{p}} \operatorname{sh}(2\beta_{\mathbf{p}}) = nW_{\mathbf{p}} \quad (14.67)$$

и

$$E_0 = \frac{n^2}{2} V W_0 - \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{p}} (\varepsilon_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}}), \quad (14.68)$$

то гамильтонианы (14.63), (14.61) будут совпадать.

Пусть на больших расстояниях бозоны притягиваются, а на малых отталкиваются так, что (см. стр. 224, ??)

$$W_0 = (2\pi\hbar)^3 W(\mathbf{p} = 0) = \int W(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = 4\pi \int_0^\infty W(r) r^2 dr > 0.$$

Возводя в квадрат и вычитая соотношения (14.67), получаем:

$$E_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \sqrt{1 + 4 \frac{p_0^2}{\mathbf{p}^2}}, \quad p_0 = \sqrt{\rho W_0}. \quad (14.69)$$

где $\rho = mN/V = nm$ – плотность бозонов. При малых \mathbf{p} энергия квазичастиц имеет фононный спектр со скоростью звука p_0/m (см. стр. 137):

$$E_{\mathbf{p}} \approx \frac{p_0}{m} |\mathbf{p}| + \dots$$

Найдём условия применимости теории. Произведение $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}$ имеет такую же структуру, как и $\hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}}$ с точностью смены знака у $\beta_{\mathbf{p}}$, поэтому:

$$\hat{N} - \hat{N}_0 = \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}}} + \sum'_{\mathbf{p}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}}} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}} - \frac{n}{2} \sum'_{\mathbf{p}} \frac{W_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}}} (\hat{A}_{\mathbf{p}} \hat{A}_{-\mathbf{p}} + \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{-\mathbf{p}}^+).$$

Среднее $\hat{N} - \hat{N}_0$ по вакууму квазичастиц определяется первой суммой, которую вычислим в пределе $V \rightarrow \infty$, переходя к интегрированию в сферических координатах и делая замену $p = zp_0$:

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{4\pi}{2N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p_0^3 I = \frac{p_0^3}{\hbar^3 n} \frac{I}{4\pi^2},$$

где интеграл I и обезразмерен введением функции $w(p) = W_{\mathbf{p}}/W_0$:

$$I = \int_0^\infty dz z^2 \frac{1 + 2w(zp_0)/z^2 - \sqrt{1 + 4w(zp_0)/z^2}}{\sqrt{1 + 4w(zp_0)/z^2}}.$$

Например, если $w(p) = 1$, что соответствует точечному отталкиванию частиц $W(\mathbf{x}) = W_0 \delta(\mathbf{x})$, интеграл равен $I \approx 4/3$. В этом случае использованное приближение будет справедливо, если

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_0^3}{\hbar^3 n} \ll 1,$$

что выполняется при малости безразмерного параметра $p_0/(\hbar n^{1/3})$.

Пусть бозоны являются атомами гелия ${}^4\text{He}$ при низкой температуре $T < 4.215 \text{ K}$, когда он становится жидким. Для него скорость звука, плотность и масса атома равны:

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = 20 \frac{\text{м}}{\text{с}}, \quad \rho \sim 130 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad m = 4m_p = 4 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ кг}.$$

Поэтому, учитывая значение постоянной Планка $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$, получаем:

$$\frac{p_0}{\hbar n^{1/3}} = \frac{v_0 m^{4/3}}{\hbar \rho^{1/3}} \approx 0.47.$$

Куб этой величины, делённый на $3\pi^2$ (для точечного взаимодействия) равен 0.004. Таким образом, в этом случае менее полу процента частиц имеют не нулевые импульсы. Впрочем, конкретный числовой коэффициент, определяющий $\Delta N/N$ существенно зависит от явного вида потенциала взаимодействия. Заметим, что в жидком гелии существует две скорости звука. Приведенная выше – так называемая вторая скорость связана со спектром квазичастиц. Обычная скорость звука, определяемая фононами исходных атомов гелия в 10 раз больше и равна 250 м/с.

Концентрация атомов гелия равная $n = \rho/m = 1/\mathcal{V}$, определяет характерный объём $\mathcal{V} = 4\pi R^3/3$, занимаемый одним атомом. В свою очередь, кубический корень из концентрации пропорционален радиусу сферы, приходящейся на атом:

$$R \sim \left(\frac{3m}{4\pi\rho} \right)^{1/3} \approx 2.2 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

тогда как типичный “радиус” атома гелия в 10 раз меньше и составляет порядка $0.3 \cdot 10^{-10}$ м.

Запишем теперь плотность энергии вакуума квазичастиц (14.68) при $V \rightarrow \infty$:

$$\frac{E_0}{V} = \frac{n^2}{2} W_0 - \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \left\{ 1 + \frac{2\rho W_p}{\mathbf{p}^2} - \sqrt{1 + \frac{4\rho W_p}{\mathbf{p}^2}} \right\} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

При больших \mathbf{p} подынтегральное выражение стремиться к $(\rho^2/m) W_p^2 / \mathbf{p}^2$. Чтобы такой интеграл сходился, W_p должно убывать при больших импульсах быстрее чем $|\mathbf{p}|^{-1/2}$.

Рассмотрим модельный потенциал взаимодействия между бозонами:

$$W(r) = \frac{W_0}{4\pi r_0^2} \left(\frac{1+2\alpha}{r} - \frac{\alpha}{r_0} \right) e^{-r/r_0}$$

Константы выбраны так, чтобы фурье-образ потенциала в нуле был положителен, независимо от значения параметра α :

$$W_p = W_0 \frac{1 + (1+\alpha)(pr_0/\hbar)^2}{\{1 + (pr_0/\hbar)^2\}^2}.$$

Оператор суммарного импульса системы в старых и новых операторах совпадает:

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum'_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = \sum'_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \hat{A}_{\mathbf{p}}^+ \hat{A}_{\mathbf{p}},$$

где сумма от \mathbf{p} $\text{sh}^2 \beta_{\mathbf{p}}$ равна нулю в силу антисимметрии выражения.

Часть V

Специальные вопросы

Глава 15

Метод факторизации

Использование операторов повышения и понижения \hat{a}^+ , \hat{a} для постореня спектра гармонического осциллятора (глава 2), это достаточно универсальный метод. Его можно обобщить и похожим образом находить собственные значения и векторы самых различных операторов [6]. Сначала будет рассмотрена идея метода, которая затем иллюстрируется на нескольких примерах.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Построение спектра оператора

Найдём собственные значения эрмитового оператора $\hat{H} = \hat{H}_0$, представив его в форме

$$\hat{H}_0 = \hat{A}_0^+ \hat{A}_0 + E_0, \quad (15.1)$$

где E_0 – некоторое действительное число. Если подобное представление неоднозначно, выберем такое, при котором E_0 наибольшее. Затем построим последовательность операторов \hat{A}_n и \hat{H}_n :

$$\hat{H}_n = \hat{A}_n^+ \hat{A}_n + E_n = \hat{A}_{n-1} \hat{A}_{n-1}^+ + E_{n-1}, \quad (15.2)$$

так, что числа E_n максимальные и $E_n > E_{n-1}$. Несложно проверить выполнение “перестановочных” соотношений ($\prec H_{47}$):

$$\hat{H}_n \hat{A}_{n-1} = \hat{A}_{n-1} \hat{H}_{n-1}, \quad \hat{A}_n^+ \hat{H}_{n+1} = \hat{H}_n \hat{A}_n^+. \quad (15.3)$$

Построим теперь состояния

$$\hat{A}_n |\varphi_{n-1}\rangle = |\varphi_n\rangle = \hat{A}_n \dots \hat{A}_1 \hat{A}_0 |E\rangle, \quad (15.4)$$

где $|E\rangle$ – собственные векторы оператора $\hat{H} = \hat{H}_0$. Так как норма любого вектора неотрицательна, из (15.1) следует:

$$\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = \langle E | \hat{A}_0^+ \hat{A}_0 | E \rangle = \langle E | (\hat{H}_0 - E_0) | E \rangle = E - E_0 \geq 0. \quad (15.5)$$

Далее, пользуясь первым соотношением (15.3), запишем:

$$\hat{A}_0^+ \hat{A}_1^+ \hat{A}_1 \hat{A}_0 = \hat{A}_0^+ (\hat{H}_1 - E_1) \hat{A}_0 = \hat{A}_0^+ \hat{A}_0 (\hat{H}_0 - E_1).$$

Усреднение по $|E\rangle$ даёт:

$$\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle (E - E_1) = (E - E_0)(E - E_1) \geq 0. \quad (15.6)$$

Аналогично поступаем для $|\varphi_n\rangle$:

$$\langle E | \hat{A}_0^+ \dots \hat{A}_n^+ \hat{A}_n \dots \hat{A}_0 | E \rangle = \langle E | \hat{A}_0^+ \dots \hat{A}_{n-1}^+ (\hat{H}_n - E_n) \hat{A}_{n-1} \dots \hat{A}_0 | E \rangle.$$

Будем переносить $\hat{H}_n - E_n$ вправо к $|E\rangle$. При перестановке с каждым \hat{A}_{k-1} , индекс \hat{H}_k понижается на единицу (15.3), пока не станет нулевым:

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = (E - E_n) \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle = (E - E_0)(E - E_1) \dots (E - E_n) \geq 0,$$

где снова учтена неотрицательность нормы состояния $|\varphi_n\rangle$.

Так как это соотношение справедливо при любом n и $E_0 < E_1 < \dots$, то либо $E > E_n$, либо E равно одному из E_n . Если спектр неограничен сверху ($E_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$), то всегда можно выбрать сколь угодно большое n , поэтому справедлив второй вывод: $E = E_n$, т.е. числа E_n пробегают все собственные значения \hat{H} . Если же последовательность E_n ограничена и стремится к некоторому E_{max} , то E или совпадает с одним из E_n , или принимает любое *непрерывное* значение $E > E_{max}$.

Построим собственные векторы $|E_n\rangle$ оператора \hat{H} , соответствующие собственным значениям E_n . Пусть $E = E_0$. Тогда из (15.5) следует, что $|\varphi_0\rangle = 0$ и (15.4) даёт уравнение из которого находится вектор основного состояния для (15.1):

$$\hat{A}_0 |E_0\rangle = 0, \quad \hat{H} |E_0\rangle = E_0 |E_0\rangle. \quad (15.7)$$

Если положить $E = E_1$, то из (15.6) следует $|\varphi_1\rangle = 0$, поэтому из (15.6):

$$\hat{A}_1 |\varphi_0\rangle = 0. \quad (15.8)$$

Решив это уравнение, можно построить первое возбуждённое состояние:

$$|E_1\rangle = \hat{A}_0^+ |\varphi_0\rangle. \quad (15.9)$$

Действительно, докажем, что для него выполняется $\hat{H} |E_1\rangle = E_1 |E_1\rangle$:

$$\hat{H} |E_1\rangle = \hat{H}_0 \hat{A}_0^+ |\varphi_0\rangle = \hat{A}_0^+ \hat{H}_1 |\varphi_0\rangle = \hat{A}_0^+ (\hat{A}_1^+ \hat{A}_1 + E_1) |\varphi_0\rangle = E_1 \hat{A}_0^+ |\varphi_0\rangle,$$

где сначала переставлены операторы при помощи (15.3), а затем учтено (15.8). В общем случае для $E = E_n$ вектор $|\varphi_n\rangle = 0$ и если найдено решение уравнения

$$\hat{A}_n |\varphi_{n-1}\rangle = 0, \quad (15.10)$$

то вектор n -того возбуждённого состояния равен:

$$|E_n\rangle = \hat{A}_0^+ \dots \hat{A}_{n-1}^+ |\varphi_{n-1}\rangle. \quad (15.11)$$

Для доказательства, необходимо подействовать на этот вектор оператором $\hat{H} = \hat{H}_0$ и n раз перенести его через $\hat{A}_0, \dots, \hat{A}_{n-1}$, пока не получится $\hat{H}_n = \hat{A}_n^+ \hat{A}_n + E_n$. В силу (15.10), результат будет равен $E_n |E_n\rangle$.

В общем случае векторы $|E_n\rangle$, получаемые из (15.11), могут иметь произвольную норму, которую, как обычно, можно сделать единичной.

Метод факторизации применим как в одномерном, так и в многомерном случаях. При этом \hat{H} не обязательно должен быть гамильтонианом и таким образом иногда удаётся найти дискретный спектр различных эрмитовых операторов.

2 Потенциал Морзе

Приведём несколько примеров потенциалов, допускающих точные решения. В одномерном стационарном уравнении Шрёдингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = (U(x) - E) \Psi(x)$$

всегда можно сделать замену $x \mapsto x/x_0$, чтобы потенциал и энергия стали безразмерными. Поэтому далее считаем, что координата измеряется в единицах произвольной константы x_0 размерности длины. Для её восстановления необходимо сделать обратную замену $x \mapsto x/x_0$, а потенциал U и энергию E_n умножить на $2m x_0^2/\hbar^2$. Таким образом, не ограничивая общности, будем искать спектр гамильтонiana:

$$\hat{H} = \hat{p}^2 + U(\hat{x}). \quad (15.12)$$

Метод факторизации можно применять прямо – угадывая по данному потенциалу $U(x)$ операторы \hat{A}_n . Однако, можно поступать обратным образом – взяв некоторую систему операторов \hat{A}_n , удовлетворяющих (15.2), выяснить к какому потенциалу они приводят. Рассмотрим в качестве примера операторы:

$$\hat{A}_n = a_n - b e^{-x} + i \hat{p}, \quad (15.13)$$

где a_n, b – некоторые действительные константы. Найдём:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = (a_n - b e^{-x} - i \hat{p})(a_n - b e^{-x} + i \hat{p}) = \hat{p}^2 + (a_n - b e^{-x})^2 + i b [\hat{p}, e^{-x}].$$

Аналогичное выражение со знаком минус в последнем слагаемом получается для $\hat{A}_n \hat{A}_n^+$. Вычислим коммутатор и выясним когда можно удовлетворить соотношению (15.2):

$$(a_n - b e^{-x})^2 - b e^{-x} + E_n = (a_{n-1} - b e^{-x})^2 + b e^{-x} + E_{n-1}.$$

Возводя в квадрат и приравнивая коэффициенты при слагаемых пропорциональных e^{-x} и не зависящих от x , получаем:

$$a_n = a_{n-1} - 1, \quad E_n + a_n^2 = E_{n-1} + a_{n-1}^2. \quad (15.14)$$

При $n = 0$ произведение $\hat{A}_0^+ \hat{A}_0$ (15.1) должно дать гамильтониан (15.12), что приводит к

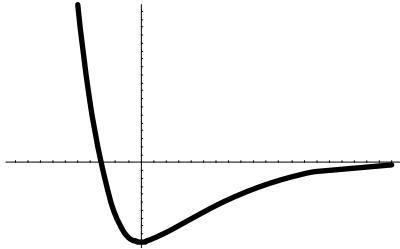
$$U(x) = b^2 e^{-2x} - 2b \left(a + \frac{1}{2}\right) e^{-x}, \quad E_0 = -a^2. \quad (15.15)$$

Этот потенциал называется *потенциалом Морзе*. Осталось записать его спектр.

Первое рекуррентное соотношение (15.14) имеет решение: $a_n = a - n$, где $n = 0, 1, \dots$ и $a \equiv a_0$. Второе имеет вид $Q_n = Q_{n-1} = Q_{n-2} = \dots = Q_0$, поэтому $E_n + a_n^2 = E_0 + a_0^2$, что эквивалентно:

$$E_n = -(a - n)^2. \quad (15.16)$$

Минимум потенциала $U_{min} = -(a + 1/2)^2$ в $x_{min} = -\ln([a + 1/2]/b)$ существует, если $(2a + 1)b > 0$. Без потери общности можно сдвинуть начало координат в точку минимума $x \mapsto x + x_{min}$:



$$U(x) = \left(a + \frac{1}{2}\right)^2 \left[e^{-2x} - 2e^{-x}\right], \quad (15.17)$$

т.е. положить $b = a + 1/2$. При $x \rightarrow \infty$ имеем $U(x) \rightarrow 0$, поэтому связанные состояния имеют отрицательные энергии $E_n < 0$. При $a = n$ энергия равна нулю, поэтому на квантовое число n есть ограничение:

$$n < a, \quad (15.18)$$

т.е. в потенциале Морзе может быть только конечное число связанных состояний.

Найдём волновую функцию основного состояния. Уравнение (15.10) $\hat{A}_n |\varphi_{n-1}\rangle = 0$, в координатном базисе имеет вид ($b = a + 1/2$):

$$\left[a - n - b e^{-x}\right] \varphi_{n-1}(x) + \varphi'_{n-1}(x) = 0.$$

Несложное интегрирование даёт:

$$\varphi_{n-1}(x) = C \exp\left\{-\left(a - n\right)x - b e^{-x}\right\},$$

где C – константа. При $n = 0$ это функция основного состояния:

$$\Psi_0(x) = \langle x | E_0 \rangle = C \exp\left\{-a x - b e^{-x}\right\}. \quad (15.19)$$

Функция первого возбуждённого состояния получается из соотношения (15.11):

$$\Psi_1(x) = \hat{A}_0^+ \varphi_0(x) = \left[a - b e^{-x} - \frac{d}{dx}\right] \varphi_0(x) = 2(a - b e^{-x}) \Psi_0(x).$$

Аналогично находятся волновые функции следующих возбуждённых состояний.

3 Гиперболический потенциал

- В качестве ещё одного примера возьмём операторы:

$$\hat{A}_n = a_n \operatorname{th}(x) + b_n + i\hat{p}, \quad (15.20)$$

где a_n, b_n – действительные константы и th – гиперболический тангенс. Запишем:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = (a_n \operatorname{th}(x) + b_n - i\hat{p}) (a_n \operatorname{th}(x) + b_n + i\hat{p}),$$

перемножим скобки:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \hat{p}^2 + a_n^2 \operatorname{th}^2(x) + 2a_n b_n \operatorname{th}(x) + b_n^2 + i a_n [\operatorname{th}(x), \hat{p}]$$

и вычислим коммутатор ($\hbar = 1$):

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \hat{p}^2 + a_n^2 + b_n^2 + 2a_n b_n \operatorname{th}(x) - \frac{a_n (a_n + 1)}{\operatorname{ch}^2(x)}.$$

Это же выражение получается для $\hat{A}_n \hat{A}_n^+$, но с множителем $a_n (a_n - 1)$ в последнем слагаемом. При $n = 0$, в соответствии с (15.1), следует гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}^2 + U(x)$, с потенциалом и энергией основного состояния:

$$U(x) = 2ab \operatorname{th}(x) - \frac{a(a+1)}{\operatorname{ch}^2(x)}, \quad (15.21)$$

где $b = b_0$, $a = a_0$ и $E_0 = -a_0^2 - b_0^2$. Соотношение (15.2) приводит к:

$$\begin{aligned} E_n + a_n^2 + b_n^2 - E_{n-1} - a_{n-1}^2 - b_{n-1}^2 = \\ -2(a_n b_n - a_{n-1} b_{n-1}) \operatorname{th}(x) + \frac{(a_n + a_{n-1})(a_n - a_{n-1} + 1)}{\operatorname{ch}^2(x)}. \end{aligned}$$

Левая часть не зависит от x , поэтому правая часть должна равняться нулю, для чего необходимо положить:

$$a_n b_n = a_{n-1} b_{n-1}, \quad a_n = a_{n-1} - 1.$$

Первое рекуррентное соотношение выполняется при любом n , поэтому $a_n b_n = a_0 b_0$. Второе, приводит к $a_n = a_0 - n$. Аналогично:

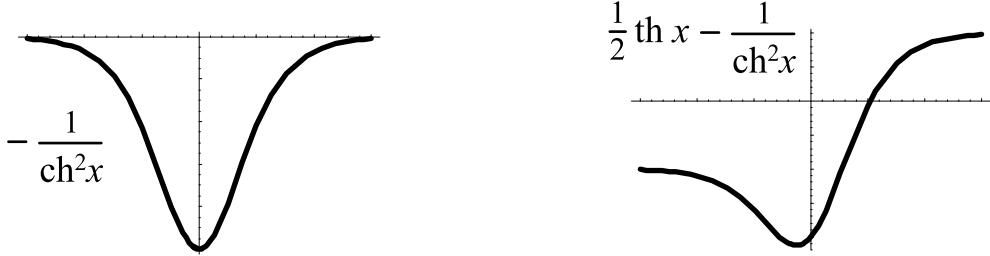
$$E_n + a_n^2 + b_n^2 = E_0 + a_0^2 + b_0^2,$$

откуда получаются энергии:

$$E_n = -(a - n)^2 - \frac{(ab)^2}{(a - n)^2}, \quad (15.22)$$

где $n = 0, 1, \dots$ – номер связанного состояния.

▷ Нарисуем получившийся потенциал (15.31). Пусть $a > 0$. Если $b = 0$, он симметричен при $x \mapsto -x$. Изменение знака A переворачивает его вокруг минимума. При этом $V(\pm\infty) = \pm 2ab$:



Минимум существует при $b < a + 1$ (считаем далее $a, b > 0$) и в точке $x_0 = -\text{ath}(b/(a+1))$ равен $V_{min} = -a(a+1) - b^2a/(a+1)$.

Энергии связанных состояний E_0 всегда меньше $V(-\infty) = -2ab$. Поэтому из (15.22) следует ограничение на квантовое число n (полагаем $E_n = -2ab$):

$$n < a - \sqrt{ab}. \quad (15.23)$$

Волновую функцию основного состояния $\Psi_0(x) = \langle x | E_0 \rangle$ найдём, решая в координатном базисе уравнение:

$$\hat{A}_0 \Psi_0(x) = \left(a \text{ th}(x) + b + \frac{d}{dx} \right) \Psi_0(x) = 0,$$

откуда, с точностью до нормировочного множителя:

$$\Psi_0(x) = \frac{e^{-bx}}{\text{ch}^a(x)}. \quad (15.24)$$

При $x \rightarrow -\infty$ волновая функция $\Psi_0(x) \sim e^{-(a-b)|x|}$ убывает только при $b < a$, что является условием существования связанного состояния. Такое же решение, но с $a \mapsto a_1 = a - 1$ и $b \mapsto b_1 = ab/(a-1)$ имеет уравнение $\hat{A}_1 \varphi(x) = 0$, поэтому первое возбуждённое состояние описывается волновой функцией:

$$\Psi_1(x) \sim \hat{A}_0^+ \varphi_0(x) \sim \left[(2a-1) \text{ th}(x) + \frac{2ab-1}{a-1} \right] \frac{e^{-abx/(a-1)}}{\text{ch}^{a-1}(x)}.$$

При больших x , $\Psi_1(x) \sim \exp\{-((a-1)^2 + A)x/(a-1)\}$ и это состояние возможно только при $1 < a$. Аналогично, по алгоритму (15.10), (15.11) находится функция второго возбуждённого состояния и т.д.

4 Трехмерные задачи

▷ Рассмотрим трёхмерный гармонический осциллятор (стр. 110) с гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2. \quad (15.25)$$

Сделаем преобразование $r \mapsto r r_0$, $\hat{p}_r \mapsto \hbar \hat{p}_r / r_0$, где $r_0 = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$ – константа размерности длины (стр. 62) и новые “безразмерные” операторы координаты и импульса коммутируют следующим образом: $[r, \hat{p}_r] = i$. В результате таких замен гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \hat{h}, \quad \hat{h} = \hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} + r^2.$$

Для получения спектра \hat{h} , введём операторы:

$$\hat{A}_n = \frac{\alpha_n}{r} + r + i\hat{p}_r \quad (15.26)$$

и вычислим ($\lessdot H_{48}$) их произведения:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \hat{p}_r^2 + \frac{\alpha_n^2 + \alpha_n}{r^2} + r^2 + 2\alpha_n - 1, \quad \hat{A}_n \hat{A}_n^+ = \hat{p}_r^2 + \frac{\alpha_n^2 - \alpha_n}{r^2} + r^2 + 2\alpha_n + 1.$$

При $n = 0$ комбинация $\hat{A}_0^+ \hat{A}_0 + h_0$ должна дать гамильтониан:

$$\alpha_0^2 + \alpha_0 = l(l+1), \quad h_0 = 1 - 2\alpha_0.$$

Из двух решений квадратного уравнения для α_0 : l и $-l - 1$, выбираем второе решение, которое даёт наибольшее значение для $h_0 = 2l + 3$. Подставляя произведения операторов \hat{A}_n^+ и \hat{A}_n в соотношение (15.2): $\hat{h}_n = \hat{A}_n^+ \hat{A}_n + h_n = \hat{A}_{n-1}^+ \hat{A}_{n-1} + h_{n-1}$, получаем:

$$\alpha_n^2 + \alpha_n = \alpha_{n-1}^2 - \alpha_{n-1}, \quad h_n = h_{n-1} + 2(\alpha_{n-1} - \alpha_n + 1).$$

Корень первого уравнения для которого $h_n > h_{n-1}$ при любом n , равен: $\alpha_n = \alpha_{n-1} - 1$ или $\alpha_n = \alpha_0 - n$ и $h_n = h_{n-1} + 4 = h_0 + 4n$, где $n = 0, 1, 2\dots$. Таким образом, энергии связанных состояний ($n \mapsto n_r$):

$$E_{n_r, l} = \frac{\hbar\omega}{2} (4n_r + 2l + 3), \quad n_r, l = 0, 1, 2\dots \quad (15.27)$$

определяются двумя независимыми квантовыми числами n_r, l , которые связаны с n (5.21): $n = 2n_r + l$. В качестве упражнения предлагается найти волновые функции осциллятора ($\lessdot H_{49}$).

• Ещё одним важным точно решаемым случаем является кулоновский потенциал (атом водорода, стр. 114):

$$\hat{H} = E_B \hat{h}, \quad \hat{h} = \hat{p}_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}, \quad (15.28)$$

где расстояния измеряются в боровских радиусах $r_B = \hbar^2 / \mu \alpha$, а энергия E в единицах $E_B = \alpha / r_B$. Выбрав

$$\hat{A}_n = b_n - \frac{a_n}{r} + i \hat{p}_r,$$

имеем:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \hat{p}_r^2 + \frac{a_n^2 - a_n}{r^2} - \frac{2a_n b_n}{r} + b_n^2.$$

Произведение $\hat{A}_n \hat{A}_n^+$ отличается во втором слагаемом $a_n^2 - a_n \mapsto a_n^2 + a_n$. Гамильтониан (15.28) равен $\hat{A}_0^+ \hat{A}_0 + h_0$, поэтому:

$$a_0 = l + 1, \quad b_0 = \frac{1}{l+1}, \quad h_0 = -\frac{1}{(l+1)^2},$$

где выбирается такое a_0 , при котором h_0 максимально. Из соотношения (15.2): $\hat{h}_n = \hat{A}_n^+ \hat{A}_n + h_n = \hat{A}_{n-1}^+ \hat{A}_{n-1} + h_{n-1}$, получаем связи:

$$a_n^2 - a_n = a_{n-1}^2 + a_{n-1}, \quad a_n b_n = a_{n-1} b_{n-1}, \quad h_n = h_{n-1} + b_{n-1}^2 - b_n^2.$$

Уровни энергии должны увеличиваться: $b_{n-1}^2 > b_n^2$. Поэтому из двух корней $a_n = a_{n-1} + 1$ и $a_n = -a_{n-1}$ выбираем первый. Второе соотношение выполняется при любом n , следовательно $a_n b_n = a_0 b_0 = 1$:

$$a_n = a_{n-1} + 1 = a_0 + n = n + l + 1, \quad b_n = \frac{1}{n + l + 1}.$$

Аналогично $h_n + b_n^2 = h_0 + b_0^2 = 0$, поэтому $h_n = -b_n^2$. При построении собственных волновых функций, решаются уравнения (стр. 249):

$$\hat{A}_n \varphi_{n-1} = \left(\frac{1}{l+n+1} - \frac{l+n}{r} + \frac{d}{dr} \right) \varphi_{n-1} = 0.$$

При $n = 0$ оно даёт радиальную функцию основного состояния:

$$R_{0l}(r) = \left(\frac{2}{l+1} \right)^{l+3/2} \frac{1}{\sqrt{\Gamma(2l+3)}} r^l e^{-r/(l+1)} \quad (15.29)$$

Аналогично строятся волновые функции возбуждённых (по числу нулей) состояний.

5 Класс точно решаемых задач

Найдём при помощи метода факторизации класс точно решаемых задач с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2 + V(x)$ (система единиц $\hbar = 1$ и $m = 1/2$). Пусть:

$$\hat{A}_n = f_n(x) + i\hat{p}, \quad (15.30)$$

где $f_n(x)$ – действительные функции координаты. Тогда:

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \hat{p}^2 + f_n^2(x) - f'_n(x), \quad \hat{A}_n \hat{A}_n^+ = \hat{p}^2 + f_n^2(x) + f'_n(x).$$

При $n = 0$ (15.1) должен получиться гамильтониан:

$$U(x) = f_0^2(x) - f'_0(x) + E_0, \quad (15.31)$$

а соотношение (15.2) даёт:

$$E_n - E_{n-1} = f'_n(x) + f'_{n-1}(x) - f_n^2(x) + f_{n-1}^2(x). \quad (15.32)$$

Выберем теперь функции $f_n(x)$ в виде:

$$f_n(x) = a_n F(x) + b_n G(x), \quad (15.33)$$

где a_n, b_n – константы. Для такой факторизации потенциал равен:

$$U(x) = a_0^2 F^2 - a_0 F' + b_0^2 G^2 - b_0 G' + 2a_0 b_0 FG + E_0. \quad (15.34)$$

Подстановка (15.33) в (15.32) даёт рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} E_n - E_{n-1} &= -2(a_n b_n - a_{n-1} b_{n-1}) F G \\ &+ (a_n + a_{n-1}) [F' - (a_n - a_{n-1}) F^2] + (b_n + b_{n-1}) [G' - (b_n - b_{n-1}) G^2]. \end{aligned}$$

Справа должна быть ненулевая константа, которая может зависеть от n . Одновременно обнулить 5 коэффициентов при функциях координат невозможно. Поэтому необходимо уменьшить их количество. Это можно сделать [12], например, следующими выборами функции $G(x)$:

$$G(x) = 1, \quad G(x) = \frac{1}{F(x)}, \quad G(x) = \sqrt{a + b F^2(x)}. \quad (15.35)$$

В первом случае константу в правой части даёт второе и четвёртое слагаемые. Выбор $F G = 1$ даёт константу в последнем слагаемом. Третья возможность, после возведения G в квадрат, приводит к константе в четвёртом слагаемом. Далее необходимо выбрать такое дифференциальное уравнение для F , чтобы оставшиеся функции координат сократились ($\lessdot H_{50}$).

▷ Получаемые рекуррентные соотношения, зависящие от n в k -той степени можно решать, подставляя в них полином $(k+1)$ -й степени по n и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях n . Например, пусть:

$$\alpha_n = \alpha_{n-1} + \mu + \nu.$$

Записывая $\alpha_n = \alpha_0 + An + Bn^2$, подставляя в уравнением и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях n , получаем:

$$\alpha_n = \alpha_0 + \mu n + \frac{\nu}{2} n(n+1).$$

▷ По-мимо приведенных выше примеров, точные решения имеют также следующие потенциалы, выражющиеся через гиперболические функции:

$$U(x) = \frac{b^2 - a(a+1) + (2a+1)b \operatorname{sh} x}{\operatorname{ch}^2(x)}, \quad E_n = -(a-n)^2, \quad (15.36)$$

$$U(x) = \frac{b^2 + a(a+1) + (2a+1)b \operatorname{ch} x}{\operatorname{sh}^2(x)}, \quad E_n = -(a-n)^2, \quad (15.37)$$

$$U(x) = \frac{b(b+1)}{\operatorname{sh}^2(x)} - \frac{a(a+1)}{\operatorname{ch}^2(x)}, \quad E_n = -(a+b-2n)^2. \quad (15.38)$$

Для этих потенциалов необходимо использовать функции:

$$f_n = \frac{b + a_n \operatorname{sh} x}{\operatorname{ch} x}, \quad f_n = \frac{b + a_n \operatorname{ch} x}{\operatorname{sh} x}, \quad f_n = a_n \operatorname{th} x + b_n \operatorname{cth} x.$$

В первых двух случаях получается $a_n = a - n$, а в третьем: $a_n = a - n$, $b_n = b - n$ и $b \neq 0$.

Если в уравнении Шрёдингера формально сделать замену $x \mapsto ix$, то потенциал и энергия умножаться на -1 . Так как $\operatorname{sh}(ix) = i \sin(x)$ и $\operatorname{ch}(ix) = \cos(x)$, последние два потенциала можно записать при помощи тригонометрических функций. При этом связанные состояния предполагают, что частица находится в одном из минимумов потенциалов (они периодичны). Более детальное обсуждение их параметров и волновых функций можно найти в [13].

Естественно, факторизационный метод применим к (15.31), гармоническому осциллятору $U(x) = x^2$. Кроме рассмотренных задач, возможны и другие, более громоздкие варианты точно решаемых стационарных уравнений Шрёдингера.

Глава 16

Симметрии квантовой механики

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Симметрии осциллятора

• ▷ Для произвольного сферически симметричного потенциала $V(r)$ гамильтониан зависит от орбитального квантового числа l и не зависит от $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Поэтому для состояния с данной энергией E , следует ожидать кратность вырождения $2l + 1$ (любые m). Вырождение же осциллятора $(n+1)(n+2)/2$, $n = 2n_r + l$ существенно больше. Такую ситуацию называют “случайным” вырождением. Однако, для осциллятора оно не случайно и связано с высокой степенью симметрии задачи.

Рассмотрим N -мерный случай. Положим $\hbar = \mu = \omega = 1$ и выразим гамильтониан через операторы рождения и уничтожения одномерного осциллятора $\hat{a}_k = (\hat{x}_k + i\hat{p}_k)/\sqrt{2}$:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} (\hat{p}_k^2 + \hat{x}_k^2) = \sum_{k=1}^N \left(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k^- + \frac{1}{2} \right). \quad (16.1)$$

Введём следующий набор N^2 операторов ($\hat{A}_{ij}^+ = \hat{A}_{ji}$):

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} (\hat{a}_i^+ \hat{a}_j^- + \hat{a}_j^- \hat{a}_i^+) = \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^- + \frac{\delta_{ij}}{2} = \frac{\hat{p}_i \hat{p}_j + \hat{x}_i \hat{x}_j}{2} + \frac{i}{2} \hat{L}_{ij}, \quad (16.2)$$

где $\hat{L}_{ij} = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i = -i(\hat{A}_{ij} - \hat{A}_{ji})$ – оператор антисимметричного тензора N -мерного момента импульса. Так как $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$, несложно проверить, что:

$$[\hat{A}_{ij}, \hat{A}_{ab}] = \delta_{ja} \hat{A}_{ib} - \delta_{ib} \hat{A}_{aj}. \quad (16.3)$$

Отсюда следует, что гамильтониан $\hat{H} = \hat{A}_{11} + \dots + \hat{A}_{NN}$ коммутирует с каждым оператором:

$$[\hat{H}, \hat{A}_{ij}] = 0. \quad (16.4)$$

Из N^2 операторов одна комбинация ($\hat{A}_{11} + \dots + \hat{A}_{NN}$) образует собственно гамильтониан, поэтому мы имеем $N^2 - 1$ нетривиальных сохраняющихся величин, которые в общем случае не коммутируют друг с другом. Их алгебра (коммутационные соотношения) соответствуют алгебре генераторов группы SU_N , которая является группой унитарных матриц $N \times N$ с единичным определителем: $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$ и $\det \hat{U} = 1$.

Максимальное число коммутирующих генераторов группы называется её *рангом*. Можно показать, что ранг группы SU_N равен $N - 1$. Коммутирующие операторы образуют полный набор (стр. 34). Существует также $N - 1$ операторов *Казимира* (они строятся из генераторов), коммутирующих со всеми генераторами.

▷ Двухмерный осциллятор соответствует движению в плоскости x, y и эквивалентен двум несвязанным одномерным осцилляторам. Его энергия равна $E = n + 1$, где $n = n_1 + n_2$ и кратность вырождения $n + 1$. Сохраняющимся аналогом момента импульса является оператор:

$$\hat{L} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -\imath\hbar \frac{\partial}{\partial\phi},$$

где ϕ – полярный угол. Его собственные значения равны $\hbar m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ В полярных координатах: $x = r \cos \phi$ и $y = r \sin \phi$ лапласиан равен:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{r^2}.$$

При действии оператором квадрата импульса на радиальную функцию вида $R(r) = u(r)/\sqrt{r}$, получается уравнение ($l = |m| > 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u''(r) + \left[\frac{\hbar^2(l^2 - 1/4)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r),$$

поэтому в найденных ранее функциях $u(r)$, необходимо делать замену $l \mapsto l - 1/2$ (можно показать, что в N -мерном пространстве соответствующая замена имеет вид: $l \mapsto l + (N - 3)/2$). Без учёта симметрии, вырождение должно быть двухкратным ($m = \pm l$).

Для явной демонстрации “скрытой” симметрии двухмерного осциллятора, введём три эрмитовых оператора:

$$\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{A}_{12} + \hat{A}_{21}), \quad \hat{L}_2 = \frac{1}{2}(\hat{A}_{22} - \hat{A}_{11}), \quad \hat{L}_3 = -\frac{\imath}{2}(\hat{A}_{12} - \hat{A}_{21}).$$

Последний пропорционален моменту импульса $\hat{L}_3 = \hat{L}/2$, а

$$\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{p}_x\hat{p}_y + \hat{x}\hat{y}), \quad \hat{L}_2 = \frac{1}{4}(\hat{p}_x^2 + \hat{x}^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{y}^2).$$

Они образуют алгебру группы SU_2 (по k сумма):

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \imath \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k,$$

для которой оператор Казимира равен:

$$\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 = \frac{1}{4}\hat{H}^2 + \frac{1}{4}.$$

На стр. 34 было показано, что если $[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0$ и $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] \neq 0$, то спектр оператора \hat{H} должен быть вырожден. Именно это приводит к дополнительному вырождению энергий связанных состояний.

- В трёхмерном случае введём восемь операторов Гелл-Манна:

$$\begin{aligned}\hat{\lambda}_1 &= \hat{A}_{12} + \hat{A}_{21}, & \hat{\lambda}_2 &= -\imath(\hat{A}_{12} - \hat{A}_{21}), & \hat{\lambda}_3 &= \hat{A}_{11} - \hat{A}_{22} \\ \hat{\lambda}_4 &= \hat{A}_{13} + \hat{A}_{31}, & \hat{\lambda}_5 &= -\imath(\hat{A}_{13} - \hat{A}_{31}), & \hat{\lambda}_6 &= \hat{A}_{23} + \hat{A}_{32}, & \hat{\lambda}_7 &= -\imath(\hat{A}_{23} - \hat{A}_{32}), \\ \hat{\lambda}_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{A}_{11} + \hat{A}_{22} - 2\hat{A}_{33}).\end{aligned}$$

Они удовлетворяют алгебре SU_3 (по k – сумма от 1 до 8):

$$[\hat{\lambda}_i, \hat{\lambda}_j] = 2\imath f_{ijk} \hat{\lambda}_k, \quad (16.5)$$

со следующими, отличными от нуля антисимметричными структурными константами (перестановка в них пары индексов даёт минус):

$$f_{123} = 1, \quad f_{147} = f_{516} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{637} = \frac{1}{2}, \quad f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

Обратим внимание, что коммутаторы, в результате которых появляется $\hat{\lambda}_8$, содержат в правой части два слагаемых:

$$[\hat{\lambda}_4, \hat{\lambda}_5] = \imath\sqrt{3} \hat{\lambda}_8 + \imath \hat{\lambda}_3, \quad [\hat{\lambda}_6, \hat{\lambda}_7] = \imath\sqrt{3} \hat{\lambda}_8 - \imath \hat{\lambda}_3.$$

Соответствующие группе SU_3 матрицы Гелл-Манна получаются, если $(\hat{A}_{ij})_{\alpha\beta}$ записать как матрицы 3×3 (по индексам α, β) в которых отличен от нуля только элемент $\alpha = i, \beta = j$, т.е. $(\hat{A}_{ij})_{\alpha\beta} = \delta_{i\alpha}\delta_{j\beta}$. След произведения матриц $(\hat{\lambda}_k)_{\alpha\beta}$ удовлетворяет простому соотношению ортогональности:

$$\text{Tr}(\hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j) = 2 \delta_{ij},$$

что оправдывает такой выбор эрмитовых комбинаций операторов \hat{A}_{ij} .

Из анализа структурных констант следует, что тройки операторов $\{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_4, \hat{\lambda}_7\}$, $\{\hat{\lambda}_5, \hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_6\}$, $\{\hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_4, \hat{\lambda}_6\}$, и $\{\hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_5, \hat{\lambda}_7\}$ подчиняются алгебре группы SU_2 и являются подгруппами SU_3 . Аналогично подгруппы SU_2 образуют следующие тройки операторов:

$$\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{2} \{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_3\},$$

$$\hat{\mathbf{U}} = \frac{1}{2} \{\hat{\lambda}_6, \hat{\lambda}_7, \frac{1}{2}(\sqrt{3}\hat{\lambda}_8 + \hat{\lambda}_3)\}, \quad \hat{\mathbf{V}} = \frac{1}{2} \{\hat{\lambda}_4, \hat{\lambda}_5, \frac{1}{2}(\sqrt{3}\hat{\lambda}_8 - \hat{\lambda}_3)\}.$$

Для матрицы $\hat{\lambda}_8$ принято вводить также обозначение:

$$\hat{Y} = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{\lambda}_8.$$

Он коммутирует с \hat{I}_3 , имея с ним общие собственные векторы, которые могут служить для построения матричных представлений группы SU_3 .

Запишем соответствующие уравнения на собственные значения:

$$\hat{I}_3 |m, y\rangle = m |m, y\rangle, \quad \hat{Y} |m, y\rangle = y |m, y\rangle$$

и введём операторы:

$$\hat{I}_\pm = \hat{I}_1 \pm i\hat{I}_2, \quad \hat{U}_\pm = \hat{U}_1 \pm i\hat{U}_2, \quad \hat{V}_\pm = \hat{V}_1 \pm i\hat{V}_2.$$

Из коммутационных соотношений:

$$[\hat{I}_3, \hat{I}_\pm] = \pm \hat{I}_3, \quad [\hat{I}_3, \hat{V}_\pm] = \pm \frac{1}{2} \hat{V}_\pm, \quad [\hat{I}_3, \hat{U}_\pm] = \mp \frac{1}{2} \hat{U}_\pm,$$

$$[\hat{Y}, \hat{I}_\pm] = 0, \quad [\hat{Y}, \hat{V}_\pm] = \pm \hat{V}_\pm, \quad [\hat{Y}, \hat{U}_\pm] = \pm \hat{U}_\pm$$

следует, что они являются повышающими и понижающими операторами:

$$\hat{I}_\pm |m, y\rangle \sim |m \pm 1, y\rangle, \quad \hat{V}_\pm |m, y\rangle \sim |m \pm \frac{1}{2}, y \pm 1\rangle, \quad \hat{U}_\pm |m, y\rangle \sim |m \mp \frac{1}{2}, y \pm 1\rangle.$$

Компоненты “обычного” оператора углового момента равны

$$\hat{\mathbf{L}} = \{-\hat{\lambda}_7, \hat{\lambda}_5, -\hat{\lambda}_2\}. \quad (16.6)$$

Заметим, что нет оператора (кроме операторов Казимира), который бы коммутировал с каждой компонентой углового момента.

Гамильтониан, коммутирующий со всеми \hat{A}_{ij} (N -мерный случай):

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{A}_{kk},$$

выступает в качестве единичного оператора, делая \hat{A}_{ij} зависимыми (из N^2 независимых $N^2 - 1$ их комбинаций). Один из операторов Казимира в N -мерном случае имеет вид:

$$\hat{C} = \sum_{ij} \hat{A}_{ij} \hat{A}_{jk} = \hat{H}^2 - 3N \hat{H} + \frac{N(3N+1)}{4}, \quad (16.7)$$

где последнее равенство проще проверить при помощи второго соотношения (16.2). Как и “единичная матрица” \hat{H} , он коммутирует с каждым \hat{A}_{ij} :

$$[\hat{C}, \hat{A}_{ij}] = 0.$$

Итогом всей этой алгебры является объяснение дополнительного вырождения. Большое число операторов, коммутирующих с гамильтонианом, но не коммутирующих между собой приводит к сильному вырождению спектра (стр. 34).

2 Симметрия кулоновского потенциала

▷ Кулоновский потенциал, как и осциллятор, обладает вырождением, связанным с дополнительной симметрией. Рассмотрим N -мерное пространство. Со сферически симметричным потенциалом $V(r)$ коммутирует (следовательно, сохраняется) эрмитов тензор момента импульса:

$$\hat{L}_{ij} = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i. \quad (16.8)$$

Найдём коммутаторы с координатами и проекциями импульса ($\hbar = 1$):

$$[\hat{x}_i, \hat{L}_{ab}] = i(\hat{x}_a \delta_{bi} - \hat{x}_b \delta_{ai}), \quad [\hat{p}_i, \hat{L}_{ab}] = i(\hat{p}_a \delta_{bi} - \hat{p}_b \delta_{ai}).$$

Отсюда следует, что скалярные комбинации $\hat{r}^2 = \hat{\mathbf{x}}^2 = \hat{x}_i \hat{x}_i$, $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_i \hat{p}_i$ и $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}} = \hat{x}_i \hat{p}_i$ коммутируют с \hat{L}_{ab} . Поэтому любой вектор вида $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{x}} f + \hat{\mathbf{p}} g$, где f, g – скалярные функции коммутирует с \hat{L}_{ab} как $\hat{\mathbf{x}}$ или $\hat{\mathbf{p}}$:

$$[\hat{A}_i, \hat{L}_{ab}] = i(\hat{A}_a \delta_{bi} - \hat{A}_b \delta_{ai}). \quad (16.9)$$

Аналогично можно вычислить коммутаторы с тензорными комбинациями, например:

$$[\hat{x}_i \hat{p}_j, \hat{L}_{ab}] = i(\hat{x}_i \hat{p}_a \delta_{jb} - \hat{x}_i \hat{p}_b \delta_{ja} + \hat{x}_a \hat{p}_j \delta_{ib} - \hat{x}_b \hat{p}_j \delta_{ia}).$$

Также коммутирует $\hat{x}_i \hat{x}_j$, $\hat{p}_i \hat{p}_j$ и компоненты самого момента \hat{L}_{ij} . Эти коммутаторы удовлетворяют алгебре генераторов группы вращений N -мерного пространства SO_N (специальная ортогональная группа).

Такой же алгебре удовлетворяют генераторы вращения $(N+1)$ -мерного пространства (группа SO_{N+1}), имеющие индекс на единицу больше. Обозначим дополнительный индекс как 0 (это евклидово пространство, поэтому он не имеет отношения к лоренцевской нулевой компоненте). Пусть греческие индексы пробегают значения $0, 1, \dots, N$, а латинские меняются от 1 до N . Запишем алгебру генераторов группы вращений $(N+1)$ -мерного пространства:

$$[\hat{L}_{\alpha\beta}, \hat{L}_{\mu\nu}] = i(\hat{L}_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} - \hat{L}_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} + \hat{L}_{\mu\beta} \delta_{\nu\alpha} - \hat{L}_{\nu\beta} \delta_{\mu\alpha}) \quad (16.10)$$

и выделим в ней коммутаторы операторов с нулевым индексом:

$$[\hat{L}_{a0}, \hat{L}_{b0}] = i \hat{L}_{ab}, \quad [\hat{L}_{a0}, \hat{L}_{ij}] = i(\hat{L}_{i0} \delta_{aj} - \hat{L}_{j0} \delta_{ai}). \quad (16.11)$$

Коммутаторы между \hat{L}_{ij} такие же, как и (16.10), но с “латинскими индексами”. Группа SO_N является подгруппой SO_{N+1} . Например, вращения в плоскости SO_2 – это подгруппа вращений 3-пространства SO_3 .

▷ Перейдём теперь к кулоновскому потенциалу и введём N -мерный вектор со следующими компонентами (по i сумма):

$$\hat{A}_k = \frac{\hat{x}_k}{r} - \frac{\hat{p}_i \hat{L}_{ik} + \hat{L}_{ik} \hat{p}_i}{2}. \quad (16.12)$$

Чтобы он был эрмитовым, во втором слагаемом проведена симметризация некоммутирующих операторов \hat{p}_i и \hat{L}_{ik} . Несложно проверить, что компоненты \hat{A}_k коммутируют с гамильтонианом кулоновского поля:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{1}{r}, \quad [\hat{H}, \hat{A}_k] = 0,$$

являясь сохраняющейся величиной (система единиц: $\alpha = \mu = \hbar = 1$ и для восстановления размерных констант необходимо сделать замены $x_k \mapsto x_k/r_B$, $p_k \mapsto p_k r_B/\hbar$, где $r_B = \hbar/\sqrt{\mu\alpha}$ – боровский радиус). Чуть более громоздкие вычисления приводят к коммутаторам компонент вектора между собой:

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -2i \hat{H} \hat{L}_{ij}, \quad (16.13)$$

а с тензором момента он коммутирует как и любой N -мерный вектор (16.9). Так как гамильтониан \hat{H} коммутирует с \hat{A}_k и \hat{L}_{ij} , можно ввести операторы:

$$\hat{L}_{k0} = \frac{\hat{A}_k}{\sqrt{-2\hat{H}}}.$$

Они удовлетворяют соотношениям (16.11), а, следовательно, операторы \hat{L}_{k0} , $\hat{L}_{0k} = -\hat{L}_{k0}$ и \hat{L}_{ij} образуют группу вращений $(N+1)$ -мерного пространства SO_{N+1} . Эта группа симметрии N -мерного кулоновского потенциала дополнительна к группе SO_N (существующей для любого сферически симметричного гамильтониана).

В 3-мерном пространстве тензор момента импульса имеет три ненулевые компоненты, которые образуют аксиальный вектор:

$$\hat{\mathbf{L}} = \{\hat{L}_{23}, \hat{L}_{31}, \hat{L}_{12}\}.$$

В этом случае сохраняющийся вектор называется вектором Рунге–Ленца:

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} - \frac{\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}}{2}. \quad (16.14)$$

Его постоянство приводит к тому, что в классической механике траектории частицы в кулоновском поле замкнуты. В квантовой механике сохранение величин \hat{A}_k , которые между собой не коммутируют, приводит к дополнительному вырождению спектра в кулоновском поле (стр. 34).

Глава 17

Функции Грина

В этой главе рассматриваются динамические задачи квантовой механики. Для их иллюстрации по-прежнему используется модель ангармонического осциллятора с гамильтонианом $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{x}^2)/2 + \lambda \hat{x}^4/4!$. Чтобы сделать её максимально похожей на квантово-полевую модель φ^4 , вместо параметра β используется параметр $\lambda = 12\beta$.

После решения уравнений Гейзенберга, вводится понятие n -точечных функций Грина. Они удовлетворяют уравнениям Дайсона, которые играют важную роль в квантовой теории поля. Мы решим их по теории возмущений, введя очень полезный инструмент – диаграммы Фейнмана. В заключение, при помощи оператора эволюции вычисляется энергия основного состояния ангармонического осциллятора.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Функции Грина

- В теории линейных дифференциальных операторов \hat{L}_x , функцией Грина $G(x, s)$ называется решение уравнения

$$\hat{L}_x G(x, y) = \delta(x - y),$$

где x, y – наборы динамических переменных (координаты, время и т.п.), а $\delta(x - y)$ – функция Дирака от этих переменных. Функции Грина позволяют строить решения $u(x)$ неоднородных уравнений:

$$\hat{L}_x u(x) = f(x), \quad u(x) = \int G(x, y) f(y) dy.$$

В квантовой механике, матричные элементы оператора эволюции, умноженные на функцию Хэвисайда: $G_{xy}(t) = U_{xy}(t) \theta(t)$, также часто называют функцией Грина. Она определяет амплитуду вероятности перехода частицы из y в x за время $t > 0$. В квантовой теории поля функции Грина имеют похожий физический смысл, но связаны с хронологическим произведением операторов. Чтобы не было путаницы, будем говорить в этом случае о n -точечных функциях Грина или короче n -функциях.

Определим 2-функцию Грина $G(t, s) = \langle E_0 | T \hat{x}(t) \hat{x}(s) | E_0 \rangle$, как среднее от хронологического произведения (стр. 197) операторов координаты по основному состоянию полного гамильтонiana системы:

$$G(t, s) = \theta(t - s) \langle E_0 | \hat{x}(t) \hat{x}(s) | E_0 \rangle + \theta(s - t) \langle E_0 | \hat{x}(s) \hat{x}(t) | E_0 \rangle.$$

Такая функция (в отличии от обычного среднего) будет симметрична $G(t, s) = G(s, t)$, что справедливо для хронологического произведения любого числа операторов (операторы можно переставлять местами, так как предписание $T\{\dots\}$ всегда расставит их в нужном порядке).

Если гамильтониан не зависит от времени, то не существует выделенного момента времени (время однородно). В этом случае, 2-функция Грина должна зависеть от разности времён $G(t, s) = G(t - s)$, где

$$G(t) = \theta(t) \langle E_0 | \hat{x}_t \hat{x} | E_0 \rangle + \theta(-t) \langle E_0 | \hat{x} \hat{x}_t | E_0 \rangle \quad (17.1)$$

и $\hat{x} = \hat{x}(0)$ – оператор координаты в начальный момент времени (представление Шрёдингера). Хронологическое произведение определено при $t \neq s$. Поэтому *доопределим* 2-функцию Грина при совпадающих временах следующим образом:

$$G(t, t) = \langle E_0 | \hat{x}_t^2 | E_0 \rangle = \langle E_0 | \hat{x}^2 | E_0 \rangle = G(0, 0), \quad (17.2)$$

где учтено, что $\hat{x}_t = e^{i\hat{H}t} \hat{x} e^{-i\hat{H}t}$ и $\hat{H} | E_0 \rangle = E_0 | E_0 \rangle$.

• Выразим 2-функцию Грина через собственные векторы и значения гамильтониана. Для этого подставим $\hat{x}_t = e^{\imath \hat{H}t} \hat{x} e^{-\imath \hat{H}t}$ в определение (17.1):

$$G(t) = \theta(t) \langle E_0 | e^{\imath \hat{H}t} \hat{x} e^{-\imath \hat{H}t} \hat{x} | E_0 \rangle + \theta(-t) \langle E_0 | \hat{x} e^{\imath \hat{H}t} \hat{x} e^{-\imath \hat{H}t} | E_0 \rangle$$

и вставим между координатами сумму по полной системе ортонормированных векторов $|E_n\rangle\langle E_n|$:

$$= \sum_n \langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle \langle E_n | \hat{x} | E_0 \rangle \left\{ \theta(t) e^{-\imath(E_n - E_0)t} + \theta(-t) e^{\imath(E_n - E_0)t} \right\}. \quad (17.3)$$

Вводя разность энергий $\Omega_n = E_n - E_0$, перепишем это соотношение таким образом:

$$G(t) = \sum_n |\langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle|^2 e^{-\imath \Omega_n |t|}. \quad (17.4)$$

При помощи интегрального представления функции Хевисайда (стр. 335)

$$\theta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\imath e^{-\imath kt}}{k + \imath \epsilon} \frac{dk}{2\pi}, \quad (17.5)$$

выражению в фигурных скобках (17.3) можно придать следующий вид:

$$\left\{ \dots \right\} = \imath \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{e^{-\imath(k+\Omega_n)t}}{k + \imath \epsilon} + \frac{e^{\imath(k+\Omega_n)t}}{k + \imath \epsilon} \right] \frac{dk}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\imath \Omega_n}{k^2 - \Omega_n^2 + \imath \epsilon} e^{-\imath kt} \frac{dk}{2\pi},$$

где сдвинута переменная интегрирования $k \mapsto k - \Omega_n$. Затем во втором интеграле сделана замена $k \mapsto -k$ и слагаемые приведены к общему знаменателю. При этом вместо $(\Omega_n - \imath \epsilon)^2 = \Omega_n^2 - 2\imath \Omega_n \epsilon - \epsilon^2$, для краткости, написано $\Omega_n^2 - \imath \epsilon$, что не скажется на пределе $\epsilon \rightarrow +0$ ($\Omega_n > 0$, поэтому $2\Omega_n \epsilon \sim \epsilon$, а $\epsilon^2 \ll \epsilon$). В результате, получаем интеграл Фурье (стр. 340) для 2-функции Грина:

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(k) e^{-\imath kt} \frac{dk}{2\pi}, \quad (17.6)$$

с фурье-образом:

$$G(k) = \sum_n \frac{2\imath \Omega_n |\langle E_0 | \hat{x} | E_n \rangle|^2}{k^2 - \Omega_n^2 + \imath \epsilon}. \quad (17.7)$$

Он имеет полюсы в точках $\Omega_n - \imath \epsilon$ и $-\Omega_n + \imath \epsilon$, поэтому, вычисляя интеграл по теореме Коши ($\ll H_{51}$), снова приходим к (17.4).

- Аналогичным образом определяются n -функции Грина:

$$G(t_1, t_2, \dots, t_n) = \langle E_0 | T \hat{x}(t_1) \hat{x}(t_2) \dots \hat{x}(t_n) | E_0 \rangle \quad (17.8)$$

(хронологический порядок действует на всё произведение). Для гармонического осциллятора будем обозначать их буквой D , используя G для ангармонического осциллятора.

При вычислении функций Грина гармонического осциллятора удобна *теорема Вика*. Для её доказательства, рассмотрим сначала обычные (не хронологические) средние и выразим оператор координаты (3.22) через операторы рождения и уничтожения:

$$\hat{x}_t = \hat{x}_t^- + \hat{x}_t^+, \quad \hat{x}_t^- = \frac{\hat{a}}{\sqrt{2\omega}} e^{-\omega t}, \quad \hat{x}_t^+ = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{2\omega}} e^{\omega t}. \quad (17.9)$$

Так как $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$, имеем следующие коммутаторы ($\hat{x}_1 \equiv \hat{x}(t_1)$ и т.д.):

$$[\hat{x}_1^-, \hat{x}_2] = [\hat{x}_1, \hat{x}_2^+] = [\hat{x}_1^-, \hat{x}_2^+] = \tilde{D}_{12} = \frac{e^{-\omega(t_1-t_2)}}{2\omega}. \quad (17.10)$$

Через функцию $\tilde{D}_{12} \equiv \tilde{D}(t_1 - t_2)$, в частности, выражается среднее по основному состоянию от произведения двух операторов (3.26). Вычислим среднее от четырех операторов:

$$\langle 0 | \hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{x}_3 \hat{x}_4 | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{x}_1^- \hat{x}_2 \hat{x}_3 \hat{x}_4 | 0 \rangle = \langle 0 | (\hat{x}_2 \hat{x}_1^- + \tilde{D}_{12}) \hat{x}_3 \hat{x}_4 | 0 \rangle.$$

В первом равенстве \hat{x}_1 заменён на \hat{x}_1^- , так как $\langle 0 | \hat{a}^+ = 0$. Во втором равенстве он переставлен с \hat{x}_2 при помощи первого коммутатора (17.10). Продолжим переносить \hat{x}_1^- вправо:

$$= \langle 0 | \hat{x}_2 \hat{x}_1^- \hat{x}_3 \hat{x}_4 | 0 \rangle + \tilde{D}_{12} \tilde{D}_{34} = \langle 0 | \hat{x}_2 (\hat{x}_3 \hat{x}_1^- + \tilde{D}_{13}) \hat{x}_4 | 0 \rangle + \tilde{D}_{12} \tilde{D}_{34}$$

и т.д. Когда он доберётся до $|0\rangle$, получится ноль:

$$\langle 0 | \hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{x}_3 \hat{x}_4 | 0 \rangle = \tilde{D}_{12} \tilde{D}_{34} + \tilde{D}_{13} \tilde{D}_{24} + \tilde{D}_{14} \tilde{D}_{23}. \quad (17.11)$$

В общем случае для n операторов, \hat{x}_1^- на пути к $|0\rangle$ переставится с каждым из остальных $n - 1$ операторов и мы получаем *теорему Вика*:

$$\langle 0 | \hat{x}_1 \hat{x}_2 \dots \hat{x}_n | 0 \rangle = \sum_{k=2}^n \tilde{D}_{1k} \langle 0 | \hat{x}_2 \dots \hat{x}_{k-1} \hat{x}_{k+1} \dots \hat{x}_n | 0 \rangle. \quad (17.12)$$

Повторяя её рекурсивно для произведения $n - 1$ операторов, можно свести среднее к сумме произведений функций (17.10). Подчеркнём, что такое простое соотношение выполняется только для средних по основному состоянию. При усреднении по возбуждённому состоянию осциллятора $|n\rangle$, возникают более громоздкие выражения.

• Теорему Вика можно сформулировать и для хронологических средних $\langle 0|T \hat{x}_1 \hat{x}_2 \dots \hat{x}_n |0\rangle$. Определим 2-функцию Грина:

$$D_{12} = \theta_{12} \tilde{D}_{12} + \theta_{21} \tilde{D}_{21} = \langle 0|T \hat{x}_1 \hat{x}_2 |0\rangle = \frac{e^{-i\omega|t_1-t_2|}}{2\omega}, \quad (17.13)$$

где $\theta_{12} \equiv \theta(t_1 - t_2)$ и т.д. Если в n -функции $t_1 > t_2 > \dots > t_n$, имеем обычное среднее и применима теорема Вика (17.12). В ней, в правой части времена упорядочены, поэтому в среднем можно поставить знак хронологического порядка. Пусть теперь t_2, \dots, t_n по-прежнему упорядочены в порядке убывания, а значение t_1 находится между t_i и t_{i+1} . Тогда снова применима теорема Вика. Действительно, например:

$$\langle 0| \hat{x}_2 \hat{x}_1 \hat{x}_3 \hat{x}_4 |0\rangle = \langle 0| \hat{x}_2 \hat{x}_1^- \hat{x}_3 \hat{x}_4 |0\rangle + \langle 0| \hat{x}_2 \hat{x}_1^+ \hat{x}_3 \hat{x}_4 |0\rangle.$$

Оператор \hat{x}_1^- , как и раньше, переносится вправо, что даст функции \tilde{D}_{13} и \tilde{D}_{14} . Оператор \hat{x}_1^+ , будем переносить влево, чтобы уничтожить его с $\langle 0|$. При этом необходимо делать перестановки $[\hat{x}_2, \hat{x}_1^+] = \tilde{D}_{21}$, т.е. появится функция \tilde{D}_{21} с упорядоченными по убыванию ($t_2 > t_1$) временами. В результате, с учётом определения (17.13), приходим к *теореме Вика для хронологических средних* (D_{1k} – без тильды!):

$$\langle 0| T \hat{x}_1 \hat{x}_2 \dots \hat{x}_n |0\rangle = \sum_{k=2}^n D_{1k} \langle 0| T \hat{x}_2 \dots \hat{x}_{k-1} \hat{x}_{k+1} \dots \hat{x}_n |0\rangle. \quad (17.14)$$

В частности, 4-функция Грина гармонического осциллятора равна:

$$D(t_1, \dots, t_4) = \langle 0| T \hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{x}_3 \hat{x}_4 |0\rangle = D_{12} D_{34} + D_{13} D_{24} + D_{14} D_{23}, \quad (17.15)$$

что при совпадающих временах даёт (см. также (9.6), стр. 152):

$$D(t, t, t, t) = 3 D^2(0) = \frac{3}{(2\omega)^2} = \langle 0| \hat{x}^4 |0\rangle.$$

В связи с этим, *доопределим* n -функцию Грина произвольной системы при совпадающих временах следующим образом:

$$G(t, t, \dots, t) = \langle E_0| \hat{x}^n(t) |E_0\rangle = \langle E_0| \hat{x}^n |E_0\rangle = G(0, 0, \dots, 0). \quad (17.16)$$

В частности, при помощи формулы Гелл-Мана–Фейнмана (??):

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \frac{1}{4!} \langle E_0| \hat{x}^n |E_0\rangle = \frac{1}{4!} G(0, 0, 0, 0), \quad (17.17)$$

можно выразить производную энергии основного состояния ангармонического осциллятора $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{x}^2)/2 + \lambda \hat{x}^4/4!$ через 4-функцию Грина при совпадающих временах.

2 Дифференцирование хронологических произведений

• Вычисление производной по времени от хронологического произведения требует аккуратности. Рассмотрим сначала два произвольных оператора $a_t \equiv a(t)$ и $b_1 \equiv b(t_1)$, опуская над ними шляпки. Возьмём производную по t от их хронологического произведения:

$$\mathbf{T}\{a_t b_1\} = \theta(t - t_1) a_t b_1 + \theta(t_1 - t) b_1 a_t.$$

Производная функции Хэвисайда равна функции Дирака: $\theta'(t) = \delta(t)$, см. стр. 335. Кроме этого $d\theta(t_1 - t)/dt = -\delta(t_1 - t)$, поэтому, обозначая производную точкой над оператором, имеем:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{T}\{a_t b_1\} = \theta(t - t_1) \dot{a}_t b_1 + \theta(t_1 - t) b_1 \dot{a}_t + \delta(t - t_1) (a_t b_1 - b_1 a_t).$$

Первые два слагаемых снова образуют хронологическое произведение, а выражение в круглых скобках – коммутатор, в котором можно положить времена равными друг другу, так как $\delta(t - t_1) f(t) = f(t_1)$:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{T}\{a_t b_1\} = \mathbf{T}\{\dot{a}_t b_1\} + \delta(t - t_1) [a_1, b_1]. \quad (17.18)$$

▷ Возьмём теперь произведение трёх операторов: $\mathbf{T}\{a_t b_1 b_2\}$, где b_1 и b_2 , вообще говоря, *различны*. Пусть $t_1 > t_2$. Если это не так, то можно переставить местами b_1 и b_2 , получив требуемый порядок. Обозначая для краткости $\theta_{t1} \equiv \theta(t - t_1)$, запишем:

$$\mathbf{T}\{a_t b_1 b_2\} = \theta_{t1} a_t b_1 b_2 + \theta_{1t} \theta_{t2} b_1 a_t b_2 + \theta_{2t} b_1 b_2 a_t.$$

Это выражение содержит все размещения a_t , в зависимости от значений времён t, t_1, t_2 . Во втором слагаемом, для “фиксирования” положения a_t между b_1 и b_2 потребовалось две функции Хэвисайда. Возьмём производную по времени:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{T}\{a_t b_1 b_2\} &= \mathbf{T}\{\dot{a}_t b_1 b_2\} \\ &+ \delta_{t1} a_t b_1 b_2 - \delta_{1t} \theta_{t2} b_1 a_t b_2 + \theta_{1t} \delta_{t2} b_1 a_t b_2 - \delta_{2t} b_1 b_2 a_t. \end{aligned}$$

Благодаря функции Дирака, обе функции Хэвисайда равны $\theta(t_1 - t_2) = 1$ при $t_1 > t_2$. В результате имеем:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{T}\{a_t b_1 b_2\} = \mathbf{T}\{\dot{a}_t b_1 b_2\} + \delta_{t1} \mathbf{T}\{[a_1, b_1] b_2\} + \delta_{t2} \mathbf{T}\{b_1 [a_2, b_2]\},$$

где, времена в коммутаторах снова сделаны одинаковыми. Кроме этого, поставлена операция хронологического порядка. В данном случае времена t_1 и t_2 упорядочены как $t_1 > t_2$. Для другого порядка, операторы b_1 и b_2 и в левой и в правой части соотношения поменяются местами.

▷ Несложно повторить эти вычисления для хронологического произведения 4-х операторов $T\{a_t b_1 b_2 b_3\}$, положив снова $t_1 > t_2 > t_3$:

$$\theta_{t1} a_t b_1 b_2 b_3 + \theta_{1t} \theta_{t2} b_1 a_t b_2 b_3 + \theta_{2t} \theta_{t3} b_1 b_2 a_t b_3 + \theta_{3t} b_1 b_2 b_3 a_t.$$

Взятие производной по t в членах с двумя θ -функциями приведёт к двум слагаемым с различным знаком, в результате чего появятся коммутаторы. В общем случае:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} T\{a_t b_1 \dots b_n\} &= T\{\dot{a}_t b_1 \dots b_n\} \\ &+ \sum_{k=1}^n \delta(t - t_k) T\{b_1 \dots b_{k-1} [a_k, b_k] b_{k+1} \dots b_n\}. \end{aligned} \quad (17.19)$$

▷ В дальнейшем мы будем иметь также дело с *фермионными операторами*. Для них хронологическое произведение определяется так, что при упорядочивании появляется знак минус, если сделано нечётное число парных перестановок. Например, пусть f_t, g_1 – фермионные операторы, а b_2 – бозонный (“обычный”) оператор. Тогда:

$$T\{f_t g_1\} = -T\{g_1 f_t\}, \quad T\{f_t b_2\} = T\{b_2 f_t\}.$$

Хронологическое произведение трёх операторов при $t_1 > t_2$ равно:

$$T\{f_t g_1 b_2\} = \theta_{t1} f_t g_1 b_2 - \theta_{1t} \theta_{t2} g_1 f_t b_2 - \theta_{2t} g_1 b_2 f_t.$$

Минус возникает, так как фермионный оператор f_t “перебрался” через другой фермионный оператор g_1 . Беря производную по t , имеем:

$$\frac{d}{dt} T\{f_t g_1 b_2\} = T\{\dot{f}_t g_1 b_2\} + \delta_{t1} \{f_1, g_1\} b_2 - \delta_{t2} g_1 [f_2, b_2],$$

где во втором слагаемом стоит *антикоммутатор* $\{f_1, g_1\} = f_1 g_1 + g_1 f_1$, а в третьем, как и раньше, коммутатор. В общем случае, если f_t – фермионный оператор, а q_i – фермионные или бозонные операторы, то:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} T\{f_t q_1 \dots q_n\} &= T\{\dot{f}_t q_1 \dots q_n\} \\ &+ \sum_{k=1}^n (\pm) \delta(t - t_k) T\{q_1 \dots q_{k-1} [f_k, q_k]^\pm q_{k+1} \dots q_n\}, \end{aligned} \quad (17.20)$$

где для бозонных операторов стоит коммутатор, а для фермионных – антикоммутатор:

$$[f, q]^\pm = \begin{cases} fq + qf, & \text{если } q \text{ – фермионный оператор,} \\ fq - qf, & \text{если } q \text{ – бозонный оператор.} \end{cases}$$

В (17.20) слагаемые берутся со знаком минус, если для помещения оператора f_k после q_{k-1} требуется сделать нечётное число перестановок f_k с теми q_i , которые также являются фермионными операторами.

3 Уравнения Дайсона

Найдём уравнение, которому удовлетворяет 2-функция Грина. В силу правила (17.19), первая производная хронологического произведения равна (шляпки над операторами опускаем, $x_s \equiv x(s)$ и т.д.):

$$\frac{d}{dt} T\{x_t x_s\} = T\{\dot{x}_t x_s\} + \delta(t - s) [x_s, x_s] = T\{\dot{x}_t x_s\}.$$

Возьмём ещё одну производную:

$$\frac{d^2}{dt^2} T\{x_t x_s\} = T\{\ddot{x}_t x_s\} + \delta(t - s) [\dot{x}_s, x_s].$$

Так как $\dot{x}_t = p_t$, коммутатор равен $-\imath$. Подставим вместо \ddot{x}_t уравнение Гейзенберга (3.17):

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) T\{x_t x_s\} + \frac{\lambda}{6} T\{x_t^3 x_s\} = -\imath \delta(t - s). \quad (17.21)$$

Усреднение по основному состоянию даёт первое уравнение Дайсона для ангармонического осциллятора. При $\lambda = 0$ (гармонический осциллятор) 2-функция Грина $D(t) = \langle 0 | T x_t x | 0 \rangle$ удовлетворяет уравнению:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) D(t) = -\imath \delta(t). \quad (17.22)$$

Аналогично, для n -функций записывается система *дифференциальных уравнений* для ангармонического осциллятора:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) T\{x_t x_1 \dots x_n\} + \frac{\lambda}{6} T\{x_t^3 x_1 \dots x_n\} = -\imath \sum_{k=1}^n \delta_{tk} T\{x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} x_n\},$$

где $x_k \equiv x(t_k)$ и $\delta_{tk} \equiv \delta(t - t_k)$. После усреднения по основному состоянию, получаются *интегральные уравнения Дайсона*:

$$\langle E_0 | T x_t x_1 \dots x_n | E_0 \rangle + \frac{\imath \lambda}{6} \int D_{ts} \langle E_0 | T x_s^3 x_1 \dots x_n | E_0 \rangle ds \quad (17.23)$$

$$= \sum_{k=1}^n D_{tk} \langle E_0 | T x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} x_n | E_0 \rangle,$$

где $D_{tk} \equiv D(t - t_k)$ – функция Грина гармонического осциллятора, удовлетворяющая (17.22). Действуя на это уравнение оператором $d^2/dt^2 + \omega^2$, несложно проверить, что получается дифференциальное уравнение.

Строго говоря, интегральное уравнение (17.23) не эквивалентно дифференциальному, так как в нём, “без ущерба” для оператора $d^2/dt^2 + \omega^2$ можно заменить D_{ts} на $D_{ts} + A \cos\{\omega(t-s) + \phi_0\}$, где A и ϕ_0 – константы. Этот произвол для *основного состояния* устранился теоремой Вика. Действительно, при $\lambda = 0$ (17.23) даёт (17.14) с

$$D_{ts} = \langle 0 | T x_t x_s | 0 \rangle = \frac{e^{-i\omega|t-s|}}{2\omega}. \quad (17.24)$$

Это же выражение следует из общей формулы (17.4), так как в силу (2.48), стр. 63, единственный отличный от нуля матричный элемент равен $\langle 0|x|1\rangle = 1/\sqrt{2\omega}$, а разница энергий: $\Omega_n = n\omega$. По этой же причине, фурье-образ функции Грина (17.7) гармонического осциллятора равен:

$$D(k) = \frac{i}{k^2 - \omega^2 + i\epsilon}. \quad (17.25)$$

Такое фурье-представление функции (17.24) при $\epsilon \rightarrow 0$ удовлетворяет уравнению (17.22):

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) D(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i(-k^2 + \omega^2)}{k^2 - \omega^2 + i\epsilon} e^{-ikt} \frac{dk}{2\pi} = -i \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikt} \frac{dk}{2\pi} = -i \delta(t).$$

Отметим важный момент. Записывая для функции Грина интеграл Фурье, мы предполагаем, что существует обратное преобразование. Однако, это будет происходить только, если считать, что в соотношении (17.24) у частоты ω присутствует малая комплексная добавка. Действительно, вычислим обратное преобразование:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega|t|}}{2\omega} e^{ikt} dt = \int_{-\infty}^0 e^{i(k+\omega)t} \frac{dt}{2\omega} + \int_0^{\infty} e^{i(k-\omega)t} \frac{dt}{2\omega} = \frac{i}{k^2 - \omega^2 + i\epsilon}.$$

На бесконечности подынтегральные функции будут убывать (а интегралы сходятся) только, если сделать замену:

$$\omega \mapsto \omega - i\epsilon. \quad (17.26)$$

Это правило необходимо использовать при вычислении всех интегралов и только в самом конце устремлять ϵ к нулю. В теории линейных дифференциальных операторов, функция Грина с образом (17.25) называется *причинной функцией* (см. стр. ??).

4 Теория возмущений для уравнения Дайсона

Решим систему уравнений Дайсона (17.23) по теории возмущений, считая параметр λ малым. Точную 2-функцию Грина по-прежнему обозначаем как $G_{12} = \langle E_0 | T x_1 x_2 | E_0 \rangle$, а 2-функцию гармонического осциллятора, когда $\lambda = 0$, следующим образом: $D_{12} = \langle 0 | T x_1 x_2 | 0 \rangle$. Аналогично, с n аргументами обозначаются n -точечные функции. Запишем интегральные уравнения (17.23) для $n = 1, 3$:

$$G_{12} + \frac{i\lambda}{6} \int D_{1s} G_{sss2} ds = D_{12}, \quad (17.27)$$

$$G_{1234} + \frac{i\lambda}{6} \int D_{1s} G_{sss234} ds = D_{12} G_{34} + D_{13} G_{24} + D_{14} G_{23}.$$

Разложим все функции Грина в ряд по λ :

$$\begin{aligned} G_{12} &= D_{12} + G_{12}^{(1)} + G_{12}^{(2)} + \dots, \\ G_{1234} &= D_{1234} + G_{1234}^{(1)} + G_{1234}^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

где $G_{1\dots n}^{(k)}$ имеет порядок малости λ^k . Подставим эти разложения в уравнения и приравняем величины одного порядка:

$$G_{12}^{(1)} = -\frac{i\lambda}{6} \int D_{1s} G_{sss2}^{(0)} ds, \quad G_{12}^{(2)} = -\frac{i\lambda}{6} \int D_{1s} G_{sss2}^{(1)} ds, \quad (17.28)$$

$$G_{1234}^{(1)} + \frac{i\lambda}{6} \int D_{1s} G_{sss234}^{(0)} ds = D_{12} G_{34}^{(1)} + D_{13} G_{24}^{(1)} + D_{14} G_{23}^{(1)}. \quad (17.29)$$

Нулевое приближение ($\lambda = 0$) к 4-функции уже найдено (17.15):

$$G_{sss2}^{(0)} \equiv D_{sss2} = D_{ss} D_{s2} + D_{ss} D_{s2} + D_{s2} D_{ss} = 3 D_{ss} D_{s2},$$

что сразу даёт первую поправку к 2-функции Грина:

$$G_{12}^{(1)} = -\frac{i\lambda}{2} \int D_{1s} D_{ss} D_{s2} ds. \quad (17.30)$$

Чтобы найти вторую поправку к 2-функции Грина, необходимо сначала вычислить первую поправку к 4-функции. Для этого, в свою очередь, необходимо знать 6-функцию Грина в нулевом приближении. В общем случае система Дайсона является последовательностью зацепляющихся уравнений и чем более высокий порядок нас интересует, тем большее число уравнений приходится задействовать.

Проведём соответствующие вычисления. Для 6-функции гармонического осциллятора ($\lambda = 0$) из теоремы Вика (17.14) имеем:

$$G_{123456}^{(0)} \equiv D_{123456} = D_{12} D_{3456} + D_{13} D_{2456} + D_{14} D_{2356} + D_{15} D_{2346} + D_{16} D_{2345}.$$

Положим 3 времени одному значению (любые 3, так как функция Грина симметрична):

$$\begin{aligned} D_{s234ss} &= D_{s2} D_{34ss} + D_{s3} D_{24ss} + D_{s4} D_{23ss} + 2 D_{ss} D_{234s} \\ &= 6 D_{2s} D_{3s} D_{4s} + 3 D_{ss} (D_{2s} D_{34} + D_{3s} D_{24} + D_{4s} D_{23}), \end{aligned}$$

где в последнем равенстве подставлено (17.15). Теперь можно записать первую поправку к 4-функции (17.29), где $G_{sss234}^{(0)} = D_{sss234}$:

$$\begin{aligned} G_{1234}^{(1)} &= -\imath\lambda \int D_{1s} D_{2s} D_{3s} D_{4s} ds \\ &- \frac{\imath\lambda}{2} \int [D_{1s} D_{ss} D_{s2} D_{34} + D_{1s} D_{ss} D_{s3} D_{24} + D_{1s} D_{ss} D_{s4} D_{23}] ds \\ &- \frac{\imath\lambda}{2} \int [D_{12} D_{3s} D_{ss} D_{s4} + D_{13} D_{2s} D_{ss} D_{s4} + D_{14} D_{2s} D_{ss} D_{s3}] ds. \end{aligned} \quad (17.31)$$

Когда три аргумента совпадают, это выражение заметно упрощается. Пусть $t_1 = t_3 = t_4 = u$, тогда

$$G_{u2uu}^{(1)} = -\imath\lambda \int [D_{s2} D_{us}^3 + \frac{3}{2} D_{uu} D_{ss} D_{su} D_{s2} + \frac{3}{2} D_{us}^2 D_{ss} D_{u2}] ds.$$

Так как переменная s уже задействована, во втором уравнении (17.28) обозначим переменную интегрирования как u и подставим в него $G_{u2uu}^{(1)}$, что даёт вторую поправку к 2-функции Грина:

$$\begin{aligned} G_{12}^{(2)} &= (-\imath\lambda)^2 \int D_{1u} \left[\frac{1}{6} D_{us}^3 + \frac{1}{4} D_{uu} D_{us} D_{ss} \right] D_{s2} du ds \\ &+ (-\imath\lambda)^2 \int \frac{1}{4} D_{1u} D_{us}^2 D_{ss} D_{u2} du ds. \end{aligned} \quad (17.32)$$

Придадим полученным результатам более наглядную форму при помощи диаграмм Фейнмана. Этот инструмент является исключительно важным в квантовой теории поля и служит не только для повышения образности аналитических выражений, но и как их физическая интерпретация.

▷ Диаграммы Фейнмана – это графы, состоящие из точек, соединённых линиями. Условимся аргументы функций Грина обозначать белыми кружками. Чёрным кружком (*вершина*) обозначим интеграл по времени, умноженный на $(-\imath\lambda)$, а линией – 2-функцию Грина гармонического осциллятора: $D_{12} \equiv D(t_1 - t_2)$, где t_1 и t_2 – времена точек, которые соединяет эта линия. Для ангармонического осциллятора с “четвертым” взаимодействием $(\lambda/4!) x^4$ в вершине всегда будет сходиться 4 линии:

Точную 2-функцию Грина ангармонического осциллятора G_{12} изобразим жирной линией. В результате, с точностью до λ^2 , имеем:

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{Diagram 2} \end{array} = \begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ \text{Diagram 4} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 5} \\ \text{Diagram 6} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 7} \\ \text{Diagram 8} \end{array} + \begin{array}{c} \text{Diagram 9} \\ \text{Diagram 10} \end{array} + \dots$$

Первое слагаемое после равенства – это нулевое приближение, равное D_{12} . Во втором слагаемом в вершине s сходятся две *внешние* линии D_{1s} и D_{s2} , а также начинается и кончается петля внутренней линии, которой соответствует в (17.30) множитель D_{ss} . Рядом с диаграммой стоит множитель $1/2$ на который необходимо умножить выражение, записанное по правилам Фейнмана. Остальные три диаграммы соответствуют второму приближению (17.32) и имеют 2 вершины ($\sim \lambda^2$).

Аналогично можно нарисовать ряд для 4-функции Грина, которую обозначим кругом с четырьмя внешними линиями:

В правой части времена внешних линий не подписаны, но повторяют порядок времён в левой части. Первые три слагаемых – это нулевое приближение, равное (17.15). Диаграммы второй строки имеют первый порядок по теории возмущений (17.31). При этом только первая диаграмма связная, в остальные 6 (в квадратных скобках) – нет. Несвязность означает наличие множителей, не связанных между собой интегрированием. Заметим, что несвязные диаграммы состоят из частей разложения 2-функций (нулевого и первого порядка).

▷ Найдём явный вид 2-функции Грина в первом порядке по теории возмущений. Для этого необходимо вычислить интеграл:

$$\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ 1 \quad t \quad 2 \end{array} = \frac{-i\lambda}{2} \int D_{1t} D_{tt} D_{t2} dt = \frac{-i\lambda}{2(2\omega)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega(|t_1-t|+|t-t_2|)} dt.$$

Пусть $t_1 < t_2$. Тогда диапазон интегрирования можно разбить на 3 отрезка и на каждом раскрыть модули в показателе экспоненты:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega(|t_1-t|+|t-t_2|)} dt = \int_{-\infty}^{t_1} e^{-\omega(t_1+t_2-2t)} dt + \int_{t_1}^{t_2} e^{-\omega(t_2-t_1)} dt + \int_{t_2}^{\infty} e^{\omega(t_1+t_2-2t)} dt.$$

Используя правило $\omega \mapsto \omega - i\epsilon$ (17.26) и выполняя интегрирование, получаем (при $t_1 > t_2$ порядок времён обратный):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega(|t_1-t|+|t-t_2|)} dt = \left\{ 1 + i\omega |t_1 - t_2| \right\} \frac{e^{-i\omega |t_1 - t_2|}}{i\omega}. \quad (17.33)$$

В результате, в этом приближении 2-функция Грина равна:

$$G(t) = \langle E_0 | T x_t x | E_0 \rangle = \left(1 - \frac{\lambda}{8\omega^3} \{ 1 + i\omega |t| \} + \dots \right) \frac{e^{-i\omega |t|}}{2\omega}. \quad (17.34)$$

Это же соотношение можно получить при помощи теории возмущений Релея-Шрёдингера (стр. 152) с $\beta = \lambda/12$ и формулы (17.4):

$$G(t) = \frac{1}{2\omega} \left(1 - \frac{\lambda}{8\omega^3} + \dots \right) \exp \left\{ -i\omega \left(1 + \frac{\lambda}{8\omega^3} + \dots \right) |t| \right\}. \quad (17.35)$$

Совпадение с (17.34) будет, если в ряд по λ разложить экспоненту. При этом возникает множитель пропорциональный $\lambda |t|$. Он мал только при малых временах, поэтому выражение (17.35), справедливое при любом t , лучше, чем (17.34).

В качестве упражнения, предлагается также вычислить 4-функцию Грина для совпадающих времён. В соответствии с (17.17), она даёт производную энергии основного состояния по параметру λ :

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \frac{1}{4!} G(0, 0, 0, 0) = \frac{1}{4!} \left[\frac{3}{(2\omega)^2} - \frac{7\lambda}{(2\omega)^5} + \dots \right]. \quad (17.36)$$

Это соотношение совпадает с результатом, полученным в рамках теории Релея-Шрёдингера (стр. 152).

5 Среднее S -оператора *

• S -оператор (стр. 197) записан как хронологическое произведение операторов взаимодействия в представлении взаимодействия:

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{\imath \hat{H}_0 t} e^{-\imath \hat{H}(t-t_0)} e^{-\imath \hat{H}_0 t_0} = \text{T} \left\{ \exp \left(-\imath \int_{t_0}^t \hat{V}_I(\tau) d\tau \right) \right\}. \quad (17.37)$$

Это соотношение играет важную роль в квантовой теории поля. Получим с его помощью энергию основного состояния ангармонического осциллятора с $\hat{V}_I(t) = (\lambda/4!) \hat{x}_I^4(t)$. В качестве невозмущенного гамильтониана в этом случае выступает гамильтониан гармонического осциллятора \hat{H}_0 , для которого решения $\hat{x}_I(t)$ известны (3.18). Вычислим среднее оператора $\hat{S}(T/2, -T/2)$ по основному состоянию $\hat{H}_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$ ($T = t - t_0$):

$$S(T) = \langle 0 | \hat{S} \left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2} \right) | 0 \rangle = e^{\imath \varepsilon_0 T} \langle 0 | e^{-\imath \hat{H} T} | 0 \rangle = e^{\imath \varepsilon_0 T} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\imath E_n T} |\langle 0 | E_n \rangle|^2,$$

где в последнем равенстве после экспоненты $e^{-\imath \hat{H} T}$ вставлена сумма по полному набору собственных векторов гамильтониана $\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$. Это среднее является функцией T . По своему физическому смыслу время действительно, однако, когда функция $S(T)$ задана, её всегда можно аналитически продолжить на комплексные значения T . Вычислим чему она равна, если T стремится к $+\infty$ ($1 - \imath\epsilon$), т.е. к большим временам, которые сдвигаются вниз от действительной оси на малую комплексную величину $\imath\epsilon$. Перепишем сумму в виде:

$$S(T) = e^{-\imath(E_0 - \epsilon_0)T} \left(|\langle 0 | E_0 \rangle|^2 + e^{-\imath\Omega_1 T} |\langle 0 | E_1 \rangle|^2 + \dots \right).$$

Так как $E_0 < E_1 < \dots$, частоты $\Omega_n = E_n - E_0 > 0$ и все слагаемые кроме первого при $T \rightarrow +\infty$ ($1 - \imath\epsilon$) равны нулю ($e^{-\Omega_n \infty(\epsilon+\imath)} = 0$, считаем ϵ малой, но конечной). Поэтому:

$$S(T) \rightarrow e^{-\imath(E_0 - \epsilon_0)T} |\langle 0 | E_0 \rangle|^2, \quad \text{при } T \rightarrow +\infty (1 - \imath\epsilon). \quad (17.38)$$

Если найти среднее от S -оператора в таком пределе, то получится экспонента в показателе которой будет стоять разница энергии основного состояния ангармонического E_0 и гармонического ϵ_0 осцилляторов. Приведём соответствующие вычисления по теории возмущений.

• Опуская индекс I , шляпки над операторами и раскладывая экспоненту в ряд до второго порядка по взаимодействию, имеем

$$S(T) = 1 - \frac{i\lambda}{4!} \int \langle 0 | x_t^4 | 0 \rangle dt + \frac{(-i\lambda)^2}{2! \cdot 4!^2} \int \langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle dt ds + \dots$$

Среднее в первом порядке легко вычисляется (представление взаимодействие, поэтому H_0):

$$\langle 0 | x_t^4 | 0 \rangle = \langle 0 | e^{iH_0 t} x^4 e^{-iH_0 t} | 0 \rangle = \langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \frac{3}{(2\omega)^2}, \quad (17.39)$$

где учтено (9.6), стр. 152. Во втором порядке положим сначала $t > s$:

$$\langle 0 | x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle = \langle 0 | e^{iH_0 t} x^4 e^{-iH_0(t-s)} x^4 e^{-iH_0 s} | 0 \rangle = e^{i\varepsilon_0(t-s)} \langle 0 | x^4 e^{-iH_0(t-s)} x^4 | 0 \rangle$$

или вставляя после экспоненты сумму по полному набору собственных векторов гамильтониана H_0 :

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n(t-s)} \langle 0 | x^4 | n \rangle \langle n | x^4 | 0 \rangle = (x_{00}^4)^2 + e^{-i\omega_2(t-s)} (x_{02}^4)^2 + e^{-i\omega_4(t-s)} (x_{04}^4)^2,$$

где $\omega_n = \varepsilon_n - \varepsilon_0 = n\omega$ и учтено, что матричные элементы $x_{0n}^4 = \langle 0 | x^4 | n \rangle$ отличны от нуля только при $n = 0, 2, 4$. Такое же выражение получается при $s > t$, но в экспонентах будет стоять $s - t$. Поэтому, подставляя значения x_{0n}^4 из (9.6), получаем:

$$\langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle = 9 \frac{1}{(2\omega)^4} + 72 \frac{e^{-2i\omega|t-s|}}{(2\omega)^4} + 24 \frac{e^{-4i\omega|t-s|}}{(2\omega)^4}. \quad (17.40)$$

Перепишем эти два средних при помощи 2-функции Грина гармонического осциллятора $D_{ts} = e^{-i\omega|t-s|}/(2\omega)$:

$$\langle 0 | x_t^4 | 0 \rangle = 3 D_{tt}^2, \quad (17.41)$$

$$\langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle = 9 D_{tt}^2 D_{ss}^2 + 72 D_{tt} D_{ts}^2 D_{ss} + 24 D_{ts}^4, \quad (17.42)$$

Константы $1/(2\omega)$ несколько произвольно обозначены двумя эквивалентными способами: D_{tt} , D_{ss} . Если при вычислении хронологических средних использовать теорему Вика, они возникнут естественным образом, однако выкладки будут несколько более громоздкими ($\lessdot H_{52}$).

Таким образом, с точностью до λ^2 , среднее S -оператора по основному состоянию гармонического осциллятора равно:

$$S(T) = 1 - \imath\lambda \int \frac{1}{8} D_{tt}^2 dt \quad (17.43)$$

$$+ (-\imath\lambda)^2 \int \left[\frac{1}{128} D_{tt}^2 D_{ss}^2 + \frac{1}{16} D_{tt} D_{ts}^2 D_{ss} + \frac{1}{48} D_{ts}^4 \right] dt ds + \dots$$

При помощи правил Фейнмана (стр. 278) это выражение изобразим при помощи следующих диаграмм:

$$S(T) = 1 + \frac{1}{8} \text{Diagram } t + \frac{1}{128} \text{Diagram } t \text{Diagram } s + \frac{1}{16} \text{Diagram } t \text{Diagram } s + \frac{1}{48} \text{Diagram } t \text{Diagram } s + \dots$$

Возле каждой диаграммы стоит числовой множитель, который называют *симметричным коэффициентом*. Две петли, соединённые чёрной точкой (второе слагаемое) пропорциональны $D_{tt}^2 = D_{tt}D_{tt}$ (две линии, каждая из которых начинается и кончается на одной вершине). Третье слагаемое состоит из двух несвязных (не соединённых) пар петель. Ему соответствует произведение выражений для каждой пары петель.

Заметим, что третье слагаемое в (17.43) равно квадрату второго слагаемого, делённому на 2. Поэтому, учитывая ряд Тейлора:

$$\exp(a_1\lambda + a_2\lambda^2 + \dots) = 1 + a_1\lambda + \left\{ \frac{a_1^2}{2} + a_2 \right\} \lambda^2 + \dots,$$

выражение для среднего можно переписать в более компактном виде:

$$S(T) = \exp \left(\frac{1}{8} \text{Diagram } t + \frac{1}{16} \text{Diagram } t \text{Diagram } s + \frac{1}{48} \text{Diagram } t \text{Diagram } s + \dots \right)$$

При этом под показателем экспоненты остались только связные диаграммы, пропорциональные, в соответствии с (17.38), энергии основного состояния ангармонического осциллятора.

В интегралах (17.43) не указаны пределы интегрирования. Так как мы хотим воспользоваться (17.38), предполагается, что они симметричны и равны $-T/2$ и $T/2$. Чтобы не усложнять себе жизнь, будем считать T большим действительным числом. А уже после вычислении интеграла (в частности, при подстановке пределов интегрирования), устремим T к $+\infty$ ($1 - \imath\epsilon$), считая $\epsilon > 0$ конечной величиной. Наконец, только в *финальном* результате перейдём к пределу $\epsilon \rightarrow 0$.

Для двух петель получается тривиальный интеграл:

$$\frac{1}{8} \circlearrowleft = \frac{-\imath\lambda}{8} \int_{-T/2}^{T/2} D_{tt}^2 dt = \frac{T}{\imath} \frac{\lambda}{8(2\omega)^2},$$

где константа $D_{tt}^2 = 1/(2\omega)^2$ вынесена за интеграл и T равно результату интегрирования по dt . Для оставшихся двух диаграмм вычислим двойной интеграл:

$$\int_{-T/2}^{T/2} D_{ts}^n dt ds = \int_{-T/2}^{T/2} e^{-\imath n \omega |t-s|} \frac{dt ds}{(2\omega)^n} = 2T \int_0^{T/2} e^{-\imath n \omega t} \frac{dt}{(2\omega)^n},$$

где проведена замена переменных интегрирования $t' = t - s$ и $s' = s$, что сразу даёт значение интеграла по s' равное T . В интеграле по t' (штрих опущен), в силу чётности подынтегральной функции, интегрирование начинается от нуля и результат умножен на 2. При заменах пределы интегрирования остались без изменений, так как T считается большим (когда $T = \infty$ такие действия законны). Проводя оставшееся интегрирование и устремляя в этом интеграле T к ∞ $(1 - \imath\epsilon)$, получаем:

$$\int_{-T/2}^{T/2} D_{ts}^n dt ds = \frac{T}{\imath} \frac{4/n}{(2\omega)^{n+1}}. \quad (17.44)$$

Этот же результат получился бы и при действительном пределе $T \rightarrow \infty$, если учесть правило $\omega \mapsto \omega - \imath\epsilon$ интегрирования функций Грина (17.26).

Подставляя эти интегралы в логарифм среднего S -оператора

$$\ln S(T) = -\imath\lambda \int \frac{1}{8} D_{tt}^2 dt + (-\imath\lambda)^2 \int \left[\frac{1}{16} D_{tt} D_{ts}^2 D_{ss} + \frac{1}{48} D_{ts}^4 \right] dt ds,$$

окончательно получаем:

$$\frac{\imath}{T} \ln S(T) = \frac{\lambda}{8(2\omega)^2} - \left[\frac{2}{16} + \frac{1}{48} \right] \frac{\lambda^2}{(2\omega)^5}. \quad (17.45)$$

Поэтому, в соответствии с (17.38), энергия основного состояния ангармонического осциллятора во втором порядке по теории возмущений равна:

$$E_0 = \varepsilon_0 + \frac{\imath}{T} \ln S(T) = \frac{\omega}{2} + \frac{\lambda}{8(2\omega)^2} - \frac{7}{48} \frac{\lambda^2}{(2\omega)^5} + \dots,$$

что с точностью до переобозначения константы $\lambda = 12\beta$, совпадает с результатом на стр. 152.

Глава 18

Функциональные методы

Использование функциональных производных (производных по функциям) является мощным математическим аппаратом получения различных соотношений в квантовой теории. Этому подходу посвящена настоящая глава. Будет введено понятие производящего функционала для функций Грина и получено уравнение Шингера, тесно связанное с уравнениями Дайсона.

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Функциональные производные

Рассмотрим линейную функцию n переменных J_1, \dots, J_n , заданную при помощи чисел f_1, \dots, f_n :

$$F = F(J_1, \dots, J_n) = \sum_{k=1}^n f_k J_k.$$

Её частная производная по J_i определяется обычным образом:

$$\frac{\partial F}{\partial J_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \sum_{k=1}^n f_k (J_k + \epsilon \delta_{ki}) - \sum_{k=1}^n f_k J_k \right\} = f_i. \quad (18.1)$$

При помощи интеграла в непрерывном случае, можно определить линейный функционал:

$$F[J(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) J(x) dx, \quad (18.2)$$

который при фиксированной функции $f(x)$ даёт число, если вместо функции $J(x)$ подставить её конкретный вид, например $J(x) = x^2$ или $J(x) = \sin(x)$. Таким образом, функционал ставит в соответствие каждой функции $J(x)$ число. Определим по аналогии с (18.1) функциональную производную:

$$\frac{\delta F}{\delta J(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} f(y) (J(y) + \epsilon \delta(x-y)) dy - \int_{-\infty}^{\infty} f(y) J(y) dy \right\} = f(x).$$

Это определение можно использовать для произвольного функционала. В частности, когда он является просто функцией имеем:

$$\frac{\delta J(y)}{\delta J(x)} = \delta(x-y), \quad (18.3)$$

что является непрерывным обобщением формулы $\partial J_i / \partial J_j = \delta_{ij}$ для дискретных величин. Если под интегралом стоит нелинейная функция $\mathcal{L}(J)$, можно написать:

$$\frac{\delta}{\delta J(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(J(y)) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J(y)} \delta(x-y) dy = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial J(x)}.$$

Для доказательства необходимо разность $\mathcal{L}(J(y) + \epsilon \delta(x-y)) - \mathcal{L}(J(y))$ разложить в ряд по ϵ и перейти к пределу $\epsilon \rightarrow 0$. Подобным образом вычисляются функциональные производные и в более сложных случаях. При этом всегда можно иметь ввиду аналогию с обычными частными производными.

Далее мы будем использовать сокращённые “индексные” обозначения для функций $J_x \equiv J(x)$, и функции Дирака $\delta_{xy} \equiv \delta(x - y)$, записываются подобно символу Кронекера:

$$\frac{\delta J_y}{\delta J_x} = \delta_{xy}.$$

Кроме этого, при интегрировании часто будет опускаться занчёк dx :

$$\int_{-\infty}^{\infty} J(x) D(x, y) J(y) dx dy \equiv \int_{x,y} J_x D_{xy} J_y.$$

Коммутаторы с функциональными производными можно вычислять как в координатном представлении квантовой механики. Например, найдём коммутатор $\delta/\delta J_x$ с J_y^n , где n – некоторое число. Ставя справа от коммутатора произвольный функционал $\Psi = \Psi[J]$, имеем:

$$\left[\frac{\delta}{\delta J_x}, J_y^n \right] \Psi = \frac{\delta(J_y^n \Psi)}{\delta J_x} - J_y^n \frac{\delta \Psi}{\delta J_x} = n J_y^{n-1} \delta_{xy} \Psi + J_y^n \frac{\delta \Psi}{\delta J_x} - J_y^n \frac{\delta \Psi}{\delta J_x}.$$

Функциональная производная произведения находится аналогично частным производным для обычных функций. Опуская функционал Ψ (в силу его произвольности), имеем:

$$\left[\frac{\delta}{\delta J_x}, J_y^n \right] = n \delta_{xy} J_y^{n-1}. \quad (18.4)$$

Приведём ещё один пример:

$$\left[\frac{\delta^n}{\delta J_y^n}, J_x \right] = n \delta_{xy} \frac{\delta^{n-1}}{\delta J_y^{n-1}}. \quad (18.5)$$

Этот коммутатор можно получить аналогичным образом, рекурсивно вычисляя n -тую функциональную производную. Возможен и другой приём. Обозначим функциональную производную как оператор \hat{D}_x :

$$\hat{D}_x = \frac{\delta}{\delta J_x}, \quad \hat{J}_x = J_x, \quad [\hat{D}_x, \hat{J}_y] = \delta_{xy}.$$

Аналогично импульсному представлению квантовой механики, перейдём в “ D -представление”, в котором:

$$\hat{D}_x = D_x, \quad \hat{J}_x = -\frac{\delta}{\delta D_x}, \quad [\hat{D}_x, \hat{J}_y] = \delta_{xy}.$$

Теперь вычисление коммутатора (18.5) сводится к коммутатору (18.4).

2 Производящий функционал

Определим функционал, зависящий от функции $J_t \equiv J(t)$, которую будем называть *током*:

$$Z \equiv Z[J] = \langle E_0 | T \exp \left\{ \int_t \hat{x}_t J_t \right\} | E_0 \rangle, \quad (18.6)$$

где $|E_0\rangle$ – основное состояние гамильтониана \hat{H} , а \hat{x}_t – оператор координаты в представлении Гейзенберга. В отличии от него J_t – обычная функция, что подчёркивается шляпкой над \hat{x}_t и её отсутствием над J_t . Иногда в определении (18.6) в показателе экспоненты выделяют мнимую единицу, что соответствует переопределению тока $J_t \mapsto i J_t$.

Операция нормального порядка действует на операторы координаты, стоящие в показателе экспоненты. При этом экспонента понимается как ряд Тейлора:

$$Z = 1 + \int_t \langle E_0 | \hat{x}_t | E_0 \rangle J_t + \frac{1}{2!} \int_{t,s} \langle E_0 | T \hat{x}_t \hat{x}_s | E_0 \rangle J_t J_s + \dots$$

Несложно видеть, что коэффициентами разложения по токам J_t являются n -функции Грина:

$$G(t_1, \dots, t_n) = \left. \frac{\delta Z}{\delta J_1 \dots \delta J_n} \right|_{J=0}, \quad (18.7)$$

где $J = 0$ означает, что после взятия функциональных производных, необходимо все токи положить равными нулю. В связи с этим соотношением, Z называется *производящим функционалом* для функций Грина.

Так как под хронологическим произведением операторы можно представлять местами, вычисление функциональных производных по токам проводится подобно частным производным от дискретных переменных:

$$\frac{\delta Z}{\delta J_t} = \langle E_0 | T \hat{x}_t e^{\int_s^t \hat{x}_s J_s} | E_0 \rangle.$$

Обратим внимание, что интеграл в показателе экспоненты проводится уже по s . Она является (подобно суммационному индексу) “немой переменной” и должна отличаться от времени t , в операторе \hat{x}_t и токе J_t по которому взята производная. Аналогичным образом, вторая производная должна записываться как:

$$\frac{\delta^2 Z}{\delta J_t \delta J_s} = \langle E_0 | T \hat{x}_t \hat{x}_s e^{\int_u^t \hat{x}_u J_u} | E_0 \rangle,$$

где снова переименована переменная интегрирования.

• Найдём уравнение которому удовлетворяет производящий функционал. Для этого умножим дифференциальные уравнения Дайсона (стр. 274) на $J_1 \dots J_n / n!$, где $J_k \equiv J(t_k)$ и проинтегрируем их по t_1, \dots, t_n :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \frac{1}{n!} \int_{t_1 \dots t_n} T\{x_t x_1 \dots x_n\} J_1 \dots J_n + \frac{\lambda}{6} \frac{1}{n!} \int_{t_1 \dots t_n} T\{x_t^3 x_1 \dots x_n\} J_1 \dots J_n \\ = -i \frac{n}{n!} \int_{t_1 \dots t_{n-1}} T\{x_1 \dots x_{n-1}\} J_1 \dots J_{n-1} J_t. \end{aligned}$$

После равенства интеграл по t_k от n слагаемых с функцией Дирака дал множитель n и переменные интегрирования переобозначены единым образом. Просуммировав это равенство по n от 0 до бесконечности, получим к функциональному *уравнению Швингера*:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \frac{\delta Z}{\delta J_t} + \frac{\lambda}{6} \frac{\delta^3 Z}{\delta J_t^3} = -i J_t Z, \quad (18.8)$$

которое в себе содержит все уравнения Дайсона. Ему можно придать интегральный вид (Z усредняется по основному состоянию!, см. стр. 275):

$$\frac{\delta Z}{\delta J_t} + \frac{i\lambda}{6} \int_s D_{ts} \frac{\delta^3 Z}{\delta J_s^3} = \int_s D_{ts} J_s Z. \quad (18.9)$$

При $\lambda = 0$ это уравнение легко решается:

$$Z_0 = \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_{t,s} J_t D_{ts} J_s \right\}, \quad (18.10)$$

что проверяется взятием взятием функциональной производной. Теперь можно воспроизвести теорему Вика. Возьмём первые 2 производные:

$$\frac{\delta Z_0}{\delta J_1} = \int_t D_{1t} J_t Z_0, \quad \frac{\delta^2 Z_0}{\delta J_1 \delta J_2} = D_{12} Z_0 + \int_{t,s} D_{1t} D_{2s} J_t J_s Z_0.$$

При взятии производной от $J_t D_{ts} J_s$ по t_1 имеем $\delta_{1t} D_{ts} J_s + J_t D_{ts} \delta_{1s}$. Интегрируя с функциями Дирака получаем интеграл от $2 D_{1t} J_t$ по t (функция D_{ts} симметрична и переменные интегрирования можно переименовать). Аналогично для третей производной:

$$\frac{\delta^2 Z_0}{\delta J_1 \delta J_2 \delta J_3} = \left[\int_t \left(D_{12} D_{3t} + D_{13} D_{2t} + D_{23} D_{1t} \right) J_t + \int_{t,s,u} D_{1t} D_{2s} D_{3u} J_t J_s J_u \right] Z_0.$$

Взятие четвёртой производной по J_4 при $J = 0$ (можно сразу игнорировать нелинейные по J члены), даёт выражение для 4-функции Грина гармонического осциллятора (17.15), стр. 271.

3 Теория возмущений для уравнения Швингера

Производящий функционал ангармонического осциллятора $Z = Z[J]$ можно выразить через производящий функционал гармонического осциллятора $Z_0 = Z_0[J]$ (18.10) при помощи следующего соотношения:

$$Z = \frac{S[J]}{S[0]}, \quad S[J] = \exp\left\{\frac{-i\lambda}{4!} \int_s \frac{\delta^4}{\delta J_s^4}\right\} Z_0, \quad (18.11)$$

где $S[0]$ означает, что после вычисления $S[J]$ необходимо положить токи равными нулю: $J = 0$. Для доказательства (18.11) вычислим производную функционала $S = S[J]$ по J_t . Функциональные производные, как и обычные частные производные, перестановочны, поэтому:

$$\frac{\delta S}{\delta J_t} = \exp\left\{\frac{-i\lambda}{4!} \int_s \frac{\delta^4}{\delta J_s^4}\right\} \frac{\delta Z_0}{\delta J_t} = \exp\left\{\frac{-i\lambda}{4!} \int_s \frac{\delta^4}{\delta J_s^4}\right\} \int_u D_{tu} J_u Z_0.$$

Поменяем местами экспоненту с производной и ток J_u при помощи коммутатора:

$$\left[\exp\left(\alpha \int_s \frac{\delta^4}{\delta J_s^4}\right), J_u \right] = 4\alpha \frac{\delta^3}{\delta J_u^3} \exp\left(\alpha \int_s \frac{\delta^4}{\delta J_s^4}\right), \quad (18.12)$$

где α – произвольная константа. Он получается подобно (18.5), переходом в “ D -представление”. В результате:

$$\frac{\delta S}{\delta J_t} = \int_u D_{tu} J_u S - \frac{i\lambda}{6} \int_u D_{tu} \frac{\delta^3 S}{\delta J_u^3}.$$

Таким образом, $S[J]$ удовлетворяет уравнению Швингера (18.9). Так как оно линейно, а $S[0]$ – константа (введенная, чтобы получить $Z[0] = 1$), то и Z в (18.11) удовлетворяет уравнению Швингера.

Решение уравнения Швингера в форме (18.11) является довольно формальным и для реального вычисления производящего функционала необходимо разложить экспоненту в ряд:

$$S = Z_0 - \frac{i\lambda}{4!} \int_t \frac{\delta^4 Z_0}{\delta J_t^4} + \frac{(-i\lambda)^2}{2 \cdot 4!^2} \int_{t,s} \frac{\delta^8 Z_0}{\delta J_t^4 \delta J_s^4} + \dots$$

После вычисления функциональных производных, необходимо положить $J = 0$ и разделить ряд $S[J]$ на $S[0]$, чтобы получить $Z[J]$, с помощью которого далее вычисляются функции Грина.

Приведём пример подобных выкладок в первом порядке по теории возмущений. Возьмём первую и вторую производную от (18.10):

$$\frac{\delta Z_0}{\delta J_t} = \int_s D_{ts} J_s Z_0, \quad \frac{\delta^2 Z_0}{\delta J_t^2} = D_{tt} Z_0 + \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^2 Z_0.$$

Ещё одна производная равна:

$$\frac{\delta^3 Z_0}{\delta J_t^3} = 3 D_{tt} \int_s D_{ts} J_s Z_0 + \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^3 Z_0.$$

Беря четвёртую производную, для функционала $S[J]$ (18.11) в первом порядке по λ получаем следующее выражение:

$$S[J] = Z_0 + \frac{-i\lambda}{4!} \int_t \left\{ 3 D_{tt}^2 + 6 D_{tt} \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^2 + \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^4 \right\} Z_0 + \dots$$

Так как $Z_0[0] = 1$, то знаменатель в определении $Z[J]$ равен:

$$S[0] = 1 + \frac{-i\lambda}{8} \int_t D_{tt}^2 + \dots$$

Второе слагаемое является, вообще говоря, бесконечной константой, однако, она сокращается с аналогичной константой в числителе при разложении дроби в ряд:

$$Z[J] = Z_0 + \frac{-i\lambda}{4!} \int_t \left\{ 6 D_{tt} \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^2 + \left[\int_s D_{ts} J_s \right]^4 \right\} Z_0 + \dots \quad (18.13)$$

Это выражение даёт нетривиальные поправки по λ к функциям Грина с двумя и четырьмя временами. Например:

$$G_{12} = \frac{\delta^2 Z}{\delta J_1 \delta J_2} \Big|_{J=0} = D_{12} - \frac{i\lambda}{2} \int_t D_{1t} D_{tt} D_{t2} = \text{---o---} + \frac{1}{2} \text{---o---} \circlearrowleft$$

Первое слагаемое D_{12} возникает при взятии второй функциональной производной от Z_0 , а второе – от квадрата интеграла в (18.13). Такое разложение для 2-функции Грина было получено в предыдущей главе (стр. 276) в результате решения уравнения Дайсона. Аналогично, взятие четвёртой производной приведёт к первой поправке к 4-функции Грина. Для нетривиального приближения к 6-функции необходимо провести вычисление Z во втором порядке по λ .

4 Непертурбативное решение уравнения Швингера

Решение уравнения Швингера при помощи разложения по константе λ приведёт к обычной теории возмущения. Чтобы получить новые результаты, применим другой приближённый метод [Рочев (1999)]. Запишем уравнение Швингера в дифференциальной форме:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right) \frac{\delta Z}{\delta J_t} + \frac{\lambda}{6} \frac{\delta^3 Z}{\delta J_t^3} = -\imath J_t Z. \quad (18.14)$$

В качестве нулевого приближения возьмём уравнение без источника, т.е. без второго слагаемого в правой части:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right) \frac{\delta Z^{(0)}}{\delta J_t} = -\frac{\lambda}{6} \frac{\delta^3 Z^{(0)}}{\delta J_t^3}. \quad (18.15)$$

Его решение будем искать в виде:

$$Z^{(0)} = \exp \int_t f_t J_t, \quad (18.16)$$

что для функции $f_t \equiv f(t)$ даёт следующее уравнение:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right) f_t = -\frac{\lambda}{6} f_t^3. \quad (18.17)$$

Это уравнение похоже на уравнение поля теории φ^4 , однако имеет обратный знак у константы λ . Благодаря этому, кроме тривиального решения $f_x = 0$ (которое нам не подходит), оно обладает нетривиальными решениями. Например, функция f_x может быть отличной от нуля константой:

$$f_0 = m \sqrt{\frac{6}{\lambda}}. \quad (18.18)$$

В одномерном случае (размерность $1+1$) существует также солитоно-подобное решение в виде тахионного кинка:

$$f = f_0 \operatorname{ath}\left(\frac{m\gamma}{\sqrt{2}} \{x - ut\}\right),$$

где u – произвольная константа $u^2 > 1$ и $\gamma = \sqrt{u^2 - 1}$. Формально это решение имеет групповую скорость u , превышающую скорость света, с которой оно движется не изменяя своей формы. Впрочем, так как мы рассматриваем теорию в трёхмерном пространстве, далее будем ограничиваться только константным решением (18.18).

Для построения поправок к нулевому приближению запишем ряд:

$$Z = Z^{(0)} + Z^{(1)} + Z^{(2)} + \dots$$

Будем считать, что второе слагаемое в правой части уравнения (??) в некотором смысле малым и разложение ведём так, как если бы оно умножалось на малый параметр. Тогда поправки к нулевому приближению удовлетворяют системе уравнений:

$$(\partial^2 + m^2) \frac{\delta Z^{(k)}}{\delta J_x} = \frac{\lambda}{6} \frac{\delta^3 Z^{(k)}}{\delta J_x^3} + \iota J_x Z^{(k-1)}. \quad (18.19)$$

Сделаем в ней следующую подстановку: $Z^{(k)} = P^{(k)} Z^{(0)}$. Функционалы $P^{(k)}$ удовлетворяют уравнениям:

$$(\partial^2 + m^2) \frac{\delta P^{(k)}}{\delta J_x} = \frac{\lambda}{6} \left(\frac{\delta^3 P^{(k)}}{\delta J_x^3} + 3f_0 \frac{\delta^2 P^{(k)}}{\delta J_x^2} + 3f_0^2 \frac{\delta P^{(k)}}{\delta J_x} \right) + \iota J_x P^{(k-1)},$$

где учтено уравнение (18.17). При этом $P^{(0)} = 1$.

Глава 19

Функциональный интеграл

Функциональный интеграл или интеграл по траекториям является ещё одним полезным методом описания квантовых систем. Это не самый простой математический инструмент и, обычно, соответствующие результаты можно получить другими методами. Однако, он очень удобен при проведении численных моделей (особенно для многомерных задач и в квантовой теории поля).

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присыпать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

1 Интеграл по траекториям

Рассмотрим частицу с одной степенью свободы, находящуюся в поле потенциала $V(x)$. Матричные элементы гамильтониана системы:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (19.1)$$

в координатном представлении равны

$$\langle x | \hat{H} | y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p \rangle \langle p | y \rangle + V(x) \langle x | y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-y)} H(p, x),$$

где $H(p, x) = p^2/2m + V(x)$ – классическая функция Гамильтона и в первом равенстве вставлен единичный оператор суммирования по собственным векторам импульса $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$, а затем учтено, что

$$\langle x | p \rangle = \frac{e^{ipx}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \langle x | y \rangle = \delta(x - y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x-y)}.$$

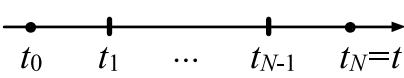
Пусть у частицы в момент времени t_0 измерена координата x_0 . Амплитуда вероятности $\langle x | x_0, t - t_0 \rangle$ обнаружить эту частицу в момент времени t в координате x , будет равна $\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle$. Введём промежуточное время t_1 между t_0 и t :

$$\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle = \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_1)} e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)} | x_0 \rangle$$

и вставим между экспонентами единичный оператор, как интеграл по полному набору собственных векторов координаты:

$$\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_1)} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)} | x_0 \rangle. \quad (19.2)$$

Это соотношение имеет смысл суммирования произведения амплитуд перехода из x_0 во все возможные точки x_1 и от туда в финальную координату x . Подобное дробление интервала $t - t_0$ можно вести до бесконечности:



$$t_k = t_0 + k\Delta t, \quad \Delta t = \frac{t - t_0}{N},$$

так, что при $N \rightarrow \infty$ время перехода Δt каждого шага стремится к нулю.

Представим экспоненту $e^{-i\hat{H}(t-t_0)}$ в виде $e^{-i\hat{H}(t_N-t_{N-1})} \cdot \dots \cdot e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)}$, где $t_N = t$. При $\Delta t \rightarrow 0$, экспоненту в амплитуде $\langle x_k | e^{-i\hat{H}\Delta t} | x_{k-1} \rangle$ можно разложить в ряд по Δt :

$$\langle x_k | (1 - i\hat{H}\Delta t) | x_{k-1} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_k}{2\pi} e^{ip_k(x_k-x_{k-1})} \left\{ 1 - i H(p_k, x_k) \Delta t \right\},$$

где подставлены матричные элементы гамильтониана. Сворачивая выражение в фигурных скобках снова в экспоненту, имеем

$$\langle x_k | e^{-i\hat{H}\Delta t} | x_{k-1} \rangle \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_k}{2\pi} e^{i \left\{ p_k \dot{x}_k - H(p_k, x_k) \right\} \Delta t}, \quad (19.3)$$

где введена “скорость” частицы $\dot{x}_k = (x_k - x_{k-1})/\Delta t$ для времени t_k . Теперь соотношение (19.2) для N интервалов принимает вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \underbrace{\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_{N-1})} | x_{N-1} \rangle}_{N \text{ множителей}} \underbrace{\langle x_{N-1} | \dots | x_1 \rangle}_{N-1} \langle x_1 | e^{-i\hat{H}(t_1-t_0)} | x_0 \rangle$$

или, подставляя (19.3):

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \frac{dp_1 \dots dp_N}{(2\pi)^N} \exp \left[i \sum_{k=1}^N \left(p_k \dot{x}_k - H(p_k, x_k) \right) \Delta t \right]. \quad (19.4)$$

В пределе $N \rightarrow \infty$ и $\Delta t \rightarrow 0$ выражение под экспонентной заменяется на интеграл по dt от t_0 до t . В результате, амплитуду вероятности перехода можно описать при помощи *функционального интеграла*:

$$\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle = \int \frac{\delta x \delta p}{(2\pi)^N} \exp \left[i \int_{t_0}^t \{ p \dot{x} - H(p, x) \} dt \right], \quad (19.5)$$

где значки δx и δp означают следующие пределы:

$$\int \delta x = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k, \quad \int \delta p = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dp_k. \quad (19.6)$$

Интегралов по импульсам на один больше, чем интегралов по координатам. Впрочем, при $N \rightarrow \infty$ это не играет роли. Также как обычный интеграл Римана определяется при помощи предела частичных сумм, так и функциональные интегралы (19.5) имеют смысл пределов N -кратных интегралов, определённые выше.

- Для гамильтониана (19.1) интеграл по импульсу (19.3) является гауссовым и его несложно вычислить (см. стр. 395):

$$\langle x_k | e^{-i\hat{H}\Delta t} | x_{k-1} \rangle \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\Delta t}} \exp\left[i\left\{\frac{m\dot{x}_k^2}{2} - V(x_k)\right\}\Delta t\right],$$

поэтому амплитуду перехода можно записать также в следующем виде:

$$\langle x | e^{-i\hat{H}T} | x_0 \rangle = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \exp\left[i \sum_{k=1}^N \left(\frac{m\dot{x}_k^2}{2} - V(x_k)\right) \Delta t\right], \quad (19.7)$$

где введена бесконечная (при $N \rightarrow \infty$) функция времени $T = t - t_0$:

$$\mathcal{N} = \left(\frac{mN}{2\pi i T}\right)^{N/2}. \quad (19.8)$$

Напомним также, что $\dot{x}_k = (x_k - x_{k-1})/\Delta t$ и $x_N = x$. Таким образом, в непрерывном пределе:

$$\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle = \mathcal{N} \int \delta x e^{iS[x]}, \quad (19.9)$$

где в показателе экспоненты стоит *действие*:

$$S[x] = \int_{t_0}^t L(\dot{x}, x) dt,$$

являющееся функционалом траекторий движения $x = x(t)$, а

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \quad (19.10)$$

– это *лагранжиан* системы. При вычислении действия начальная и конечная точки фиксированы. В классической механике частица движется по траектории соответствующей экстремуму действия, что приводит к *уравнениям Лагранжа*:

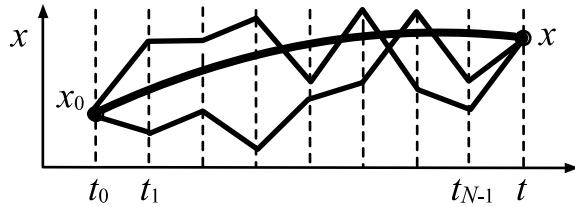
$$\frac{\delta S}{\delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}.$$

Для лагранжиана (19.10) уравнения Лагранжа имеют вид

$$m \ddot{x} = -V'(x). \quad (19.11)$$

Дифференциальные уравнения второго порядка требуют задания двух условий. Это могут быть начальные значения координаты и скорости $x(t_0)$, $\dot{x}(t_0)$ или положение частицы в два момента времени $x(t_0)$ и $x(t_1)$.

▷ Формулу (19.9) можно интерпретировать как интеграл по траекториям $x = x(t)$, соединяющим начальную и конечную точки с координатами x_0 и x . Эти траектории не обязательно совпадают с классическим решением уравнения Лагранжа (19.11) и суммируются все возможные траектории, включая также недифференцируемые:



Мы работаем в системе единиц $\hbar = 1$. Для восстановления постоянной Планка, необходимо величины размерности длины и времени разделить на \hbar (стр. 13), т.е. сделать подстановки $t \mapsto t/\hbar$, $x \mapsto x/\hbar$. При этом скорость и энергия не изменятся. Так как лагранжиан имеет размерность энергии, постоянная Планка появится в знаменателе под экспонентой в формуле (19.9): $dt \mapsto dt/\hbar$. В классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ комплексная экспонента является сильно осциллирующей функцией и траектории, заметно отличающиеся от экстремума действия, будут давать малый вклад в амплитуду перехода (см. также стр. 307). Таким образом, в этом пределе частица движется по классической траектории. Фейнмановский интеграл является наиболее прямым методом установления соответствия между квантовой теорией, в которой понятие траектории отсутствует (импульс и координата одновременно не измеримы) и классической механикой, основанной на понятии траектории частицы.

При помощи интеграла по траекториям можно строить квазиклассическое приближение к амплитуде перехода, раскладывая действие в ряд в окрестности классической траектории $\bar{x}(t)$:

$$S[x] = S[\bar{x}] + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t M_{ts} (x_t - \bar{x}_t) (x_s - \bar{x}_s) dt ds + \dots,$$

где

$$M_{ts} = \left. \frac{\delta^2 S}{\delta x_t \delta x_s} \right|_{x=\bar{x}}.$$

Этот ряд аналогичен ряду Тейлора для функций многих переменных, но вместо дискретного суммирования ведётся интегрирование. При этом первая функциональная производная, вычисленная на классической траектории равна нулю. Ведущим приближением будет действие на классической траектории $S[\bar{x}]$, а квадратичное по x слагаемое в (19.9) приводит к интегралам гауссового вида.

2 Статистическая сумма

Определим *статистическую сумму*:

$$Z_\beta = \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}} = \int \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle dx = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (19.12)$$

где во втором равенстве след оператора (сумма диагональных элементов) записан в координатном представлении, а в третьем равенстве – в энергетическом: $\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$ (не путаем Z_β с функционалом $Z = Z[J]$). Статсумма с параметром $\beta = T^{-1}$ играет важную роль при описании систем, находящихся в *термодинамическом равновесии* при температуре T (в системе единиц, в которой постоянная Больцмана $k_B = 1$).

Напомним, что в квантовой теории различают чистые и смешанные состояния. *Чистое состояние* описывается вектором гильбертового пространства (волновой функцией в координатном представлении). Оно возникает при взаимодействии макроприбора и микросистемы. *Смешанное состояние* – это некогерентная смесь чистых состояний с различными весами W_n . Например, мы можем взять N квантовых систем из которых N_1 находятся в чистом состоянии $|E_1\rangle$, ещё N_2 в состоянии $|E_2\rangle$ и т.д. Затем “случайно их перемешать”. Совокупность этих систем образует *квантовый ансамбль* в котором с вероятностью $W_n = N_n/N$ можно обнаружить квантовую систему в чистом состоянии $|E_n\rangle$. Именно таким ансамблем являются системы, находящиеся в термодинамическом равновесии. При этом вероятность с которой микросистема находится в состоянии с энергией E_n , равна:

$$W_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z_\beta}. \quad (19.13)$$

При любой температуре более вероятными являются низкие энергии. Увеличение температуры (уменьшение параметра β) повышает вероятность более высоких энергий (возбуждённых состояний). Множитель Z_β^{-1} обеспечивает единичность суммарной вероятности.

В смешанном состоянии среднее значение физической величины A определяется при помощи суммы квантовых средних $\langle E_n | \hat{A} | E_n \rangle$ в состояниях $|E_n\rangle$, умноженных на вероятности W_n этих состояний:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_\beta} \text{Tr}(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n \langle E_n | \hat{A} | E_n \rangle W_n, \quad (19.14)$$

где второе соотношение записано в энергетическом представлении с (19.13).

▷ Найдём среднюю энергию ансамбля смешанных состояний:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n W_n = \frac{1}{Z_\beta} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z_\beta} \frac{\partial Z_\beta}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z_\beta}{\partial \beta}. \quad (19.15)$$

Аналогично вычисляется дисперсия энергии:

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle (E - \bar{E})^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z_\beta}{\partial \beta^2}.$$

Важную роль в статистической физике играет энтропия ($T = 1/\beta$):

$$S = - \sum_n W_n \ln W_n = \ln Z_\beta + \beta \langle E \rangle = \frac{\partial(T \ln Z_\beta)}{\partial T}.$$

В равновесном состоянии она стремится к максимуму, что даёт вероятности (19.13), при условии равенства единице суммарной вероятности и фиксированном значении средней энергии ($\ll H_{53}$).

▷ Для гармонического осциллятора $E_n = \omega(n + 1/2)$:

$$Z_\beta = e^{-\omega\beta/2} \left(1 + e^{-\omega\beta} + e^{-2\omega\beta} + \dots \right) = \frac{e^{-\omega\beta/2}}{1 - e^{-\omega\beta}} = \frac{2}{\text{sh}(\omega\beta/2)}. \quad (19.16)$$

Соответственно, средняя энергия (19.15) равна:

$$\langle E \rangle = \frac{\omega}{2} \frac{\text{ch}(\omega\beta/2)}{\text{sh}(\omega\beta/2)}. \quad (19.17)$$

При $\beta \rightarrow \infty$ она стремится к энергии основного состояния, а при $\beta \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$) бесконечна (при больших температурах вклад в среднее дают всё более высокие энергии). В качестве упражнения ($\ll H_{54}$), стоит найти статсумму и энергию свободной частицы в 3-мерном пространстве.

▷ Статсумма полезна и в задачах “обычной” квантовой механики. Например, с её помощью можно определить спектр гамильтониана. Так, для энергии основного состояния имеем:

$$E_0 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln Z_\beta, \quad E_1 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \ln (Z_\beta - e^{-\beta E_0}). \quad (19.18)$$

Эти соотношения получаются аналогично рассуждениям на стр. 280: в сумме $Z_\beta = e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + \dots$ при $\beta \rightarrow \infty$ “выживает” только первое слагаемое ($E_0 < E_1 < \dots$). Продолжая, можно найти все уровни энергии. Аналогично получается среднее значение любого оператора в основном состоянии:

$$\langle E_0 | \hat{A} | E_0 \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}})}{\text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}}. \quad (19.19)$$

В частности, если $\hat{A} = \hat{H}$, это ещё один способ найти энергию основного состояния, более удобный при численном моделировании, чем (19.18).

- Выразим статсумму (19.12) при помощи функционального интеграла. Для этого, диапазон $0 \dots \beta$, как и время, разобьём на N малых отрезков $\Delta\tau = \beta/N$ и вычислим след в координатном представлении:

$$Z_\beta = \int \langle x | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | x_2 \rangle \dots \langle x_{N-1} | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | x \rangle dx_1 \dots dx_{N-1} dx.$$

Для гамильтониана $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(\hat{x})$ при $\Delta\tau \rightarrow 0$, проводя гауссово интегрирование (I.19), стр. 394 по p , аналогично амплитуде, получаем:

$$Z_\beta = \left(\frac{mN}{2\pi\beta} \right)^{N/2} \int dx_1 \dots dx_N \exp \left\{ - \sum_{k=1}^N \left[\frac{m\dot{x}_k^2}{2} + U_k \right] \Delta\tau \right\}, \quad (19.20)$$

где $\dot{x}_2 = (x_2 - x_1)/\Delta\tau$, $U_k = U(x_k)$ и по $x_0 = x_N = x$ вычисляется след. В пределе $N \rightarrow \infty$, $\Delta\tau \rightarrow 0$, $\beta = N\Delta\tau$, напишем:

$$Z_\beta = \mathcal{N} \int \delta x \exp \left\{ - \int_0^\beta \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + U(x) \right] d\tau \right\}, \quad (19.21)$$

где:

$$\mathcal{N} = \left(\frac{mN}{2\pi\beta} \right)^{N/2}, \quad \int \delta x = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N. \quad (19.22)$$

В экспоненте стоит интеграл по энергии (а не по лагранжиану, как в амплитуде). Кроме этого, рассматриваются все *замкнутые* траектории:

$$x(0) = x(\beta).$$

Определим также *матрицу плотности*, являющуюся пределом выражения при $N \rightarrow \infty$:

$$\rho(x, x_0) = \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x_0 \rangle \approx \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left[- \sum_{k=1}^N \left(\frac{m\dot{x}_k^2}{2} + V_k \right) \Delta\tau \right],$$

или в непрерывных обозначениях ($\dot{x} = dx/d\tau$):

$$\rho(x, x_0) = \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x_0 \rangle = \mathcal{N} \int \delta x \exp \left[- \int_0^\beta \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} + V(x) \right) d\tau \right]. \quad (19.23)$$

В отличии от (19.7) такой функциональный интеграл удобен при проведении численных моделирований (экспонента быстро убывает).

• Матрица плотности (19.23) является функцией x , x_0 и $\beta > 0$. Если сделать аналитическое продолжение к $\beta = iT$, то получится амплитуда перехода частицы из точки x_0 в x за время T . При $x = x_0$, интеграл от $\rho(x, x)$ по x даёт статсумму Z_β . Кроме этого, матрица плотности определяет средние по ансамблю от различных физических величин:

$$\langle \hat{A} \rangle = Z_\beta^{-1} \operatorname{Tr}(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}) = Z_\beta^{-1} \int \langle x | \hat{A} | y \rangle \rho(y, x) dx dy. \quad (19.24)$$

Интеграл от энергии в экспоненте называют *евклидовым действием*. По сравнению с интегралом Фейнмана (19.9) теперь используются комплексные времена: $T = -i\beta$, $t = -i\tau$. При этом $(dx/dt)^2 = -(dx/d\tau)^2$, поэтому классические уравнения движения (19.11) принимают вид:

$$m \frac{d^2x}{d\tau^2} = V'(x) \quad (19.25)$$

(поменялся знак в правой части). Эти же уравнения получаются ($\ll H_{55}$), если вычислить экстремум евклидового действия.

▷ Евклидовы времена можно использовать и для вычисления функций Грина. Определим операторы:

$$\hat{x}(\tau) = e^{\tau \hat{H}} \hat{x} e^{-\tau \hat{H}}. \quad (19.26)$$

С их помощью, например, для гармонического осциллятора можно записать: $\langle E_0 | \hat{x}(\tau_2) \hat{x}(\tau_1) | E_0 \rangle = e^{-\omega(\tau_2 - \tau_1)} / 2\omega$. Аналитическое продолжение этого выражения к комплексным значениям $\tau_1 = it_1$, $\tau_2 = it_2$ приводит к среднему операторов в представлении Гейзенберга (3.26), стр. 75.

Так как $\operatorname{Tr}\{\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}\} = \operatorname{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}\}$ ($\ll H_{??}$), запишем:

$$\operatorname{Tr}\left\{e^{-\beta \hat{H}} \hat{x}(\tau_2) \hat{x}(\tau_1)\right\} = \int \langle x | e^{-(\beta - \tau_2) \hat{H}} \hat{x} e^{-(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}} \hat{x} e^{-\tau_1 \hat{H}} | x \rangle dx$$

или вставляя перед операторами \hat{x} интегралы по $|x_2\rangle\langle x_2|$ и $|x_1\rangle\langle x_1|$:

$$= \int x_1 x_2 \langle x | e^{-(\beta - \tau_2) \hat{H}} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\tau_1 \hat{H}} | x \rangle dx dx_1 dx_2.$$

Повторяя вывод для матрицы плотности при $0 < \tau_1 < \tau_2 < \beta$, получаем:

$$\operatorname{Tr}\left\{e^{-\beta \hat{H}} \hat{x}(\tau_1) \hat{x}(\tau_2)\right\} = \mathcal{N} \int \delta x x(\tau_1) x(\tau_2) \exp\left\{-\int_0^\beta \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x)\right) d\tau\right\}.$$

Множители $x(\tau_1)$, $x(\tau_2)$ участвуют в интегрировании по dx_{k_1} и dx_{k_2} , где $k_i = N \tau_i / \beta$. В пределе $\beta \rightarrow \infty$ по формуле (19.19), вычислив такой функциональный интеграл, можно найти среднее $\langle E_0 | \hat{x}(\tau_1) \hat{x}(\tau_2) | E_0 \rangle$.

3 Гармонический осциллятор

Найдём матрицу плотности $\rho(x_b, x_a)$ гармонического осциллятора. Запишем для него евклидово действие и уравнения движения:

$$S_E[x] = \int_0^\beta \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + \frac{\omega^2 x^2}{2} \right) d\tau, \quad \ddot{x} - \omega^2 x = 0. \quad (19.27)$$

Их общее решение $\bar{x}(\tau) = A e^{\omega\tau} + B e^{-\omega\tau}$ с начальным $x_a = \bar{x}(0)$ и конечным $x_b = \bar{x}(\beta)$ условиями имеет вид (τ, β – евклидовы времена):

$$\bar{x}(\tau) = x_a \frac{\operatorname{sh} \omega(\beta - \tau)}{\operatorname{sh} \omega\beta} + x_b \frac{\operatorname{sh} \omega\tau}{\operatorname{sh} \omega\beta}. \quad (19.28)$$

Функционал евклидового действия на этой траектории равен ($\ll H_{56}$):

$$S_E[\bar{x}] = \frac{\omega}{2} \frac{(x_a^2 + x_b^2) \operatorname{ch} \omega\beta - 2x_a x_b}{\operatorname{sh} \omega\beta}. \quad (19.29)$$

Сделаем в интеграле (19.23) замену переменных $x(\tau) = \bar{x}(\tau) + y(\tau)$, где $\bar{x}(\tau)$ – классическая траектория (19.28), а $y(\tau)$ – отклонение от неё. Граничные условия учтены в $\bar{x}(\tau)$, поэтому для функции отклонения: $y(0) = y(\beta) = 0$. Подставим эту замену в функционал действия (19.27):

$$S_E[x] = S_E[\bar{x}] + S_E[y] + \int_0^\beta (\dot{\bar{x}}\dot{y} + \omega^2 \bar{x}y) d\tau.$$

Интеграл равен нулю (интегрирование в нём первого слагаемого по частям: $\dot{\bar{x}}\dot{y} d\tau = \dot{\bar{x}} dy$ с $y(0) = y(\beta) = 0$, приводит к уравнениям движения (19.27)). Поэтому для *квадратичного* действия матрица плотности равна:

$$\rho(x_b, x_a) = \mathcal{N} \int \delta x e^{-S_E[x]} = e^{-S_E[\bar{x}]} \mathcal{N} \int \delta y e^{-S_E[y]} = e^{-S_E[\bar{x}]} \rho(0, 0),$$

где в последнем равенстве учтено, что в интеграле по δy выполняется $y(0) = y(\beta) = 0$. Таким образом, зависимость от координат полностью содержится в евклидовом действии (19.29) на классической траектории.

Матрица плотности $\rho(0, 0)$ в дискретном виде является $(N-1)$ -мерным гауссовым интегралом с матрицей, имеющей простую ленточную структуру. Соответствующий интеграл можно ($\ll H_{57}$) вычислить используя формулу (I.20), стр. 394. Однако мы рассмотрим другой подход, имеющий значение выходящее за рамки данной задачи.

Так как $y(0) = y(\beta) = 0$, функцию $y(\tau)$ можно разложить в ряд Фурье:

$$y(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\pi n \frac{\tau}{\beta}\right). \quad (19.30)$$

Найдём интеграл от квадрата производной (кинетический член):

$$\int_0^{\beta} \dot{y}^2 d\tau = \sum_{n,m=1}^{\infty} a_n a_m \frac{\pi^2 nm}{\beta^2} \int_0^{\beta} \cos\left(\pi n \frac{\tau}{\beta}\right) \cos\left(\pi m \frac{\tau}{\beta}\right) d\tau = \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n^2 \frac{\pi^2 n^2}{\beta^2},$$

где учтено, что интеграл от произведения косинусов равен $(\beta/2) \delta_{n,m}$. Такое же значение имеет интеграл от произведения синусов, поэтому евклидово действие равно:

$$S_E[y] = \frac{\beta}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\pi^2 n^2}{\beta^2} + \omega^2 \right) a_n^2. \quad (19.31)$$

В дискретном случае разложение (19.30) ($k = 1, \dots, N - 1$, $\tau_k = k\beta/N$):

$$y_k = \sum_{n=1}^{N-1} a_n \sin\left(\frac{\pi n k}{N}\right) \quad (19.32)$$

можно рассматривать как замену переменных интегрирования y_1, \dots, y_{N-1} на новые переменные a_1, \dots, a_{N-1} , с якобианом преобразования:

$$J = \det \frac{\partial(y_1, \dots, y_{N-1})}{\partial(a_1, \dots, a_{N-1})}.$$

Так как действие (19.31) диагонально по a_n , интеграл по a_1, \dots, a_{N-1} является произведением несвязных гауссовых интегралов:

$$\rho(0, 0) = \mathcal{N} J \prod_{n=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} da_n \exp\left\{-\frac{\beta}{4} \left(\frac{\pi^2 n^2}{\beta^2} + \omega^2\right) a_n^2\right\},$$

которые легко вычисляются:

$$\rho(0, 0) = \mathcal{N} J \cdot \left(\frac{2\pi}{\beta/2}\right)^{\frac{N-1}{2}} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\pi^2 n^2}{\beta^2} + \omega^2\right) \right]^{-1/2}$$

или

$$\rho(0, 0) = \underbrace{\mathcal{N} J \cdot \left(\frac{4\pi}{\beta}\right)^{\frac{N-1}{2}} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \frac{\pi^2 n^2}{\beta^2} \right]^{-1/2}}_{C_N(\beta)} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \left(1 + \frac{\beta^2 \omega^2}{\pi^2 n^2}\right) \right]^{-1/2}, \quad (19.33)$$

где величина $C_N(\beta)$ не зависит от частоты ω .

При помощи представления гиперболического синуса [3], 4.5.68:

$$\operatorname{sh} x = x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{\pi^2 n^2}\right), \quad (19.34)$$

получаем:

$$\rho(0, 0) = C_N(\beta) \left(\frac{\omega \beta}{\operatorname{sh} \omega \beta} \right)^{1/2}.$$

Осталось определить функцию $C_N(\beta)$. Так от ω она не зависит, а множитель после неё при $\omega \rightarrow 0$ стремится к единице, то $C_N(\beta)$ равна матрице плотности свободной частицы. Запишем:

$$\rho_0(x, x_0) = \langle x | e^{-\beta \frac{\hat{p}^2}{2}} | x_0 \rangle = \int \langle x | p \rangle \langle p | x_0 \rangle e^{-\beta \frac{p^2}{2}} dp = \int e^{ip(x-x_0)-\beta \frac{p^2}{2}} \frac{dp}{2\pi}.$$

Вычисляя гауссовый интеграл (I.19), стр. 394, получаем:

$$\rho_0(x, x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_0)^2}{2\beta} \right\}. \quad (19.35)$$

Отсюда, после подстановки “обычных” времён $\beta = iT$, следует амплитуда перехода свободной частицы (восстанавливаем массу m):

$$\langle x | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}T} | x_0 \rangle = \mathcal{N} \int \delta x \exp \left\{ i \int_0^T \frac{m \dot{x}^2}{2} dt \right\} = \sqrt{\frac{m}{2\pi iT}} e^{i\frac{m(x-x_0)^2}{2T}}. \quad (19.36)$$

Вероятность перехода $x \mapsto x_0$ за время T пропорциональна квадрату модуля этого выражения. При этом зависимость от $x - x_0$ исчезает, что связано с бесконечной неопределенностью импульса в начальном состоянии (все значения импульса равновероятны). Физичнее рассматривать начальное состояние, например, с гауссовым распределением $\Psi(x_0)$, что предлагается проделать в качестве упражнения ($\ll \text{H}??$).

Возвращаясь к гармоническому осциллятору, можно записать:

$$C_N(\beta) = \rho_0(0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}}. \quad (19.37)$$

Собирая все результаты вместе, окончательно, получаем:

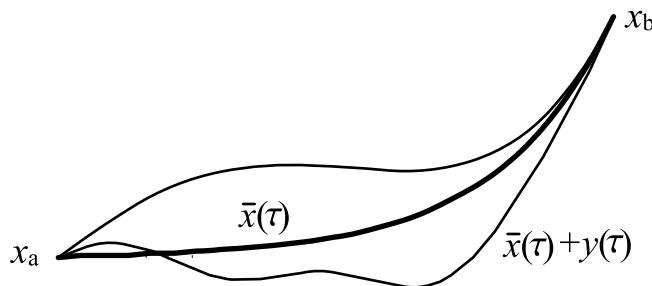
$$\rho(x_b, x_a) = \langle x_b | e^{-\beta \hat{H}} | x_a \rangle = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi \operatorname{sh} \omega \beta}} \exp \left\{ -\frac{\omega}{2} \frac{(x_a^2 + x_b^2) \operatorname{ch} \omega \beta - 2 x_a x_b}{\operatorname{sh} \omega \beta} \right\},$$

что совпадет с результатами алгебраического подхода (стр. 77).

- Ниже на рисунке изображена классическая евклидова траектория $\bar{x}(\tau)$, (19.28) и две траектории отклонения от неё, построенные при по помощи разложения Фурье (19.30). Верхняя траектория содержит 2 гармоники, а нижняя 5 ($t = \tau/\beta$):

$$y = \frac{\sin(\pi t)}{3} + \frac{\sin(2\pi t)}{10}, \quad y = -\frac{\sin(\pi t)}{5} + \frac{\sin(2\pi t)}{10} + \frac{\sin(5\pi t)}{20}.$$

Чем больше амплитуды a_n в гармониках с $n \gg 1$, тем более “изломанная” получается кривая, за счёт высокочастотных колебаний:



Функциональный интеграл для матрицы плотности – это интеграл в $(N - 1)$ -мерном пространстве, каждая точка которого $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_{N-1}\}$ является той или иной траекторией. От них зависит подынтегральная функция $\exp(-S_E[\mathbf{x}])$, которая достигает максимального значения в минимуме евклидового действия $S_E[\mathbf{x}]$. Этот минимум соответствует траектории, являющейся решением классических уравнений движения. Именно она даёт заметный вклад в интеграл.

Для очень изломанных траекторий, кинетический член действия (сумма квадратов производных) оказывается очень большой. Поэтому значение подынтегральной функции на таких траекториях близко к нулю. Аналогично, малый вклад в интеграл даёт каждая траектория сильно отклоняющаяся от классического решения. Все эти случаи приводят к малым значениям подынтегральной функции. Впрочем, в конфигурационном пространстве траекторий очень много, поэтому их суммарный вклад может оказаться заметным.

Для осциллятора, каждая гармоника разложения Фурье, в конечном счёте, является множителем в формуле разложения гиперболического синуса (19.34). Это формула неплохо работает и при конечном числе сомножителей, по крайней мере, пока параметр β невелик. При больших β множество возможных траекторий с не очень маленькими значениями подынтегральной функции $\exp(-S_E[\mathbf{x}])$ существенно растёт. Соответственно, в формуле (19.34) приходится учитывать всё больше сомножителей и, следовательно, всё больше гармоник в разложении траектории.

4 Метод Монте-Карло

В дискретном приближении функциональный интеграл является N -кратным интегралом, значение которого можно получить численными методами. Зададим достаточно широкий диапазон $L = x_{max} - x_{min}$ изменения координат (x_{min}, x_{max}) . Пусть интеграл вычисляется от функции $f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_N)$ по N -мерному кубу объёма $V = L^N$:

$$I = \int_V f(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x}. \quad (19.38)$$

При малых N , стандартным подходом численного интегрирования, является деление N -мерного объёма $V = L^N$ на небольшие объёмы $\Delta V = (L/K)^N$, где K – число разбиений длины L по каждой координате x_k . Затем вычисляется сумма $f_k \Delta V$, где f_k – значение функции в объёме ΔV . К сожалению, для больших N этот метод не работает. Например, для гармонического осциллятора $E = (\dot{x}^2 + x^2)/2$ можно положить $L = 10$. Пусть $K = N = 100$, тогда число значений функции, которые необходимо вычислить равно $K^N = 10^{200}$, что не реалистично. Поэтому приходится использовать вероятностные методы, получившие название *методов Монте-Карло*.

Введём функцию $p(\mathbf{x})$, которая ни где не обращается в ноль внутри объёма V и нормирована на единицу:

$$\int_V p(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = 1.$$

Её можно интерпретировать как плотность вероятности некоторого *случайного вектора* \mathbf{x} . Перепишем интеграл (19.38) в следующем виде:

$$I = \int_V \frac{f(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} p(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \left\langle \frac{f(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \right\rangle, \quad (19.39)$$

где символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по случайным векторам с распределением $p(\mathbf{x})$. В частном случае равномерного распределения (векторы \mathbf{x} выбираются внутри V равновероятно) имеем $p(\mathbf{x}) = 1/V$. Соответственно, искомый интеграл является средним значением функции $f(\mathbf{x})$, умноженным на V . Это среднее можно оценить по n случайно заданным векторам \mathbf{x} :

$$I \approx V \tilde{f}, \quad \tilde{f} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f_k,$$

где f_k – значения функции от каждого такого вектора.

Если провести численный эксперимент по n случайным величинам f_k , то получится некоторое значение среднего \tilde{f}_1 . Повтор с новыми n случайными величинами приведёт к другому значению \tilde{f}_2 и т.д. Среднеквадратичный разброс этих средних характеризует ошибку в измерении истинного среднего \bar{f} . Чем больше n , тем эта ошибка будет меньше. Квадрат ошибки равен:

$$\sigma_{\tilde{f}}^2 = \langle (\tilde{f} - \bar{f})^2 \rangle = \langle \tilde{f}^2 \rangle - \bar{f}^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n \langle f_i f_j \rangle - \bar{f}^2,$$

где символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по бесконечному числу экспериментов (\tilde{f} – случайная величина, а $\bar{f} = \langle \tilde{f} \rangle$ – число). Двойная сумма по i, j содержит n^2 слагаемых из которых n штук вида $\langle f_i^2 \rangle$ имеют одинаковые индексы и $n^2 - n$ штук вида $\langle f_i f_j \rangle$ – различные. Если все значения f_i – независимые случайные величины, то $\langle f_i f_j \rangle = \langle f_i \rangle \langle f_j \rangle = \langle f_i \rangle^2$ и

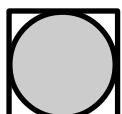
$$\sigma_{\tilde{f}}^2 = \frac{1}{n^2} \left[n \langle f_i^2 \rangle + (n^2 - n) \langle f_i \rangle^2 \right] - \langle f_i \rangle^2 = \frac{\langle f_i^2 \rangle - \langle f_i \rangle^2}{n}.$$

Таким образом, ошибка измерения *выборочного среднего* \tilde{f} с ростом n убывает как $1/\sqrt{n}$:

$$\sigma_{\tilde{f}} = \frac{\sigma_f}{\sqrt{n}}, \quad \sigma_f^2 = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2, \quad (19.40)$$

где σ_f^2 – среднеквадратичный разброс функции по бесконечной выборке.

Равномерные случайные числа хороши для функций, значения которых внутри объёма интегрирования меняются незначительным образом. Однако для функциональных интегралов это не так и подынтегральная функция $f(\mathbf{x}) = e^{-S_E[\mathbf{x}]}$ быстро убывает при отклонении от экстремума действия. В многомерии это создаёт существенную проблему. Рассмотрим шар радиуса $R = L/2$, вписанный N -мерный куб объёма $V = L^N$. Отношение их объёмов равно (стр. 402):



$$\frac{V_R}{V} = \frac{2\pi^{N/2}}{N2^N\Gamma(N/2)}, \quad \begin{array}{c} N : & 2 & 5 & 10 & 100 \\ V_R/V : & 0.8 & 0.2 & 10^{-3} & 10^{-70} \end{array}$$

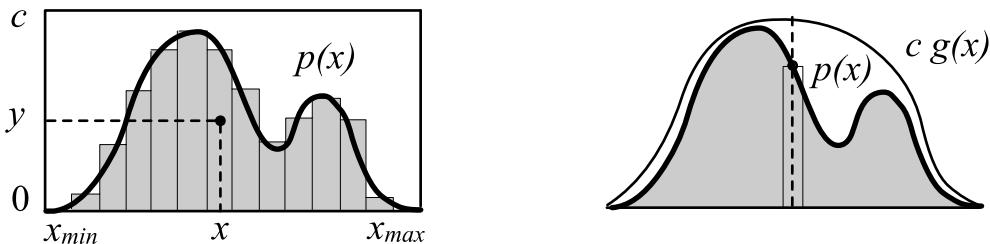
Если ненулевые значения подынтегральной функции находятся внутри шара, то для 100-кратного интеграла потребуется провести численный эксперимент, по $n = 10^{70}$ равномерно распределенным случайным числам, чтобы был шанс получить не ноль при применении метода Монте-Карло. Эта проблема относится к классу проблем, получивших название “*проклятие размерности*”.

Ситуацию можно спасти, отказавшись от равномерных случайных выборок. Пусть распределение вероятности $p(\mathbf{x})$ примерно повторяет подынтегральную функцию $f(\mathbf{x})$. Тогда случайные числа будут в основном появляться в окрестности ненулевых значений $f(\mathbf{x})$. Если $f(\mathbf{x}) \approx c p(\mathbf{x})$, где c – константа, ошибка в измерении выборочного среднего (19.39) будет существенно меньше:

$$\sigma_{f/p}^2 = \langle f^2 / p^2 \rangle - \langle f/p \rangle^2 \approx \langle c^2 \rangle - \langle c \rangle^2 \approx 0.$$

Рассмотрим способы генерации случайных чисел с заданным распределением. Пусть некоторое решение необходимо принять с вероятностью p . Сгенерим случайное число u , которое *равномерно* распределено в интервале $[0 \dots 1]$. Решение принимается, если $u \leq p$ (длина отрезка $[0 \dots 1]$ равна 1 и для u вероятность попасть в диапазон $[0 \dots p]$ как раз равна p).

Применим эту геометрическую идею к генерации одномерного случайного числа x с плотностью вероятности $p(x)$. Возьмём прямоугольник, внутри которого гарантировано помещается значимая (ненулевая) часть графика функции $p(x)$ (ниже первый рисунок). Будем случайно и равномерно заполнять прямоугольник точками. Для этого независимо генерим x из диапазона $[x_{min} \dots x_{max}]$, и y из $[0 \dots c]$, где c – заведомо выше максимума $p(x)$. В качестве случайного числа с распределением $p(x)$ возьмём координату x тех точек у которых $y \leq p(x)$, т.е. отбираем только точки, попавшие под график $p(x)$:



В результате, получится больше точек там где значение $p(x)$ велико и меньше, там где мало. Гистограмма их распределения повторит функцию $p(x)$. При этом конкретное значение c роли не играет (требуется только выполнение условия $c \geq p_{max}$). Впрочем, чем ближе c к p_{max} , тем меньше прийдётся создавать лишних точек, не попавших под график плотности вероятности $p(x)$. Так как часть точек приходится отбрасывать, подобный метод называют *семплированием с отказом*.

Метод можно улучшить, если вместо равномерно распределённых случайных чисел использовать генератор чисел с распределением $g(x)$. При этом должно существовать такое $c \geq 1$, что при любом x выполняется $c g(x) \geq p(x)$, т.е. функция $c g(x)$ везде выше $p(x)$ (второй рисунок).

Сгенерим случайное число x с распределением $g(x)$. Гистограмма этих чисел будет повторять функцию $g(x)$. Затем сгенерим равномерно распределённое число y из их диапазона $[0 \dots c g(x)]$. Будем использовать x в качестве случайной величины с распределением $p(x)$, если $y \leq p(x)$.

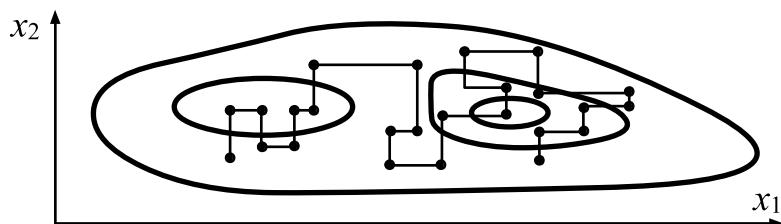
Фактически это повторение метода прямоугольника с “кривой” верхней границей. Конкретное значение числа c , при выполнении условия $c g(x) \geq p(x)$, роли не играет. Однако, чем теснее $c g(x)$ обхватывает функцию $p(x)$, тем меньше будет промахов, т.е. не попаданий под $p(x)$.

Этот метод можно использовать и для многомерных распределений $p(\mathbf{x})$. Однако “проклятие размерности” приведёт к очень большому числу промахов. Простейший способ обойти проблему – это генерить одномерные случайные числа по очереди для каждой координаты, зафиксировав все остальные.

Возьмём некоторый вектор $\mathbf{x}^{(0)} = \{x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots x_N^{(0)}\}$ в окрестности ненулевого значения $p(\mathbf{x}^{(0)})$. Рассмотрим одномерное распределение

$$P(x) = p(x, x_2^{(0)}, \dots x_N^{(0)}), \quad (19.41)$$

где $x_2^{(0)}, \dots x_N^{(0)}$ – фиксированные значения. Получим случайное число $x_1^{(1)}$ при помощи семплирования с отказом и будем считать, что мы имеем новый случайный вектор $\mathbf{x}^{(1)} = \{x_1^{(1)}, x_2^{(0)}, \dots x_N^{(0)}\}$. Затем зафиксируем все координаты, кроме x_2 и снова тем же способом получим случайное число $\mathbf{x}^{(2)} = \{x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(0)}, \dots x_N^{(0)}\}$ и т.д. Такой метод называется *семплированием по Гиббсу*. Ниже на рисунке изображена траектория последовательности случайных чисел в этом методе для двухмерного распределения $p(x_1, x_2)$ с двумя максимумами. Оно нарисовано линиями высот, подобно горам на топографической карте:



Выбор начальной точки может оказаться неудачным, поэтому, обычно, сначала проводится некоторое число итераций, которые называются “отжигом” случайной величины. Предполагается, что после отжига вектор \mathbf{x} “доблуждается” в оптимальную область и далее его можно использовать как случайную величину с распределением $p(\mathbf{x})$.

Сгенерённые таким образом числа будут не вполне независимы. Тем не менее, при большом числе итераций получается последовательность векторов $\mathbf{x}^{(k)}$, имеющая многомерное распределение $p(\mathbf{x})$.

5 Алгоритм Метрополиса

В семплировании по Гиббсу есть одна проблема, связанная с тем, что одномерное распределение (19.41) постоянно изменяется и заранее выбрать хорошо охватывающую его, простую функцию $c g(x)$ сложно. Решением является *алгоритм Метрополиса*. В нём задаётся начальный вектор $\mathbf{x}^{(0)}$. Затем он случайно меняется на вектор $\mathbf{x}^{(1)}$. Это можно сделать изменением одной координаты или случайным небольшим сдвигом в произвольном направлении. Затем вычисляется отношение $\alpha = f(\mathbf{x}^{(1)})/f(\mathbf{x}^{(0)})$. Если $\alpha > 1$, полагаем $\alpha = 1$. Вектор $\mathbf{x}^{(1)}$ принимается с вероятностью α , иначе новым случайному вектором снова считается $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)}$. Далее алгоритм повторяется и из $\mathbf{x}^{(1)}$ аналогично получается $\mathbf{x}^{(2)}$ и т.д. В результате работы этого алгоритма создаётся последовательность случайных векторов $\mathbf{x}^{(k)}$ с распределением вероятности наиболее повторяющим функцию: $p(\mathbf{x}) \sim f(\mathbf{x})$.

Для обоснования алгоритма Метрополиса напомним основные сведения из теории марковских *случайных процессов*. Рассмотрим упорядоченную последовательность случайных N -мерных векторов $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots$ Обычным образом можно построить плотность вероятности $p(\mathbf{x})$ встретить в последовательности конкретное значение \mathbf{x} . Более детальную информацию о процессе даёт вероятность $p(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ встретить в последовательности \mathbf{x} , за которым следует \mathbf{x}' или, в более общем случае, совместную вероятность последовательности векторов $p(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', \dots)$. Если подобные вероятности не меняются вдоль “бесконечной” последовательности, то говорят о *стационарном* случайном процессе.

Условной вероятностью $p(\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x})$ называют вероятность обнаружить в последовательности вектор \mathbf{x} , если уже известно, что перед ним стоит вектор \mathbf{x}_0 . Для её вычисления необходимо отобрать все пары \mathbf{x}_0, \mathbf{x} , где \mathbf{x}_0 – фиксированный вектор, а \mathbf{x} – произвольный и разделить их на общее количество значений \mathbf{x}_0 в последовательности. Другими словами:

$$p(\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})}{p(\mathbf{x}_0)}. \quad (19.42)$$

Рассмотренные выше вероятности нормированы следующим образом:

$$\int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1, \quad \int p(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}' = 1, \quad \int p(\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$$

(в последнем случае нормировка означает единичную вероятность встретить после \mathbf{x}_0 хоть какой-нибудь вектор). Аналогично можно определить условную вероятность с более длинной предысторией $p(\mathbf{x}, \mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x}'')$ и т.д.

Марковским процессом называют случайный процесс (случайную последовательность векторов), в котором условная вероятность зависит только от последнего значения, а не более длинной предыстории. Другими словами: $p(\dots, \mathbf{x}, \mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x}'') = p(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x}'')$.

Пусть *пространство состояний* (возможные значения \mathbf{x}) и условные вероятности $p(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')$ таковы, что при переходах мы можем попасть в любой состояния (нет поглощающих состояний из которых нельзя попасть ни в какое другое и нет замкнутых циклов, попадание в который приводит к блужданию только по подмножеству состояний). Тогда, начиная с любого вектора \mathbf{x} и переходя к новым с вероятностями $p(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')$, мы получим случайную последовательность с некоторым *стационарным* распределением $p(\mathbf{x})$ (такие марковские процессы называют *эргодичными*).

Предположим, что наши действия приводят к стационарному марковскому процессу и $p(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = p(\mathbf{x}', \mathbf{x})$. Тогда из определения (19.42) следует, что

$$p(\mathbf{x}) p(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') = p(\mathbf{x}') p(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x}). \quad (19.43)$$

Предположим, что из последнего, уже сгенерированного случайного вектора \mathbf{x} получается новый вектор \mathbf{x}' при помощи двух действий: 1) с вероятностью $g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')$ из \mathbf{x} получается \mathbf{x}' ; 2) затем с вероятностью $a(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')$ он принимается в качестве следующего вектора. Общая вероятность $p(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')$ получить \mathbf{x}' соответствует тому, что оба шага пройдены:

$$p(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') = g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') a(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}'). \quad (19.44)$$

Из (19.43) и (19.44) следует, что:

$$\frac{a(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')}{a(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x}')}{p(\mathbf{x})} \frac{g(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x})}{g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')}. \quad (19.45)$$

Несложно видеть, что этому соотношению удовлетворяет *правило отбора Метрополиса-Гастингса*:

$$a(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{x}')}{p(\mathbf{x})} \frac{g(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x})}{g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}')} \right\}. \quad (19.46)$$

Если способ получения нового вектора \mathbf{x}' имеет симметричное распределение: $g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') = g(\mathbf{x}' \mapsto \mathbf{x})$, то приходим к *правилу Метрополиса*. Например, если $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \sigma \mathbf{u}$, где σ константа, а \mathbf{u} нормально распределённая случайная величина (гауссово распределение) с нулевым средним и единичной дисперсией, то $g(\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}') = \exp\{-(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 / 2\sigma^2\} / (2\pi\sigma)^{N/2}$ – симметрична.

Часть VI

Математические приложения

Анализ

Исходным объектом математики является множество. В частности, функции определяются как отношения между множествами. Важную роль в физике играет особый класс множеств, называемых метрическими пространствами. Хотя большинство функций, встречаемых в теории, являются “гладкими”, в квантовой механике приходится использовать, так называемые, обобщённые функции, наиболее важными примерами которых является сингулярная функция Дирака и разрывная функция Хевисайда.

A.1 Множества

• Размышления о совокупностях объектов создало математику и стало её основой. Множество – это фундаментальное понятие, обобщающее интуитивное представление об объединении объектов по некоторому признаку. Примерами множеств являются: множество целых чисел, множество прямых, множество симпатичных девушек.

Будем считать, что существуют две сущности – *множества* и их *элементы*. Множества состоят из элементов, причём все элементы данного множества *различны* и их порядок роли не играет.

Множество определено, если есть способ выяснить содержит ли оно тот или иной элемент или нет. Факт, что элемент a принадлежит множеству \mathcal{A} (содержится в множестве) обозначается следующим образом: $a \in \mathcal{A}$. Эта запись является логической функцией двух аргументов a, \mathcal{A} , принимающая два значения: истина (если a принадлежит \mathcal{A}) или ложь (в противном случае). Такие логические функции называются *предикатами*. Привычным примером предиката $x < y$ является обозначение того, что число x меньше числа y . Знак равенства $x = y$ – это тоже предикат. Если элемент a не принадлежит множеству \mathcal{A} , то это обозначается следующим образом: $a \notin \mathcal{A}$ (тоже предикат).

Для двух множеств, состоящих их одних и тех же элементов, вводится предикат *равенства*: $\mathcal{A} = \mathcal{B}$. Если для множеств \mathcal{A} и \mathcal{B} , каждый $a \in \mathcal{A}$ также принадлежит \mathcal{B} то говорят, что \mathcal{A} является *подмножеством* (частью) множества \mathcal{B} . Для выражения этого вводится третий предикат: $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$. Всегда $\mathcal{A} \subset \mathcal{A}$ истинно (множество состоит из элементов, принадлежащих ему же). Кроме этого, если $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$ и $\mathcal{B} \subset \mathcal{C}$, то $\mathcal{A} \subset \mathcal{C}$.

Множество, состоящее из конечного числа элементов, можно описать перечислив эти элементы. Так, $\mathcal{A} = \{3, 2, 1, 5, 4\}$ – множество натуральных чисел от 1 до 5. В общем случае множества задаются при помощи условия: $\mathcal{A} = \{x \mid \text{условие}\}$. Например, $\mathcal{A} = \{x \mid 0 < x < 6\}$ – это снова числа от 1 до 5, а $\mathcal{A} = \{x \mid x > 0\}$ – множество положительных чисел.

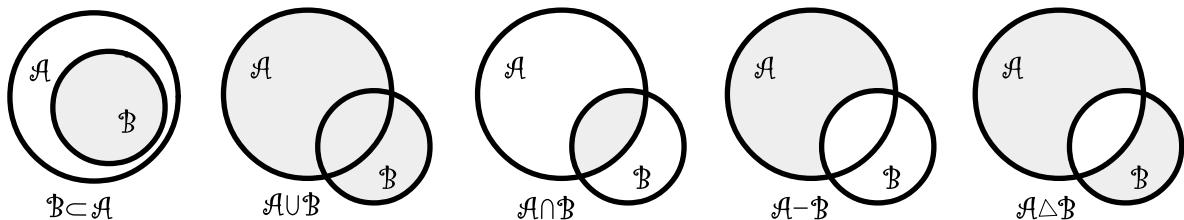
Совокупность множеств также является множеством, элементами которого выступают другие множества. Для избежания противоречий считают, что множество не может быть одним из своих элементов: $\mathcal{A} \notin \mathcal{A}$.

Не стоит путать $a \in \mathcal{A}$ (элемент множества) и $\{a\} \subset \mathcal{A}$ (подмножество, состоящее из одного элемента). Множество $\{\}$ не содержащее элементов, называется *пустым* и обозначается как: \emptyset . Пустое множество является подмножеством любого множества: $\emptyset \subset \mathcal{A}$. Множество \mathcal{A} из n элементов имеет 2^n подмножеств ($\ll H_{58}$), включая само \mathcal{A} и \emptyset .

- Для образования новых множеств вводится три *функции* (операции), ставящие в соответствие двум множествам, третье:

$$\begin{aligned} \text{объединение: } \mathcal{A} \cup \mathcal{B} &= \{x \mid (x \in \mathcal{A}) \text{ или } (x \in \mathcal{B})\} \\ \text{пересечение: } \mathcal{A} \cap \mathcal{B} &= \{x \mid (x \in \mathcal{A}) \text{ и } (x \in \mathcal{B})\} \\ \text{дополнение: } \mathcal{A} - \mathcal{B} &= \{x \mid (x \in \mathcal{A}) \text{ и } (x \notin \mathcal{B})\}, \end{aligned}$$

Таким образом, в объединённое множество попадают все элементы из обоих множеств. В пересечение только общие для множеств элементы, а в дополнение $\mathcal{A} - \mathcal{B}$ только те элементы \mathcal{A} , которые не принадлежат \mathcal{B} . Эти базовые функции можно наглядно представить при помощи *диаграмм Эйлера-Венна*, в которых замкнутая область обозначает некоторое множество. Область геометрического пересечения двух множеств будет множественным пересечением $\mathcal{A} \cap \mathcal{B}$, и т.д.:



Понятно, что $\mathcal{A} \cup \mathcal{A} = \mathcal{A}$, $\mathcal{A} \cap \mathcal{A} = \mathcal{A}$ и если $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$, то $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \mathcal{A}$. Результатом функций от множеств может быть пустое множество. Например: $(\mathcal{A} - \mathcal{B}) \cap \mathcal{B} = \emptyset$. Отметим мнемонику: значок \cup – это чашка в которую “сливаются” (объединяясь) оба множества.

При помощи диаграмм Эйлера-Венна несложно доказывать различные тождества для введенных выше операций. Например, в качестве упражнения предлагается проверить свойства *коммутативности* и *ассоциативности* для объединения множеств:

$$\mathcal{A} \cup \mathcal{B} = \mathcal{B} \cup \mathcal{A}, \quad (\mathcal{A} \cup \mathcal{B}) \cup \mathcal{C} = \mathcal{A} \cup (\mathcal{B} \cup \mathcal{C}).$$

и такое же для пересечения \cap . Затем доказать их *дистрибутивность*:

$$(\mathcal{A} \cup \mathcal{B}) \cap \mathcal{C} = (\mathcal{A} \cap \mathcal{C}) \cup (\mathcal{B} \cap \mathcal{C}),$$

которое верно и при замене \cup на \cap и наоборот. Ещё два тождества:

$$\mathcal{A} \cap (\mathcal{B} - \mathcal{C}) = (\mathcal{A} \cap \mathcal{B}) - (\mathcal{A} \cap \mathcal{C}),$$

$$(\mathcal{A} - \mathcal{B}) \cup (\mathcal{B} - \mathcal{A}) = (\mathcal{A} \cup \mathcal{B}) - (\mathcal{A} \cap \mathcal{B})$$

также несложно доказать, пользуясь диаграммами Эйлера-Венна (последнее называют *симметричной разностью* и обозначают как $\mathcal{A} \Delta \mathcal{B}$).

A.2 Отношения и функции

- Рассмотрим два множества $\mathcal{A} : \{a_1, a_2, \dots\}$ и $\mathcal{B} : \{b_1, b_2, \dots\}$. Они могут иметь разный смысл (\mathcal{A} – это все точки, \mathcal{B} – все прямые), или одинаковый (и \mathcal{A} , и \mathcal{B} – это множества натуральных чисел). Образуем новое множество состоящие из всех возможных пар элементов множеств (первый элемент в паре $a \in \mathcal{A}$, а второй $b \in \mathcal{B}$):

$$\{(a_1, b_1), (a_1, b_2), \dots, (a_2, b_1), (a_2, b_2), \dots\}.$$

Такое множество называют *прямым произведением* и обозначают как $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$. Подмножество \mathcal{R} множества $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$ называют *отношением*.

Например, пусть: $\mathcal{A} : \{1, 2, 3\}$ и $\mathcal{B} : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Существует $18 = 3 \cdot 6$ возможных упорядоченных пар. Определим отношение $R(a, b)$, отобразив 8 из 18-ти пар которые ему удовлетворяют:

$$\mathcal{R} : \{ (1, 2), (1, 3), (1, 4), (1, 5), (1, 6), \\ (2, 4), (2, 6), \\ (3, 6) \}$$

	1	2	3	4	5	6
1		*	*	*	*	*
2				*		*
3						*

Слева от таблицы по вертикали расположены элементы множества \mathcal{A} , а сверху по горизонтали – множества \mathcal{B} . Каждая ячейка таблицы является элементом множества $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$ всех пар. Звёздочки помечены элементы, отобранные в подмножество \mathcal{R} . Отношение $R(a, b)$ может обозначать ”число a – собственный делитель b ” ($a \neq b$). Например $R(2, 4)$ истинно (включено в отношение), а $R(3, 4)$ – ложно (не включено).

И так, отношение – это предикат. Если у него два аргумента $R(x, y) : \mathcal{R} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, его называют *бинарным*. Аналогично можно рассматривать отношение между тремя объектами: $R(x, y, z) : \mathcal{R} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$ и т.д.

Для бесконечных множеств расставлять “звёздочки” в таблице становится проблематичным, поэтому при задании отношения формулируют те или иные свойства (аксиомы), которым данное отношение удовлетворяет. Например, для отношения между элементами одного и того же множества $R(a, b) : \mathcal{R} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{X}$ можно задать свойство симметрии:

$$R(a, b) \rightarrow R(b, a).$$

Это означает, что, если $R(a, b)$ – справедливо (a и b находятся в отношении \mathcal{R} , то и $R(b, a)$ будет справедливо. Это соответствует квадратной таблице, симметричной относительно диагонали, идущей из левого верхнего угла в правый нижний. Обратим внимание, что в прямом произведении важен порядок перечисления элементов, даже если это произведение определено на паре элементов из одного и того-же множества.

• Рассмотрим *отношение эквивалентности* $\mathcal{R} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{X}$ между элементами одного множества \mathcal{X} . Вместо функциональной записи $R(a, b)$ для него принято использовать обозначение $a \sim b$. Для любых элементов \mathcal{X} постулируется справедливость (истинность) следующих аксиом:

$$\begin{array}{lll} x \sim x & & \text{(рефлексивность),} \\ x \sim y & \rightarrow & y \sim x \quad \text{(симметричность),} \\ x \sim y, \quad y \sim z & \rightarrow & x \sim z \quad \text{(транзитивность).} \end{array}$$

Этим аксиомам, например, удовлетворяет отношение равенства $x = y$ (звездочки в $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ только на диагонали). Однако, существует и другие отношения эквивалентности. Например, целые m и n равны по модулю 2, если $m - n$ нацело делится на 2 (таблица отношения подобна шахматной доске). При этом натуральные числа $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ разбиваются на два класса эквивалентности чётных $\{2, 4, 6, \dots\}$ и нечётных $\{1, 3, 5, \dots\}$ чисел (внутри каждого класса элементы связаны отношением $a \sim b$). Ещё один пример – прямые на плоскости с классами эквивалентности – множеств параллельных друг другу прямых.

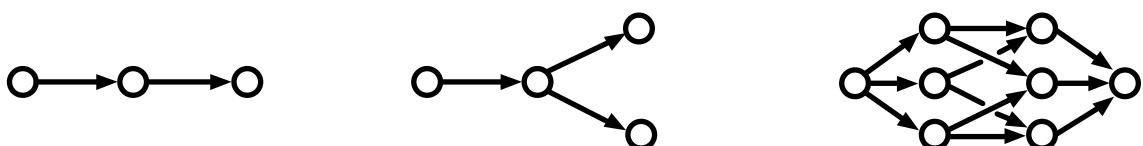
▷ Изменение аксиом приводит к новому отношению $x \prec y$, которое называют *отношением строгого частичного порядка*:

$$\begin{array}{lll} x \not\prec x & & \text{(антирефлексивность, т.е. } x \prec x \text{ ложно),} \\ x \prec y, \quad y \prec z & \rightarrow & z \prec z \quad \text{(транзитивность).} \end{array}$$

Из аксиом следует асимметричность отношения: $x \prec y \rightarrow y \not\prec x$. Примером отношения порядка является строгое неравенство между числами на вещественной прямой $x < y$. Отношение “натуральное x есть собственный делитель y ” также отношение строгого порядка.

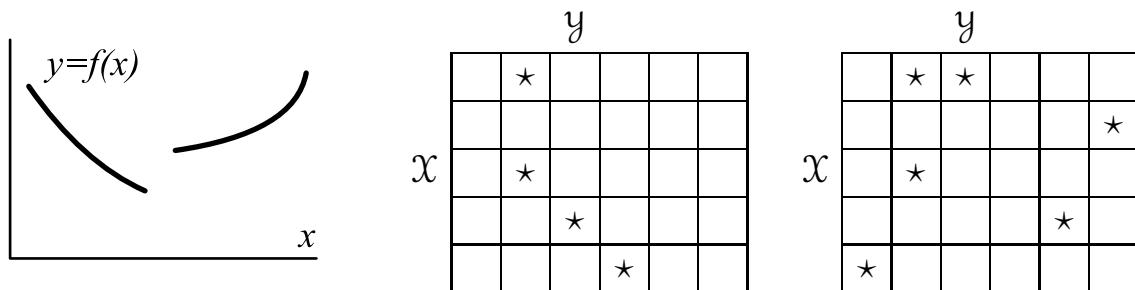
Отношение *нестрого порядка* $x \preccurlyeq y$ означает $x \prec y$ или $x = y$. Его примером является предикат подмножества $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$.

Отношение порядка удобно изображать в виде графа, в котором узлы являются элементами множества, а стрелка (направленное ребро) от a к b означает, что $a \prec b$ (ребра, следующие из транзитивности опускаются):



Структуры графов могут быть самыми различными: связными и несвязными, линейными и т.д. Все они отражают различные способы введения отношения порядка на множестве. Выше первый граф является линейным порядком, подобным порядку чисел. Третий граф связывает между собой все подмножества множества, состоящего из трёх элементов.

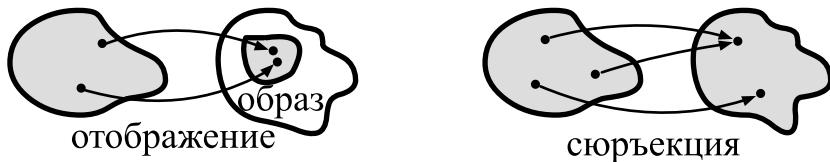
- Отношение $F(x, y)$, обозначаемое также $y = f(x)$, называется *функциональным*, если для каждого $x \in \mathcal{X}$ отношение $F(x, y)$ истинно для *не более одного* $y \in \mathcal{Y}$. Ниже первая таблица определяет функциональное отношение, тогда как вторая функциональным не является:



Действительно, в первой строке второй таблицы стоят две звёздочки, поэтому нельзя определить функцию которая первому элементу x_1 множества \mathcal{X} ставит в соответствие $f(x_1)$ *один* элемент множества \mathcal{Y} . Если мы переставим местами элементы в отношении (перевернём таблицу на 90°) то получится обратная к $f(x)$ функция. Не у каждой функции есть обратная (например, её нет у первой таблицы выше).

Множество величин x для которых определено отношение (непустые строки) называется *областью определения* функции. Если оно совпадает со всем множеством \mathcal{X} (нет пустых строк), то говорят что функция f есть *отображение* множества \mathcal{X} в \mathcal{Y} . Отображение часто обозначают следующим образом $f : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$.

Отображения можно изображать диаграммами со стрелочками, соединяющими элементы в двух областях, символизирующих два множества. Заштрихованными частями обозначаются области определения (слева) и значения (справа), а точками, некоторые выбранные элементы:



Отображение $\mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$ называется *инъекцией*, если два различных $x \in \mathcal{X}$ отображаются в два различных $y \in \mathcal{Y}$, т.е. если $x_1 \neq x_2$, то $f(x_1) \neq f(x_2)$. Отображение называется *сюръекцией*, если каждый $y \in \mathcal{Y}$ является образом по крайней мере одного элемента \mathcal{X} . Наконец, отображение является *биекцией*, если каждый $y \in \mathcal{Y}$ является образом единственного элемента $x \in \mathcal{X}$. Биекция является одновременно инъекцией и сюръекцией и называется также *взаимно однозначным соответствием* между \mathcal{X} и \mathcal{Y} .

• *Бинарные функции* двух аргументов $f : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \mapsto \mathcal{Z}$, или $z = f(x, y)$ любой паре прямого произведения двух множеств \mathcal{X} и \mathcal{Y} ставят в соответствие элемент из третьего множества \mathcal{Z} . Часто бинарные функции задаются на элементах одного множества: $f : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathcal{X}$.

Рассмотрим в качестве примера множество из четырех элементов $\mathcal{X} = \{a, b, c, d\}$, и определим на этом множестве две функции двух аргументов при помощи следующих таблиц:

	a	b	c	d	
a	a	a	c	a	a
b	a	d	d	d	b
c	c	d	c	b	c
d	a	d	b	a	d

	a	b	c	d	
a	a	c	c	a	a
b	b	d	d	b	b
c	c	a	a	c	c
d	d	b	b	d	d

На пересечении строки и столбца стоит значение функции соответствующее аргументам, написанным в заголовке строки и столбца. Например, для первой таблицы $f_1(a, c) = c$, $f_1(d, d) = a$ и т.д.

Функцию двух аргументов иногда удобно записывать в операционном виде, ставя вместо функции между аргументами некоторый значок – обозначение данной операции:

$$z = f(x, y) \quad \text{или} \quad z = x \circ y.$$

Особый интерес представляют функции, которые удовлетворяют тем или иным аксиомам. Например, можно потребовать, чтобы функции были симметричны или ассоциативны:

$$\begin{array}{ll} \text{симметричность} & \left| \begin{array}{l} f(x, y) = f(y, x) \\ f(x, f(y, z)) = f(f(x, y), z) \end{array} \right| \begin{array}{l} x \circ y = y \circ x, \\ x \circ (y \circ z) = (x \circ y) \circ z. \end{array} \\ \text{ассоциативность} & \end{array}$$

Подобные свойства особенно полезны для бесконечных множеств, отношения между которыми уже нельзя задать при помощи таблиц.

Выше таблица f_1 обладает симметричностью, но не является ассоциативной. Вторая функция f_2 , наоборот, ассоциативна, но не симметрична.

Можно рассматривать композицию различных бинарных функций. Например, привычные арифметические операции $a + b$ и $a * b$ на множестве целых чисел связаны различными соотношениями. При этом тождество $(a + b) * c = (a * c) + (b * c)$, можно переписать также и в функциональном виде: $\text{mult}(\text{plus}(a, b), c) = \text{plus}(\text{mult}(a, c), \text{mult}(b, c))$. Понятно, что операционный вид оказывается существенно компактнее.

Алгебра изучает различные соотношения между (обычно бинарными) функциями, которые обладают теми или иными свойствами.

A.3 Действительные числа и функции

Напомним основные свойства вещественной прямой, которая является моделью одномерного физического пространства. Множество её точек обозначают как \mathbb{R} .

На этой прямой “живут” самые разнообразные математические объекты. Прежде всего – это *натуральные числа* $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$, которые, согласно Кронекеру, создал Бог, тогда как всё остальное уже придумал человек. Несколько более широкое множество образуют *целые числа* $\mathbb{Z} = \{\dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$. Они хорошо различимы на вещественной прямой и между ними есть “дырки”.

Следующие обитатели – это *рациональные числа*, равные отношению целого и натурального числа: $\mathbb{Q} = \{m/n \mid m \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$. В отличии от целых чисел, рациональные заполняют прямую *плотно* и между ними нет “дырок”. Действительно, какими бы близкими не были два рациональных числа $q_1 < q_2$, между ними всегда находятся другие рациональные числа, например $q_1 < (q_1 + q_2)/2 < q_2$.

Одним из самых поразительных открытий в математике было осознание того, что “между” элементами всюду плотного множества рациональных чисел обитают другие – *иррациональные числа* \mathbb{I} , которых в некотором смысле даже “больше”, чем рациональных. То, что рациональных чисел недостаточно, следует из простого доказательства иррациональности числа $\sqrt{2}$. Действительно, пусть $\sqrt{2} = m/n$, где m и n взаимно простые числа (несократимая дробь). Тогда $m^2 = 2n^2$, т.е. m^2 – чётно и так как квадрат чётного числа всегда чётное, делаем вывод, что m – чётное и может быть представлено в виде $m = 2k$. Но тогда $n^2 = 2k^2$, и следовательно n – также чётное, что противоречит тому, что m и n – взаимно простые.

Все рациональные числа можно разбить на два множества \mathcal{A} и \mathcal{B} так, что каждое число $a \in \mathcal{A}$ меньше, каждого $b \in \mathcal{B}$. При этом должна осуществляться одна из трёх возможностей:

- 1) Есть наибольшее число $a_0 \in \mathcal{A}$. Например, если $a \leq 1$ и $b > 1$.
- 2) Есть наименьшее число $b_0 \in \mathcal{B}$. Например, если $a < 1$ и $b \geq 1$.
- 3) Нет ни наибольшего числа в множестве \mathcal{A} , ни наименьшего в \mathcal{B} .

Третья возможность возникает, например, когда к \mathcal{A} отнесены все рациональные числа, квадрат которых меньше 2, а к \mathcal{B} – квадрат которых больше 2. Такое разбиение (его называют *сечением*) задаёт иррациональное число $\sqrt{2}$, находящееся между \mathcal{A} и \mathcal{B} . Возможны и другие способы определения иррациональных чисел.

▷ Объединение рациональных и иррациональных чисел образует все точки вещественной прямой \mathbb{R} . Само по себе это утверждение тривиально (есть рациональные и “другие” числа), поэтому необходимо более конструктивное определение вещественных чисел. Одним из них является десятичная запись числа, в виде бесконечной последовательности цифр от 0 до 9. Например, $1/4 = 0.25000\dots$, $1/11 = 0.090909\dots$ и т.д. Для рациональных чисел такие последовательности всегда периодичны (рано или поздно начинает повторяться цифра или последовательность цифр). Иррациональные числа описываются *непериодическими* десятичными последовательностями: $\sqrt{2} = 1.41421356237309504880168872421\dots$

▷ Многие иррациональные числа можно определить как *пределы последовательностей*. Напомним, что бесконечная последовательность чисел $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ сходится к числу a (имеет предел a), если для любого, сколь угодно малого $\varepsilon > 0$, можно указать такое целое $N = N(\varepsilon)$, что:

$$|a_n - a| < \varepsilon \text{ при всех } n \geq N(\varepsilon) \quad \text{---} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ | \varepsilon | \end{array} \quad \begin{array}{ccccccc} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & \dots & a \end{array} \quad \rightarrow$$

Другими словами, мы всегда можем покрыть весь приближающийся к a бесконечный “хвост” последовательности a_N, a_{N+1}, \dots сколь угодно малым интервалом ε (точнее, задав ε , указать попадающий в него хвост).

Аналогично определяется значение бесконечной суммы чисел (ряда чисел): $x_1 + x_2 + x_3 + \dots$, как предел последовательности частичных сумм: $a_1 = x_1, a_2 = x_1 + x_2, \dots, a_n = x_1 + \dots + x_n$.

Иррациональное число, например e (число Эйлера) можно определить как предел последовательности или как сумму ряда:

$$e = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n, \quad e = 1 + \frac{1}{1!} + \frac{1}{2!} + \dots + \frac{1}{n!} + \dots$$

Последовательность сходится к *иррациональному* числу, хотя каждый её член *рационален*: $2, 9/4, 64/27, \dots \rightarrow e = 2.71828182845904523536\dots$

▷ Отрезок вещественной прямой может быть *ограниченным* с обоих сторон, с одной стороны или не ограниченным ни с одной:

$$[0, 1] = \{x \mid 0 \leq x \leq 1\}, \quad (0, 1] = \{x \mid 0 < x \leq 1\}, \quad (0, 1) = \{x \mid 0 < x < 1\}.$$

В последнем случае у отрезка *нет* наименьшего $\min(0, 1)$ или наибольшего $\max(0, 1)$ элемента, хотя есть *точная нижняя грань*: $\inf(0, 1) = 0$ и *точная верхняя грань*: $\sup(0, 1) = 1$. При этом $\min[0, 1] = \inf[0, 1] = 0$ и $\max[0, 1] = \sup[0, 1] = 1$. Если \min и \max всегда принадлежат множеству, то \inf и \sup могут и не принадлежать ему.

• Функция $f(x)$ является отношением (стр. 324) между двумя множествами \mathcal{X} и \mathcal{Y} , при котором каждому $x \in \mathcal{X}$ ставится в соответствие *одно* определённое $y \in \mathcal{Y}$ (если отношение для данного x определено). Для конечных множеств подобные функции можно задавать при помощи таблиц, явным образом перечислив пары элементов, входящих в отношение. Для множеств бесконечных, а тем более непрерывных, необходимы другие, более эффективные методы.

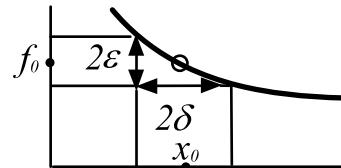
Рассмотрим функции действительной переменной, принимающие действительные значения: $\mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$. Некоторая точка $x \in \mathbb{R}$ может быть произвольным образом связана с любой точкой $y \in \mathbb{R}$. Однако, обычно мы наделяем функции некоторыми свойствами, которые позволяют при помощи небольшого числа вещественных параметров задать поведение функции в окрестности данной точки (т.е. минимизировать описание отношения). Важнейшее из таких свойств – *непрерывность функции*.

Напомним, сначала, что функция $f(x)$ при стремлении x к x_0 имеет своим *пределом* значение f_0 :

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f_0,$$

если для любого, сколь угодно малого положительного ε можно указать такое число $\delta = \delta(\varepsilon)$, что

$$|f(x) - f_0| < \varepsilon \quad \text{для всех } |x - x_0| < \delta(\varepsilon)$$



Это определение обобщает на непрерывный случай определение предела последовательности чисел a_n (вместо указания хвоста последовательности $n > N = N(\varepsilon)$, мы указываем диапазон для x). Оно формализует интуитивное понятие “непрерывного приближения”, позволяя строго доказывать, что $f_0 = \lim f(x)$ при $x \rightarrow x_0$, не ссылаясь на некие неопределённые процессы типа “приближения” или “стремления”.

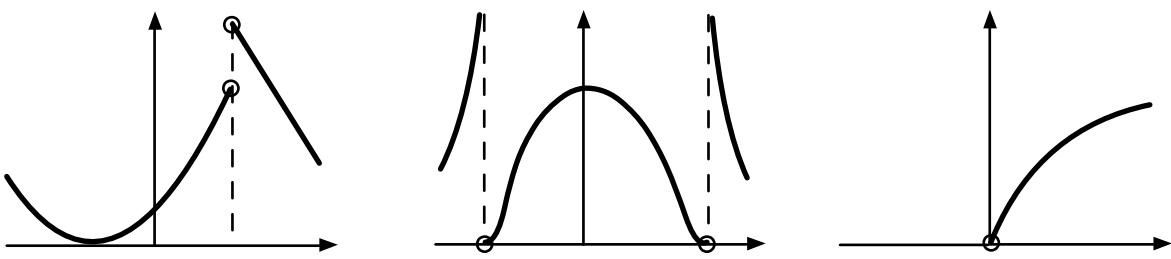
Если вместо неравенства по модулю $|x - x_0| < \delta$ используются неравенства

$$x_0 - \delta < x \leq x_0 \quad \text{или} \quad x_0 \leq x < x_0 + \delta,$$

то говорят о *пределе слева* ($x \rightarrow x_0 - 0$) и *пределе справа* ($x \rightarrow x_0 + 0$) соответственно. Левый и правый пределы стремления к нулю обозначаются также как $x \rightarrow -0$ и $x \rightarrow +0$. Если правый и левый пределы существуют и равны друг другу, то существует обычный (двухсторонний) предел (аналогично и в обратную сторону).

Функция является *непрерывной* в точке x_0 , если при $x \rightarrow x_0$ она 1) имеет предел $f_0 = \lim f(x)$ и 2) этот предел совпадает со значением функции $f_0 = f(x_0)$. Функция непрерывна на интервале, если она непрерывна в каждой точке интервала.

Если условие непрерывности в точке не выполняется, то говорят, что функция терпит в данной точке разрыв. Различают разрывы *первого* и *второго рода*.



Разрыв первого рода имеет функция у которой есть *конечные* и различные пределы при приближении к точке x_0 слева и справа (выше первый график). Разрыв второго рода – когда хотя бы один из пределов не существует или равен бесконечности – выше второй график, для функции $f(x) = \exp(-1/(1-x^2))$ и третий для $f(x) = \sqrt{x}$.

В качестве примера всюду разрывной функции приведём *функцию Дирихле* $D(x)$. Она равна 1, если x – рациональное число и 0, если иррациональное:

$$D(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \text{ рационально} \\ 0, & \text{если } x \text{ иррационально} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Графически нарисовать такую функцию проблематично, т.к. она представляет собой плотный, но не непрерывный ёжик с единичными “столбиками” для рациональных x и “провалами” при иррациональных x .

Именно рассмотрение подобных функций заставило формализовать понятие предела, непрерывности и других “очевидных” понятий. Например, известная *теорема Вейерштрасса* утверждает, что функция $f(x)$, непрерывная в интервале $a \leq x \leq b$, имеет наибольшее и наименьшее значение. При интуитивном восприятии функции как гладкой кривой, это утверждение выглядит тривиальным и не требующим доказательства. Однако, для разрывных функций оно вполне может оказаться неверным. Например, пусть $f(x) = x$ при иррациональных x и $f(x) = 1/2$ при рациональных x . Внутри интервала $0 \leq x \leq 1$ эта функция ограничена сверху единицей, а снизу – нулём. Однако она не имеет максимального и минимального значения (при $x = 0$ и $x = 1$ мы получим $1/2$, а не 0 и 1).

A.4 Функции Дирака и Хевисайда

• *Функция Дирака* или δ -*функция* равна везде нулю, кроме одной точки, где её значение бесконечно. При этом интеграл, включающий эту точку, равен единице. В одномерном случае:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x = 0 \\ 0 & \text{при } x \neq 0 \end{cases}, \quad \int_a^b \delta(x) dx = 1, \quad \delta(-x) = \delta(x). \quad (\text{A.2})$$

Конкретное значение границ a и b не играет роли, так как дельта-функция равна нулю при $x \neq 0$. При интегрировании с гладкой функцией, имеющей в окрестности $x = x_0$ значение $f(x_0)$, имеем:

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{при } x_0 \in [a, b] \\ 0 & \text{при } x_0 \notin [a, b] \end{cases}.$$

Это соотношение часто записывается следующим образом:

$$f(x) \delta(x - x_0) = f(x_0) \delta(x - x_0). \quad (\text{A.3})$$

Для функции Дирака справедливо тождество

$$\delta(f(x) - f(x_0)) = \delta(f'(x_0)(x - x_0)) = \frac{\delta(x - x_0)}{|f'(x_0)|}, \quad (\text{A.4})$$

где проведено разложение в ряд Тейлора $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ и $|f'(x_0)|$ выносится заменой переменной интегрирования $x' = x f'(x_0)$ (если $f'(x_0) < 0$ изменяется знак пределов интегрирования, откуда получается модуль).

Существует множество гладких функций, зависящих от параметра ϵ , которые имеют своим пределом δ -функцию при $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\frac{1}{\epsilon \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\epsilon^2}\right], \quad \frac{\epsilon/\pi}{x^2 + \epsilon^2}, \quad \frac{1}{\pi x} \sin\left(\frac{x}{\epsilon}\right). \quad (\text{A.5})$$

Интеграл этих функций от $-\infty$ до ∞ равен единице, а максимум в точке $x = 0$ стремится к бесконечности при $\epsilon \rightarrow 0$.

Трёхмерная функция Дирака определяется аналогично одномерной. Если её аргумент равен нулю, то она равна бесконечности, иначе нулю. При этом интеграл по произвольному объёму, окружающему точку сингулярности, равняется единице. В декартовых координатах 3-мерную Дирака можно записать через произведение одномерных:

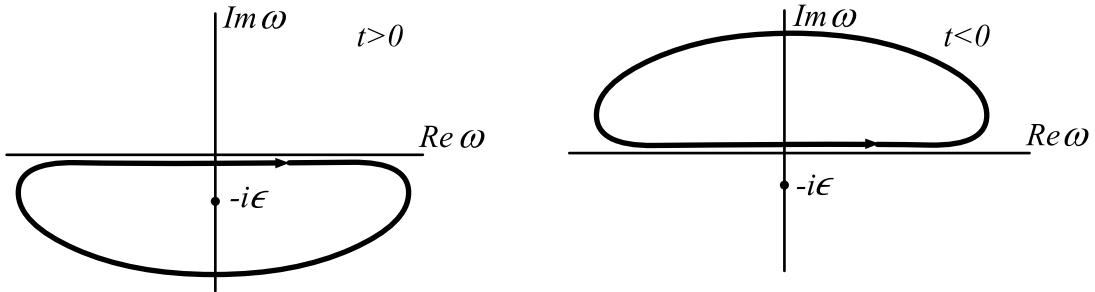
$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z), \quad \int \delta(\mathbf{r}) dV = 1.$$

Также можно определить функции Дирака произвольной размерности.

- Введём также разрывную θ -функцию Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i e^{-i\omega x}}{\omega + i\epsilon} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (\text{A.6})$$

Второе равенство проверяется по теореме Коши, интегрированием по замкнутому контуру в комплексной плоскости ω :



Если $x > 0$, то контур можно замкнуть в нижней полуплоскости (левый рисунок), т.к. при $\omega \rightarrow -i\infty$ интеграл по замыкающему контуру благодаря экспоненте равен нулю (дополнительный знак минус, т.к. интегрирование идёт по часовой стрелке). Если же $x < 0$, то замыкание надо проводить в верхней полуплоскости (правый рисунок) и т.к. полюс в этот контур не попадает, получается ноль.

Производная от функции Хевисайда равна δ -функции:

$$\frac{d\theta(x)}{dx} \equiv \theta'(x) = \delta(x). \quad (\text{A.7})$$

Действительно, вычислим по частям интеграл от произвольной функции по интервалу $[a, b]$, содержащему точку $x = 0$:

$$\int_a^b f(x)\theta'(x)dx = f(x)\theta(x) \Big|_a^b - \int_a^b f'(x)\theta(x)dx = f(b) - \int_0^b f'(x)dx = f(0),$$

где во равенстве учтено, что $\theta(a) = 0$ при $a < 0$ и по этой же причине обрезан предел интегрирования.

Аналогично δ -функции, можно записать непрерывное и дифференцируемое приближение к разрывной функции Хевисайда:

$$\theta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{1 + e^{-2x/\epsilon}}, \quad \delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\operatorname{ch}^{-2}(x/\epsilon)}{2\epsilon}, \quad (\text{A.8})$$

где ещё один аппроксиматор к δ -функции получен при помощи соотношения (A.7).

A.5 Обобщённые функции

• Введенная выше функция Дирака определена крайне неформально. Более того с математической точки зрения, определение (A.2) бессмысленно, так как интеграл Римана от всюду равной нулю (кроме одной точки) функции не определен. Задавать же значение функции равное бесконечности – вообще некорректно, т.к. бесконечность не есть число принадлежащее \mathbb{R} , а лишь обозначение неограниченного увеличения значения вещественной переменной. Поэтому требуется более формальный подход к таким “странным” функциям, класс которых принято называть обобщёнными функциями. В общем случае

обобщённая функция определяется как *линейный функционал* в векторном пространстве “хороших функций”.

Функционал $F[f(x)]$ – это правило по которому данной функции $f(x)$ ставится в соответствие число (вещественное или комплексное). Линейность функционала означает, что

$$F[\alpha_1 f_1(x) + \alpha_2 f_2(x)] = \alpha_1 F[f_1(x)] + \alpha_2 F[f_2(x)],$$

где α_i – произвольные константы, а $f_i(x)$ – произвольные функции.

“Хорошими функциями”, упомянутыми в определении, могут быть, например, функции из $C^\infty[-\infty, \infty]$ – множества непрерывных, бесконечное число раз дифференцируемых на интервале $[-\infty, \infty]$ функций, которые к тому же достаточно быстро убывают на бесконечности. Часто на “хорошие функции” накладывают еще более жесткое требование – *финитности*, т.е. равенство нулю вне некоторого фиксированного для всех функций интервала. Примером такой функции является:

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{a^2}{a^2-x^2}\right) & \text{при } |x| < a, \\ 0 & \text{при } |x| \geq a. \end{cases}$$

Стоит проверить, что она всюду (включая точки $x = \pm a$) бесконечное число раз дифференцируема и несмотря на “разрывное определение”, это гладкая функция строго равная нулю вне диапазона $|x| < a$.

Будем обозначать линейный функционал $F[f(x)]$ при помощи круглых скобок, внутри которых через запятую сначала записывается *имя* обобщённой функции (имя функционала), а затем указывается *произвольная* “хорошая” функция. Выражение (F, f) для данной функции $f = f(x)$ равно некоторому числу. Функциональный подход к определению обобщённой функции позволяет расширить класс “обычных” функций, но имеет при этом ряд особенностей и ограничений. Приведём несколько примеров функциональных определений обобщённых функций.

▷ “Обычная” функция (или говорят *регулярная*) является обобщённой, если определить функционал, как скалярное произведение (стр. 351):

$$(\varphi, f) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) f(x) dx. \quad (\text{A.9})$$

При *фиксированной* $\varphi = \varphi(x)$, подстановка в интеграл некоторой функции $f = f(x)$ приводит к конкретному числу. Это функционал, причём функционал линейный.

▷ Функция Дирака $\delta(x)$ как функционал *определяется* следующим образом:

$$(\delta, f) = f(0). \quad (\text{A.10})$$

В этом определении нет ни каких интегралов, подобных (A.2), а просто утверждается, что при действии функционала δ на любую функцию $f(x)$ получается число, равное значению $f(0)$.

▷ Аналогично, функция Хевисайда задаётся соотношением:

$$(\theta, f) = \int_0^{\infty} f(x) dx. \quad (\text{A.11})$$

Обратим внимание, что в определении θ -функции как функционала, не играет роли её значение при $x = 0$ и его можно положить любым, так как значение интеграла одна точка не изменит. При обычном подходе к функциям, если две функции отличаются значением в одной точке – то это различные функции. Обобщённые функции являются функционалами и говорить об их значениях в точке смысла не имеет.

▷ Определим ещё одну обобщённую функцию \mathcal{P}/x :

$$\left(\frac{\mathcal{P}}{x}, f\right) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx, \quad (\text{A.12})$$

где знак \mathcal{P} означает взятие интеграла в смысле *главного значения*:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{f(x)}{x} dx + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \right) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{f(x) - f(0)}{x} dx.$$

Если $f(0)$ конечно, то в силу различного знака $1/x$ слева и справа от 0 такое вычисление интеграла от $f(x)/x$ даст конечный результат.

- На обобщённые функции можно наложить ряд условий, которые позволяют задавать новые обобщённые функции. Например, определим сложение двух обобщённых функций φ_1, φ_2 :

$$(\varphi_1 + \varphi_2, f) = (\varphi_1, f) + (\varphi_2, f), \quad (\text{A.13})$$

и умножение на число или в более общем случае на гладкую (регулярную) функцию $g = g(x)$:

$$(g\varphi, f) = (\varphi, g^* f). \quad (\text{A.14})$$

Дифференцирование обобщённых функций определяется при помощи правила, справедливого для интегральных функционалов (A.9), после выполнения интегрирования по частям:

$$(\varphi', f) = (\varphi, -f'). \quad (\text{A.15})$$

Независимо от явного вида функционала, будем считать это соотношение *определением* производной от обобщённой функции. В частности, выше мы видели, что $(\theta', f) = (\theta, -f') = (\delta, f)$. Для производной произведения обобщённой функции φ на регулярную $g = g(x)$ справедлива обычная формула:

$$((g\varphi)', f) = (g'\varphi + g\varphi', f) \quad (\text{A.16})$$

в чём несложно убедиться, записав по определению $((g\varphi)', f) = (g\varphi, -f')$ и расписав правую часть (A.16) с учётом предыдущих соотношений (A.13)-(A.15).

▷ В отличие от “обычных” функций, произведение обобщённых функций, вообще говоря, не определено. Так, аналогично тождеству для функции Дирака $\delta(x)x = 0$, запишем тождество для функции \mathcal{P}/x :

$$\frac{\mathcal{P}}{x} x = 1.$$

Вычислим произведение \mathcal{P}/x и δ -функции. С одной стороны:

$$\frac{\mathcal{P}}{x} (\delta(x)x) = \frac{\mathcal{P}}{x} 0 = 0.$$

С другой стороны

$$\delta(x) \left(\frac{\mathcal{P}}{x} x \right) = \delta(x) 1 = \delta(x).$$

Таким образом, произведение двух обобщённых функций оказывается некоммутативным, а следовательно “плохо определенным”.

▷ Введём ещё один функционал, который является отличным от главного значения способом регуляризации подынтегральной функции $1/x$:

$$\left(\frac{1}{x \pm i0}, f \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon} dx. \quad (\text{A.17})$$

Для такой обобщённой функции справедлива *формула Сохоцкого*:

$$\frac{1}{x \pm i0} = \frac{\mathcal{P}}{x} \mp i\pi\delta(x). \quad (\text{A.18})$$

Действительно, проведем регуляризацию, заменив интегрирование по всей вещественной оси на диапазон $[-R, R]$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon} dx \mapsto \int_{-R}^{R} \frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon} dx = \int_{-R}^{R} \frac{f(x) - f(0)}{x \pm i\varepsilon} dx + f(0) \int_{-R}^{R} \frac{dx}{x \pm i\varepsilon}.$$

В первом интеграле можно перейти к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$, так как особенность $x = 0$ устранена и результат совпадает с главным значением интеграла от $f(x)/x$. Второй интеграл равен $\mp 2i \operatorname{arctg}(R/\varepsilon) \rightarrow \mp i\pi$ при $R \rightarrow \infty$, $\varepsilon \rightarrow 0$. Это значение умножается на $f(0)$, равное (δ, f) .

▷ Обобщённые функции могут быть решениями алгебраических уравнений. Рассмотрим, например уравнение:

$$x^n \varphi(x) = 0.$$

Его *обобщённым решением* будет такой функционал φ , что

$$(x^n \varphi, f) = (\varphi, x^n f) = 0$$

для любой функции f . Решением уравнения $x \varphi(x) = 0$ является обобщённая функция $(C\delta, f)$, где C – произвольная константа.

Обобщённым решением уравнения $x^2 \varphi(x) = 0$ является $\varphi = C_1 \delta + C_2 \delta'$, где C_i – константы и штрих – производная δ -функции ($\lessdot H_{61}$). Аналогично, решением $x^n \varphi(x) = 0$ является линейная комбинация δ -функции и её $n-1$ первых производных. Для более сложного уравнения имеем:

$$x(x-1)^2 \varphi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi(x) = C_1 \delta(x) + C_2 \delta(x-1) + C_3 \delta'(x-1).$$

Наконец, для уравнения $x \varphi(x) = 1$ обобщённым решением будет \mathcal{P}/x .

Напомним, что обобщённая функция является функционалом, а не обычной функцией. Поэтому запись $\delta(x-1)$ лишь означает функционал, значением которого при действии на $f(x)$ будет число $f(1)$.

A.6 Преобразования Фурье

Периодическую функцию $f(t + T) = f(t)$, где $T = b - a$ можно представить на отрезке $t = [a...b]$ в виде ряда:

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{i2\pi kt/T}, \quad c_n = \int_a^b f(t) e^{-i2\pi nt/T} \frac{dt}{T}. \quad (\text{A.19})$$

Заданная таким образом функция $f(t)$ периодична и разложена по полному набору линейно независимых ортогональных функций $e^{i2\pi kt/T}$. Второе соотношение для коэффициентов c_n проверяется в результате несложного интегрирования. Функция $f(t)$ будет действительной: $f^*(t) = f(t)$, если $c_k^* = c_{-k}$.

Возьмём симметричный интервал $[a, b] = [-T/2, T/2]$ и введём новые коэффициенты $\phi_k = T c_k$. Обозначив $t_k = 2\pi k/T$, запишем ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi_k e^{it_k x} \frac{1}{T}, \quad \phi_k = \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-it_k x} dx.$$

Величины t_k можно рассматривать как новую переменную, изменение которой равно $\Delta t = t_k - t_{k-1} = 2\pi/T$. Устремим T к бесконечности. По определению интеграла, выражение для $f(x)$ можно записать в виде:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t) e^{itx} dt, \quad \phi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-itx} dx, \quad (\text{A.20})$$

где $\phi(t)$ становится непрерывной функцией параметра $t = t_k$. Соотношения (A.20) называются *интегральным фурье-преобразованием*.

Для функции Дирака справедливо интегральное представление, которое часто встречается в книге:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} \frac{dt}{2\pi} = \delta(x). \quad (\text{A.21})$$

Неформально его можно получить обрезав пределы интегрирования интервалом $[-L/2, L/2]$, а затем устремить L в бесконечность, воспользовавшись третей функцией в (A.5) с $\epsilon = 2/L$.

Подстановка одного интеграла (A.20) в другой должна приводить к тождественному результату. При помощи интегрального представления функции Дирака (A.21) несложно проверить, что это действительно так.

- Рассмотрим в пространстве $L_2[-\pi, \pi]$ разложение в ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_k \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{A.22})$$

по ортонормированным ($\prec H_{83}$) на интервале $[-\pi, \pi]$ векторам:

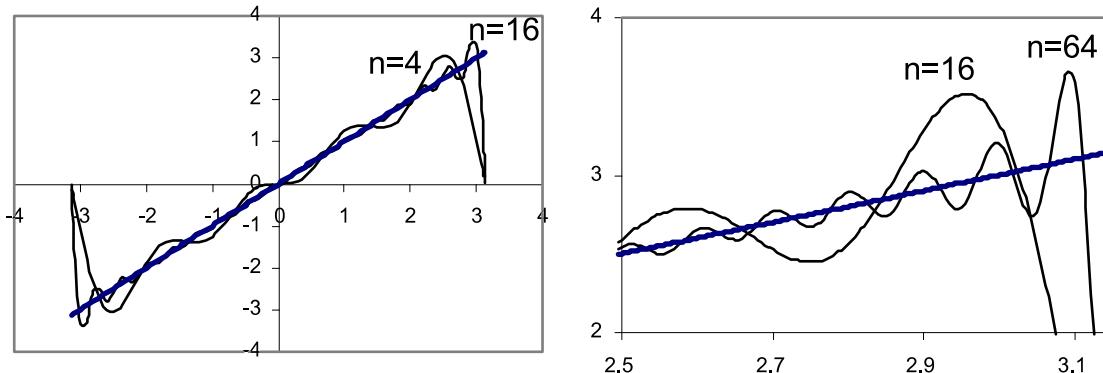
$$\varphi_k(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \int_{-\pi}^{\pi} \varphi_k^*(x) \varphi_j(x) dx = \delta_{kj}.$$

Хотя суммирование в (A.22) ведётся от $-\infty$ до $+\infty$, простым переупорядочиванием: $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_{-1}, \varphi_2, \varphi_{-2}, \dots$ эти базисные векторы записываются в виде счётной последовательности (без отрицательных индексов в сумме мы бы упустили часть линейно независимых векторов).

Запишем ($\prec H_{84}$) разложение функции $f(x) = x$ в ряд Фурье:

$$x = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{\sin(kx)}{k}. \quad (\text{A.23})$$

Ниже на первом графике просуммированы первые 4 и 16 членов ряда. Чем их больше, тем более “прямая” будет получаться функция:



Исключения составляют точки $x = \pm\pi$, в которых, как видно из (A.23) сумма равна нулю. Если нарисовать график первых членов ряда вне пределов $[-\pi, \pi]$, мы получим периодическую “линейную пилу”, один из “зубьев” которой нарисован на первом графике. Это отражает периодический характер разложения (A.22), для которого $f(x) = f(x + 2\pi)$.

Любопытный эффект Гиббса возникает также при приближении к границам интервала. Сколь бы много членов разложения мы не взяли (второй график), последний максимум суммы будет примерно на 18% отклоняться от $f(x)$, хотя и сколь угодно близко прижиматься к граничной точке (поэтому среднеквадратичное отклонение разложения от $f(x)$, тем не менее, будет нулевым). Этот же эффект возникает и внутри интервала $[-\pi, \pi]$ для разрывных функций на границе их разрыва.

A.7 Метрические пространства

▷ *Метрическим пространством* называется произвольное множество \mathcal{X} на котором с каждой парой элементов связано вещественное число (определенна функция $d(x, y) : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$) со следующими свойствами:

$$\begin{aligned} d(x, y) &\geq 0, & d(x, y) = 0, &\text{ только, если } x = y, \\ d(x, y) &= d(y, x), \\ d(x, z) &\leq d(x, y) + d(y, z). \end{aligned} \tag{A.24}$$

Последнее свойство – это *неравенство треугольника*, а функция $d(x, y)$ – *метрика* или *расстояние* между двумя элементами множества $x, y \in \mathcal{X}$, которые называются *точками*.

На вещественной прямой \mathbb{R} расстояние равно $d(x, y) = |x - y|$. Другим примером метрического пространства является n -мерное *евклидово пространство* \mathbb{R}^n . Каждая его точка – это упорядоченный набор n вещественных чисел $\{x_1, \dots, x_n\}$. Расстояние между ними равно

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \dots + (x_n - y_n)^2}. \tag{A.25}$$

Первые две аксиомы метрики выполняются тривиально, а неравенство треугольника имеет простую геометрическую интерпретацию (сумма длин сторон треугольника прилегающих к одному углу больше, чем противоположная к углу сторона треугольника).

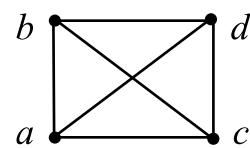
▷ Множество всех *непрерывных* на отрезке $[0, 1]$ вещественнозначных функций ($\mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$) также является метрическим пространством, обозначаемым как $C[0, 1]$. Расстояние на нём можно ввести различным образом:

$$d_1(f, g) = \max_{x \in [0, 1]} |f(x) - g(x)|, \quad d_2(f, g) = \int_0^1 |f(x) - g(x)| dx.$$

Обе эти функции удовлетворяют аксиомам (A.24).

Метрику можно вводить и для множеств, состоящих из дискретного набора элементов. Например, на множестве четырех элементов $\{a, b, c, d\}$ можно определить 16 чисел:

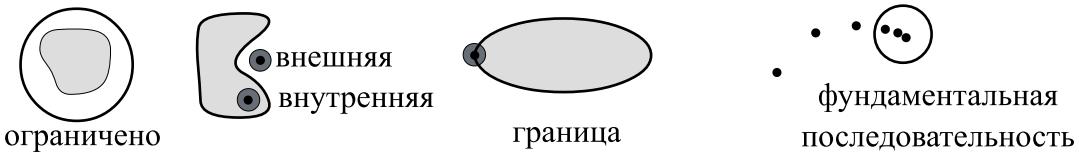
	a	b	c	d
a	0	3	4	5
b	3	0	5	4
c	4	5	0	3
d	5	4	3	0



Несложно проверить, что эта функция удовлетворяет (A.24).

▷ *Открытый шар* в метрическом пространстве – есть множество точек x , удовлетворяющих условию: $d(x, x_0) < r$. Точка x_0 является центром шара, а r – его радиусом. *Замкнутый шар* – это множество $d(x, x_0) \leq r$. Подмножество называется *ограниченным*, если оно содержится в некотором шаре. *Окрестностью* точки x называется подмножество точек, принадлежащих открытому шару с центром в x .

Точка $x \in \mathcal{X}$ является *внутренней точкой* подмножества $\mathcal{X} \subset \mathcal{M}$, некоторого пространства \mathcal{M} , если у точки x есть окрестность, целиком лежащая в \mathcal{X} . Соответственно, если точка не принадлежит к \mathcal{X} и имеет окрестность не принадлежащую \mathcal{X} , то она называется *внешней точкой*. Точка, не являющаяся ни внутренней, ни внешней точкой подмножества \mathcal{X} называется *граничной точкой*. Множество всех граничных точек называется *границей* и обозначается как $\partial\mathcal{X}$. Множество состоящее только из внутренних точек называется *открытым*. Открытое множество \mathcal{X} вместе с его границей $\partial\mathcal{X}$ является *замкнутым*.



▷ *Фундаментальной последовательностью* или *последовательностью Коши* называется бесконечная последовательность точек $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$, если для любого вещественного $\varepsilon > 0$, существует целое $N = N(\varepsilon)$, что

$$d(x_n, x_m) < \varepsilon \quad \text{для любых } n, m \geq N. \quad (\text{A.26})$$

Это означает, что весь бесконечный “хвост” последовательности занимает сколь угодно малую “область” в метрическом пространстве (расстояние между любыми его двумя элементами сколь угодно мало).

Это определение напоминает предел последовательности. Более того, любая сходящаяся последовательность $\lim x_n = x$ является фундаментальной. Однако не любая фундаментальная последовательность обязана сходиться к некому элементу множества. Так, если множество состоит из рациональных чисел, то некоторые, определённые на нём фундаментальные последовательности сходятся (например $1, 1/2, 1/4, \dots, 1/2^n, \dots$), а некоторые – нет (когда предел является иррациональное число).

Пространство называется *полным*, если его любая фундаментальная последовательность сходится. Неполное пространство можно пополнить (сделать полным), если добавить к нему пределы всех возможных фундаментальных последовательностей. Так, мы пополняем множество рациональных чисел \mathbb{Q} (которое неполно) всеми иррациональными \mathbb{I} , получая полное пространство действительных чисел \mathbb{R} .

A.8 Интегралы Римана, Стилтьеса и Лебега

В начальных курсах анализа интеграл от a до b определяют, следуя Риману, как площадь, ограниченная функцией $f(x)$ и осью x . Для его нахождения, интервал интегрирования разбивается на n отрезков и вычисляется предел следующей суммы:

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n, \quad S_n = \sum_{k=1}^n f(\xi_k) (x_k - x_{k-1}), \quad (\text{A.27})$$

где $x_k = a + k(b-a)/n$ и ξ_k произвольная точка, принадлежащая отрезку $[x_{k-1}, x_k]$. Для ограниченных, кусочно-непрерывных на интервале $[a, b]$ функций предел последовательности частичных сумм S_1, S_2, \dots всегда существует. Говорят, что такие функции *интегрируемы по Риману*.

Существуют выделенные значения точки ξ_k в которых функция $f(x)$ на интервале $[x_{k-1}, x_k]$ имеет верхнюю $M_k = \inf f$ и нижнюю $m_k = \sup f$ грани (стр. 331). Если $f(\xi_k) = M_k$, то S_n называют “верхней” суммой, а если $f(\xi_k) = m_k$ – “нижней” суммой. В пределе $n \rightarrow \infty$ обе эти суммы стремятся к одной величине, равной значению интеграла Римана.

▷ *Интеграл Стилтьеса* является небольшой модификацией интеграла Римана. В нём, кроме интегрируемой функции $f(x)$ вводится также функция $g(x)$ по которой производится интегрирование:

$$\int_a^b f(x) dg(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n, \quad S_n = \sum_{k=1}^n f(\xi_k) (g(x_k) - g(x_{k-1})). \quad (\text{A.28})$$

Если функция $g(x)$ непрерывна и дифференцируема, можно перейти от интеграла Стилтьеса к интегралу Римана:

$$\int_a^b f(x) dg(x) = \int_a^b f(x) g'(x) dx.$$

Подчеркнём, что функция $g(x)$ не обязательно должна монотонно возрастать или убывать на интервале $[a, b]$. Постоянное возрастание требуется от x , а не от $g(x)$. Например, можно рассматривать функции для которых $g(a) = g(b)$. В общем случае функция $g(x)$ может быть разрывной и это делает интеграл Стилтьеса более универсальным инструментом, чем интеграл Римана.

- Существуют функции для которых предел (A.27) не определён и их нельзя проинтегрировать по Риману (такой “плохой” функцией является функция Дирихле, стр. 333). Лебег придумал способ интегрирования, дающий для “хороших” функций тот-же результат, что и (A.27), но при этом для некоторых “плохих” функций приводящий к осмысленным результатам.

Рассмотрим *интегрирование по Лебегу* сначала для непрерывных функций. Пусть область значений функции (по оси y) изменяется от A до B при интегрировании по x от a до b . Разобьём интервал $[A, B]$ на n равных частей так, что $y_k = A + k(B - A)/n$. Отберём множество \mathcal{X} точек на оси x для которых значение функции попадает в интервал $[y_{k-1}, y_k]$:

$$\mathcal{X}_k = \{x \mid y_{k-1} \leq f(x) < y_k\}$$

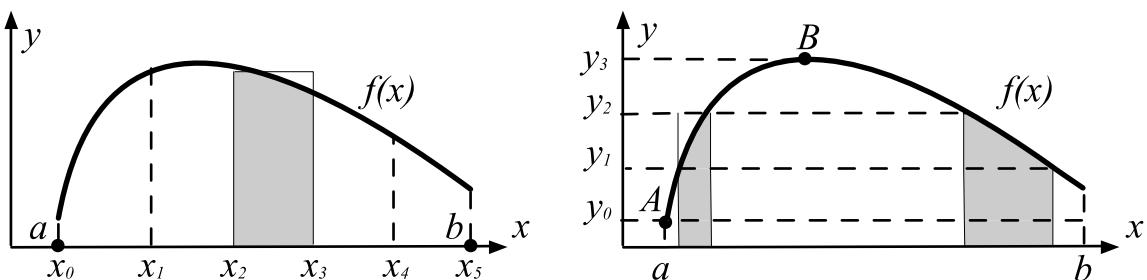
и вычислим сумму:

$$S_n = \sum_{k=1}^n y_k \mu \mathcal{X}_k = y_1 \mu \mathcal{X}_1 + y_2 \mu \mathcal{X}_2 + \dots + y_n \mu \mathcal{X}_n,$$

где $\mu \mathcal{X}_k$ – суммарная длина отрезков вещественной оси, попавших в \mathcal{X}_k . Интеграл Лебега равен пределу интегральных сумм S_n при $n \rightarrow \infty$.

Таким образом, если при интегрировании по Риману мы разбиваем на малые интервалы ось x , то при интегрировании по Лебегу тоже делается с осью y . В обоих случаях длина интервалов устремляется к нулю.

Ниже на левом рисунке изображено вычисление определённого интеграла по Риману, а справа по Лебегу:



На правом рисунке заштрихованы области множества \mathcal{X}_2 в который попали точки x для которых значения функции находятся между y_1 и y_2 . Таких столбиков, соответствующих данному Δy два, тогда как в интеграле Римана, в силу однозначности функции, столбик для каждого Δx всегда один. Для “гладких” функций оба алгоритма приведут к одному и тому-же результату, равному площади под функцией $f(x)$.

• Если мы ограничились бы только гладкими функциями, особого преимущества в подходе Лебега не было. Его общность проявляется при рассмотрении существенно разрывных (в том числе всюду) функций. При интегрировании по Лебегу для каждого интервала значений Δy отбирается множество всех x для которых $f(x)$ попадает в Δy . Каким бы сложным не было это множество, необходимо лишь суметь измерить его длину, чтобы вычислить интеграл.

В общем случае длина множества называется *мерой*. Рассмотрим сначала интервал вещественной оси между точками a и b . Независимо от того замкнут он: $[a, b] = \{x | a \leq x \leq b\}$ или открыт: $(a, b) = \{x | a < x < b\}$ его мерой считается расстояние между точками:

$$\mu[a, b] = \mu(a, b) = b - a. \quad (\text{A.29})$$

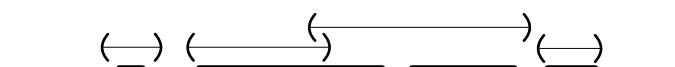
Назовём *открытым множеством* \mathcal{O} конечную или счётную (бесконечную, пронумерованную) совокупность открытых, *непересекающихся* интервалов (a_i, b_i) . Если из интервала $[a, b]$ удалено некоторое открытое множество, то получается замкнутое множество \mathcal{C} . Ниже на рисунке изображено замкнутое множество \mathcal{C} (прерывистая жирная линия), содержащееся в отрезке $[a, b]$ из которого удалено три открытых интервала, образующих открытое множество \mathcal{O} (тонкие линии окруженные круглыми скобками):



Меры \mathcal{C} и \mathcal{O} связаны следующим образом:

$$\mu\mathcal{C} + \mu\mathcal{O} = b - a. \quad (\text{A.30})$$

Открытыми и закрытыми множествами фантазии математиков не ограничиваются. Пусть есть множество \mathcal{M} , точки которого лежат на отрезке $[a, b]$. Рассмотрим объединение *открытых* множеств, подмножеством которых является \mathcal{M} (открытые множества могут пересекаться). Это объединение называют *покрытием* \mathcal{M} . Ниже на рисунке жирные сегменты представляют множество \mathcal{M} , а круглые скобки – частично пересекающиеся открытые интервалы, покрывающие \mathcal{M} :



Покрытия можно сделать самым различным образом и каждое из них будет иметь определённую меру, в соответствии с (A.29), (A.30). Назовём *внешней мерой* $\mu\mathcal{M}$ множества \mathcal{M} *нижнюю грань* (sup) мер всевозможных его покрытий. Другими словами отбираем такую совокупность открытых множеств, которая наиболее “экономна” (наименьшей длиной) покрывает множество \mathcal{M} . Её длину и называем внешней мерой $\mu\mathcal{M}$.

Множество называется *измеримым*, если

$$\mu\mathcal{M} + \mu\{[a, b] - \mathcal{M}\} = b - a, \quad (\text{A.31})$$

где $\{[a, b] - \mathcal{M}\}$ – дополнение отрезка до множества \mathcal{M} (исключение из него точек \mathcal{M}). Если же соотношение (A.31) не выполняется – говорят, что \mathcal{M} неизмеримо и не имеет меры. Интуитивно (A.31) также “очевидно”, как и (A.30). Тем не менее, существуют неизмеримые множества для которых (A.31) не выполняется. Впрочем, большинство множеств с которыми работают математики (а тем более физики) измеримы.

Измеримые множества обладают двумя естественными свойствами: 1) объединение конечной или счётной совокупности непересекающихся измеримых множеств образует измеримое множество и его мера равна сумме мер этих множеств; 2) если ко всем точкам множества прибавить одно и то же число, то его мера не поменяется.

Мера дискретного множества, состоящего из конечного или счётного числа точек, равна нулю. Докажем это утверждение. Пусть есть бесконечное счётное ограниченное множество чисел на отрезке $[0, 1]$ (например $1, 1/2, 1/4, 1/8, \dots$ ограничено снизу нулём, а сверху единицей). Запишем его в виде последовательности $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, x_3, \dots\}$ (не обязательно монотонно возрастающей или убывающей). Зададим малое вещественное $\varepsilon > 0$ и окружим точку x_n открытым интервалом \mathcal{D}_n с длиной (мерой) $\varepsilon/2^n$. Сумма всех таких открытых интервалов покрывает \mathcal{X} . Так как интервалы могут пересекаться:

$$\mu\mathcal{X} = \sup \mu(\mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2 \cup \dots) \leq \mu(\mathcal{D}_1) + \mu(\mathcal{D}_2) + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon}{2^n} = \varepsilon.$$

Переходя к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$, приходим к выводу, что мера \mathcal{X} равна нулю: $\mu\mathcal{X} = 0$ (меньше она быть не может, так как мера неотрицательна).

Множество рациональных чисел *счётно*, поэтому его мера равна нулю (хотя оно и всюду плотно покрывает вещественную прямую!). Действительно на отрезке $[0, 1]$, кроме 0 и 1, все рациональные числа можно записать как отношение двух натуральных m/n , где $m < n$ и дробь несократима. Все они без повторов могут быть упорядочены (пронумерованы), если отобрать сначала те, для которых $m+n = 2$, затем те, для которых $m+n = 3$ и т.д.:

$$0, 1, \quad 1/2; \quad 1/3; \quad 1/4, 2/3; \quad 1/5; \quad 1/6, 2/5, 3/4; \dots$$

В соответствии с (A.31) мера “остальных” (иррациональных чисел) на отрезке $[0, 1]$ равна единице. Значение функции Дирихле (A.1), соответствующее мере рациональных чисел равно 1, а иррациональных – 0. Поэтому и интеграл Лебега от неё равен $0 = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1$.

Векторные пространства

Основной математический объект в квантовой механике – это вектор комплексного векторного пространства. Именно с его помощью можно описывать состояние системы. В этом приложении собраны основные факты из теории векторных пространств и операторов. Используются обозначения, принятые в математике. Они несколько отличаются от “скобочных” обозначений Дирака в квантовой теории. Впрочем, переход от одних к другим не должен составлять труда.

V.1 Векторное пространство

- Рассмотрим множество \mathbb{V} объектов $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \dots$, которые будем называть *векторами* и обозначать жирным шрифтом. Для них введём операцию “сложения” (функцию $\mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}$) со свойствами *коммутативности* и *ассоциативности*:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}, \quad (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c}). \quad (\text{V.1})$$

Эта операция *замкнута* (всегда даёт объект из \mathbb{V}). Постулируем также существование выделенного *нулевого вектора* $\mathbf{0}$, сумма которого с любым вектором снова даёт этот же вектор (докажите ($\prec H_{62}$), что $\mathbf{0}$ *единственны*):

$$\mathbf{0} + \mathbf{a} = \mathbf{a}. \quad (\text{V.2})$$

Введём ещё одну замкнутую операцию – умножение вектора на комплексное число \mathbb{C} (обозначаем нежирным шрифтом), в результате которой снова получается некоторый вектор из множества \mathbb{V} , т.е. $\mathbb{C} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}$. Пусть для любых чисел и векторов выполняются следующие аксиомы:

$$\alpha(\beta\mathbf{a}) = (\alpha\beta)\mathbf{a}, \quad \alpha(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \alpha\mathbf{a} + \alpha\mathbf{b}, \quad (\alpha + \beta)\mathbf{a} = \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{a}. \quad (\text{V.3})$$

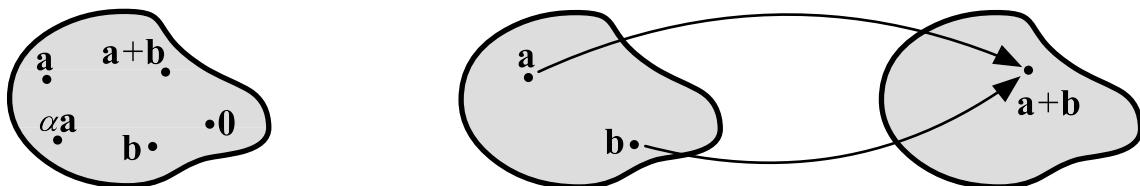
Обратим внимание, что в последней аксиоме знак плюс в левой и правой части это различные операции: слева – сложение комплексных чисел, а справа – сложение векторов, получившихся после умножения \mathbf{a} на числа. Различное умножение используется и в первой аксиоме. Свойства (V.3) называются *дистрибутивностью* относительно умножения и сложения. Определим ещё умножение чисел 1 и 0 на произвольный вектор:

$$1\mathbf{a} = \mathbf{a}, \quad 0\mathbf{a} = \mathbf{0}. \quad (\text{V.4})$$

Вектор $(-1)\mathbf{a}$ будем обозначать как $-\mathbf{a}$, при этом из (V.3) следует, что:

$$\mathbf{a} - \mathbf{a} = 1\mathbf{a} + (-1)\mathbf{a} = (1 - 1)\mathbf{a} = \mathbf{0}.$$

Множество векторов можно представлять совокупностью точек, каждая из которых соответствует тому или иному вектору. Отображение одних векторов на другие будем изображать при помощи двух одинаковых множеств (как ниже на втором рисунке для сложения):



Множество \mathbb{V} с перечисленными выше свойствами называется *линейным векторным пространством* или просто *векторным пространством*.

• Свяжем с каждым вектором неотрицательное действительное число, которое назовём *нормой* вектора, т.е. определим функцию: $\|\mathbf{a}\| : \mathbb{V} \mapsto \mathbb{R}$. Пусть она обладает следующими свойствами:

$$\|\mathbf{a}\| \geq 0, \quad \|\alpha\mathbf{a}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{a}\|, \quad \|\mathbf{a} + \mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{b}\|, \quad (\text{V.5})$$

при этом $\|\mathbf{a}\| = 0$ только для нулевого вектора и $|\alpha|$ – модуль комплексного числа α . Норма разности векторов $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|$ задаёт расстояние (метрику) в векторном пространстве. Если $\|\mathbf{a}\| = 1$, то говорят, что вектор \mathbf{a} *нормирован*.

Определим ещё одну функцию от двух векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} с комплексными значениями ($\mathbb{V} \times \mathbb{V} \mapsto \mathbb{C}$). Обозначим её угловыми скобками $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ без функционального имени перед ними. Эта функция называется *скалярным произведением*, если она удовлетворяет аксиомам:

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle \geq 0, \quad \langle \mathbf{a}, \alpha\mathbf{b} \rangle = \alpha \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle, \quad \langle \mathbf{c}, \mathbf{a} + \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{c}, \mathbf{a} \rangle + \langle \mathbf{c}, \mathbf{b} \rangle. \quad (\text{V.6})$$

При этом $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle = 0$ только для $\mathbf{a} = \mathbf{0}$. Дополнительно будем постулировать, что комплексное сопряжение переставляет векторы местами:

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle^* = \langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle. \quad (\text{V.7})$$

Это свойство, вместе с (V.6) приводит к линейности функции скалярного произведения и по первому аргументу, но при этом $\langle \alpha\mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \alpha^* \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$. Два вектора называются *ортогональными*, если $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = 0$.

Далее будем связывать норму и скалярное произведение следующим образом:

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle}. \quad (\text{V.8})$$

Выполнение первых двух аксиом (V.5) при этом очевидно, а третью (*неравенство треугольника*) предлагается проверить в качестве упражнения ($\Leftarrow H_{63}$), доказав сначала *неравенство Коши-Шварца* ($\Leftarrow H_{64}$):

$$\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\| \geq |\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|. \quad (\text{V.9})$$

Если в векторном пространстве вместо комплексных чисел используются действительные, то это *действительное векторное пространство*. Его, например, в евклидовом пространстве образуют векторы как направленные отрезки (“стрелочки”) между двумя точками. Несложно проверить выполнимость для них аксиом (V.1)-(V.4). Норма такого вектора имеет смысл его длины, а *действительное* и симметричное скалярное произведение определяет угол между векторами.

- Векторы $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$ называются *линейно зависимыми*, если существуют k одновременно ненулевых чисел $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ таких, что выполняется соотношение:

$$\alpha_1 \mathbf{a}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{a}_k = \mathbf{0}. \quad (\text{V.10})$$

Любой из линейно зависимых векторов можно выразить через линейную комбинацию остальных. Так, если $\alpha_1 \neq 0$, то:

$$\mathbf{a}_1 = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1} \mathbf{a}_2 - \dots - \frac{\alpha_k}{\alpha_1} \mathbf{a}_k.$$

Если же (V.10) возможно только при $\alpha_1 = \dots = \alpha_k = 0$, тогда векторы являются *линейно независимыми*.

▷ Размерностью пространства $n = \dim \mathbb{V}$ называется наибольшее число линейно независимых векторов. Если такое число существует, то говорят, что пространство n -мерно.

В n -мерном пространстве существует *базис*, т.е. набор из n линейно независимых векторов $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$, через которые выражается любой вектор:

$$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + \dots + a_n \mathbf{e}_n. \quad (\text{V.11})$$

Числа a_1, \dots, a_n называются *координатами* вектора \mathbf{a} в данном базисе, а всё соотношение – *разложением вектора по базису*.

То, что такое разложение возможно, следует из определения размерности пространства $n = \dim \mathbb{V}$, так как добавление к n линейно независимым векторам $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ произвольного вектора \mathbf{a} , не равного ни одному \mathbf{e}_i , должно сделать эту совокупность линейно зависимой. Если же $\mathbf{a} = \mathbf{e}_i$, то разложение (V.11) выполняется тривиально.

▷ Важно то, что разложение по данному базису *единственно*. Действительно, пусть существует два различных разложения: $\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + \dots + a_n \mathbf{e}_n$ и $\mathbf{a} = a'_1 \mathbf{e}_1 + \dots + a'_n \mathbf{e}_n$. Вычитая их, приходим к:

$$(a_1 - a'_1) \mathbf{e}_1 + \dots + (a_n - a'_n) \mathbf{e}_n = \mathbf{0}.$$

Так как базисные векторы линейно независимы, соотношение выполняется только, если круглые скобки равны нулю: $a'_i = a_i$ для всех i .

Если векторное пространство состоит из единственного вектора $\mathbf{0}$, то его размерность считается нулевой. Одномерное пространство порождается нулевым вектором $\mathbf{0}$ и произвольным $\mathbf{e}_1 \neq \mathbf{0}$ (а также бесконечным числом векторов вида $\alpha \mathbf{e}_1$). Два линейно независимых вектора \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 порождают 2-мерное пространство. Коротко мы будем его обозначать как $\mathbb{V} = \{\mathbf{0}, \alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2\}$. При этом $\dim \mathbb{V} = 2$.

▷ Базисные векторы могут быть попарно ортогональными и нормированными (*ортонормированный базис*):

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (\text{V.12})$$

где в правой части записан символ *Кронекера*, равный единице, если индексы совпадают и нулю при различных индексах:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j \\ 0 & \text{при } i \neq j \end{cases}. \quad (\text{V.13})$$

В этом случае координаты a_i вектора \mathbf{a} равны его скалярному произведению на базисные векторы:

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{a} \rangle = \sum_{j=1}^n \langle \mathbf{e}_i, a_j \mathbf{e}_j \rangle = \sum_{j=1}^n a_j \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \sum_{j=1}^n a_j \delta_{ij} = a_i.$$

В последнем равенстве применено общее правило суммирования с символом Кронекера δ_{ij} : если один из его индексов (выше j) участвует в суммировании, можно убрать сумму по j и символ Кронекера, а в оставшемся выражении заменить j на второй индекс (выше i). Действительно, так как символ Кронекера отличен от нуля только при $i = j$ в сумме “выживает” лишь слагаемое для которого $j = i$. Обратим внимание, что в комплексном векторном пространстве $\langle \mathbf{a}, \mathbf{e}_i \rangle = a_i^*$.

▷ В 3-мерном евклидовом пространстве “со стрелочками” максимальное число линейно независимых векторов равно 3. В таком пространстве два вектора линейно зависимы, когда они коллинеарны (параллельны). Три вектора линейно зависимы, если они компланарны (лежат в одной плоскости). Ниже приведены примеры неортогонального и ортогонального базисов на плоскости (2-мерное пространство):



▷ Если базисные векторы $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ попарно не ортогональны, то с их помощью можно определить новый базис, который будет уже ортогональным. Действительно, пусть $\langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle \neq 0$. Тогда положим:

$$\mathbf{e}'_1 = \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{e}'_2 = \mathbf{e}_1 + c \mathbf{e}_2.$$

Требуя, чтобы $\langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2 \rangle = 0$, находим $c = -\langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle / \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle$. Далее:

$$\mathbf{e}'_3 = \mathbf{e}_1 + c_1 \mathbf{e}_2 + c_2 \mathbf{e}_3.$$

Записывая уравнения $\langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_3 \rangle = 0$ и $\langle \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3 \rangle = 0$, найдём коэффициенты c_1, c_2 и т.д. Такой алгоритм называется *ортогонализацией по Шмидту*.

V.2 Операторы

- Оператор одному вектору ставит в соответствие некоторый другой:

$$\hat{A} \mathbf{a} = \mathbf{b}. \quad (\text{V.14})$$

Его мы будем помечать сверху шляпкой. Оператор является функцией, у которой области определения (на что “действует” оператор) и значений (что “получается”) – это векторы: $\mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}$.

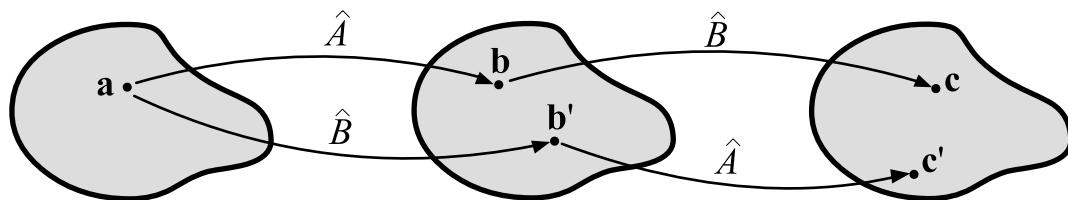
Операторы можно складывать, умножать на число и перемножать друг с другом:

$$(\hat{A} + \hat{B}) \mathbf{v} = \hat{A} \mathbf{v} + \hat{B} \mathbf{v}, \quad (\alpha \hat{A}) \mathbf{v} = \alpha (\hat{A} \mathbf{v}), \quad (\hat{A} \hat{B}) \mathbf{v} = \hat{A}(\hat{B} \mathbf{v}). \quad (\text{V.15})$$

В последнем случае произведение операторов предполагает, что на вектор сначала действует ближайший к нему оператор, а потом на результирующий вектор действует следующий оператор. Последовательность таких действий важна и в общем случае: $\hat{A} \hat{B} \neq \hat{B} \hat{A}$. При умножении операторов выполняется ассоциативность, а при сложении и умножении дистрибутивность:

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}, \quad \hat{A}(\hat{B}+\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C}), \quad (\hat{A}+\hat{B})\hat{C} = (\hat{A}\hat{C}) + (\hat{B}\hat{C}).$$

Оператор является отображением векторного пространства самого в себя, которое будем изображать стрелкой с именем оператора над ней. Ниже проиллюстрирована неперестановочность произведения:



В результате отображения $\hat{B}\hat{A}$ получается \mathbf{c} , а отображение $\hat{A}\hat{B}$ даёт, вообще говоря, отличный от \mathbf{c} вектор \mathbf{c}' . Алгебраически верхняя цепочка отображений на этом рисунке выглядит следующим образом: $\hat{A}\mathbf{a} = \mathbf{b}$ и затем $\hat{B}\hat{A}\mathbf{a} = \hat{B}\mathbf{b} = \mathbf{c}$.

Оператор называется *линейным*, если для любых векторов и чисел:

$$\hat{A}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \hat{A}\mathbf{a} + \hat{A}\mathbf{b}, \quad \hat{A}(\alpha \mathbf{a}) = \alpha \hat{A}\mathbf{a}, \quad (\text{V.16})$$

т.е. действие оператора на сумму векторов равно сумме результатов действия оператора на каждый вектор и число можно выносить за действие оператора. В дальнейшем мы будем иметь дело только с линейными операторами. Для любого линейного оператора $\hat{A}\mathbf{0} = \mathbf{0}$ ($\ll H_{65}$).

▷ Действие единичного $\hat{1}$ и нулевого $\hat{0}$ операторов на произвольный вектор \mathbf{a} определяется следующим образом:

$$\hat{1} \mathbf{a} = \mathbf{a}, \quad \hat{0} \mathbf{a} = \mathbf{0}. \quad (\text{V.17})$$

Таким образом, единичный оператор отображает любой вектор сам в себя, а нулевой оператор любой вектор отображает в нулевой.

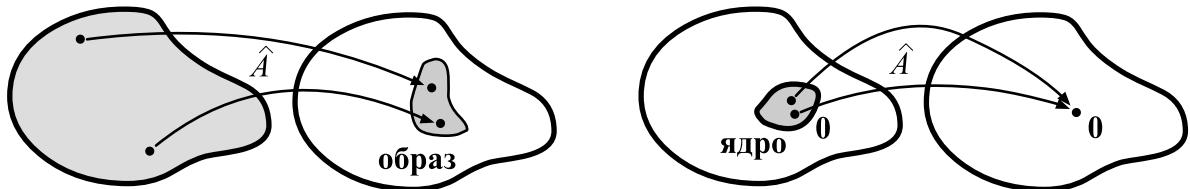
▷ При действии оператора \hat{A} на все векторы пространства \mathbb{V} , может получаться лишь часть векторов \mathbb{V} . Это *подмножество* пространства \mathbb{V} называется *образом* оператора \hat{A} и обозначается как $\text{im}(\hat{A})$. Образ – это множество значений оператора. Запись $\hat{A}\mathbb{V}$ означает все векторы, получающие при действии на *каждый* вектор \mathbb{V} , поэтому

$$\text{im}(\hat{A}) \equiv \hat{A}\mathbb{V}. \quad (\text{V.18})$$

Множество векторов \mathbf{x} для которых $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ называется *ядром* оператора \hat{A} и обозначается следующим образом:

$$\ker(\hat{A}) = \{ \mathbf{x} \mid \hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0} \}. \quad (\text{V.19})$$

Ядро нулевого оператора $\hat{0}$ совпадает со всем векторным пространством: $\ker(\hat{0}) = \mathbb{V}$, тогда как в ядре единичного оператора $\hat{1}$ находится только нулевой вектор. Нулевой вектор входит в ядро и образ любого оператора, но в общем случае ядро может содержать более одного вектора. Возможны операторы у которых ядро и образ совпадают, имея ненулевую размерность.



▷ Оператор, как и вектор, в данном ортонормированном базисе можно задать при помощи набора комплексных чисел:

$$A_{ij} = \langle \mathbf{e}_i, \hat{A}\mathbf{e}_j \rangle. \quad (\text{V.20})$$

Действительно, вычислим скалярное произведение базисного вектора \mathbf{e}_i с векторами в соотношении $\mathbf{b} = \hat{A}\mathbf{a}$:

$$b_i = \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{b} \rangle = \sum_{j=1}^n a_j \langle \mathbf{e}_i, \hat{A}\mathbf{e}_j \rangle = \sum_{j=1}^n A_{ij} a_j, \quad (\text{V.21})$$

где $n = \dim \mathbb{V}$ – размерность векторного пространства. Таким образом, координаты векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} связаны линейным соотношением при помощи коэффициентов A_{ij} , которые полностью определяют действие оператора \hat{A} на произвольный вектор.

▷ Для некоторых операторов \hat{A} существуют *обратные*, которые обозначаются как \hat{A}^{-1} . При этом для *любого* вектора \mathbf{a} :

$$\hat{A}\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad \Rightarrow \quad \hat{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{a}.$$

Если обратный оператор есть, тогда для любых двух векторов $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$ векторы $\hat{A}\mathbf{x}_1$ и $\hat{A}\mathbf{x}_2$ – различные. Если же $\hat{A}\mathbf{x}_1 = \hat{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{y}$, то действие \hat{A}^{-1} на \mathbf{y} не определено. Понятно, что

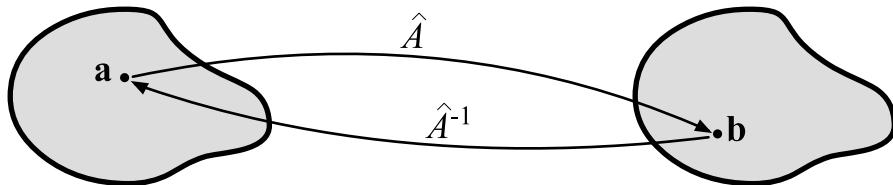
$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{1}. \quad (\text{V.22})$$

Для обратных операторов (если они есть) справедливы тождества:

$$(\hat{A}^{-1})^{-1} = \hat{A}, \quad (\alpha\hat{A})^{-1} = \frac{1}{\alpha}\hat{A}, \quad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}. \quad (\text{V.23})$$

Первые два очевидны, а последнее доказывается умножением с любой стороны на $\hat{A}\hat{B}$.

Если обратный оператор \hat{A}^{-1} для данного оператора \hat{A} существует, то он всегда единственный ($\lessdot H_{66}$).



Для оператора \hat{A} , имеющего обратный \hat{A}^{-1} , образ совпадает со всем пространством, а ядро состоит только из $\mathbf{0}$ ($\lessdot H_{67}$).

▷ Для линейного оператора \hat{A} можно определить, *сопряжённый* к нему оператор \hat{A}^+ при помощи соотношения:

$$\langle \mathbf{a}, \hat{A}^+ \mathbf{b} \rangle = \langle \hat{A} \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle. \quad (\text{V.24})$$

Из определения следуют ($\lessdot H_{68}$), свойства эрмитового сопряжения:

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}, \quad (\alpha\hat{A})^+ = \alpha^*\hat{A}^+, \quad (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+. \quad (\text{V.25})$$

С учётом этих тождеств в скалярном произведении (V.24) можно “перебрасывать” действие оператора с одного вектора на другой, ставя после этого над оператором значок сопряжения. Например:

$$\langle \mathbf{a}, \alpha\hat{A}\hat{B} \mathbf{b} \rangle = \langle (\alpha\hat{A}\hat{B})^+ \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \langle \alpha^*\hat{B}^+\hat{A}^+ \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle.$$

В ортонормированном базисе

$$(\hat{A}^+)^{ij} = \langle \mathbf{e}_i, \hat{A}\mathbf{e}_j \rangle = \langle \hat{A}\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \langle \mathbf{e}_j, \hat{A}\mathbf{e}_i \rangle^* = A_{ji}^*.$$

Если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то оператор называют *самосопряженным* или *эрмитовым*. Примерами эрмитовых операторов является единичный и нулевой операторы.

▷ *Коммутатором* двух операторов называется оператор, равный:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (\text{V.26})$$

Если в результате получается ноль (нулевой оператор), то говорят, что операторы *коммутируют* или являются перестановочными: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. В противном случае они не коммутируют. Коммутатор – это антисимметрическая функцией операторов:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (\text{V.27})$$

что несложно проверить, используя определение (V.26). При вычислении коммутаторов весьма полезно тождество для коммутатора произведения:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}, \quad (\text{V.28})$$

которое непосредственно следует из определения:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C}.$$

При раскрытии скобок в правой части, возникают слагаемые $\hat{B}\hat{A}\hat{C}$ и $-\hat{B}\hat{A}\hat{C}$, которые сокращаются. Сокращение означает, что разница $\hat{L} - \hat{L}$ равна нулевому оператору $\hat{0}$, сумма которого с любым оператором равна: $\hat{0} + \hat{A} = \hat{A}$. Отметим также *тождество Якоби*:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (\text{V.29})$$

▷ Если различным значениям действительного параметра t ставится в соответствие тот или иной оператор, то говорят, что задана *операторная функция* $\hat{X}(t)$. Для таких функций в ряде случаев можно определить производную по параметру при помощи обычного правила:

$$\frac{d\hat{X}}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\hat{X}(t + \Delta t) - \hat{X}(t)}{\Delta t}. \quad (\text{V.30})$$

Простейший пример – это линейная функция $\hat{X}(t) = \hat{A} + t\hat{B}$, где \hat{A} и \hat{B} фиксированные операторы. Её производная по t равна \hat{B} .

▷ Оператор \hat{L} называют *ограниченным*, если существует число c , такое, что для любого нормированного вектора \mathbf{u} : $\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 1$ выполняется неравенство:

$$\langle \hat{L}\mathbf{u}, \hat{L}\mathbf{u} \rangle \leq c, \quad (\text{V.31})$$

где в силу свойств скалярного произведения, c – положительно. Число c называется *нормой оператора* и обозначается как $\|\hat{L}\|$. Таким образом, норма оператора это наибольшее значение нормы вектора, получающееся при действии оператора на любой единичный вектор $\|\mathbf{u}\| = 1$.

V.3 Матричная алгебра

Примером n -мерного векторного пространства является множество упорядоченных наборов из n комплексных чисел \mathbb{C}^n . Операторами в таком пространстве выступают матрицы $n \times n$. Упорядоченные наборы удобно изображать в виде столбиков, а матрицы квадратными таблицами. Например, при $n = 2$ произвольный вектор и оператор имеют вид:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}.$$

Сложение векторов и умножение на число производится покомпонентно:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix}, \quad \alpha \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \alpha a_1 \\ \alpha a_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{V.32})$$

Все компоненты нулевого вектора равны нулю, а единичная и нулевая матрицы 2×2 имеют вид:

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{V.33})$$

Действие матрицы на вектор выполняется по “правилу лома”: элементы строки матрицы умножаются на элементы столбика и складываются. Результат записывается в месте где “лом” пробил “дырку” в столбике:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}a_1 + A_{12}a_2 \\ A_{21}a_1 + A_{22}a_2 \end{pmatrix}.$$

Правило лома справедливо и для произведения матриц $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$. При этом элементы каждой строки первой матрицы перемножаются с элементом каждого столбика второй матрицы и их сумма в результирующей матрице записывается на месте пересечения строки и столбика:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix}.$$

Эти правила в общем случае можно записать в индексном виде:

$$b_i = \sum_{k=1}^n A_{ik} a_k, \quad C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj}. \quad (\text{V.34})$$

Умножение матриц (как и операторов) ассоциативно $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$, но в общем случае неперестановочно: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Матрицы (как и векторы) можно складывать и умножать на число (по-компонентно). Относительно этих операций они, в свою очередь, образуют векторное пространство с аксиомами (V.1)-(V.4).

▷ Для векторов введём операцию *эрмитового сопряжения* (обозначаем крестиком), которое превращает столбик в строку и заменяет элементы на их комплексно сопряжённые значения:

$$\mathbf{a}^+ = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}^+ = (a_1^* \ a_2^*). \quad (\text{V.35})$$

С её помощью, скалярное произведение со свойствами (V.6), (V.7) можно определить следующим образом:

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \mathbf{a}^+ \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i = a_1^* b_1 + \dots + a_n^* b_n. \quad (\text{V.36})$$

▷ *Транспонирование* – это операция, в результате которой получается новая матрица с переставленными местами строками и столбцами:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad (\hat{A}^T)_{ij} = A_{ji}. \quad (\text{V.37})$$

Симметричной называется матрица, которая не меняется при транспонировании: $A_{ij} = A_{ji}$.

▷ *Сопряжение* матрицы проводится в результате её транспонирования и взятия комплексного сопряжения каждого элемента:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}, \quad (\hat{A}^+)_{ij} = A_{ji}^*. \quad (\text{V.38})$$

▷ Простейший базис в n -мерном пространстве состоит из n векторов с нулевыми элементами, за исключением k -того элемента для k -того вектора, равного единице. Например, для 2-мерного пространства имеем два базисных вектора и любой вектор может быть разложен по этому базису:

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2. \quad (\text{V.39})$$

Базисные векторы (V.39) ортонормированы:

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \mathbf{e}_i^+ \mathbf{e}_j = \delta_{ij}. \quad (\text{V.40})$$

Заметим, что единичная матрица (V.33) в индексных обозначениях является символом Кронекера: $(\hat{1})_{ij} = \delta_{ij}$.

▷ *Обратная матрица* \hat{A}^{-1} к матрице \hat{A} удовлетворяет равенству:

$$\hat{A}^{-1} \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{1},$$

где $\hat{1}$ – единичная матрица. Если у матрицы нет обратной, то она называется *сингулярной*.

- Каждой матрице можно поставить в соответствие комплексное число, называемое *определителем* со следующими свойствами:

$$\det(\hat{A}\hat{B}) = \det(\hat{A}) \cdot \det(\hat{B}), \quad \det(\hat{1}) = 1, \quad \det(\hat{0}) = 0. \quad (\text{V.41})$$

Для матрицы $n \times n$ этим условиям удовлетворяет сумма произведений $A_{11}A_{22}\dots A_{nn}$ в которых перебираются все $n!$ перестановок вторых индексов, умноженные на (-1) , если эта перестановка нечётная. Так, для квадратной матрицы 2×2 определитель равен:

$$\det \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}$$

(взяты произведения элементов матрицы "крест – накрест" и вычтены друг из друга). Для получения определителя матрицы 3×3 можно взять элементы первой строки \hat{A} и для каждого из них вычеркнуть из матрицы строку и столбец, в котором этот элемент стоит. Затем найти определитель получившейся матрицы 2×2 и умножить его на этот элемент. Все такие произведения необходимо сложить со знаком плюс, если сумма номера строки и столбика, в котором стоит элемент, чётная, и со знаком минус, если нечётная:

$$\det \hat{A} = A_{11} \det \begin{pmatrix} A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} - A_{12} \det \begin{pmatrix} A_{21} & A_{23} \\ A_{31} & A_{33} \end{pmatrix} + A_{13} \det \begin{pmatrix} A_{21} & A_{22} \\ A_{31} & A_{32} \end{pmatrix}.$$

Этот алгоритм распространяется на матрицы произвольной размерности, сводя вычисление их определителей к сумме (разности) определителей матриц с размерностью на единицу меньше. При этом можно использовать любую строку или столбец (не только первую строку, как в примере с матрицей 3×3).

▷ *Алгебраическое дополнение* к элементу A_{ij} – это число \tilde{A}_{ij} , равное определителю матрицы, получающейся из исходной вычёркиванием i -той строки и j -того столбца (на пересечении которых стоит A_{ij}), и умноженное на $(-1)^{i+j}$. Алгебраические дополнения стоят в разложении определителя матрицы по i -той строке или столбцу:

$$\det \hat{A} = \sum_{k=1}^n A_{ik} \tilde{A}_{ik} = \sum_{k=1}^n A_{ki} \tilde{A}_{ki}.$$

▷ *Диагональной матрицей* называется матрица у которой отличны от нуля только элементы $A_{11}, A_{22}, \dots, A_{nn}$. Определитель такой матрицы равен произведению диагональных элементов. Произведение двух диагональных матриц снова даёт диагональную.

▷ Чтобы получить обратную матрицу \hat{A}^{-1} необходимо вычислить все алгебраические дополнения \tilde{A}_{ij} матрицы \hat{A} , записав их в виде матрицы. Затем её *транспонировать и разделить* на $\det \hat{A}$ (который для несингулярной матрицы отличен от нуля). Например:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 6 & 4 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{A}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & -4 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & -4 & 2 \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -2 \\ -2 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Алгебраическое дополнение к A_{23} равно $(-1)^{2+3} \cdot (2 \cdot 0 - 1 \cdot 1) = 1$ и т.д. Определитель матрицы равен $\det \hat{A} = 2$.

▷ Перечислим некоторые свойства определителей:

$$\det \hat{A}^T = \det \hat{A}, \quad \det(\hat{A}^{-1}) = \frac{1}{\det(\hat{A})}, \quad \det(\alpha \hat{A}) = \alpha^n \det(\hat{A}) \quad (\text{V.42})$$

(в последнем соотношении α – число и \hat{A} – матрица $n \times n$). Кроме этого: перестановка двух строк (столбцов) изменяет знак определителя; если строка (столбец) состоит из нулей, то определитель равен нулю; определитель не изменится, если к любой строке (столбцу) поэлементно прибавить другую строку (столбец), умножив её на произвольное число.

▷ Система линейных уравнений $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ относительно компонент вектора \mathbf{x} для матрицы \hat{A} и вектора \mathbf{b} имеет решение (единственное), если \hat{A} имеет обратную (умножая уравнение на \hat{A}^{-1} , получаем $\mathbf{x} = \hat{A}^{-1}\mathbf{b}$).

Если вектор \mathbf{b} нулевой, то уравнение $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ называется *однородной системой*. По-мимо тривиального решения $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, эта система будет иметь отличные от нуля решения, если $\det(\hat{A}) = 0$ (иначе существует \hat{A}^{-1} , умножая на которую, получим $\mathbf{x} = \mathbf{0}$).

Однородная система возникает при выяснении линейной независимости векторов. В качестве упражнения (<H₆₉), стоит доказать линейную независимость векторов с компонентами:

$$\mathbf{e}_1 = \{1, 2, 1\}, \quad \mathbf{e}_2 = \{1, 0, -1\}, \quad \mathbf{e}_3 = \{-1, 2, -1\}.$$

Ещё одним применением уравнения $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ является определении ядра матрицы (стр. 355). Стоит (<H₇₀) его найти для матрицы с нулевым определителем и совпадающим ядром и образом:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{A}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что если квадрат оператора равен нулю, это, вообще говоря, не означает, что сам оператор нулевой. Аналогично из $\hat{A}\hat{B} = \hat{0}$ не следует, что \hat{A} или \hat{B} нулевые операторы.

V.4 Векторные подпространства

- Подпространством \mathbb{M} векторного пространства \mathbb{V} называют подмножество векторов $\mathbb{M} \subset \mathbb{V}$, для которых операции сложения и умножение на число не выводят результат из \mathbb{M} , т.е., если $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{M}$, то $\alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b} \in \mathbb{M}$. Любое подпространство содержит нулевой вектор $\mathbf{0}$. Таким образом, подмножеством может быть любая совокупность векторов из \mathbb{V} . Однако, чтобы такая совокупность оказалась подпространством, она сама должна быть векторным пространством.

В трёхмерном пространстве “со стрелочками”, векторы, лежащие в одной плоскости – это 2-мерное подпространство. В n -мерном пространстве любые $k \leq n$ линейно независимых векторов $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$ и все их комбинации $\alpha_1\mathbf{a}_1 + \dots + \alpha_k\mathbf{a}_k$, где α_i – различные комплексные числа, образуют подпространство, называемое *линейной оболочкой* векторов $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$. Линейная оболочка всех базисных векторов совпадает с векторным пространством.

▷ Образ $\text{im}(\hat{A})$ и ядро $\ker(\hat{A})$ оператора \hat{A} являются подпространствами. Размерность $\text{im}(\hat{A})$ называется *рангом* оператора \hat{A} , а размерность $\ker(\hat{A})$ – дефектом. Сумма размерностей образа и ядра равна размерности всего пространства ($\lessdot H_{71}$):

$$\dim \text{im}(\hat{A}) + \dim \ker(\hat{A}) = \dim \mathbb{V}. \quad (\text{V.43})$$

Например, размерность ядра нулевого оператора равна размерности пространства $\dim \mathbb{V}$, а его образ $\mathbf{0}$ имеет нулевую размерность. У единичного оператора всё с точностью до наоборот. Однако, у некоторых операторов, например, ядро и образ могут совпадать, поэтому необязательно “маленькому” ядру соответствует “большой” образ или наоборот.

▷ Подпространство \mathbb{M} называется *инвариантным* относительно оператора \hat{A} , если при действии \hat{A} на векторы подпространства будут получаться векторы этого же подпространства (в общем случае $\hat{A}\mathbb{M} \subset \mathbb{M}$).



Ядро и образ оператора \hat{A} являются инвариантными подпространствами относительно \hat{A} . Например, если \mathbf{x}_1 и \mathbf{x}_2 принадлежат ядру, то их линейная комбинация также элемент ядра:

$$\hat{A}(\alpha\mathbf{x}_1 + \beta\mathbf{x}_2) = \alpha\hat{A}\mathbf{x}_1 + \beta\hat{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{0}.$$

Аналогично для образа оператора.

• *Пересечение* (общие элементы) подпространств \mathbb{V}_1 и \mathbb{V}_2 образуют подпространство $\mathbb{V}_1 \cap \mathbb{V}_2$. Подпространством будут также все векторы, равные сумме векторов из \mathbb{V}_1 и \mathbb{V}_2 . Такое подпространство обозначается как $\mathbb{V}_1 + \mathbb{V}_2$ и называется *суммой подпространств*. Не стоит путать его с объединением подпространств $\mathbb{V}_1 \cup \mathbb{V}_2$, которое может и не быть подпространством. Например, пусть \mathbf{a} и \mathbf{b} – линейно независимые векторы. Тогда для $\mathbb{V}_1 = \{\mathbf{0}, \alpha\mathbf{a}\}$ и $\mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \beta\mathbf{b}\}$ их объединение $\mathbb{V}_1 \cup \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \alpha\mathbf{a}, \beta\mathbf{b}\}$ не подпространство, так как сумма $\mathbf{a} + \mathbf{b}$ этому множеству не принадлежит. А вот сумма подпространств является подпространством:

$$\mathbb{V}_1 + \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \alpha\mathbf{a} + \mathbf{0}, \beta\mathbf{b} + \mathbf{0}, \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b}\} = \{\mathbf{0}, \alpha\mathbf{a}, \beta\mathbf{b}, \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b}\}.$$

Для размерностей сумм и пересечений подпространств справедлива следующая формула:

$$\dim(\mathbb{V}_1 + \mathbb{V}_2) = \dim \mathbb{V}_1 + \dim \mathbb{V}_2 - \dim(\mathbb{V}_1 \cap \mathbb{V}_2). \quad (\text{V.44})$$

Проиллюстрируем её на примере 3-мерного пространства \mathbb{V} с базисом $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$. Пусть есть два частично пересекающихся подпространств:

$$\mathbb{V}_1 = \{\mathbf{0}, \alpha_1\mathbf{e}_1 + \alpha_2\mathbf{e}_2\}, \quad \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \beta_2\mathbf{e}_2 + \beta_3\mathbf{e}_3\}.$$

Их размерности равны: $\dim \mathbb{V}_1 = \dim \mathbb{V}_2 = 2$. Сумма и пересечение этих подпространств имеют вид:

$$\mathbb{V}_1 + \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \gamma_1\mathbf{e}_1 + \gamma_2\mathbf{e}_2 + \gamma_3\mathbf{e}_3\}, \quad \mathbb{V}_1 \cap \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}, \alpha\mathbf{e}_2\}.$$

Их размерности равны $\dim(\mathbb{V}_1 + \mathbb{V}_2) = 3$ и $\dim(\mathbb{V}_1 \cap \mathbb{V}_2) = 1$.

▷ *Прямой суммой* подпространств $\mathbb{X} \oplus \mathbb{Y}$ называется сумма подпространств, имеющих единственный общий элемент $\mathbf{0}$, т.е. когда пересечение подпространств равно $\mathbb{V}_1 \cap \mathbb{V}_2 = \mathbf{0}$. Например, в трёхмерном пространстве можно рассмотреть следующую прямую сумму подпространств:

$$\{\mathbf{0}, \alpha_1\mathbf{e}_1 + \alpha_2\mathbf{e}_2 + \alpha_3\mathbf{e}_3\} = \{\mathbf{0}, \alpha_1\mathbf{e}_1 + \alpha_2\mathbf{e}_2\} \oplus \{\mathbf{0}, \alpha_3\mathbf{e}_3\}.$$

Из (V.44) следует, что сумма размерностей подпространств в прямой сумме равна размерности результирующего пространства. Но обратное, вообще говоря не верно, и если $\dim \mathbb{V}_1 + \dim \mathbb{V}_2 = \dim \mathbb{V}$, это ещё не означает, что $\dim \mathbb{V}_1 \cap \dim \mathbb{V}_2 = \{\mathbf{0}\}$ (например, \mathbb{V}_1 и \mathbb{V}_2 могут совпадать).

Разбиение всего пространства на прямые суммы подпространств часто оказывается весьма полезным и сводит задачу исследования свойств пространства к более простой, так как размерность каждого подпространства меньше, чем у исходного.

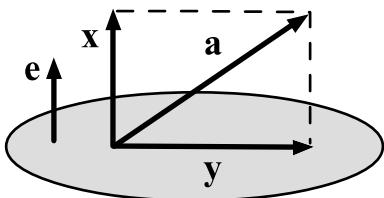
- Проективным (или проекционным) называется оператор, если:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}. \quad (\text{V.45})$$

Оператор $\hat{1} - \hat{P}$ также является проективным, при этом $\hat{P}(\hat{1} - \hat{P}) = \hat{0}$. Любой проективный оператор разбивает *всё* векторное пространство на два подпространства \mathbb{X} и \mathbb{Y} , прямая сумма которых образует $\mathbb{V} = \mathbb{X} \oplus \mathbb{Y}$. Действительно, рассмотрим образ проективного оператора $\hat{P}\mathbf{v} = \mathbf{y}$, где \mathbf{v} пробегает все векторы \mathbb{V} . Подействуем на это уравнение оператором \hat{P} . По определению (V.45), имеем: $\hat{P}\mathbf{y} = \hat{P}^2\mathbf{v} = \hat{P}\mathbf{v} = \mathbf{y}$. Следовательно образ $\text{im}(\hat{P})$ инвариантен относительно \hat{P} , причём для него \hat{P} выступает единичным оператором. Ядро и образ проективного оператора пересекаются только на нулевой вектор, а их прямая сумма образует всё векторное пространство:

$$\hat{P}\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad \hat{P}\mathbf{y} = \mathbf{y}, \quad \mathbb{V} = \mathbb{X} \oplus \mathbb{Y},$$

где $\mathbf{x} \in \mathbb{X}$ и $\mathbf{y} \in \mathbb{Y}$. В 3-мерном пространстве “со стрелочками” проективным оператором является операция проектирования вектора \mathbf{a} на некоторую плоскость и на ось, перпендикулярную к ней. При этом вектор \mathbf{y} лежит в плоскости (на него \hat{P} отображает \mathbf{a}), а вектор \mathbf{x} параллелен нормали к плоскости \mathbf{e} и проектируется оператором $\hat{1} - \hat{P}$:



$$\mathbf{x} = \frac{\langle \mathbf{e}, \mathbf{a} \rangle}{\langle \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle} \mathbf{e}, \quad \mathbf{a} = \mathbf{x} + \mathbf{y}.$$

В n -мерном пространстве может существовать несколько проективных операторов $\hat{P}_1, \dots, \hat{P}_k$ со свойствами ($i \neq j$):

$$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i, \quad \hat{P}_i \hat{P}_j = \hat{0}, \quad \hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \dots + \hat{P}_k = \hat{1}. \quad (\text{V.46})$$

Эти операторы разбивают векторное пространство на прямую сумму подпространств, каждое из которых является *проекцией* пространства \mathbb{V} выполненной, соответствующим проективным оператором:

$$\mathbb{V} = \mathbb{V}_1 \oplus \mathbb{V}_2 \oplus \dots \oplus \mathbb{V}_k, \quad \hat{P}_i \mathbb{V} = \mathbb{V}_i. \quad (\text{V.47})$$

Каждый вектор $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$ однозначно представим в виде суммы k векторов $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \dots + \mathbf{v}_k$, где $\mathbf{v}_i \in \mathbb{V}_i$ ($k \leq n$). Базис $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ в \mathbb{V} называется *присоединённым* к разложению (V.47), если несколько первых векторов базиса принадлежат к \mathbb{V}_1 , несколько последующих к \mathbb{V}_2 и т.д.

Сумма проективных операторов $\hat{P} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2$ из (V.46) – снова проективный оператор. При этом он перестановчен со своими слагаемыми: $\hat{P}\hat{P}_1 = \hat{P}_1\hat{P} = \hat{P}_1$, которые относительно \hat{P} называются *подпроекторами*.

- Приведём пример проективных операторов в 3-мерном пространстве:

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Несложно проверить, что их квадраты равны им самим $\hat{P}_1^2 = \hat{P}_1$ и т.д., а произведения приводят к нулевой матрице $\hat{P}_1\hat{P}_2 = \hat{P}_1\hat{P}_3 = \hat{P}_2\hat{P}_3 = \hat{0}$. Эти операторы разбивают 3-мерное векторное пространство на прямую сумму трёх одномерных пространств. Причём оператор \hat{P}_1 проектирует произвольный вектор $\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3)^T$ на базисный вектор $\mathbf{e}_1 = (1 \ 0 \ 0)^T$, оператор \hat{P}_2 проектирует на $\mathbf{e}_2 = (0 \ 1 \ 0)^T$ и т.д.

▷ Если проективный оператор имеет обратный, то он является единичным (проектирует пространство само в себя). Действительно, умножая определение $\hat{P}^2 = \hat{P}$ на \hat{P}^{-1} , получаем $\hat{P} = \hat{1}$. Поэтому для проективного оператора, отличного от единичной матрицы, определитель должен быть равен нулю: $\det(\hat{P}) = 0$. Несложно видеть, что это справедливо для приведенных выше матриц.

▷ Следом матрицы называют сумму её диагональных элементов:

$$\text{Tr } \hat{A} = A_{11} + A_{22} + \dots + A_{nn} \quad (\text{V.48})$$

Под знаком следа можно ($\lessdot H_{72}$) переставлять матрицы местами:

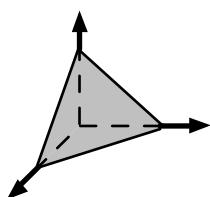
$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}). \quad (\text{V.49})$$

След проективного оператора равен размерности подпространства \mathbb{V}_P на которое происходит проектирование:

$$\text{Tr}(\hat{P}) = \dim \mathbb{V}_P. \quad (\text{V.50})$$

Выше размерности подпространств и следы проективных операторов равны 1. Как указывалось ранее, сумма “ортогональных” проективных операторов является снова проективным оператором. Например для $\hat{P} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2$ по-прежнему $\hat{P}^2 = \hat{P}$ и $\hat{P}\hat{P}_3 = \hat{0}$. Приведём также пример менее тривиального проективного оператора:

$$\hat{P} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$



который проектирует ($\lessdot H_{73}$) произвольный вектор на плоскость, перпендикулярную вектору $\mathbf{e} = (1 \ 1 \ 1)^T$. Его определитель нулевой, а след равен 2 (2-мерное пространство плоскости). При этом $\langle \mathbf{e}, \hat{P}\mathbf{x} \rangle = 0$.

V.5 Собственные значения

Иногда при действии оператора на вектор, получается тот же вектор, умноженный на число:

$$\hat{A}\mathbf{a} = a\mathbf{a}. \quad (\text{V.51})$$

Такое уравнение называется *уравнением на собственные значения*, ненулевой вектор \mathbf{a} – *собственным вектором* оператора \hat{A} , а число a – *собственным значением*. Уравнение (V.51) обычно имеет несколько решений (различных a и \mathbf{a}). Множество различных собственных значений образуют *спектр* оператора \hat{A} .

▷ У эрмитовых операторов собственные значения *действительны*. Это утверждение следует из определения сопряжения (V.24), если в качестве векторов взять собственный вектор оператора \hat{A} :

$$\langle \mathbf{a}, \hat{A}^+ \mathbf{a} \rangle = \langle \mathbf{a}, \hat{A} \mathbf{a} \rangle^* \quad \Rightarrow \quad a \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle = a^* \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle^*,$$

где в первом соотношении положено $\hat{A}^+ = \hat{A}$, учтено (V.51) и собственное значение вынесено за скалярное произведение. Так как $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle$ действительно, см. (V.7) и не равно нулю ($\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$), получаем $a^* = a$.

▷ Собственные векторы эрмитовых операторов, соответствующие различным собственным значениям *ортогональны*. Пусть \mathbf{a} и \mathbf{a}' – собственные векторы с *действительными* собственными значениями a и a' :

$$\langle \mathbf{a}', \hat{A} \mathbf{a} \rangle = a \langle \mathbf{a}', \mathbf{a} \rangle, \quad \langle \hat{A} \mathbf{a}', \mathbf{a} \rangle = a' \langle \mathbf{a}', \mathbf{a} \rangle.$$

Вычитая эти соотношения, получаем $(a - a') \langle \mathbf{a}', \mathbf{a} \rangle = 0$, где учтено, что: $\langle \hat{A} \mathbf{a}', \mathbf{a} \rangle = \langle \mathbf{a}', \hat{A} \mathbf{a} \rangle$ (самосопряженность оператора). Таким образом, если $a \neq a'$ – скалярное произведение собственных векторов равно нулю.

▷ Собственные векторы соответствующие различным собственным значениям *линейно независимы*. Действительно, пусть есть m векторов \mathbf{a}_i . Если они зависимы, то существуют ненулевые числа c_i такие, что:

$$\sum_{i=1}^m c_i \mathbf{a}_i = c_1 \mathbf{a}_1 + c_2 \mathbf{a}_2 + \dots + c_m \mathbf{a}_m = 0.$$

Подействуем на эту сумму оператором $(\hat{A} - a_1 \hat{1})(\hat{A} - a_2 \hat{1}) \dots (\hat{A} - a_{m-1} \hat{1})$:

$$c_m (a_m - a_1)(a_m - a_2) \dots (a_m - a_{m-1}) \mathbf{a}_m = 0.$$

Если все a_i различны, то $c_m = 0$, что противоречит линейной зависимости векторов. Эрмитовость при доказательстве не использовалось, поэтому это утверждение справедливо для любого оператора.

▷ Когда одному и тому же собственному значению a соответствует несколько линейно независимых собственных векторов $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$, то говорят, что происходит *вырождение*. Число этих векторов k называется *кратностью вырождения*. Линейная оболочка (стр. 362), построенная на векторах $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$, образует подпространство, векторы которого являются собственными векторами оператора \hat{A} с одним и тем же собственным значением. Пусть, например, существует два линейно независимых вектора \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , таких, что

$$\hat{A}\mathbf{a}_1 = a\mathbf{a}_1, \quad \hat{A}\mathbf{a}_2 = a\mathbf{a}_2.$$

Тогда, в силу линейности оператора \hat{A} , имеем:

$$\mathbf{a} = \alpha_1\mathbf{a}_1 + \alpha_2\mathbf{a}_2, \quad \hat{A}\mathbf{a} = a\mathbf{a}.$$

Линейная оболочка всех независимых собственных векторов, принадлежащих фиксированному собственному значению образует *собственное подпространство* оператора.

Вырожденные собственные векторы могут оказаться неортогональными. Однако, так как они линейно независимы, при помощи алгоритма Шмидта (стр. 353) их всегда можно сделать ортогональными.

▷ Ключевым для квантовой теории является то, что в n -мерном пространстве эрмитовый оператор всегда имеет n линейно независимых собственных векторов, которые можно выбрать в качестве базиса. Это утверждение справедливо и для вырожденного спектра, т.е. когда часть собственных значений совпадает. Поэтому при наличии вырождений с кратностями k_1, k_2, \dots, k_m , всегда

$$k_1 + k_2 + \dots + k_m = n. \quad (\text{V.52})$$

Действительно, пусть эрмитовый оператор в пространстве \mathbb{V} с размерностью $n = \dim \mathbb{V}$ имеет хотя бы одно собственное значение (ниже, на примере матриц, будет показано, что это так). Обозначим его собственный вектор через \mathbf{a}_1 и рассмотрим множество всех векторов \mathbf{b} ортогональных к \mathbf{a}_1 . Они образуют векторное подпространство размерности $n - 1$ (если \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 ортогональны \mathbf{a}_1 , то и $\alpha\mathbf{b}_1 + \beta\mathbf{b}_2$ ортогонален). Это подпространство инвариантно, т.к. \hat{A} , действуя на его векторы не выводит их из подпространства ($\mathbf{b}' = \hat{A}\mathbf{b}$ также ортогонален \mathbf{a}_1):

$$a_1 \langle \mathbf{b}, \mathbf{a}_1 \rangle = 0 = \langle \mathbf{b}, \hat{A}\mathbf{a}_1 \rangle = \langle \hat{A}\mathbf{b}, \mathbf{a}_1 \rangle = \langle \mathbf{b}', \mathbf{a}_1 \rangle = 0.$$

В таком пространстве оператор \hat{A} опять имеет хотя бы одно собственное значение с собственным вектором \mathbf{a}_2 . Повторяя рассуждения, получим n ортогональных собственных векторов $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ (возможно с частично совпадающими собственными значениями).

- Уравнение (V.51) для матриц сводится к решению однородного уравнения $(\hat{A} - a\hat{1}) \mathbf{a} = \mathbf{0}$, ненулевое решение которого возможно (стр. 361), если следующий определитель равен нулю:

$$\det(\hat{A} - a\hat{1}) = 0. \quad (\text{V.53})$$

Это уравнение относительно a называется *характеристическим уравнением*. В n -мерном пространстве оно является полиномом n -й степени по a и может иметь не более чем n различных корней:

$$\det(\hat{A} - a\hat{1}) = (-1)^n a^n + c_{n-1} a^{n-1} + \dots + c_0 = 0$$

По основной теореме алгебры такое уравнение имеет хотя бы один корень. Можно показать, что:

$$c_{n-1} = (-1)^{n-1} \operatorname{Tr}(\hat{A}), \quad c_0 = \det(\hat{A}). \quad (\text{V.54})$$

(c_0 получается тривиально при $a = 0$). Заметим, что для матриц \hat{A} с нулевым определителем, одно из собственных значений всегда равно нулю.

Любопытно, что сама матрица \hat{A} удовлетворяет своему характеристическому уравнению:

$$(-1)^n \hat{A}^n + c_{n-1} \hat{A}^{n-1} + \dots + c_0 \hat{1} = \hat{0}, \quad (\text{V.55})$$

где в правой части стоит нулевая матрица. Например, в 2-мерном случае:

$$\det \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \lambda \operatorname{Tr}(\hat{A}) + \det(\hat{A}).$$

Прямой подстановкой, несложно проверить, что:

$$\hat{A}^2 - \hat{A} \operatorname{Tr}(\hat{A}) + \hat{1} \det(\hat{A}) = \hat{0}, \quad (\text{V.56})$$

т.е. \hat{A}^2 выражается через \hat{A} и единичную матрицу. Аналогично в n -мерном случае \hat{A}^n выражается через более низкие степени \hat{A} .

Свойство (V.55) несложно доказать для диагональных матриц. У них на диагонали стоят собственные значения a_1, \dots, a_n (часть из которых может при вырождении совпадать). Характеристическое уравнение имеет вид:

$$(a_1 - a) \cdot (a_2 - a) \cdot \dots \cdot (a_n - a) = 0.$$

Матрица $a_1\hat{1} - \hat{A}$ в первом элементе на диагонали имеет ноль. У $a_2\hat{1} - \hat{A}$ – ноль на втором элементе и т.д. Произведение таких матриц равно нулевой матрице. Произвольную эрмитову матрицу всегда можно диагонализовать с сохранением алгебры (стр. 370). Поэтому уравнение (V.55) будет также выполняться и в общем случае.

- Запишем произвольную эрмитову матрицу 2×2 :

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} a & ce^{i\varphi} \\ ce^{-i\varphi} & b \end{pmatrix},$$

где a, b, c и φ – действительные величины. Уравнение (V.53) для собственного значения λ является квадратным:

$$\det \begin{pmatrix} a - \lambda & ce^{i\varphi} \\ ce^{-i\varphi} & b - \lambda \end{pmatrix} = (a - \lambda)(b - \lambda) - c^2 = 0,$$

с двумя действительными решениями:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} (a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4c^2}).$$

Они совпадают, если $c = 0$ и $a = b$, что соответствует матрице, пропорциональной единичной. При $\det \hat{L} = ab - c^2 = 0$ имеем $\lambda_1 = 0$. Собственные векторы находим, решая систему уравнений $(\hat{L} - \lambda \hat{1})\mathbf{u} = \mathbf{0}$:

$$\begin{pmatrix} a - \lambda & ce^{i\varphi} \\ ce^{-i\varphi} & b - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} (a - \lambda)\alpha = -\beta ce^{i\varphi} \\ (b - \lambda)\beta = -\alpha ce^{-i\varphi} \end{cases}.$$

В зависимости от значения параметра “ c ” существует два класса решений. Если $c = 0$ и $\lambda_1 = a \neq \lambda_2 = b$, имеем два линейно независимых ортогональных вектора:

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где в силу линейности (V.51) положено $\alpha = \beta = 1$. При $c \neq 0$ имеем $\beta = \alpha ce^{-i\varphi}/(\lambda - b)$, что даёт при $\lambda = \lambda_{1,2}$ другие два независимых вектора.

В качестве полезных упражнений предлагается найти собственные значения и векторы следующих двух матриц:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{V.57})$$

В первом случае ($\triangleleft H_{74}$) матрица 2×2 неэрмитова и имеет только один собственный вектор (у эрмитовой матрицы 2×2 их всегда два!). Второй пример ($\triangleleft H_{75}$) с эрмитовой матрицей 3×3 содержит двукратно вырожденное собственное значение.

V.6 Преобразования операторов

- Пусть \hat{U} несингулярный оператор (имеет обратный). Рассмотрим следующее преобразование оператора \hat{A} :

$$\hat{A}' = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}. \quad (\text{V.58})$$

Собственные значения старого \hat{A} и нового \hat{A}' операторов одинаковы. Действительно, умножим уравнение на собственные значения $\hat{A}\mathbf{a} = a\mathbf{a}$ слева на \hat{U}^{-1} и вставим единичный оператор $\hat{U}\hat{U}^{-1}$ после \hat{A} :

$$(\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U})(\hat{U}^{-1} \mathbf{a}) = a(\hat{U}^{-1} \mathbf{a}).$$

Таким образом, собственные значения оператора \hat{A}' совпадают с собственными значениями \hat{A} , хотя меняются собственные векторы:

$$\mathbf{a}' = \hat{U}^{-1} \mathbf{a}, \quad \mathbf{a} = \hat{U} \mathbf{a}'. \quad (\text{V.59})$$

Преобразование (V.58) не меняет алгебры: если $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, то $\hat{C}' = \hat{A}'\hat{B}'$ ($\lessdot H_{76}$). В частности, проективный оператор $\hat{P}^2 = \hat{P}$ остаётся проективным: $\hat{P}'^2 = \hat{P}'$. Для матриц преобразование (V.58) сохраняет значение определителя: $\det(\hat{A}') = \det(\hat{A})$ и следа: $\text{Tr}(\hat{A}') = \text{Tr}(\hat{A})$.

▷ Если $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$, то оператор \hat{U} называется *унитарным*, а (V.58) *унитарным преобразованием*. Оно не только сохраняет собственные значения, но и не меняет эрмитовости оператора ($\lessdot H_{77}$).

Для эрмитовых матриц, всегда можно выбрать унитарную матрицу так, что преобразованная матрица \hat{A}' оказывается диагональной. Её собственные значения равны диагональным элементам, а, следовательно, и собственным значениям матрицы \hat{A} . Для диагональной матрицы можно выбрать собственные векторы у в которых для k -того вектора равен единице его k -тый элемент, а остальные равны нулю. Такие векторы образуют полный ортонормированный базис: $\langle \mathbf{a}'_i, \mathbf{a}'_j \rangle = \delta_{ij}$.

Запишем (V.59) обозначая через $(\mathbf{a}_i)_j$ для i -того базисного вектора его j -тую компоненту:

$$(\mathbf{a}_i)_j = \sum_{k=1}^n U_{jk} (\mathbf{a}'_i)_k = \sum_{k=1}^n U_{jk} \delta_{ki} = U_{ji},$$

где во втором равенстве подставлено значение компонент базисных векторов через символ Кронекера (0 или 1). Таким образом, матрица \hat{U} , которая диагонализирует матрицу \hat{A} , состоит из её собственных векторов, расположенных по столбикам. При этом \hat{U} будет унитарной матрицей, если нештрихованные векторы ортонормированы: $\langle \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j \rangle = \delta_{ij}$. В качестве упражнения ($\lessdot H_{78}$) стоит найти диагонализирующую матрицу для матрицы 3×3 из (V.57).

- Элементы унитарной матрицы могут выступать коэффициентами преобразования от исходного базиса $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ к новому $\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n$:

$$\mathbf{e}'_i = \sum_{k=1}^n \mathbf{e}_k U_{ki}, \quad (\text{V.60})$$

с *сохранением ортонормированности* базиса. Действительно, пусть

$$\langle \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_m \rangle = \delta_{km},$$

тогда

$$\langle \mathbf{e}'_i, \mathbf{e}'_j \rangle = \sum_{k,m=1}^n \langle \mathbf{e}_k U_{ki}, \mathbf{e}_m U_{mj} \rangle = \sum_{k,m=1}^n U_{ki}^* U_{mj} \langle \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_m \rangle = \sum_{k=1}^n U_{ki}^* U_{kj},$$

где во втором равенстве комплексные числа U_{ij} вынесены за скалярное произведение (из первого вектора с комплексным сопряжением!), а в последнем равенстве скалярное произведение заменено на символ Кронекера δ_{km} и выполнено суммирование по m . Учтём теперь эрмитовость матрицы, составленной из чисел U_{ij} . Для этого поменяем индексы в первом сомножителе, поставив значок транспонирования:

$$\langle \mathbf{e}'_i, \mathbf{e}'_j \rangle = \sum_{k=1}^n U_{ik}^{*T} U_{kj} = \sum_{k=1}^n U_{ik}^+ U_{kj} = (\hat{U}^+ \hat{U})_{ij} = (\hat{1})_{ij} = \delta_{ij}.$$

Напомним (стр. 355), что в ортонормированном базисе для любого линейного оператора \hat{A} можно задать коэффициенты $A_{ij} = \langle \mathbf{e}_i, \hat{A} \mathbf{e}_j \rangle$, которые полностью определяют его действие на произвольный вектор. Найдём как эти коэффициенты меняются при преобразовании базиса (V.60):

$$A'_{ij} = \langle \mathbf{e}'_i, \hat{A} \mathbf{e}'_j \rangle = \sum_{k,m=1}^n U_{ki}^* U_{mj} \langle \mathbf{e}_k, \hat{A} \mathbf{e}_m \rangle = \sum_{k,m=1}^n U_{ik}^+ A_{km} U_{mj} = (\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U})_{ij}.$$

Таким образом, получается унитарное преобразование матрицы. Соответственно, для разложения любого вектора имеем:

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a'_i \mathbf{e}'_i = \sum_{i,j=1}^n a'_i \mathbf{e}_j U_{ji} = \sum_{i=1}^n a_j \mathbf{e}_j.$$

Поэтому компоненты вектора в старом и новом базисе связаны следующим образом:

$$a_j = \sum_{i=1}^n U_{ji} a'_i, \quad a'_i = \sum_{j=1}^n U_{ij}^+ a_j, \quad (\text{V.61})$$

см. также соотношения (V.59) для собственных векторов.

V.7 Гильбертово пространство

• Векторное пространство \mathbb{V} может быть бесконечномерным. Если базис можно пронумеровать: $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots$, то пространство является *сепарабельным*. Сепарабельное бесконечномерное, полное векторное пространство с конечной нормой называется *гильбертовым пространством*.

В гильбертовом пространстве произвольный вектор можно разложить по ортонормированному базису $\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij}$ в бесконечный ряд:

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \mathbf{e}_i, \quad (\text{V.62})$$

где $\alpha_i = \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{a} \rangle$. Соответственно, скалярное произведение двух векторов равно:

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^* \beta_i. \quad (\text{V.63})$$

Норма вектора \mathbf{a} предполагается конечной, поэтому:

$$\|\mathbf{a}\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\alpha_i|^2 < \infty. \quad (\text{V.64})$$

Норма разности двух векторов $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|$ имеет смысл расстояния (метрики), между векторами. Поэтому сходимость бесконечных последовательностей векторов $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots$ или бесконечных сумм определяется как и для вещественных чисел (стр. 331), но вместо модуля используется норма.

Обратим внимание на упоминание “полноты” в определении гильбертового пространства. Напомним (стр. 343), что в полном пространстве любая фундаментальная последовательность сходится к некоторому элементу этого же пространства. Если пространство не полное, но в нем введено скалярное произведение, то говорят о *предгильбертовом пространстве*. Добавление в него всех пределов фундаментальных последовательностей пополняет такое пространство (делает его полным).

Обсуждая свойства векторного пространства (стр. 351) мы связали норму вектора и скалярное произведение при помощи соотношения: $\|\mathbf{a}\|^2 = \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle$. Вообще говоря, можно рассматривать пространства на которых введена норма вектора, но не определено скалярное произведение. Такие нормированные, полные, линейные пространства называются *банаховыми пространствами*.

В квантовой теории скалярное произведение играет важную роль, поэтому основной математической структурой является гильбертово пространство и его некоторые расширения, допускающие векторы с бесконечной нормой.

• Примером гильбертового пространства является пространство l_2 , в котором вектор – это бесконечная последовательность комплексных чисел $\{\alpha_i\} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}$, но не любых, а таких, для которых *конечна сумма* (V.64). Сложение и умножение на число в l_2 являются замкнутыми (не выводят результат из векторного пространства). Действительно, в силу неравенства ($\lessdot H_{79}$)

$$|\alpha + \beta|^2 \leq 2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2, \quad (\text{V.65})$$

если последовательности $\{\alpha_i\}$ и $\{\beta_i\}$ удовлетворяют (V.64) то и $\{\alpha_i + \beta_i\}$ будет удовлетворять (V.64). Ортонормированным базисом в разложении (V.62) являются векторы:

$$\mathbf{e}_1 = \{1, 0, 0, 0, \dots\}, \quad \mathbf{e}_2 = \{0, 1, 0, 0, \dots\}, \quad \mathbf{e}_3 = \{0, 0, 1, 0, \dots\}, \dots$$

\triangleright Пространство l_2 полно (стр. 343). Действительно, рассмотрим последовательность $\mathbf{a}_n = \{\alpha_i^n\} = \{\alpha_1^n, \alpha_2^n, \dots\}$, где в скобках верхний индекс нумерует векторы, а нижний – их компоненты. Докажем, что, если $\{\alpha_i^n\}$ фундаментальна, т.е. для любого $\varepsilon > 0$ можно указать такое $N = N(\varepsilon)$, что:

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k^n - \alpha_k^m|^2 < \varepsilon, \quad \text{при } n, m > N, \quad (\text{V.66})$$

тогда существует вектор $\mathbf{a} = \{\alpha_i\}$, который: 1) является пределом последовательности $\{\alpha_i^n\}$ и 2) принадлежит этому же пространству:

$$1) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}\| = 0, \quad 2) \quad \|\mathbf{a}\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\alpha_i|^2 < \infty.$$

Из (V.66) следует, что для любого k справедливо $|\alpha_k^n - \alpha_k^m|^2 < \varepsilon$, поэтому для каждого числа существует при $m \rightarrow \infty$ предел $\lim \alpha_k^m = \alpha_k$ (критерий Коши). Возьмём в (V.66) M первых слагаемых, зафиксируем n и перейдём к пределу $m \rightarrow \infty$:

$$\sum_{k=1}^M |\alpha_k^n - \alpha_k|^2 < \varepsilon.$$

Это неравенство справедливо при любом конечном M , поэтому устремим $M \rightarrow \infty$. В результате имеем определение сходимости последовательности $\{\alpha_k^n\}$ к вектору $\{\alpha_k\}$, т.е. 1) справедливо. В силу неравенства (V.65) из сходимости по k сумм $|\alpha_k^n|^2$ и $|\alpha_k^n - \alpha_k|^2$, следует сходимость ряда $|\alpha_k|$, поэтому справедливо и 2).

V.8 Функциональные пространства

- Векторами могут быть самые разнообразные объекты. Например, комплекснозначные функции одной переменной ($f(x) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$) являются векторами, если операцию сложения $f(x) + g(x)$ и умножения на число $\alpha f(x)$ понимать “обычным” образом. Множество функций очень многочисленно. Рассмотрим сначала те из них, для которых на интервале $[a, b]$ существует и *конечен* интеграл:

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty. \quad (\text{V.67})$$

Будем считать его квадратом *нормы* функции (выступающей в роли вектора), а *скалярное произведение* определим следующим образом:

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx. \quad (\text{V.68})$$

Пространство квадратично интегрируемых функций обозначается следующим образом: $L_2[a, b]$. Например, в пространстве $L_2[0, 1]$ функции x , e^{ix} являются его векторами, а вот $1/x$ – нет. Заметим, что мы ограничиваем класс функций только условием (V.67) и они не обязаны быть дифференцируемыми и непрерывными. Интервал $[a, b]$ будем пока считать конечным, т.к. конечность (V.67) для $[-\infty, \infty]$ ещё сильнее сужает класс функций, принадлежащих к $L_2[a, b]$.

В $L_2[a, b]$ можно ввести бесконечное, но *счётное* (пронумерованное) множество линейно независимых ортонормированных функций:

$$\int_a^b \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) dx = \delta_{ij}, \quad (\text{V.69})$$

по которым любая функция раскладывается в ряд:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \varphi_k(x). \quad (\text{V.70})$$

Коэффициенты разложения α_k несложно получить ($\lessdot H_{80}$) при помощи условия ортогональности (V.69):

$$\alpha_k = \int_a^b f(x) \varphi_k^*(x) dx \quad (\text{V.71})$$

(заметим, что сейчас мы нумеруем базисные векторы с нуля, а не с 1).

▷ Квадрат нормы функции (V.67) выражается ($\leq H_{81}$) через коэффициенты разложения следующим образом:

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |\alpha_k|^2.$$

Норма будет конечна (определение пространства $L_2[a, b]$), если сходится ряд квадратов коэффициентов разложения α_k . Поэтому пространство $L_2[a, b]$ имеет такие же свойства, как и пространство l_2 суммируемых последовательностей чисел. Говорят, что они *изоморфны* т.е. их элементы (векторы) можно поставить во взаимно однозначное соответствие. Кроме этого они *изометричны*, т.е. имеют одинаковое значение норм для соответствующих друг другу векторов. Таким образом, пространство $L_2[a, b]$, как и l_2 , является *гильбертовым пространством*.

▷ Хотя коэффициенты α_k в (V.71) выражаются через $f(x)$, это ещё не означает, что любую функцию можно разложить в ряд (V.70). Например, это не следует из выражения (V.70) в котором мы ограничимся конечным числом слагаемых, но для которых, тем не менее, можно записать (V.71).

Ортогональная система функций $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots$ называется *полной*, если к ней нельзя добавить никакой функции, ортогональной к $\varphi_k(x)$ (полноту базиса, не следует путать с полнотой пространства, т.е. со сходимостью любой фундаментальной последовательности). Обозначим через $r_n(x)$ разность между $f(x)$ и первыми $n + 1$ членами суммы (V.70):

$$r_n(x) = f(x) - \sum_{k=0}^n \alpha_k \varphi_k(x),$$

где α_k определяются интегралами (V.71). Несложно проверить, что $r_n(x)$ ортогональна ко всем $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)$. Кроме этого ($\leq H_{82}$):

$$\|\mathbf{r}_n\|^2 = \|\mathbf{f}\|^2 - \sum_{k=0}^n |\alpha_k|^2.$$

Бесконечный ряд (V.70) сходится к $f(x)$ в *среднем* (по норме), когда при $n \rightarrow \infty$ выполняется $\|\mathbf{r}_n\| \rightarrow 0$. Если это происходит для любой функции, то базис является полным. Полноту бесконечного набора функций, претендующих на роль базиса, необходимо, вообще говоря, каждый раз доказывать. Сходимость в среднем (её называют также *среднеквадратичной сходимостью*) вообще говоря не гарантирует *помоющей сходимости*. Это означает, что в данной точке x_0 функция $f(x_0)$ может отличаться от значения суммы бесконечного ряда (V.70), но при этом среднеквадратичное отклонение нулевое ($\|\mathbf{r}_n\| \rightarrow 0$), т.к. эти точки не образуют непрерывной части функции и их вклад в интеграл нулевой.

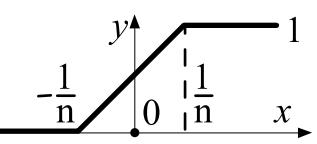
• Наложение различных ограничений на функции пространства $L_2[a, b]$ приводит к его подпространствам (подмножествам функций). Например, наиболее “комфортным” является множество дифференцируемых на $[a, b]$ функций. Более широкий класс образуют *непрерывные функции* ($|x|$ – непрерывна, но не дифференцируема при $x = 0$). Такое векторное пространство функций с нормой (V.67) обозначается как $C_2[a, b]$.

Примером интегрируемой, но разрывной функции является *θ -функция Хевисайда* (функция ступеньки):

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \bullet \frac{1}{2} \\ | \\ \text{---} \\ 0 \end{array} \quad \theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ 1/2 & \text{при } x = 0 \\ 1 & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (\text{V.72})$$

Такая функция не включается в подмножество $C_2[a, b]$ непрерывных функций, но принадлежит множеству $L_2[a, b]$ (квадратично интегрируемых функций).

Ограничение пространства $C_2[a, b]$ только непрерывными функциями делает его *неполным* (стр. 343), т.е. фундаментальная последовательность не имеет предела. Для доказательства этого введём последовательность векторов $a_1(x), a_2(x), \dots$ (непрерывных функций) следующего вида:



$$a_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < -1/n, \\ (1 + nx)/2 & \text{при } x \in [-1/n, 1/n], \\ 1 & \text{при } x > 1/n. \end{cases}$$

Эти векторы имеют конечную норму и образуют *фундаментальную последовательность*. Например, для интервала $[-1, 1]$ можно проверить, что при $n < m$

$$\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}_m\| = \int_{-1}^1 |a_n(x) - a_m(x)|^2 dx = \frac{(m-n)^2}{6m^2n} < \frac{1}{6n} = \varepsilon.$$

Поэтому для любого сколь угодно малого вещественного числа ε имеем такое целое число $N = [1/6\varepsilon]$, что “расстояние” (норма) между векторами $\mathbf{a}_n, \mathbf{a}_m$ меньше ε для всех $n, m > N$. Однако, эта последовательность при $n \rightarrow \infty$ стремится к функции Хевисайда $\theta(x)$, которая не является элементом пространства $C_2[a, b]$. Наличие такого предела интуитивно ясно. При $n \rightarrow \infty$ интервал на котором происходит переход функции $a_n(x)$ от 0 к 1 стремится к нулю. Строго же это можно доказать при помощи стандартного критерия $\|\mathbf{a}_n - \boldsymbol{\theta}\| < \varepsilon$, где $\boldsymbol{\theta}$ – это функция Хевисайда.

V.9 Функции от операторов

- Произведение операторов является хорошо определённой операцией. Пусть есть обычная функция $f(x)$, которая раскладывается в ряд Тейлора. Тогда, для оператора \hat{A} можно определить новый оператор:

$$f(\hat{A}) = f(0) + f'(0) \hat{A} + \frac{f''(0)}{2!} \hat{A}^2 + \dots \quad (\text{V.73})$$

При этом необходимо учитывать радиус сходимости рядов. Так, разложение для $(1 - x)^{-1}$ сходится только при $|x| < 1$. Поэтому разложение

$$(\hat{1} - \hat{A})^{-1} = 1 + \hat{A} + \hat{A}^2 + \hat{A}^3 + \dots \quad (\text{V.74})$$

будет сходиться, если все собственные значения оператора \hat{A} удовлетворяют условию $|a| < 1$. Это очевидно, для диагональной матрицы (к которой можно привести любую эрмитову матрицу). В этом случае \hat{A}^n будет иметь на диагонали собственные значения в n -й степени и их сумма в разложении будет сходиться, если каждое из собственных значений по модулю меньше единицы. Иногда, чтобы получить разложение, удобно сдвинуть аргумент функции на единичную матрицу:

$$\ln \hat{A} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} (\hat{A} - \hat{1})^k. \quad (\text{V.75})$$

Этот ряд сходится, если все собственные значения $|a - 1| < 1$.

При матричной записи операторов выполняется тождество:

$$\det e^{\hat{A}} = e^{\operatorname{Tr} \hat{A}}. \quad (\text{V.76})$$

Для его доказательства необходимо рассмотреть диагональную матрицу, к которой можно привести любую эрмитову матрицу преобразованием $\hat{A}' = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$ (стр. 370). Для такой матрицы:

$$\exp \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & \dots \\ & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1^\lambda & 0 & \dots \\ 0 & e_2^\lambda & \dots \\ & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Её определитель $\exp(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots)$, т.е. под экспонентой находится след диагональной матрицы. Так как при преобразовании $\hat{A}' = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$ определитель и след не меняются, это тождество будет справедливо и для недиагональных матриц.

▷ Ещё одно полезное тождество:

$$e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + \frac{1}{1!} [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \dots \quad (\text{V.77})$$

доказывается дифференцированием $\hat{U}(t) = e^{t\hat{B}} \hat{A} e^{-t\hat{B}}$ по t . Раскладывая $e^{t\hat{B}}$ в ряд, убеждаемся, что её производная по t равна

$$\frac{d(e^{t\hat{B}})}{dt} = \hat{B} e^{t\hat{B}} = e^{t\hat{B}} \hat{B}.$$

Заметим, что оператор \hat{B} коммутирует с $e^{t\hat{B}}$, поэтому его можно записать как слева, так и справа от экспоненты. Производная от произведения операторов получается также как и в случае обычных функций, однако надо следить за сохранением порядка операторов:

$$\frac{d(\hat{A}(t)\hat{B}(t))}{dt} = \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \hat{B}(t) + \hat{A}(t) \frac{d\hat{B}(t)}{dt}. \quad (\text{V.78})$$

Поэтому, беря производную от $\hat{U}(t)$ ($\Leftarrow \text{H}_{85}$), получаем (V.77).

▷ Приведенные выше бесконечные ряды для матриц возникают, вообще говоря, в бесконечно-мерном пространстве. Если же размерность векторного пространства \mathbb{V} конечна и равна $n = \dim \mathbb{V}$, то ряды по степеням \hat{A}^k всегда обрываются. Действительно, до сих пор мы рассматривали матрицы $n \times n$ как операторы в векторном пространстве состоящем из упорядоченных наборов n комплексных чисел (столбиков). Однако, сами матрицы образуют векторное пространство, относительно сложения матриц и умножения их на число (стр. 358). Так как каждая матрица задаётся n^2 числами, размерность такого векторного пространства, состоящего из матриц равна n^2 . Например, для случая $n = 2$, любая матрица может быть разложена по следующему базису:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Нулевой элемент $\mathbf{0}$ – это матрица состоящая из нулей. Ещё один важный базис в 2-мерном матричном пространстве – это *матрицы Паули*:

$$a_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + a_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 - ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix}.$$

Четыре коэффициента разложения a_0, a_1, a_2, a_3 (координаты матрицы в данном базисе) несложно связать с матричными элементами произвольной матрицы 2×2 . Если размерность пространства равна n^2 , то $n^2 + 1$ матриц являются линейно зависимыми.

- В качестве операторов в векторном пространстве функций могут, например, выступать производные, функции координат или интегралы:

$$\hat{D}f(x) = \frac{df}{dx}, \quad \hat{X}f(x) = x f(x), \quad \hat{L}f(x) = \int_a^b L(x, y) f(y) dy,$$

где функция $L(x, y)$ называется *ядром* интегрального оператора. Ещё один пример – оператор *инверсии*, меняющий знак аргумента у функции:

$$\hat{P}f(x) = f(-x).$$

Все эти *линейные* операторы, действуя на функции $f(x)$, снова дают некоторую функцию.

▷ Если пространство функций ограничено, например, классом $L_2[a, b]$, то действие не любого оператора обладает замкнутостью, т.е. приводит к функции из этого же пространства. Например, функция \sqrt{x} квадратично интегрируема на интервале $[0, 1]$. Однако, действие на неё оператора второй производной d^2/dx^2 приводит к функции $-x^{-3/2}/4$, норма которой уже бесконечна. Бесконечна также норма функции Дирака $\delta(x)$. Поэтому в квантовой теории класс функций $L_2[a, b]$ оказывается слишком узким и расширяется на функции с бесконечной нормой.

▷ Эрмитово сопряжение операторов в функциональном пространстве, определяется как и в любом векторном пространстве: $\langle \hat{A}^+ \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle = \langle \mathbf{f}, \hat{A}\mathbf{g} \rangle$. Найдём, например, эрмитово сопряжение интегрального оператора:

$$\langle \mathbf{f}, \hat{L}\mathbf{g} \rangle = \int_a^b f^*(x) L(x, y) g(y) dy dx = \int_a^b (L^*(x, y) f(x))^* g(y) dx dy,$$

поэтому

$$L^+(x, y) = L^*(y, x).$$

Оператор инверсии \hat{P} и $\hat{X} = x$ и являются эрмитовыми.

▷ Рассмотрим на всей действительной оси класс функций достаточно быстро убывающих на бесконечности. Чтобы оператор производной был эрмитовым, его необходимо умножить на мнимую единицу: $\hat{K} = -\imath d/dx$. Действительно, интегрируя по частям, имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left(-\imath \frac{d}{dx} \right) g(x) dx = -\imath f^*(x) g(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\imath \frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) dx.$$

Так как функции на бесконечности убывают, первое слагаемое в правой части равно нулю и мы получаем $\hat{K}^+ = \hat{K}$.

▷ Для вычисления коммутатора двух операторов необходимо справа от него поставить произвольную функцию:

$$\left[\frac{d}{dx}, x \right] f(x) = \frac{d}{dx}(x f(x)) - x \frac{df(x)}{dx} = f(x),$$

затем опуская её, записать результат:

$$\left[\frac{d}{dx}, x \right] = 1.$$

Заметим, что когда в качестве оператора выступает функция (как выше x) шляпка над ним, часто не ставится, однако эту операторную функцию стоит отличать от функций $f(x)$, $g(x)$, ..., которые в функциональном пространстве являются векторами.

Аналогично стоит проверить, что если $V(x)$ – оператор со свойством $V(-x) = V(x)$ (чётная функция), то оператор инверсии с ним будет коммутировать: $[\hat{P}, V(x)] = 0$. Если же $V(x)$ не обладает свойством чётности, то он не будет коммутировать с \hat{P} .

▷ Операторы в функциональном пространстве могут иметь как дискретный, так и непрерывный спектр. Например, оператор инверсии \hat{P} имеет два собственных значения ± 1 (см. стр. 46). Его собственными функциями будут все чётные функции $f_e(-x) = f_e(x)$ для $P = 1$ и все нечётные $f_o(-x) = -f_o(x)$ для $P = -1$. В этом случае мы имеем бесконечное вырождение. Так как произведение $f_e^*(x)f_o(x)$ является нечётной функцией, то скалярное произведение (V.68) равно нулю, т.е. собственные функции \hat{P} ортогональны. Любой вектор (функцию) всегда можно представить в виде суммы чётной и нечётной функций, т.е. разложить по базису собственных функций \hat{P} :

$$f(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} + \frac{f(x) - f(-x)}{2}.$$

Первый член является чётной функцией и принадлежит к собственным функциям $f_e(x)$, а второй – это нечётная функция $f_o(x)$.

▷ Функции от операторов в функциональном пространстве определяются, как обычно, при помощи рядов. Пусть, например, a – действительное число. Найдём действие на $f(x)$ следующего оператора:

$$\exp\left(a \frac{d}{dx}\right) f(x) = f(x) + a \frac{df(x)}{dx} + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \dots = f(x + a),$$

где в последнем равенстве учтено разложение в ряд Тейлора бесконечно дифференцируемой функции $f(x)$. Такой оператор называют *оператором трансляции* на число a .

Интегралы

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

I.1 Теорема Коши

- В 1748 Леонард Эйлер опубликовал замечательную формулу:

$$e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi, \quad (\text{I.1})$$

которая заменяет собой всю тригонометрию, позволяя легко вывести любое соотношение с \sin и \cos . Например, при возведении формулы Эйлера в n -ю степень получается *формула Муавра*:

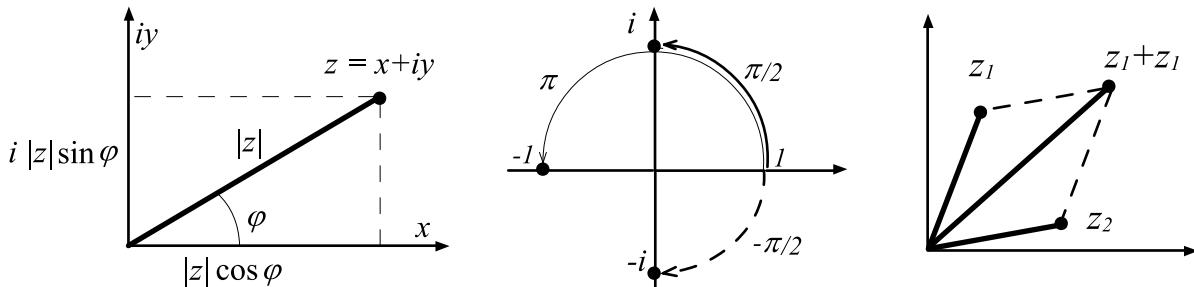
$$\cos(n\phi) + i \sin(n\phi) = (\cos \phi + i \sin \phi)^n,$$

дающая тригонометрические функции кратных углов. Доказать (I.1) можно, например, раскладывая левую и правую часть в ряд Тейлора.

- ▷ Произвольное комплексное число:

$$z = x + iy = |z| e^{i\phi} = |z| (\cos \phi + i \sin \phi)$$

определяется действительной x и мнимой y частями или модулем $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$ и аргументом (углом) $\phi = \arctg(y/x)$. Рассмотрим декартову плоскость. По оси x отложим действительную часть, а по оси y - комплексную вместе с мнимой единицей. Тогда любое комплексное число представляет собой точку на этой плоскости, а действительная и мнимая части являются проекциями на координатные оси:



Мнимая единица имеет единичный модуль и аргумент, равный $\pi/2$, а аргумент “-1” равен π . Сложение двух комплексных чисел геометрически эквивалентно сложению векторов (выше третий рисунок). Для комплексных числа не определено упорядочивание $z_1 < z_2$ и т.п.

▷ Аргумент комплексного числа определён с точностью до целого числа полных оборотов. Это означает, что $|z| e^{i\phi}$ и $|z| e^{i(\phi+2\pi k)}$ – одно и тоже число ($k = 1, 2, \dots$). Поэтому при извлечении корня n -той степени:

$$\sqrt[n]{z} = |z|^{1/n} \exp \left\{ i \frac{\phi + 2\pi k}{n} \right\}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad (\text{I.2})$$

при $k = 0, 1, \dots, n-1$ получаются различные комплексные числа. *Любое* алгебраическое уравнение n -й степени всегда имеет n решений, часть из которых может оказаться комплексными.

- Производная функции $f(z)$, зависящей от комплексного числа z , определяется аналогично производной по действительной переменной:

$$\frac{df(z)}{dz} \Big|_{z=z_0} = f'(z_0) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z_0 + \Delta z) - f(z_0)}{\Delta z}. \quad (\text{I.3})$$

Предел существует, если нет разницы от способа приближения z к z_0 . Это сильное требование накладывает ограничение на действительную и мнимую части функции. Так, если $z = x + iy$ и $f(z) = u(x, y) + i v(x, y)$, то должны выполняться *условия Коши-Римана*:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (\text{I.4})$$

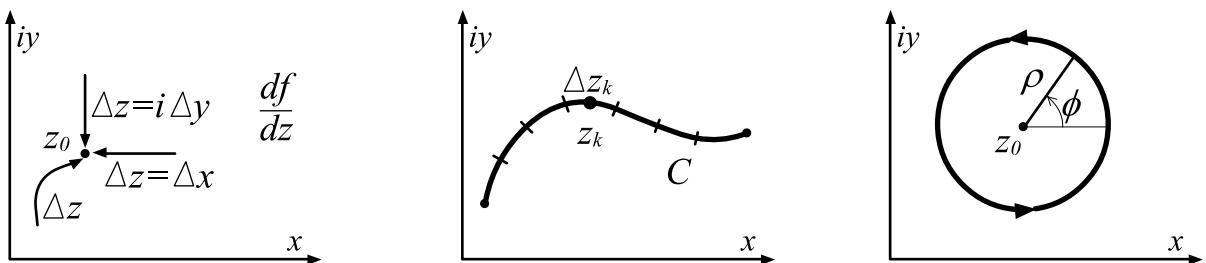
Они следуют из определения (I.3), если выбрать $\Delta z = \Delta x$ (стремимся к точке z_0 на комплексной плоскости в горизонтальном направлении) и $\Delta z = i\Delta y$ (стремимся сверху вниз), см. ниже первый рисунок.

▷ *Аналитической функцией* называется функция $f(z)$, дифференцируемая во всех точках некоторой области комплексной плоскости и имеющая в этой области непрерывную производную. Для аналитической функции должны выполняться условия Коши-Римана (I.4). Область аналитичности может совпадать со всей комплексной плоскостью или только с некоторой её частью (или частями). Если *комплексная функция* имеет производную первого порядка, то она имеет и производную любого порядка. Аналитическая функция может быть разложена в ряд Тейлора и наоборот, такая разложимость означает аналитичность.

▷ Интегрирование в комплексной плоскости осуществляется вдоль фиксированной кусочно-гладкой кривой C . Такую кривую можно задать в параметрическом виде $z(t) = x(t) + iy(t)$, где t – действительный параметр, “нумерующий” точки кривой. Для вычисления интеграла кривая разбивается на n частей $\Delta z_1, \dots, \Delta z_n$ и находится предел суммы:

$$\int_C f(z) dz = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n f(z_k) \Delta z_k,$$

где z_k – произвольная точка, принадлежащая k -тому сегменту кривой.



Кривая C по которой проводится интегрирование может иметь начало и конец, может уходить на бесконечность или быть замкнутой.

▷ В качестве примера рассмотрим интеграл от $f(z) = 1/(z - z_0)$, по замкнутой кривой, представляющей собой окружность радиуса ρ вокруг точки z_0 . Зададим её в параметрическом виде $z = z_0 + \rho e^{i\phi}$ с $0 \leq \phi \leq 2\pi$:

$$\oint_C \frac{dz}{z - z_0} = \int_0^{2\pi} \frac{i\rho e^{i\varphi} d\phi}{\rho e^{i\varphi}} = i \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi i, \quad (\text{I.5})$$

где учтено, что $dz = i\rho e^{i\varphi} d\phi$ при $\rho = \text{const}$ (см. третий рисунок на предыдущей странице). Интеграл не зависит ни от радиуса окружности ρ , ни от положения точки z_0 . Кроме этого, при выбранной параметризации кривой, её обход проводится *против часовой стрелки*. Функция $1/(z - z_0)$ не является аналитической в точке $z = z_0$. Однако, так как контур через эту точку не проходит, интеграл по нему хорошо определён.

▷ Рассмотрим функцию $f(z)$, являющуюся аналитической в некоторой односвязной (без дырок) области D . Интеграл от такой функции по любому замкнутому контуру C , лежащему в D равен нулю:

$$\oint_C f(z) dz = 0. \quad (\text{I.6})$$

Это исключительно важное утверждение называется *теоремой Коши*. Она непосредственно следует из условий Коши-Римана (I.4). Действительно, записывая $f(z) = u(x, y) + i v(x, y)$ и $dz = dx + i dy$ имеем:

$$\oint_C f(z) dz = \oint_C (u dx - v dy) + i \oint_C (v dx + u dy). \quad (\text{I.7})$$

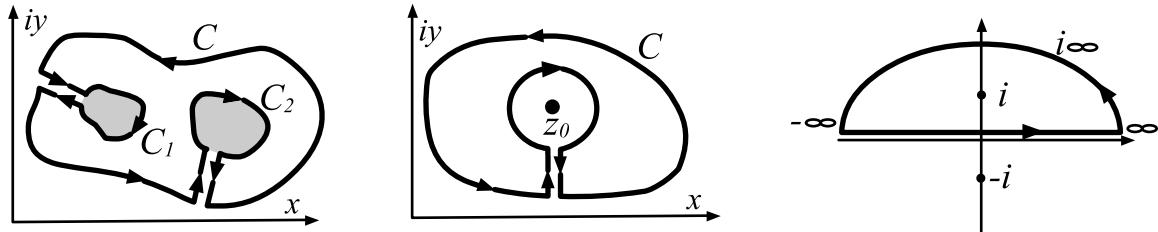
Интегралы в правой части можно рассматривать как обычные контурные интегралы в плоскости (x, y) по замкнутой кривой C . Для таких интегралов справедлива теорема Стокса, позволяющая перейти от интеграла по замкнутому контуру C к интегралу по площади S , который этот окружает контур:

$$\oint_C (F_x dx + F_y dy) = \oint_C \mathbf{F} d\mathbf{l} = \int_S [\nabla \times \mathbf{F}] d\mathbf{S} = \int_S \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) dx dy.$$

Переходя в (I.7) к поверхностным интегралам и учитывая условия Коши-Римана (I.4), несложно получить ноль.

Из теоремы Коши следует, что интеграл по незамкнутому контуру зависит только от положения начальной и конечной точки, а сам контур можно, без изменения значения интеграла, произвольным образом деформировать (в области аналитичности функции).

▷ Теорему Коши легко обобщить на многосвязную область. Пусть внутри контура C функция $f(z)$ аналитична везде, кроме нескольких областей (на первом рисунке ниже они заштрихованы). Тогда можно эти области неаналитичности окружить контурами C_1, C_2 и соединить их с основным контуром:



Интегралы по бесконечно близким сегментам кривой, соединяющей C и C_i равны нулю (интегрирование идёт во встречных направлениях: на одной $\Delta z > 0$, а на соседней $\Delta z < 0$). Поэтому интеграл по контуру C , плюс интегралы по C_1 и C_2 по теореме Коши, будет равен нулю (интегрирование по C ведётся против часовой стрелки, а по C_i – против).

▷ Аналогичным образом можно вычислить интеграл от произвольной аналитической функции $f(z)$, делённой на $z - z_0$, по произвольному контуру C , который окружает точку z_0 :

$$\oint_C \frac{f(z) dz}{z - z_0} = 2\pi i f(z_0). \quad (\text{I.8})$$

Действительно, окружим $z = z_0$ окружностью малого радиуса $\rho \rightarrow 0$ (выше второй рисунок). Аналитическая функция $f(z)$ в окрестности $z = z_0$ равна $f(z_0)$ и может быть вынесена за интеграл, после чего используется соотношение (I.5). Дифференцируя (I.8) n раз по z_0 несложно получить:

$$\oint_C \frac{f(z) dz}{(z - z_0)^{n+1}} = \frac{2\pi i}{n!} \frac{d^n f(z_0)}{dz^n}. \quad (\text{I.9})$$

▷ Если функция внутри замкнутого контура C (обход против часовой стрелки) содержит несколько полюсов z_i , разной степени то интеграл от неё равен сумме вычетов:

$$\oint_C F(z) dz = 2\pi i \sum_i \operatorname{res} F(z_i), \quad (\text{I.10})$$

где для полюса $(n + 1)$ -й степени вычет равен

$$F(z) = \frac{f(z)}{(z - z_i)^{n+1}}, \quad \operatorname{res} F(z_i) = \frac{1}{n!} \frac{d^n f(z_i)}{dz^n}$$

(предполагается, что функция $f(z)$ в окрестности z_i аналитична).

I.2 Многозначные функции

- Функции комплексной переменной $f(z)$ могут быть неоднозначными, т.е. одному и тому же значению z соответствует несколько (иногда бесконечно много) различных значений f . Это новый тип неоднозначности по сравнению с “простыми” неоднозначностями действительных функций типа $\arcsin(x)$.

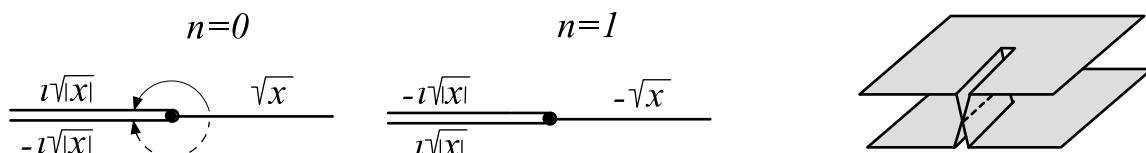
Рассмотрим в качестве примера функцию $\xi = \sqrt{z}$, обратную к $z = \xi^2$. Пусть $z = r e^{i\phi}$, где $r > 0$. Изменение угла на 2π : $\phi \mapsto \phi + 2\pi$ возвращает нас к той же точке комплексной плоскости. Однако, значение функции \sqrt{z} там уже другое ($e^{i\pi} = -1$):

$$\sqrt{z} = \sqrt{r} e^{i\frac{\phi}{2}} \quad \mapsto \quad \sqrt{z} = \sqrt{r} e^{i\frac{\phi}{2} + i\pi} = -\sqrt{r} e^{i\frac{\phi}{2}}$$

Делая ещё один оборот, возвращаемся к исходному значению. Таким образом, это двузначная функция. Аналогичные рассуждения показывают, что функция $z^{1/n}$ при целом n является n -значной функцией, см. (I.2).

Чтобы придать описанию многозначных функций наглядности, используют *поверхность Римана*. Эта поверхность является совокупностью комплексных плоскостей, называемых *листами*. На каждом листе задаётся своё однозначное множество значений функции. Переход с одного листа на другой, даёт новую *ветвь* многозначной функции (новые её значения). Для непрерывности таких переходов, листы разрезаются вдоль некоторых линий и соединяются друг с другом этими разрезами. Разрезы делают так, чтобы любые перемещения по листу, при которых не происходит пересечения разреза, не покидали данного листа (не приводили к многозначности).

Например, для описания функции $\sqrt{z} = \sqrt{r} e^{i\phi/2}$, возьмём две комплексные плоскости и разрежем их вдоль действительной полуоси $x < 0$:



Пусть на первом листе ($n = 0$) вдоль действительной полуоси $x > 0$ функция равна $\sqrt{r} \equiv \sqrt{|z|} = \sqrt{x}$. Поворачиваясь на угол $\phi = \pi$ на *верхнем* берегу разреза получаем значение функции $i\sqrt{|x|}$. Чтобы получить значение функции на нижнем берегу разреза *этого же листа*, необходимо положить $\phi = -\pi$ (чтобы не пересечь разрез, подходим к нему снизу). В результате получаем значение $-i\sqrt{|x|}$. Аналогичным образом находится значение функции \sqrt{x} в любой точке первого листа.

Будем считать, что при пересечении разреза первого листа сверху, мы переходим на нижний берег второго листа ($n = 1$). На нём значение функции будет таким же как и при “выходе” с первого листа. Поворот на угол 2π (от действительной оси x первого листа) соответствует снова действительной оси, но уже второго листа. Функция на ней равна $\sqrt{r} e^{i2\pi/2} = -\sqrt{|z|}$. Наконец, поворот на 3π даёт точки на верхнем берегу второго листа. Дальнейшее увеличение угла возвращает на первый лист со стороны его нижнего разреза. Для действительного $x > 0$ на первом листе справедливо правило вычисления корня из отрицательных чисел:

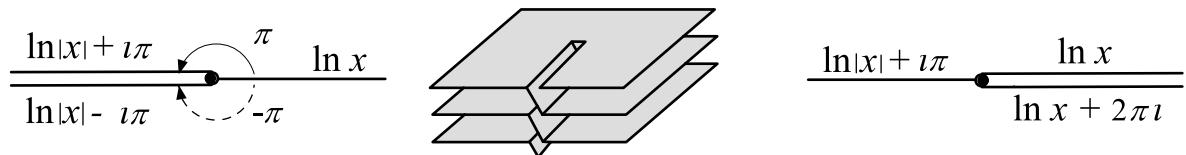
$$\sqrt{-x \pm i\epsilon} = \pm i\sqrt{x}, \quad (\text{I.11})$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ – бесконечно малое положительное число, символизирующее верхний ($i\epsilon$) и нижний ($-i\epsilon$) берега разреза.

Ещё один пример многозначной функции – это *логарифм* $\xi = \ln z$ – функция, обратная к $z = e^\xi$. Записывая $z = |z| e^{i(\phi+2\pi n)}$, $\phi = [0...2\pi]$ имеем бесконечное число *ветвей* функции:

$$\ln z = \ln |z| + i(\phi + 2\pi n), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Так как на положительной действительной полуоси логарифм $\ln x$ хорошо определён, удобно провести разрез вдоль отрицательной части оси $x < 0$:



На нижней части разреза $(n + 1)$ -я ветвь логарифма принимает то же значение, что и n -я ветвь на верхней стороне и поверхность Римана похожа на бесконечный винт.

Главным значением логарифма называют его значение на первом листе (где он равен $\ln x$ на действительной полуоси $x > 0$). На этом листе для действительного $x > 0$ и $\epsilon \rightarrow +0$:

$$\ln(-x \pm i\epsilon) = \ln(x) \pm i\pi \quad (\text{I.12})$$

При описании многозначной функции $\ln z$, можно сделать разрез и вдоль положительной полуоси $x > 0$ (выше третий рисунок). В этом случае на первом листе на верхнем берегу разреза ($x > 0$) можно положить $\ln(x+i\epsilon) = \ln(x)$. Тогда на нижнем берегу: $\ln(x-i\epsilon) = \ln(x)+2\pi i$, а на действительной отрицательной полуоси $x < 0$: $\ln(-|x|) = \ln|x| + i\pi$.

- Рассмотрим ещё один пример многозначной функции:

$$f(z) = \sqrt{z^2 - 1} = \sqrt{(z-1)(z+1)}. \quad (\text{I.13})$$

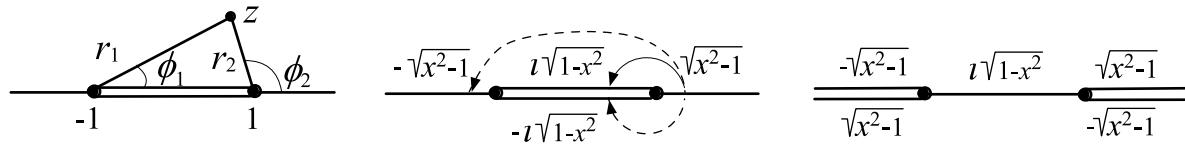
Она имеет 2 особые точки $z = \pm 1$, в которых выражение под корнем меняет свой знак. Поэтому параметризацию Эйлера $z = re^{i\phi}$ удобно изменить следующим образом:

$$z = -1 + r_1 e^{i\phi_1} = 1 + r_2 e^{i\phi_2}$$

(это две эквивалентные “нумерации” комплексного числа при помощи пары действительных чисел (r_1, ϕ_1) , либо (r_2, ϕ_2) , где $r_i > 0$). Функцию (I.13) теперь можно записать следующим образом:

$$f(z) = \sqrt{r_1 r_2} \exp\left[i\frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right]. \quad (\text{I.14})$$

Проведём разрез между особыми точками $[-1, 1]$. Пусть на действительной оси при $x > 1$ функция равна $\sqrt{x^2 - 1}$. Будем, отталкиваясь от этой линии, вычислять значения функции на всей комплексной плоскости, двигаясь так, чтобы *не пересечь* разрез (всё время остаёмся на первом листе римановой поверхности).



При движении от $x > 1$ к $-1 < x < 1$ *сверху* (тонкая линия со стрелкой на втором рисунке) угол ϕ_1 возвращается к нулевому значению, а ϕ_2 становится равными π . Поэтому на верхнем берегу разреза ($y = +0$) функция получает фазовый множитель $e^{i(0+\pi)/2} = i$. Аналогично, при движении снизу к нижнему берегу разреза ($y = -0$), получаются углы $\phi_1 = 0$ и $\phi_2 = -\pi$, поэтому фазовый множитель равен $e^{i(0-\pi)/2} = -i$. Наконец, на действительную часть оси $x < -1$ можно попасть, например, сверху, обойдя разрез. При этом $\phi_1 = \phi_2 = \pi$, поэтому $e^{i(\pi+\pi)/2} = -1$.

Пересекая разрез, мы попадаем на второй лист римановой поверхности. Например, обойдя точку ветвления $z = 1$ через разрез и вернувшись на действительную полуось $z > 1$ получим $\phi_1 = 0, \phi_2 = 2\pi$, поэтому на втором листе функция имеет уже множитель -1 . Если бы такой обход был сделан вокруг обоих точек ветвления (разрез не пересекается и мы остаёмся на первом листе), то $\phi_1 = \phi_2 = 2\pi$ и значение функции не меняется. Стоит также поверить, что функция двузначна и для её описания достаточно двух листов. Функцию (I.13) можно также определить и при помощи разрезов, нарисованных на третьем рисунке выше.

• Рассмотренные выше особые точки функций \sqrt{z} , $\ln z$, $\sqrt{z^2 - 1}$ являются точками *ветвления*. Такие точки всегда возникают парами. Разрез является линией, соединяющей пары точек ветвления. Так, для функции \sqrt{z} , кроме $z = 0$, существует также ветвление в *бесконечно удалённой точке*: если $z = 1/\xi$, то $\sqrt{z} = 1/\sqrt{\xi}$ и $\xi = 0$ – точка ветвления $\sqrt{\xi}$. Аналогичную точку ветвления содержит логарифм. У функции $\sqrt{z^2 - 1}$, бесконечно удалённая точка не является точкой ветвления, что позволяет сделать разрез конечным, а его обход не меняет значения функции.

В общем случае принята следующая классификация особых точек функции (точек в которых аналитичность нарушается). Пусть z_0 некоторая точка комплексной плоскости к которой стремится z . Эта точка будет:

- ▷ *устранимой* особой точкой, если есть конечный предел: $\sin(z)/z$;
- ▷ *полюсом*, если предел существует, но бесконечен: $1/z$, $\sin(z)/z^2$;
- ▷ *существенно* особой точкой, если предела нет: \sqrt{z} , $\exp(1/z)$.

Предел не должен зависеть от способа стремления к z_0 и в отличии от функции действительной переменной возможностей (путей) для $z \rightarrow z_0$ существенно больше.

Рядом Лорана в окрестности $|z - z_0| < r$ некоторой точки z_0 называется сумма (*r – радиус сходимости*):

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (z - z_0)^n = \dots + \frac{c_{-2}}{(z - z_0)^2} + \frac{c_{-1}}{z - z_0} + c_0 + c_1 (z - z_0) + \dots$$

Слагаемые с коэффициентами c_{-1} , c_{-2} , ... называются *главной частью*. Чтобы особая точка была устранимой, необходимо и достаточно, чтобы в ряде Лорана отсутствовала главная часть (т.е. это ряд Тейлора). Особая точка является полюсом, если главная часть содержит конечное число слагаемых. Наконец, для функций с бесконечным числом слагаемых в главной части, точка z_0 является существенно особой. Например:

$$\exp \frac{1}{z} = 1 + \frac{z^{-1}}{1} + \frac{z^{-2}}{2!} + \frac{z^{-3}}{3!} + \dots$$

имеет при $z = 0$ существенно особую точку. На языке предела это означает, что при движении вдоль действительной оси слева $x \rightarrow -0$ результат равен $\exp(-1/0) = 0$, тогда как при движении справа: $\exp(1/0) = \infty$, т.е. предел отсутствует. В случае функции $\exp(1/z^2)$ результат стремления вдоль действительной оси слева и справа совпадает, однако вдоль комплексной оси от него отличается, поэтому $z = 0$ также существенно особая точка (что видно и при разложении в ряд Лорана).

I.3 Примеры вычисления интегралов

- При $\alpha^2 > 1$ справедлив следующий интеграл

$$I_0 = \int_0^\pi \frac{d\theta}{\alpha - \cos \theta} = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\alpha - \cos \theta} = \frac{\pi}{\sqrt{\alpha^2 - 1}}. \quad (\text{I.15})$$

Сделаем подстановку $z = e^{i\theta}$. При изменении θ от 0 до 2π комплексное число z описывает единичную окружность. Выражая косинус по формуле Эйлера $\cos \theta = (z + 1/z)/2$, получаем:

$$I = \oint_{|z|=1} \frac{i dz}{z^2 - 2\alpha z + 1} = \oint_{|z|=1} \frac{i dz}{(z - z_0)(z - 1/z_0)} = 2\pi i \frac{i}{z_0 - 1/z_0},$$

где $z_0 = \alpha - \sqrt{\alpha^2 - 1}$ и в последнем равенстве учтено, что при $\alpha > 1$ внутрь окружности попадает один полюс в точке $z = z_0$.

Когда $1 > \alpha^2$, то $z_0 = \alpha \pm i\sqrt{1 - \alpha^2}$. В этом случае $|z_0| = 1$ и полюс попадает на контур интегрирования. Это соответствует полюсу в исходном интеграле, при $\cos \theta = \alpha$. Для доопределения правила обхода полюса, сделаем комплексный сдвиг $\alpha \mapsto \alpha \pm ie$. Тогда при извлечении корня в (I.15) от отрицательного числа необходимо пользоваться правилом (I.11):

$$\sqrt{(\alpha + ie)^2 - 1} = \sqrt{-(1 - \alpha^2) + 2i\alpha e} = \text{sign}(\alpha) i\sqrt{1 - \alpha^2}.$$

Также вычисляется ещё один интеграл, возникающий при интегрировании по углам 4-мерной сферической системы координат:

$$I_2 = \int_0^\pi \frac{\sin^2 \theta d\theta}{\alpha - \cos \theta} = \pi (\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 1}). \quad (\text{I.16})$$

В этом случае внутри окружности оказывается два полюса: $z = 0$ (полюс второго порядка) и $z = z_0 = \alpha - \sqrt{\alpha^2 - 1}$ (первый порядок):

$$I_2 = -\frac{i}{4} \oint_{|z|=1} \frac{(z^2 - 1)^2 dz}{z^2(z - z_0)(z - 1/z_0)}.$$

Поэтому интеграл равен сумме двух вычетов:

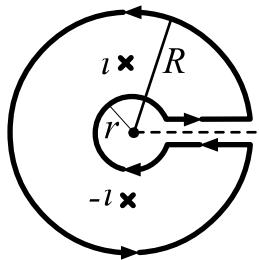
$$I_2 = \frac{2\pi}{4} \frac{(z_0^2 - 1)^2}{z_0^2(z_0 - 1/z_0)} + \frac{2\pi}{4} \left[\frac{(z^2 - 1)^2}{(z - z_0)(z - 1/z_0)} \right]'_{z=0}.$$

Аналогичным образом можно находить интегралы от тригонометрических функций по диапазону $[0..2\pi]$ или $[0..2\pi]$

- В качестве примера вычисления интеграла от многозначной функции, докажем, что при $0 < p < 2$:

$$\int_0^\infty \frac{x^{p-1}}{1+x^2} dx = \frac{\pi/2}{\sin(\pi p/2)}. \quad (\text{I.17})$$

Найдём интеграл по контуру, изображённому ниже на рисунке ($z = x + iy$):



$$I = \int_C \frac{z^{p-1}}{1+z^2} dz.$$

При не целых p функция z^p имеет точку ветвления $z = 0$. Поэтому на комплексной плоскости сделан разрез вдоль $x > 0$ (пунктирная линия). Пусть на верхнем берегу $z = x$, тогда на нижнем берегу $z = e^{2\pi i} x$ (обходим разрез против часовой стрелки: $\phi = 0 \mapsto \phi = 2\pi$). Внутри контура есть две особые точки $z_1 = i = e^{i\pi/2}$ и $z_2 = -i = e^{3i\pi/2}$ (для второй точки необходимо поворачиваться от первой так, чтобы не пересечь разрез). В результате, по теореме Коши, имеем:

$$I = \frac{1}{2i} \int_C \left[\frac{z^{p-1}}{z - z_1} - \frac{z^{p-1}}{z - z_2} \right] dz = \frac{2\pi i}{2i} \left[e^{i\pi(p-1)/2} - e^{3i\pi(p-1)/2} \right],$$

или

$$= \frac{\pi}{i} \left[e^{i\pi p/2} - e^{3i\pi p/2} \right] = \frac{2\pi}{i} e^{i\pi p} \cos(\pi p/2).$$

Вычислим этот же интеграл, разбив контур C на 4 части. Если $p > 0$, интегрирование по малой окружности радиуса r даёт ноль ($z = r e^{i\phi}$):

$$\int_{2\pi}^0 \frac{r^{p-1} e^{i\phi(p-1)}}{1+r^2 e^{2i\phi}} i r e^{i\phi} d\phi \rightarrow 0, \quad \text{при } r \rightarrow 0.$$

Аналогично, на большой окружности радиуса R , когда $R \rightarrow \infty$ интеграл равен нулю при $p < 2$. Остались интегралы вдоль верхнего и нижнего берегов разреза:

$$I = \int_0^\infty \frac{x^{p-1} dx}{1+x^2} + e^{2\pi i(p-1)} \int_\infty^0 \frac{x^{p-1} dx}{1+x^2} = -2i e^{i\pi p} \sin(\pi p) \int_0^\infty \frac{x^{p-1} dx}{1+x^2}.$$

Сравнение вычислений интеграла двумя способами, приводит к (I.17).

I.4 Гауссов интеграл

- Базовый гауссов интеграл имеет вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \quad (\text{I.18})$$

Это соотношение доказывается возведением в квадрат с последующим переходом к полярным координатам:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy = \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr \int_0^{2\pi} d\phi = \pi.$$

Выделяя полный квадрат и сдвигая переменную интегрирования, несложно вычислить также интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}. \quad (\text{I.19})$$

- Пусть $\mathbf{A} \equiv A_{ij}$ – симметричная ($A_{ij} = A_{ji}$), несингулярная ($\det \mathbf{A} \neq 0$), действительная матрица $n \times n$ с положительными собственными значениями, а $\mathbf{b} \equiv b_i$ – вектор с n компонентами. Тогда справедлив следующий n -кратный гауссовый интеграл:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}} d^n x = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} e^{\frac{1}{2}\mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}}. \quad (\text{I.20})$$

Действительно, всегда можно выбрать симметричную матрицу C_{ij} , такую, что $\mathbf{C} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} = \mathbf{1}$. Она строится при помощи собственных векторов и значений $\mathbf{A} \cdot \mathbf{u}^{(\alpha)} = a_\alpha \mathbf{u}^{(\alpha)}$ следующим образом: $C_{ij} = u_i^{(\alpha)} u_j^{(\alpha)} / \sqrt{a_\alpha}$ (по α сумма). В силу того, что $\mathbf{A} = \mathbf{C}^{-1} \mathbf{C}^{-1}$, имеем $\mathbf{C}^2 = \mathbf{A}^{-1}$. Сделаем замену переменных (по j сумма):

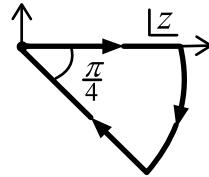
$$x_i = C_{ij} y_j, \quad d^n x = \det \left| \frac{\partial x_i}{\partial y_j} \right| d^n y = \det \mathbf{C} d^n y = \frac{d^n y}{\sqrt{\det \mathbf{A}}}.$$

Квадратичная форма $\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$ при такой замене переходит в \mathbf{y}^2 и интеграл разбивается на произведение n одномерных гауссовых интегралов (I.19) с одинаковыми $a = 1$ и различными b , равными $b_i C_{ik}$. Поэтому в результате интегрирования в показателе экспоненты будет стоять $b_i C_{ik} b_j C_{jk} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{C}^2 \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$, что и требовалось доказать.

Дифференцируя интеграл (I.19) по b или (I.20) по b_k , получаются гауссовые интегралы в которых экспонента умножается на полином x .

- Рассмотрим теперь гауссовый интеграл с мнимой единицей в показателе экспоненты:

$$\int_0^\infty e^{-iz^2} dz.$$



Он встречается в функциональных интегралах квантовой теории. Вычислим его в комплексной плоскости по замкнутому контуру, изображенному на рисунке. На бесконечно удалённом криволинейном участке контура $z = R e^{i\phi}$, поэтому показатель экспоненты $-iz^2 = -iR^2(\cos 2\phi + i \sin 2\phi)$. Если ϕ меняется от 0 до $-\pi/4$, значения $\sin 2\phi$ меньше нуля и при $R \rightarrow \infty$ подынтегральная функция на криволинейном участке равна нулю. Так как внутри контура интегрирования особых точек нет, по теореме Коши имеем:

$$\int_0^\infty e^{-iz^2} dz = \int_0^{\infty(1-i)/\sqrt{2}} e^{-iz^2} dz = \frac{1-i}{\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-\rho^2} d\rho = \frac{1-i}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (\text{I.21})$$

где в последнем интеграле сделана замена $z = \rho(1-i)/\sqrt{2}$, $-iz^2 = -\rho^2$. Число $(1-i)/\sqrt{2} = \sqrt{2}/(1+i)$ равно $1/\sqrt{i}$, где корень из мнимой единицы (двузначная функция!) равен его первому значению $\sqrt{i} = (1+i)/\sqrt{2}$:

$$\int_0^\infty e^{-iz^2} dz = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{i}}.$$

В более общем случае справедлив интеграл:

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{i}{2}az^2+bz} dz = \sqrt{\frac{2\pi}{ia}} e^{\frac{b^2}{2ia}}. \quad (\text{I.22})$$

Таким образом, при наличии мнимой единицы можно пользоваться формулой (I.19) заменяя $a \mapsto ia$, с оговоркой о значении корня из i .

Справедливы также значения интегралов:

$$\int_0^\infty \cos z^2 dz = \int_0^\infty \sin z^2 dz = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}, \quad (\text{I.23})$$

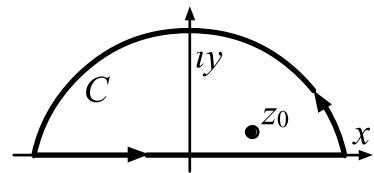
получающиеся при разложении в (I.21) экспоненты по формуле Эйлера.

I.5 Дисперсионные соотношения

Требование аналитичности накладывает на функцию очень сильные ограничения. Например, теорема Коши в форме (I.8) означает, что аналитическую функцию $f(z)$ можно восстановить по её значениям на любом замкнутом контуре, лежащем в области аналитичности. На этом факте построена техника разнообразных дисперсионных соотношений.

Рассмотрим в качестве примера функцию $f(z)$ о которой известно, что она убывает при $|z| \rightarrow \infty$ и не имеет особых точек в верхней полуплоскости. Тогда для $\operatorname{Im}(z_0) > 0$ по теореме Коши имеем:

$$2\pi i f(z_0) = \oint_C \frac{f(z) dz}{z - z_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x - z_0},$$



где отброшен интеграл на бесконечной полуокружности. Устремим z_0 сверху на действительную ось, т.е. $z_0 = x_0 + i\epsilon$. Тогда при $\epsilon \rightarrow 0$:

$$2\pi i f(x_0) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x - x_0} + i\pi f(x_0), \quad (\text{I.24})$$

где введен символ главного значения интеграла, как предела:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} F(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} + \int_{x_0 + \epsilon}^{\infty} \right] F(x) dx. \quad (\text{I.25})$$

Действительно, полюс $x = x_0$ приближается к контуру интегрирования (действительной оси) сверху. Поэтому, обходя его снизу по полуокружности радиуса ϵ , имеем три интеграла:

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} + \int_{\epsilon} + \int_{x_0 + \epsilon}^{\infty}$$

Первый и третий дают главное значение (I.25), а интеграл по полуокружности $z = x_0 + \epsilon e^{i\phi}$ от $\phi = -\pi$ до $\phi = 0$ при $\epsilon \rightarrow 0$ даёт $i\pi f(x_0)$. Иногда такой способ обхода полюса на контуре интегрирования записывают в виде соотношения:

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (\text{I.26})$$

где $\delta(x)$ – функция Дирака и это тождество необходимо понимать как обобщённую функцию, которая должна интегрироваться с некоторой гладкой функцией, что даёт (I.24).

Таким образом, из (I.24) следует, что:

$$f(x_0) = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x - x_0}. \quad (\text{I.27})$$

Беря действительную и мнимую части этого соотношения, получаем связь $\operatorname{Im} f(z)$ и $\operatorname{Re} f(z)$ при действительных $z = x$:

$$\operatorname{Re} f(x_0) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} f(x)}{x - x_0} dx, \quad \operatorname{Im} f(x_0) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} f(x)}{x - x_0} dx. \quad (\text{I.28})$$

Именно в такой форме эти формулы были получены в Крамерсом и Кронигом в теории дисперсии лучей, поэтому они получили название *дисперсионных соотношений*.

Пусть некоторая *линейная* система характеризуется функцией Грина $G(t)$, такой, что отклик $x(t)$ системы на воздействие $g(t)$ определяется интегралом

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(t - t') g(t') dt'.$$

Выполнение *принципа причинности* подразумевает, что $G(t) = 0$ при $t < 0$, т.е. на отклик $x(t)$ в момент времени t могут влиять только воздействия $g(t)$ в более ранние моменты времени $t' < t$. Это, в свою очередь, означает, что фурье-образ $G(\omega)$ функции Грина:

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-\omega t} d\omega$$

не имеет особых точек при $\operatorname{Im} \omega > 0$. Действительно, если это так, то замыкая контур в верхней полуплоскости ($e^{-i(\infty)t} = 0$ при $t < 0$), получаем, в силу теоремы Коши, $G(t) = 0$. Таким образом, функция $G(\omega)$ должна удовлетворять дисперсионным соотношениям (I.28).

Например, делая преобразование Фурье для гармонического осциллятора $\ddot{x} + \omega_0^2 x + 2\gamma\dot{x} = g(t)$, имеем:

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega}, \quad x(\omega) = G(\omega) g(\omega).$$

Функция $G(\omega)$ имеет два полюса $-i\gamma \pm \sqrt{\omega_0^2 - \gamma}$, лежащие при $\gamma > 0$ (затухание) в нижней полуплоскости. Стоит проверить, что $G(\omega)$ удовлетворяет дисперсионным соотношениям (I.28).

ФУНКЦИИ

Квантовая теория поля

Сергей С. Степанов

Эта книга находится в процессе создания. Её последняя версия и другие материалы находятся на сайте: <http://synset.com>. Замеченные ошибки и вопросы просьба присылать по адресу: steps137, затем собачка и gmail.com.

(c) 2015. Печать: 2 июля 2017 г.

F.1 Гамма-функция

▷ Гамма-функция определяется при помощи интеграла:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (\text{F.1})$$

Интегрирование его по частям при $z > 0$:

$$\Gamma(z+1) = - \int_0^\infty t^z de^{-t} = z \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$$

приводит к рекуррентному соотношению:

$$\Gamma(z+1) = z \Gamma(z). \quad (\text{F.2})$$

При $z = 1$ интеграл вычисляется элементарно, а при $z = 1/2$ он сводится заменой $t = x^2$ к гауссовому интегралу (I.18), стр. 394:

$$\Gamma(1) = 1, \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}. \quad (\text{F.3})$$

Произвольные целые и полуцелые значения $z > 0$ получаются при помощи (F.2). В частности $\Gamma(n+1) = n!$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

▷ Делая в (F.1) замену $t = x^2$, несложно получить:

$$\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta) = 4 \int_0^\infty x^{2\alpha-1} y^{2\beta-1} e^{-(x^2+y^2)} dx dy.$$

Перейдём к полярным координатам $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$ (интегрирование ведётся в первом квадранте $x, y > 0$, поэтому $\phi = 0 \dots \pi/2$):

$$\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta) = 4 \int_0^\infty r^{2(\alpha+\beta)-1} e^{-r^2} dr \int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha-1} \phi \sin^{2\beta-1} \phi d\phi.$$

Интегрируя по r и вводя бета-функцию

$$B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)}, \quad (\text{F.4})$$

можно записать значение интегралов, которые равны $B(\alpha, \beta)$:

$$= 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2\alpha-1} \phi \sin^{2\beta-1} \phi d\phi = 2 \int_0^\infty \frac{t^{2\beta-1} dt}{(1+t^2)^{\alpha+\beta}} = \int_0^1 x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1} dx,$$

где последовательно сделаны замены $\operatorname{tg} \phi = t$ и $x = 1/(1+t^2)$.

▷ Интеграл (F.1) в определении гамма-функции сходится при $z > 0$ или для комплексных чисел при $\operatorname{Re}(z) > 0$. Соотношение (F.2) позволяет аналитически продолжить гамма-функцию в область отрицательных значений z . Так как $\Gamma(z+2) = \Gamma(z+1+1) = (z+1)\Gamma(z+1) = z(z+1)\Gamma(z)$ и т.д., имеем:

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+n)}{z(z+1)\dots(z+n-1)}. \quad (\text{F.5})$$

Выберем для данного $z \leq 0$ достаточно большое натуральное число n , такое, что $z+n > 0$. Тогда числитель в (F.5) является конечным числом, а $\Gamma(z)$ имеет простые полюса при $z = 0, -1, -2, \dots$

▷ Найдём поведение гамма-функции в окрестности такого полюса. Запишем разложение в ряд Тейлора для $\Gamma(1+\epsilon)$, считая, что $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\Gamma(1+\epsilon) \approx 1 + \epsilon \Gamma'(1) = 1 - \gamma\epsilon, \quad (\text{F.6})$$

где введена *постоянная Эйлера-Маскерони*:

$$\gamma = -\Gamma'(1) = -\int_0^\infty \ln t e^{-t} dt = 0.5772156649\dots \quad (\text{F.7})$$

Полагая в (F.2) $z = \epsilon$, имеем:

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon} \approx \frac{1}{\epsilon} - \gamma. \quad (\text{F.8})$$

В общем случае положим в (F.5) $z = -n + \epsilon$:

$$\Gamma(-n + \epsilon) = \frac{\Gamma(\epsilon)}{(-1)^n n! (1 - \frac{\epsilon}{n}) \dots (1 - \frac{\epsilon}{1})} \approx \frac{\Gamma(\epsilon)}{(-1)^n n!} \left(1 + \frac{\epsilon}{n}\right) \dots \left(1 + \frac{\epsilon}{1}\right).$$

Перемножая скобки с точностью до первого порядка малости по ϵ и умножая в этом же приближении на (F.8), получаем:

$$\Gamma(-n + \epsilon) = \frac{(-1)^n}{n!} \left[\frac{1}{\epsilon} + \Psi_1(n+1) + O(\epsilon) \right], \quad (\text{F.9})$$

где введена *логарифмическая производная* гамма-функции:

$$\Psi_1(n+1) = 1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} - \gamma = \frac{\Gamma'(n+1)}{\Gamma(n+1)}. \quad (\text{F.10})$$

Последнее равенство проверяется взятием производной от логарифма (F.5) при $z = n+1$. Отметим также формулу для более длинного разложения: Первые полюсы (F.9) равны:

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} - \gamma + \frac{1}{2} \left(\gamma^2 + \frac{\pi^2}{6} \right) \epsilon - \frac{1}{6} \left(\gamma^3 + \frac{\gamma\pi^2}{2} + 2\zeta(3) \right) \epsilon^2 + \dots, \quad (\text{F.11})$$

где $\zeta(3) = 1.202\dots$ – дзета-функция Римана.

▷ При помощи гауссова интеграла и гамма-функции можно получить значение объёма и телесного угла в n -мерном евклидовом пространстве. В 2-мерном случае (плоскость) элемент объёма в полярных координатах равен $d^2x = rdr d\phi = rdr d\Omega$. Поэтому объём 2-мерной сферы радиуса R (круг) равен $V_2 = \pi R^2$, а полный телесный угол $\Omega_2 = 2\pi$. Аналогично для трёхмерного пространства $d^3x = r^2 dr d\Omega$, поэтому $V_3 = (4/3)\pi R^3$ и $\Omega_3 = 4\pi$. Чтобы обобщить эти соотношения на n -мерное пространство вычислим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x_1^2 + \dots + x_n^2)} d^n x = \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n-1} dr \int d\Omega = \pi^{n/2},$$

где последнее равенство получено возведением в n -ю степень (первый интеграл) равенства (I.18). Теперь несложно записать n -мерный телесный угол и объём n -мерной сферы радиуса R (в интеграле по r делаем замену $r^2 = t$):

$$\Omega_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}, \quad V_n = \frac{\Omega_n R^n}{n}. \quad (\text{F.12})$$

В частности для 4-мерного пространства $\Omega_4 = 2\pi^2$.

▷ Получим формулу для вычисления факториала $n! = \Gamma(n+1)$ при больших n . Запишем $t^n e^{-t} = e^{f(t)}$. Функция $f(t) = -t + n \ln t$ имеет максимум в $t_0 = n$. Разложим её в ряд около этой точки ($f'(n) = 0$):

$$f(t) = f(n) + f''(n)(t-n)^2/2 + \dots = -n + n \ln n - (t-n)^2/2n + \dots$$

Поэтому

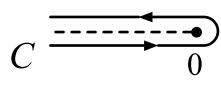
$$n! \approx e^{-n+n \ln n} \int_0^{\infty} e^{-\frac{(t-n)^2}{2n}} dt \approx e^{-n+n \ln n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(t-n)^2}{2n}} dt = e^{-n+n \ln n} \sqrt{2\pi n}.$$

Во втором интеграле нижний предел заменён на $-\infty$, так как при большом n максимум экспоненты уходит далеко вправо и становится всё более узким, поэтому интеграл от $-\infty$ до 0 практически равен нулю. В результате приходим к *формуле Стирлинга*:

$$\Gamma(n+1) = n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad (\text{F.13})$$

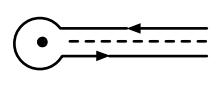
которая уже при $n = 10$ дает относительную ошибку, меньшую 1%.

- Гамма-функцию можно также определить при помощи интегрального представления:



$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^t t^{-z} dt, \quad (\text{F.14})$$

где контур C приходит из $-\infty$, огибает точку $t = 0$ и снова уходит на минус бесконечность. Вдоль отрицательной полуоси $t < 0$ сделан разрез (при нецелых z , $t = 0$ – точка ветвления). Для доказательства, сделаем замену $t = -t' = e^{i\pi} t'$, преобразовав (F.14) к:



$$\frac{2\pi i e^{i\phi z}}{\Gamma(1-z)} = \int_{C'} e^{-t'} t'^{z-1} dt'.$$

Разобьём контур на три участка (над разрезом, под ним и окружность радиуса r вокруг точки $t = 0$):

$$= \int_{-\infty}^0 e^{-x} x^{z-1} dx + e^{2\pi i z} \int_0^\infty e^{-x} x^{z-1} dx + \int_0^{2\pi} ir^z e^{-re^{i\phi}} e^{iz\phi} dx.$$

Учитываем, что на нижнем берегу разреза (второй интеграл) $t = e^{2\pi i} x$, а в третьем интеграле делаем замену $t = r e^{i\phi}$ (интеграл по окружности $r = \text{const}$). Несложно видеть, что при $r \rightarrow 0$ последний интеграл равен нулю. В результате получаем:

$$\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}. \quad (\text{F.15})$$

Это соотношение, в свою очередь, доказывается при помощи второго интегрального представления бета-функции (F.4) с $\alpha = z$ и $\beta = 1 - z$, с учётом интеграла (I.17), стр. 393.

При целых $z = n$ подынтегральная функция (F.14) имеет полюс n -того порядка с вычетом равным $1/(n-1)!$:

$$e^t t^{-n} = \frac{1}{t^n} + \dots + \frac{1}{(n-1)!} \frac{1}{t} + \dots,$$

что приводит к $\Gamma(n) = (n-1)!$.

Отметим также соотношение:

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = z e^{\gamma z} \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{k}\right) e^{-z/k}, \quad (\text{F.16})$$

где γ – постоянная Эйлера-Маскерони (F.7). При $z = 1$ оно даёт ещё один способ вычисления γ .

F.2 Вырожденная гипергеометрическая функция

▷ Вырожденная гипергеометрическая функция зависит от двух параметров α, γ и определяется при помощи ряда:

$$F_\gamma^\alpha(z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (\text{F.17})$$

Параметр γ не равен нулю или целому отрицательному числу и при любом α ряд сходится. Коэффициенты разложения $F = 1 + f_1 z + f_2 z^2 + \dots$ связаны рекуррентным соотношением:

$$f_{k+1} = \frac{\alpha+k}{(\gamma+k)(k+1)} f_k. \quad (\text{F.18})$$

При $\alpha = -n = 0, -1, -2, \dots$ ряды обрываются и получается конечный полином степени z^n .

▷ Несложно проверить, что $F_\gamma^\alpha(z)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$z f''(z) + (\gamma - z) f'(z) - \alpha f(z) = 0. \quad (\text{F.19})$$

Заменой $f(z) = z^{1-\gamma} g(z)$ оно приводится к аналогичному виду:

$$z g''(z) + (2 - \gamma - z) g'(z) - (\alpha - \gamma + 1) g(z) = 0.$$

Поэтому (F.19) имеет два линейно независимых решения и в общем случае можно записать:

$$f(z) = c_1 F_\gamma^\alpha(z) + c_2 z^{1-\gamma} F_{2-\gamma}^{\alpha-\gamma+1}(z),$$

где c_i – константы. Когда $\gamma > 1$ второе решение сингулярно при $z = 0$.

▷ Учитывая разложение в ряд Тейлора по z :

$$\frac{t^\alpha}{(t-z)^\alpha} = 1 + \frac{\alpha}{1!} \frac{z}{t} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!} \frac{z^2}{t^2} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha) k!} \frac{z^k}{t^k}$$

при помощи формулы (F.14), несложно получить интегральное представление:

$$F_\gamma^\alpha(z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_C e^t \frac{t^{\alpha-\gamma}}{(t-z)^\alpha} dt. \quad (\text{F.20})$$

При этом контур C должен обходить не только потенциальную точку ветвления $t = 0$, но и особенность $t = z$, чтобы имел смысл разложения в ряд Тейлора (ниже первый рисунок). От этих точек проводим разрезы в комплексной плоскости t .

▷ Получим при помощи (F.20) поведение вырожденной гипергеометрической функции при больших $|z|$. Деформируем контур C так, как изображено ниже на втором рисунке:



(пунктир соответствует соединению контуров C_1 и C_2 на бесконечности). В интеграле по части контура C_2 сделаем замену $t \mapsto t + z$, тем самым преобразуя его в интеграл по контуру C_1 :

$$F_\gamma^\alpha(z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_1} e^t t^{\alpha-\gamma} (t-z)^{-\alpha} dt + \frac{\Gamma(\gamma) e^z}{2\pi i} \int_{C_1} e^t (t+z)^{\alpha-\gamma} t^{-\alpha} dt.$$

Вынося в первом интеграле $(-z)^{-\alpha}$ и $z^{\alpha-\gamma}$ во втором, окончательно получаем:

$$F_\gamma^\alpha(z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} G_{\alpha-\gamma+1}^\alpha(-z) + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} z^{\alpha-\gamma} e^z G_{1-\alpha}^{\gamma-\alpha}(z), \quad (\text{F.21})$$

где введена функция:

$$G_\beta^\alpha(z) = \frac{\Gamma(1-\beta)}{2\pi i} \int_{C_1} \frac{t^{\beta-1} e^t}{(1+\frac{t}{z})^\alpha} dt, \quad (\text{F.22})$$

имеющая простое поведение при $|z| \rightarrow \infty$:

$$G_\beta^\alpha(z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{1!} z^{-1} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2!} z^{-2} + \dots, \quad (\text{F.23})$$

получаемое разложением подынтегральной функции в ряд по $1/z$.

▷ Отметим также формулу для отрицательных целых $\alpha = -n$:

$$F_\gamma^{-n}(z) = \frac{z^{1-\gamma} e^z}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+n-1)} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z} z^{\gamma+n-1} \right), \quad (\text{F.24})$$

которая, впрочем, менее удобна чем рекуррентное соотношение (F.18).

▷ Для вырожденной гипергеометрической функции справедливо тождество:

$$F_\gamma^\alpha(z) = e^z F_\gamma^{\gamma-\alpha}(-z), \quad (\text{F.25})$$

которое называется преобразованием Куммера. Его можно доказать подстановкой в уравнение (F.19).

Помощь

В этом приложении собраны решения задач, ссылки на которые в основном тексте книги обозначаются как ($\leftarrow H_{XX}$)

I Основные постулаты

- **H₁** *Тождества для коммутаторов* (стр. 18)

Учитывая определение коммутатора, распишем $[\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}]$:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}].$$

- **H₂** *Проекционные операторы* (стр. 21)

$$\hat{P}_a^2 = \sum_{i,j=1}^k |a, i\rangle\langle a, i| \cdot |a, j\rangle\langle a, j| = \sum_{i,j=1}^k \delta_{ij} |a, i\rangle\langle a, j| = \sum_{i=1}^k |a, i\rangle\langle a, i| = \hat{P}_a.$$

- **H₃** *Эрмитовость $\hat{A}(t)$* (стр. 28)

При эрмитовом сопряжении операторы произведения циклически меняются местами и над ними ставится значок сопряжения, а $(\hat{U}^+)^+ = \hat{U}$. Если $\hat{A}^+(0) = \hat{A}(0)$, тогда:

$$\hat{A}^+(t) = (U^+(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t))^+ = U^+(t) \hat{A}^+(0) (U^+(t))^+ = U^+(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t).$$

- **H₄** *Уравнение Ли для группы сдвигов* (стр. 29)

Производная $\hat{U}(t_1 + t_2) = \hat{U}(t_2) \hat{U}(t_1)$ по t_1 , при $t_1 = 0, t_2 = t$ равна:

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = U(t) \hat{I}, \quad \hat{I} = \left. \frac{d\hat{U}(t)}{dt} \right|_{t=0}.$$

Для унитарного оператора (сохраняющего норму векторов и эрмитовость операторов), имеем:

$$\frac{d(\hat{U}^+ \hat{U})}{dt} = \frac{d\hat{U}^+}{dt} \hat{U} + \hat{U}^+ \frac{d\hat{U}}{dt} = \frac{d\hat{1}}{dt} = \hat{0}.$$

Полагая $t = 0$ и учитывая производную \hat{U} и её эрмитово сопряжение, имеем: $\hat{I}^+ = -\hat{I}$. Такой оператор называется *антимермитовым*. Чтобы сделать его эрмитовым, необходимо ввести мнимую единицу: $\hat{I} = -i\hat{H}/\hbar$.

- **H₅** *Матрица произведения операторов* (стр. 35)

$$\sum_{a''} \langle a | \hat{A} | a'' \rangle \langle a'' | \hat{B} | a' \rangle = \sum_{a''} a'' \langle a | a'' \rangle \langle a'' | \hat{B} | a' \rangle = \sum_{a''} a'' \delta_{aa''} \langle a'' | \hat{B} | a' \rangle,$$

где учтено уравнение $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ и ортонормированность $\langle a | a'' \rangle = \delta_{aa''}$.

- **H₆** Примеры эрмитовых матриц 3×3 (стр. 35)

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & \imath & 0 \\ -\imath & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \imath \\ 0 & 0 & 1 \\ -\imath & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C} = \begin{pmatrix} 3 & \imath & 0 \\ -\imath & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Собственные значения \hat{A} равны $\{1, 2, 3\}$, \hat{B} : $\{0, \pm\sqrt{2}\}$ и \hat{C} : $\{2, 4, 4\}$. При этом $[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0$ и $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ (спектр \hat{C} вырожден). Нормированные, ортогональные собственные векторы матриц равны:

$$\begin{aligned} \Psi_{a=1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \imath \\ 0 \end{pmatrix}, & \Psi_{a=2} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \Psi_{a=3} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \imath \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Psi_{b=0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \imath \\ 0 \end{pmatrix}, & \Psi_{b=\sqrt{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \imath \\ 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, & \Psi_{b=-\sqrt{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\imath \\ -1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{c=2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \imath \\ 0 \end{pmatrix}, & \Psi_{c=4} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \imath \\ 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, & \Psi_{c=4} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Например, для матрицы \hat{C} составляем характеристическое уравнение:

$$\det(\hat{C} - c\hat{1}) = \det \begin{pmatrix} 3 - c & \imath & 0 \\ -\imath & 3 - c & 0 \\ 0 & 0 & 4 - c \end{pmatrix} = (4 - c)^2(2 - c) = 0,$$

откуда два корня (вырождение) равны 4 и один 2. Затем записываем уравнение на собственные значение для вырожденного корня $c = 4$:

$$\begin{pmatrix} 3 & \imath & 0 \\ -\imath & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \Psi_{c=4} = \begin{pmatrix} \imath\beta \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \beta \begin{pmatrix} \imath \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где β и γ , с точностью до нормировки, произвольны. Поэтому возможны различные выборы вырожденных собственных векторов, например так, как это сделано выше. Для базиса $\Psi_{c,a}$ возможно $2 \cdot 3 = 6$ возможных комбинаций, но ненулевые только 3 из них: $\Psi_{2,1}$, $\Psi_{4,2}$, $\Psi_{4,3}$.

- **H₇** Собственные векторы оператора импульса (стр. 37)

Разделяя переменные и интегрируя, имеем (C – константа):

$$\frac{d\Psi_p}{\Psi_p} = \frac{\imath}{\hbar} p dx \Rightarrow \ln \Psi_p + C = \frac{\imath}{\hbar} xp.$$

II Дискретный спектр одномерных систем

- **H₈** *Hyлевое среднее коммутатора* (стр. 45)

$$\langle E | \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} | E \rangle = \langle E | \hat{A} | E \rangle E - E \langle E | \hat{A} | E \rangle = 0.$$

В первом слагаемом \hat{H} действует направо: $\hat{H} | E \rangle = E | E \rangle$, а во втором – налево: $\langle E | \hat{H} = \langle E | E$ (гамильтониан эрмитов, см. стр. 19).

- **H₉** *Коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}^2]$* (стр. 45)

Коммутатор \hat{x} с $U(\hat{x})$ равен нулю. Для вычисления коммутатора с квадратом импульса, используем второе тождество (1.8), стр. 18:

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p} + \hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] = 2\imath \hbar \hat{p}.$$

- **H₁₀** *Коммутатор $[\hat{p}, U(\hat{x})]$* (стр. 45)

Запишем этот коммутатор в координатном представлении, подействовав им на произвольную функцию $f(x)$:

$$[\hat{p}, U(x)] f(x) = -\imath \hbar \left(\frac{d}{dx} U(x) f(x) - U(x) \frac{d}{dx} f(x) \right) = -\imath \hbar \frac{dU(x)}{dx} f(x),$$

где в первом слагаемом вычислена производная произведения. Так как функция $f(x)$ произвольна, её можно опустить.

- **H₁₁** *Коммутатор $[\hat{x}\hat{p}, \hat{H}]$* (стр. 45)

$$[\hat{x}\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{x}\hat{p}, \hat{p}^2] + [\hat{x}\hat{p}, U(\hat{x})] = \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] \hat{p} + \hat{x} [\hat{p}, U(\hat{x})].$$

Во втором равенстве за коммутаторы вынесены операторы через операторы с которыми они коммутируют, см. второе тождество (1.8), стр. 18.

- **H₁₂** *Средние $\langle \hat{p}^{2k} \rangle$ для бесконечно глубокой ямы* (стр. 49)

Учитывая изломанный характер волновой функции, необходимо осторожно вычислять её производные ($\omega = \pi n/a$):

$$\sqrt{\frac{a}{2}} \Psi'_n(x) = [\delta(x)\theta(a-x) - \theta(x)\delta(a-x)] \sin(\omega x) + \omega \theta(x)\theta(a-x) \cos(\omega x).$$

Первое слагаемое (с квадратными скобками) равно нулю, т.к. $\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0)$. Однако, для второй производной функции Дирака остаются:

$$\sqrt{\frac{a}{2}} \Psi''_n(x) = \omega [\delta(x) + (-1)^n \delta(a-x)] - \omega^2 \theta(x)\theta(a-x) \sin(\omega x).$$

Среднее равно:

$$\langle \hat{p}^4 \rangle = \int \Psi_n^* \hat{p}^4 \Psi_n dx = \int |\hat{p}^2 \Psi_n|^2 dx = \hbar^2 \int |\Psi_n''|^2 dx = \infty.$$

- **H₁₃** Средние для бесконечно глубокой ямы (стр. 49)

Учитывая, что $\sin(\omega x) = (e^{\omega x} - e^{-\omega x})/2i$, несложно найти:

$$\left\langle e^{\lambda \hat{x}} \right\rangle = \int_0^a e^{\lambda x} \Psi_n^2(x) dx = \frac{e^{\lambda a} - 1}{\lambda a} \left[1 + \frac{\lambda^2}{4\omega^2} \right]^{-1}.$$

Умножим обе части на $1 + \lambda^2/4\omega^2$ и разложим экспоненты в ряд по λ :

$$\langle \hat{x}^k \rangle = \frac{a^k}{k+1} - \frac{k(k-1)}{4\omega^2} \langle \hat{x}^{k-2} \rangle.$$

- **H₁₄** Гамильтониан осциллятора (стр. 62)

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{x}}{L} - i \frac{L \hat{p}}{\hbar} \right) \left(\frac{\hat{x}}{L} + i \frac{L \hat{p}}{\hbar} \right) = \frac{L^2 \hat{p}^2}{2\hbar^2} + \frac{\hat{x}^2}{2L^2} + i \frac{[\hat{x}, \hat{p}]}{2\hbar} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}.$$

- **H₁₅** Ограничность спектра снизу (стр. 62)

Докажем строго, что спектр ограничен снизу. Пусть $|n\rangle$ собственный вектор оператора $\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$, т.е. $\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$ и $\langle n|n\rangle = 1$ при любом целом n . В результате действия \hat{a} на вектор $|n-k\rangle$, где k – натуральное число, получается другой вектор $|\Psi\rangle = \hat{a} |n-k\rangle$, норма которого, по определению, должна быть неотрицательной:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle n-k | \hat{a}^+ \hat{a} | n-k \rangle = n - k \geq 0.$$

При фиксированном n всегда можно выбрать такое k , что получится 0, а это означает $|\Psi\rangle = \hat{a} |0\rangle = 0$.

- **H₁₆** Вектор n -го возбуждённого состояния (стр. 63)

Последовательно применяем (2.45):

$$\hat{a}^+ |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle, \quad (\hat{a}^+)^2 |0\rangle = \sqrt{1} \hat{a}^+ |1\rangle = \sqrt{1 \cdot 2} |2\rangle, \dots$$

- **H₁₇** Матричные элементы оператора координаты (стр. 63)

$$\frac{\sqrt{2}}{L} \langle k | \hat{x} | n \rangle = \langle k | (\hat{a} + \hat{a}^+) | n \rangle = \sqrt{n} \langle k | n-1 \rangle + \sqrt{k} \langle k-1 | n \rangle.$$

В первом слагаемом оператор \hat{a} действует направо, а во втором, \hat{a}^+ – налево. Далее учитываем ортогональность $\langle k | n \rangle = \delta_{kn}$.

- **H₁₈** Волновая функция основного состояния осциллятора (стр. 64)

В координатном представлении:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{L} + L \frac{d}{dx} \right), \quad \hat{a} \Psi_0(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{x}{L^2} \Psi_0(x) = -\Psi'_0(x).$$

III Временная эволюция

- **H₁₉** Решение уравнений Гейзенберга для осциллятора (стр. 74)

Беря производную по времени от (3.18), имеем:

$$\frac{d\hat{x}_t}{dt} = -\omega \hat{x} \sin(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m} \cos(\omega t),$$

полагая $t = 0$ и используя первое уравнение (3.16), получаем тождество.

- **H₂₀** Дисперсия координаты осциллятора (стр. 74)

$$\langle \hat{x}_t^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle c_{\omega t}^2 + \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{m^2 \omega^2} s_{\omega t}^2 + \frac{\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle}{m\omega} c_{\omega t} s_{\omega t}, \quad \bar{x}_t^2 = \left(\bar{x}_t c_{\omega t} + \frac{\bar{p}}{m\omega} s_{\omega t} \right)^2.$$

- **H₂₁** Коммутаторы при совпадающих временах (стр. 75)

Пусть в представлении Шрёдингера $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$. Тогда:

$$\hat{C}(t) = e^{i\hat{H}t} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) e^{-i\hat{H}t} = e^{i\hat{H}t} (\hat{A}e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} \hat{B} - \hat{B}e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} \hat{A}) e^{-i\hat{H}t},$$

поэтому $\hat{C}(t) = [\hat{A}(t), \hat{B}(t)]$.

- **H₂₂** Гамильтониан в представлении Гейзенберга (стр. 75)

Для гармонического осциллятора имеем:

$$\hat{H}_0 = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_0 e^{-i\hat{H}_0 t} = \omega e^{i\hat{H}_0 t} \hat{a}^+ \hat{a} e^{-i\hat{H}_0 t} + \frac{\omega}{2} = \omega \hat{a}^+(t) \hat{a}(t) + \frac{\omega}{2}.$$

- **H₂₃** Равенство нулю ковариации (стр. 78)

$$\langle \alpha | \hat{a} \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{a}^+ | \alpha \rangle = (\alpha^2 - \alpha^{*2}) \langle \alpha | \alpha \rangle = \alpha^2 - \alpha^{*2}$$

(\hat{a}^+ действует налево, т.е. $\langle \alpha | \hat{a}^+ = \alpha^* \langle \alpha |$). Поэтому:

$$\frac{2i}{\hbar} D_x p = \alpha^2 - \alpha^{*2} - (\alpha + \alpha^*)(\alpha - \alpha^*) = 0.$$

- **H₂₄** Скалярное произведение когерентных состояний (стр. 79)

$$\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = e^{-\frac{1}{2} |\alpha_1|^2 - \frac{1}{2} |\alpha_2|^2} \sum_{n,k=0}^{\infty} \frac{\alpha_1^{*n} \alpha_2^k}{\sqrt{n! k!}} \langle n | k \rangle = e^{-\frac{1}{2} |\alpha_1|^2 - \frac{1}{2} |\alpha_2|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1^* \alpha_2)^n}{n!}.$$

- **H₂₅** Дисперсия энергии в когерентном состоянии (стр. 80)

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \hbar^2 \omega^2 \langle \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{4} \rangle = \hbar^2 \omega^2 (|\alpha|^2 \langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle + |\alpha|^2 + \frac{1}{4}).$$

Затем $\hat{a} \hat{a}^+ = \hat{a}^+ \hat{a} + 1$.

- **H₂₆** $\exp(\alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a})$ (стр. 80)

$$\hat{A} = \alpha \hat{a}^+, \quad \hat{B} = -\alpha^* \hat{a}, \quad [\hat{A}, \hat{B}] = |\alpha|^2.$$

IV Момент импульса и спин

- **H₂₇** Эрмитовость оператора момента импульса (стр. 88)

$$\hat{L}_i^+ = \epsilon_{ijk}(\hat{x}_j \hat{p}_k)^+ = \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j = \epsilon_{ijk}(\hat{x}_j \hat{p}_k - i\delta_{kj}) = L_i - i\hbar \epsilon_{ikk} = L_i.$$

- **H₂₈** Производная по θ (стр. 92)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} = r c_\theta c_\phi \hat{p}_x + r c_\theta s_\phi \hat{p}_y - r s_\theta \hat{p}_z.$$

Это соотношение можно переписать в двух эквивалентных формах:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{y}{s_\theta} \left(\frac{c_\theta c_\phi}{s_\theta} \hat{p}_x - \hat{p}_z \right) + s_\phi z \hat{p}_y = \frac{x}{c_\phi} \left(\frac{c_\theta s_\phi}{s_\theta} \hat{p}_y - \hat{p}_z \right) + c_\phi z \hat{p}_x,$$

откуда несложно получить \hat{L}_x и \hat{L}_y

- **H₂₉** Квадрат момента в сферических координатах (стр. 92)

Используя $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$, имеем:

$$\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2} = e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - i \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

Производные “переносятся” через функции стандартным образом:

$$\frac{\partial}{\partial \phi} e^{i\phi} = e^{i\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} + i e^{i\phi}, \quad \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{c_\theta}{s_\theta} = \frac{c_\theta}{s_\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{s_\theta^2}.$$

- **H₃₀** Нормировка функций Y_{ll} (стр. 93)

$$\int_0^\pi \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta = \int_0^1 (1-z^2)^l dz = \frac{1}{2} \int_0^1 (1-x)^l x^{-1/2} dx = \frac{1}{2} B(l+1, 1/2),$$

где $B(\alpha, \beta)$ – бета функция (F.4), стр. 400

- **H₃₁** Оператор чётности (стр. 93)

$$[\hat{P}, \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}}] f(\mathbf{x}) = (\hat{P} \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} - \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} \hat{P}) f(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} f(-\mathbf{x}) - \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}} \hat{P} f(-\mathbf{x}) = 0,$$

где учтено, что в координатном представлении $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$, поэтому при инверсии знак меняет и радиус-вектор \mathbf{x} и импульс $\hat{\mathbf{p}}$.

- **H₃₂** Алгебра матриц Паули (стр. 95)

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

В тоже время $\varepsilon_{12k} \sigma_k = \varepsilon_{123} \sigma_3 = \sigma_3$, т.к. антисимметричный тензор Леви-Чивиты отличен от нуля только для различных индексов и $\varepsilon_{123} = 1$.

- **H₃₃** Собственные векторы оператора спина (стр. 95)

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

или $\alpha = \beta$. Аналогично находится собственный вектор для $S_x = -\hbar/2$.

V Сферически симметричные задачи

- **H₃₄** Эрмитовость \hat{p}_r (стр. 107)

Эрмитовость сразу следует из первого равенства (5.6). Второе равенство получается перестановкой операторов, с учётом:

$$[\hat{p}_\alpha, \frac{x_\beta}{r}] = \frac{\hbar}{i} \partial_\alpha \frac{x_\beta}{r} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\delta_{\alpha\beta}}{r} - \frac{x_\alpha x_\beta}{r^3} \right).$$

- **H₃₅** Коммутатор $[\hat{p}_r, r]$ (стр. 107)

В координатном представлении:

$$[\hat{\mathbf{p}}, r] = \hat{\mathbf{p}} r - r \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla r = \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{x}}{r}.$$

Деля (5.6) слева на r , а справа умножая на r , имеем:

$$\hat{p}_r r = \frac{1}{r} (\mathbf{x} \hat{\mathbf{p}}) r - i\hbar = \frac{\mathbf{x}}{r} \left(r \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{x}}{r} \right) - i\hbar = r \hat{p}_r - i\hbar.$$

- **H₃₆** Квадрат момента импульса (стр. 107)

$$\hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_k = \hat{x}_j (\hat{x}_j \hat{p}_k - i\hbar \delta_{jk}) \hat{p}_k = \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}},$$

$$\hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{p}_j = (\hat{p}_k \hat{x}_j + i\hbar \delta_{jk}) \hat{x}_k \hat{p}_j = \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{x}_j \hat{p}_j + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}} = (\hat{x}_k \hat{p}_k - i\hbar \delta_{kk}) \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}} + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{p}}.$$

- **H₃₇** Асимптотика волновой функции (стр. 109)

Подставим в уравнение Шредингера $u(r) = r^\beta e^{-\gamma r}$, принебрежем при $r \rightarrow \infty$ членом $1/r^2$ и поставим в этом пределе потенциал $V(r) = -\alpha/r$:

$$\beta(\beta - 1) r^{-2} - 2\gamma\beta r^{-1} + \gamma^2 = -\frac{2\mu}{\hbar^2}(\alpha r^{-1} + E).$$

Первым слагаемым принебрегаем, откуда $\gamma^2 = -2\mu E/\hbar^2$ и $\beta = \mu\alpha/\gamma\hbar^2$.

- **H₃₈** Вырождения осциллятора (стр. 110)

Вырождение равно числу возможностей разместить n объектов по трём “ящикам”. Найдём сначала число размещений по двум ящикам. В первый можно положить 0 объектов, во второй – n или 1 и $n - 1$ и т.д. Следовательно существует $n + 1$ возможностей. Для трёх ящиков: в первый кладём n объектов в остальные – ничего (1 возможность) или в первый $n - 1$, в остальные – 1 (2 возможности), и т.д. Всего их $1 + 2 + \dots + (n + 1) = (1 + n + 1)(n + 1)/2$.

VI Матрица плотности

- **H₃₉** *Перестановочность операторов под следом* (стр. 122)

В любом базисе след элементов произведения двух операторов равны:

$$\sum_n \langle n | \hat{A} \hat{B} | n \rangle = \sum_{n,k} \langle n | \hat{A} | k \rangle \langle k | \hat{B} | n \rangle = \sum_{n,k} \langle k | \hat{B} | n \rangle \langle n | \hat{A} | k \rangle = \sum_k \langle k | \hat{B} \hat{A} | k \rangle.$$

- **H₄₀** *Количество элементов матрицы плотности* (стр. 123)

Матрица $N \times N$ имеет N^2 комплексных элементов и определяется $2N^2$ действительными числами. Матрица плотности эрмитова $\rho_{\mu\nu}^* = \rho_{\nu\mu}$, поэтому существует только N^2 независимых *действительных* параметров, которые её определяют ($2N^2$ минус N^2 связей). Нормировка $\text{Tr}(\rho) = 1$ уменьшает их ещё на один.

- **H₄₁** *Решение уравнения для свободной частицы* (стр. 125)

Для свободной частицы с функцией Гамильтона $H = p^2/2m$ уравнение для плотности вероятности имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0.$$

Введём новые переменные $\xi = x - pt/m$ и $\eta = x$. В них уравнение становится тривиальным $\partial \rho / \partial \eta = 0$, поэтому решение имеет вид:

$$\rho(t, x, p) = f(p, x - pt/m),$$

где f – произвольная функция двух аргументов.

VII Приближённые методы дискретного спектра

- **H₄₂** Энергетическое представление (стр. 150)

Умножим уравнение $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ слева на $\langle k|$:

$$\langle k|\hat{H}_0 + \hat{V}|E_n\rangle = E_n\langle k|E_n\rangle.$$

Учтём $\langle k|\hat{H}_0 = \varepsilon_k\langle k|$ и вставим после \hat{V} сумму по полной системе $|m\rangle\langle m|$ собственных векторов \hat{H}_0 :

$$\sum_m \langle k|\hat{V}|m\rangle\langle m|E_n\rangle = (E_n - \varepsilon_k)\langle k|E_n\rangle.$$

- **H₄₃** Оператор \hat{x}^4 (стр. 152)

Опуская шляпки и учитывая $\hat{a}a = n$, $a\hat{a} = n + 1$, имеем:

$$\begin{aligned} (a + \hat{a})^4 &= (a^2 + \hat{a}^2 + 2n + 1)(a^2 + \hat{a}^2 + 2n + 1) \\ &= a^4 + \hat{a}^4 + a^2\hat{a}^2 + \hat{a}^2a^2 + (a^2 + \hat{a}^2)(2n + 1) + (2n + 1)(a^2 + \hat{a}^2) + (2n + 1)^2. \end{aligned}$$

Теперь, учитывая $[n, \hat{a}] = \hat{a}$ и $[a, n] = a$, имеем:

$$\hat{a}^2a^2 = \hat{a}\hat{a}aa = \hat{a}na = \hat{a}an - \hat{a}a = n(n - 1),$$

$$a^2\hat{a}^2 = a(n + 1)\hat{a} = ana + n + 1 = a\hat{a}n + a\hat{a} + n + 1 = (n + 1)(n + 2).$$

Перенесём также a вправо и \hat{a} – влево:

$$a^2n = a(na + a) = (n + 2)a^2, \quad n\hat{a}^2 = (\hat{a}n + \hat{a})\hat{a} = \hat{a}^2(n + 2).$$

- **H₄₄** Матричные элементы \hat{x} по теории возмущений (стр. 153)

$$\begin{aligned} c_{02}^{(1)} &= \frac{3\sqrt{2}}{8}\xi, \quad c_{13}^{(1)} = \frac{5\sqrt{6}}{8}\xi, \quad c_{04}^{(1)} = \frac{\sqrt{6}}{16}\xi, \quad c_{15}^{(1)} = \frac{\sqrt{30}}{16}\xi, \quad c_{35}^{(1)} = \frac{9\sqrt{5}}{4}\xi. \\ c_{00}^{(2)} &= -\frac{39}{256}\xi^2, \quad c_{11}^{(2)} = -\frac{315}{256}\xi^2, \quad c_{20}^{(2)} = \frac{72\sqrt{2}}{64}\xi^2, \\ c_{40}^{(2)} &= \frac{9\sqrt{6}}{16}\xi^2, \quad c_{60}^{(2)} = \frac{17\sqrt{5}}{64}\xi^2, \quad c_{13}^{(2)} = -\frac{15\sqrt{6}}{4}\xi^2, \quad c_{15}^{(2)} = \frac{3\sqrt{30}}{8}\xi^2, \end{aligned}$$

• **H₄₅** *Разложение I(α, β) по a* (стр. 161)

При смене знака у параметра α происходит бифуркация. Функция в показателе экспоненты при α > 0 имеет один минимум в точке x = 0. При α < 0 таких минимумов в точках x = ±√{-α/2β} становится два. Однако это более “слабая” бифуркация, так как интеграл при α < 0, благодаря множителю e^{-βx^4}, по-прежнему сходится:

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^k}{k!} 2 \int_0^{\infty} x^{2k} e^{-\beta x^4} = \frac{\Gamma(1/4)}{2 \beta^{1/4}} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{-\alpha}{\sqrt{\beta}} \right)^k \frac{\Gamma(k/2 + 1/4)}{\Gamma(1/4) k!}.$$

Коэффициенты достаточно быстро убывают с ростом k:

$$c_k = \frac{\Gamma(k/2 + 1/4)}{\Gamma(1/4) k!} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2} \Gamma(1/4)} \left(\frac{2k}{e} \right)^{-k/2}.$$

Так, для первых шести коэффициентов имеем:

$$c_k = \{ 1, 0.34, 0.125, 0.042, 0.013, 0.004, 0.001 \},$$

в результате чего получается сходящийся ряд.

VIII Квазиклассические приближения

- Н46 Рекуррентные формулы \hbar -разложения (стр. 175)

Функции нулевого приближения, связанны с параметрами разложения ω , a_k эффективного потенциала по степеням $x = (r - r_0)/r_0$ следующим образом:

$$C_0^0 = -\frac{\omega}{r_0}, \quad C_k^0 = \frac{r_0}{2\omega} \sum_{i=1}^{k-1} (C_i^0 C_{k-i}^0) - \frac{\omega}{2r_0} a_k.$$

Функция $C_k(x)$ имеет старший полюс порядка $(2k - 1)$ и может быть представлена рядом Лорана

$$C_k(x) = x^{1-2k} \sum_{i=0}^{\infty} C_i^0 x^i.$$

Это приводит к условиям квантования $C_{2k-2}^k = (n/r_0) \delta_{1,k}$, $k = 1, 2, \dots$
Подстановка ряда $C_k(x)$ в (10.18) даёт:

$$\begin{aligned} \frac{3-2k+i}{r_0} C_i^{k-1} + \sum_{j=0}^k \sum_{p=0}^i C_p^j C_{i-p}^{k-j} = \\ \Theta(2-2k+i) \frac{\Lambda_k}{r_0^2} (-1)^i (3-2k+i) - 2\mu E_k \delta_{i,2k-2}, \end{aligned}$$

где $\Theta(k)$ – функция Хевисайда, равная 1 при $k \geq 0$ и 0 при $k < 0$.
Положив $i = 2k-2$ и учтя условия квантования, получаем k -ю поправку к энергии:

$$2\mu E_k = \frac{\Lambda_k}{r_0^2} - \frac{1}{r_0} C_{2k-2}^{k-1} - \sum_{j=0}^k \sum_{p=0}^{2k-2} C_p^j C_{2k-2-p}^{k-j}.$$

В оставшихся случаях ($i \neq 2k-2$), имеем рекуррентные соотношения для коэффициентов:

$$\begin{aligned} C_i^k = \frac{1}{2C_0^0} \left[\Theta(2-2k+i) \frac{\Lambda_k}{r_0^2} (-1)^i (3-2k+i) - \frac{3-2k+i}{r_0} C_i^{k-1} \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{p=0}^i C_p^j C_{i-p}^{k-j} - 2 \sum_{p=1}^i C_p^0 C_{i-p}^k \right]. \end{aligned}$$

Эти формулы полностью решают задачу о нахождении поправки любого порядка по \hbar к энергии E и волновой функции $C(r)$.

IX Метод факторизации

- **H₄₇** *Метод факторизации* (стр. 248)

$$\hat{H}_{n+1} \hat{A}_n = (\hat{A}_n \hat{A}_n^+ + E_n) \hat{A}_n = \hat{A}_n (\hat{A}_n^+ \hat{A}_n + E_n) = \hat{A}_n \hat{H}_n.$$

Второе соотношение получается при помощи эрмитового сопряжения, с учётом эрмитовости операторов \hat{H}_n (все E_n действительны).

- **H₄₈** *Произведение* $\hat{A}_n^+ \hat{A}_n$ (стр. 254)

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n = \frac{\alpha_n^2}{r^2} + r^2 + \hat{p}_r^2 + 2\alpha_n + \imath \left[\frac{\alpha_n}{r} + r, \hat{p}_r \right].$$

• **H₄₉** Волновые функции трёхмерного осциллятора (стр. 254)

Необходимо решать уравнения (стр. 249):

$$\hat{A}_n \varphi_{n-1} = \left(r - \frac{l+n+1}{r} + i \hat{p}_r \right) \varphi_{n-1} = \left(r - \frac{l+n}{r} + \frac{d}{dr} \right) \varphi_{n-1} = 0.$$

При $n = 0$ имеем волновую функцию основного состояния. Первое возбуждённое (по n_r) состояние получается из $R_{1l}(r) = \hat{A}_0^+ \varphi_0$.

• **H₅₀** Выбор различных функций (стр. 256)

▷ При $G(x) = 1$, имеем:

$$\frac{E_n + b_n^2 - E_{n-1} - b_{n-1}^2}{a_n + a_{n-1}} = F' - (a_n - a_{n-1}) F^2 - 2 \frac{a_n b_n - a_{n-1} b_{n-1}}{a_n + a_{n-1}} F.$$

Положим коэффициенты в правой части равные константам:

$$a_n - a_{n-1} = \lambda, \quad \frac{a_n b_n - a_{n-1} b_{n-1}}{a_n + a_{n-1}} = \sigma$$

и потребуем выполнения дифференциального уравнения ($c = const$):

$$F' = c + \lambda F + 2\sigma F^2.$$

▷ При $G(x) = 1/F(x)$, имеем:

$$\begin{aligned} & E_n + 2a_n b_n - E_{n-1} - 2a_{n-1} b_{n-1} \\ &= (a_n + a_{n-1}) F' - (b_n + b_{n-1}) \frac{F'}{F^2} - (a_n^2 - a_{n-1}^2) F^2 - (b_n^2 - b_{n-1}^2) \frac{1}{F^2}. \end{aligned}$$

Положим

$$F'(x) = aF^2(x) + b$$

и

$$\begin{aligned} a_n &= a_{n-1} + a, & b_n &= b_{n-1} - b \\ E_n + 2a_n b_n &= E_{n-1} + 2a_{n-1} b_{n-1} + b(a_n + a_{n-1}) - a(b_n + b_{n-1}). \end{aligned}$$

▷ Наконец, при $G(x) = \sqrt{a + b F^2(x)}$ положим:

$$F'(x) = -F(x) \sqrt{a + b F^2(x)}$$

и

$$b_n = b_{n-1} + 1, \quad a_n = a_{n-1}, \quad E_n - E_{n-1} = -a(b_n^2 - b_{n-1}^2).$$

▷ Отметим также простой выбор

$$b_n = b_0, \quad a_n - a_{n-1} = -\lambda,$$

который приводит к

$$E_n - E_{n-1} = (a_n + a_{n-1})(F' + \lambda F^2) + 2b_0(G' + \lambda FG),$$

поэтому

$$F' = c_1 - \lambda F^2, \quad G' = c_2 - \lambda FG.$$

X Функции Грина

- **H₅₁** Вычисление интеграла (стр. 269)

Знаменатель $k^2 - \Omega_n^2 + i\epsilon$ перепишем как $(k - \Omega_n + i\epsilon)(k + \Omega_n - i\epsilon)$, что не скажется на пределе $\epsilon \rightarrow 0$. Кроме этого, вторым порядком ϵ^2 пренебрегаем по сравнению с первым. При $t > 0$ контур можно замкнуть в нижней полуплоскости ($e^{-i(-i\infty)t} = 0$), куда попадает полюс $k = \Omega_n - i\epsilon$. Поэтому по теореме Коши (стр. 387) имеем:

$$\int \frac{e^{-ikt}}{(k - \Omega_n + i\epsilon)(k + \Omega_n - i\epsilon)} \frac{dk}{2\pi} = \frac{2\pi i}{2\pi} \frac{e^{-i\Omega_n t}}{2\Omega_n}.$$

Аналогично, при $t < 0$ контур замыкается в верхней полуплоскости с полюсом $k = -\Omega_n + i\epsilon$.

- **H₅₂** Средние по теореме Вика (стр. 281)

Вычислим хронологическое среднее $\langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle$ для гармонического осциллятора по теореме Вика (стр. 271):

$$\langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle = 3 D_{tt} \langle 0 | T x_t^2 x_s^4 | 0 \rangle + 4 D_{ts} \langle 0 | T x_t^3 x_s^3 | 0 \rangle,$$

где сразу приведены подобные (первый оператор x_t даёт 3 одинаковых слагаемых с остальными тремя x_t и 4 слагаемых с x_s). Аналогично вычисляем получившиеся средние:

$$\langle 0 | T x_t^2 x_s^4 | 0 \rangle = D_{tt} \langle 0 | T x_s^4 | 0 \rangle + 4 D_{ts} \langle 0 | T x_t x_s^3 | 0 \rangle = 3 D_{tt} D_{ss}^2 + 12 D_{ts}^2 D_{ss}.$$

$$\langle 0 | T x_t^3 x_s^3 | 0 \rangle = 2D_{tt} \langle 0 | T x_t x_s^3 | 0 \rangle + 3D_{ts} \langle 0 | T x_t^2 x_s^2 | 0 \rangle = 9 D_{tt} D_{ts} D_{ss} + 6 D_{ts}^3.$$

Собирая всё вместе, окончательно, получаем:

$$\langle 0 | T x_t^4 x_s^4 | 0 \rangle = 9 D_{tt}^2 D_{ss}^2 + 72 D_{tt} D_{ts}^2 D_{ss} + 24 D_{ts}^4.$$

XI Функциональный интеграл

- **H₅₃** Получение W_n из минимума энтропии (стр. 301)

Для этого необходимо воспользоваться методом множителей Лагранжса, в котором находится экстремум выражения:

$$F(W_n, \lambda_1, \lambda_2) = -\sum_n W_n \ln W_n + \lambda_1 \left(1 - \sum_n W_n\right) + \lambda_2 \left(\langle E \rangle - \sum_n E_n W_n\right).$$

Равенство нулю производных по $W_n, \lambda_1, \lambda_2$ даёт (19.13).

- **H₅₄** Статсумма и средняя энергия свободной частицы (стр. 301)

Вычислим след в импульсном представлении:

$$Z_\beta = \int \langle \mathbf{p} | e^{-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} | \mathbf{p} \rangle d^3 \mathbf{p} = \delta(\mathbf{0}) \int e^{-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} d^3 \mathbf{p} = \delta(\mathbf{0}) \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2},$$

где степень $3/2$ возникает из тройного гауссова интеграла (3 степени свободы), а $\delta(\mathbf{0}) = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle$. Пользуясь формулой (19.15), получаем:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2} T.$$

Это соотношение, фактически является определением температуры, как средней энергии, которая равна $T/2$ на каждую степень свободы.

- **H₅₅** Уравнения движения, из экстремума действия (стр. 303)

$$\frac{\delta S_E[x]}{\delta x_\tau} = \frac{\delta}{\delta x_\tau} \int_0^\beta \left(\frac{m \dot{x}_s^2}{2} + V(x_s) \right) ds = \frac{\delta}{\delta x} \int_0^\beta \left(m \dot{x}_s \frac{d\delta_{s\tau}}{d\tau} + V'(x_s) \delta_{\tau s} \right) ds = 0.$$

Интегрируя с функцией Дирака, приходим к (19.25).

- **H₅₆** Классическое действие осциллятора (стр. 304)

Для траектории $\bar{x}(\tau) = A e^{\omega\tau} + B e^{-\omega\tau}$ с $x_a = x(0)$ и $x_b = x(\beta)$ имеем:

$$A = \frac{x_b - x_a e^{-\omega\beta}}{e^{\omega\beta} - e^{-\omega\beta}}, \quad B = \frac{x_a e^{\omega\beta} - x_b}{e^{\omega\beta} - e^{-\omega\beta}},$$

$$S_E[\bar{x}] = \frac{\omega}{2} A^2 \left(e^{2\omega\beta} - 1 \right) - \frac{\omega}{2} B^2 \left(e^{-2\omega\beta} - 1 \right).$$

-
- **H₅₇** Интеграл для осциллятора (стр. 304)

Запишем интеграл для $\rho(0, 0, \beta)$ в дискретном виде:

$$\rho(0, 0, \beta) = \langle y = 0 | e^{-\beta \hat{H}} | y = 0 \rangle = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \dots dy_{N-1} e^{-\frac{1}{2\Delta\tau} \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y}}, \quad (\text{P.1})$$

где

$$\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = \sum_{k=1}^N \left[\dot{y}_k^2 + y_k^2 \right] \Delta\tau^2 = \sum_{k=1}^N \left[(y_k - y_{k-1})^2 + y_k^2 \Delta\tau^2 \right]. \quad (\text{P.2})$$

Интеграл (P.1) гауссов и его несложно вычислить (I.20), стр. 394:

$$\rho(0, 0, \beta) = \mathcal{N} \frac{(2\pi)^{(N-1)/2}}{\sqrt{\det(\mathbf{A}/\Delta\tau)}} = \frac{1}{(2\pi\Delta\tau)^{\frac{N}{2}}} \frac{(2\pi\Delta\tau)^{\frac{N-1}{2}}}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\tau \det \mathbf{A}}},$$

(подставлен \mathcal{N} (19.22), $\Delta\tau = \beta/N$ и учтено, что для матрицы $n \times n$ и константы α выполняется: $\det(\alpha\mathbf{A}) = \alpha^n \det \mathbf{A}$). В (P.2) с $y_0 = y_N = 0$ матрица \mathbf{A} размером $(N-1) \times (N-1)$ имеет ленточный вид ($N = 5$):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 + \Delta\tau^2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 + \Delta\tau^2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 + \Delta\tau^2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 + \Delta\tau^2 \end{pmatrix}.$$

Вычисляя определитель $D_n = \det \mathbf{A}$ матрицы $n \times n$ по первой колонке, сводим D_n к определителям таких же матриц меньшего размера:

$$D_n = (2 + \Delta\tau^2) D_{n-1} - D_{n-2}.$$

Решим это рекуррентное уравнение сначала в более общем случае для: $D_n = (\alpha + \beta) D_{n-1} - \alpha\beta D_{n-2}$. Перенося влево αD_{n-1} , получим геометрическую прогрессию. Затем аналогично перенесём βD_{n-1} .

$$\begin{cases} D_n - \alpha D_{n-1} = \beta (D_{n-1} - \alpha D_{n-2}) = \beta^{n-2} (D_2 - \alpha D_1), \\ D_n - \beta D_{n-1} = \alpha (D_{n-1} - \beta D_{n-2}) = \alpha^{n-2} (D_2 - \beta D_1). \end{cases}$$

Если $\alpha \neq \beta$, то можно исключить D_{n-1} и найти D_n :

$$D_n = \frac{D_2 - \beta D_1}{\alpha(\alpha - \beta)} \alpha^n - \frac{D_2 - \alpha D_1}{\beta(\alpha - \beta)} \beta^n.$$

Так как $N \rightarrow \infty$, для α, β берём ведущий порядок по $1/N$ ($\Delta\tau = \beta/N$):

$$\alpha \approx 1 + \frac{\beta}{N}, \quad \beta \approx 1 - \frac{\beta}{N}, \quad D_1 \approx 2, \quad D_2 \approx 3.$$

Воспользовавшись определением числа e , при $N \rightarrow \infty$ получаем:

$$D_N \rightarrow \frac{N}{2\beta} \left(1 + \frac{\beta}{N}\right)^N - \frac{N}{2\beta} \left(1 - \frac{\beta}{N}\right)^N \rightarrow \frac{N}{\beta} \frac{e^\beta - e^{-\beta}}{2} = \frac{N}{\beta} \operatorname{sh}(\beta).$$

XII Анализ

- **H₅₈** Число подмножеств у множества (стр. 324)

Любое подмножество множества из n элементов можно представить в виде последовательности из n нулей и единиц. Единица означает, что данный элемент присутствует в подмножестве, а ноль – что нет. Например для $\mathcal{A} = \{a, b\}$ возможно 4 подмножества:

$$00 = \{\}, \quad 10 = \{a\}, \quad 01 = \{b\}, \quad 11 = \{a, b\}$$

Число таких возможных бинарных последовательностей длиной n равно 2^n (на первом месте стоит 0 или 1; для каждого из этих двух вариантов на втором месте снова стоит 0 или 1, и т.д.).

- **H₅₉** Интегралы аппроксиматоров δ -функции (стр. ??)

-
- **H₆₀** Интегральное представление δ -функции (стр. ??)

$$\int_{-L/2}^{L/2} e^{\imath kx} \frac{dx}{2\pi} = \frac{\sin(Lk/2)}{\pi k} \rightarrow \delta(k), \quad \text{при } L \rightarrow \infty$$

- **H₆₁** Проверка решения уравнения $x^2\varphi(x) = 0$ (стр. 339)

$$(x^2(C_1\delta + C_2\delta'), f) = C_1(\delta, x^2f) + C_2(\delta', x^2f) = C_2(\delta, 2xf + x^2f') = 0.$$

XIII Векторные пространства

- **H₆₂** *Нулевой вектор единственен* (стр. 350)

Пусть есть два нулевых элемента: $\mathbf{0}_1$ и $\mathbf{0}_2$. Тогда, по определению для нулевого вектора $\mathbf{0}_1$ и любого вектора $\mathbf{0}_2$ имеем $\mathbf{0}_1 + \mathbf{0}_2 = \mathbf{0}_2$. Это же соотношение для нулевого вектора $\mathbf{0}_2$ имеет вид $\mathbf{0}_2 + \mathbf{0}_1 = \mathbf{0}_1$. Сложение коммутативно, поэтому $\mathbf{0}_2 = \mathbf{0}_1$.

- **H₆₃** *Неравенство треугольника* (стр. 351)

$$\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\|^2 = \langle \mathbf{a} + \mathbf{b}, \mathbf{a} + \mathbf{b} \rangle = \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle + \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle^*.$$

Введём $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = |\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle| e^{i\phi}$ и учтём тождество Коши-Буняковского:

$$= \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2 |\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle| \cos \phi \leq \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2 \|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\| \cos \phi.$$

Или окончательно: $\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\|^2 \leq (\|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{b}\|)^2$.

- **H₆₄** *Неравенство Коши-Буняковского* (стр. 351)

Возьмём вектор $t\mathbf{x} + \mathbf{y}$, где t – действительное число. Сначала считаем, что $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ действительно. Тогда согласно свойствам скалярного произведения:

$$\langle t\mathbf{x} + \mathbf{y}, t\mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle = t^2 \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle + 2t \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle \geq 0.$$

При больших t в силу $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle > 0$ квадратный полином по t больше нуля. Чтобы он был больше нуля при любом t , необходимо отсутствие решений квадратного уравнения относительно t , т.е. детерминант должен быть отрицательным: $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle^2 - \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle \leq 0$, откуда следует (V.9). Если $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = r e^{i\varphi}$ – комплексное, тогда введём вектор $\mathbf{z} = e^{i\varphi} \mathbf{x}$:

$$\langle \mathbf{z}, \mathbf{y} \rangle = e^{-i\varphi} \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = r = |\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|, \quad \langle \mathbf{z}, \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle$$

(число из первого вектора надо выносить с комплексным сопряжением). Так как $\langle \mathbf{z}, \mathbf{y} \rangle$ действительно, оно удовлетворяет (V.9), откуда (V.9) следует для произвольного $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$.

- **H₆₅** *Действие линейного оператора на нулевой вектор* (стр. 354)

$$\hat{A}\mathbf{0} = \hat{A}(\mathbf{a} - \mathbf{a}) = \hat{A}\mathbf{a} - \hat{A}\mathbf{a} = \mathbf{0}.$$

- **H₆₆** *Единственность обратного оператора* (стр. 356)

Докажем, что два обратных \hat{A}_1^{-1} и \hat{A}_2^{-1} к \hat{A} совпадают:

$$\hat{A}_1^{-1} = \hat{A}_1^{-1} \hat{1} = \hat{A}_1^{-1} (\hat{A} \hat{A}_2^{-1}) = (\hat{A}_1^{-1} \hat{A}) \hat{A}_2^{-1} = \hat{1} \hat{A}_2^{-1} = \hat{A}_2^{-1}.$$

• **H₆₇** *Образ и ядро обратимого оператора* (стр. 356)

Если образ не охватывает всё пространство, это означает, что существуют по крайней мере два вектора $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ действие на которые оператора приводит к одному и тому же вектору $\hat{A}\mathbf{x}_1 = \mathbf{a}, \hat{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{a}$. В этом случае действие обратного оператора $\hat{A}^{-1}\mathbf{a}$ не определено.

Если ядро равно $\mathbf{0}$, то оператор обратим. Оператор не имеет обратного, если существуют векторы $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ для которых $\hat{A}\mathbf{x}_1 = \hat{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{a}$. Вычитая их, имеем $\hat{A}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = \mathbf{0}$. Так как $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$, ядро кроме нулевого вектора содержит $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$. Это рассуждение можно обратить, доказав, что если в ядре только нулевой оператор, для любых векторов $\hat{A}\mathbf{x}_1 \neq \hat{A}\mathbf{x}_2$.

• **H₆₈** *Свойства эрмитового сопряжения* (стр. 356)

$$\langle \mathbf{a}, (\hat{A}^+)^+ \mathbf{b} \rangle = \langle \hat{A}^+ \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{b}, \hat{A}^+ \mathbf{a} \rangle^* = \langle \hat{A} \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle^* = \langle \mathbf{a}, \hat{A} \mathbf{b} \rangle.$$

$$\langle \mathbf{a}, (\hat{A}\hat{B})^+ \mathbf{b} \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \langle \hat{B} \mathbf{a}, \hat{A}^+ \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{a}, \hat{B}^+ \hat{A}^+ \mathbf{b} \rangle.$$

• **H₆₉** *Независимость векторов* (стр. 361)

Составим из компонент этих векторов матрицу \hat{A} , расположив компоненты каждого вектора по столбцам:

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Линейная зависимость означает, что существуют одновременно ненулевые числа x_1, x_2, x_3 , что $x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3 = \mathbf{0}$. Для каждой компоненты векторов, это соотношение эквивалентно уравнению $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Однако, т.к. $\det(\hat{A}) = 8 \neq 0$, это уравнение не имеет ненулевых решений поэтому векторы $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ линейно независимы.

• **H₇₀** *Ядро и образ матрицы* (стр. 361)

Найдём ядро и образ у матрицы:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x_1 = \text{любое} \\ x_2 = 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Соответственно образ оператора определяется как множество векторов, получающихся при действии на произвольный вектор:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, ядро и образ совпадают. Все их векторы определяются базисным вектором $(1 \ 0)^T$. Их размерность равна 1, что в сумме, как и положено (V.43), стр. 362, даёт размерность всего пространства 2.

• **H₇₁** *Размерность образа и ядра оператора* (стр. 362)

Пусть размерность ядра равна k и в нём введены базисные векторы $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k$. По определению ядра $\hat{A}\mathbf{e}_1 = \mathbf{0}, \dots, \hat{A}\mathbf{e}_k = \mathbf{0}$. Дополним их базисными векторами $\mathbf{e}_{k+1}, \dots, \mathbf{e}_n$. Для любого вектора \mathbf{a} из \mathbb{V} , вектор образа равен

$$\mathbf{b} = \hat{A}\mathbf{a} = a_{k+1}\hat{A}\mathbf{e}_{k+1} + \dots + a_n\hat{A}\mathbf{e}_n.$$

Докажем от противного, что $n - k$ векторов $\hat{A}\mathbf{e}_{k+1}, \dots, \hat{A}\mathbf{e}_n$ линейно независимы (образуют пространство размерности $n - k$). Существование вектора $\mathbf{x} = \alpha_{k+1}\mathbf{e}_{k+1} + \dots + \alpha_n\mathbf{e}_n$ для которого $\hat{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ведёт к противоречию, так как \mathbf{x} принадлежит ядру и раскладывается по $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k$.

• **H₇₂** *След произведения матриц* (стр. 365)

Так как $\text{Tr } \hat{A} = A_{ii}$ (по i сумма), то:

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = A_{ij}B_{ji} = B_{ji}A_{ij} = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}).$$

• **H₇₃** *Проектор на плоскость* (стр. 365)

Если есть некоторый вектор $\mathbf{e} = (1 \ 1 \ 1)^T$ в евклидовом 3-мерном пространстве “со стрелочками”, то проекция на него произвольного вектора $\mathbf{x} = (x_1 \ x_2 \ x_3)^T$ равна:

$$\mathbf{x}' = \frac{\langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{e}\|^2} \mathbf{e} = \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \mathbf{e}.$$

Такой проектор можно записать при помощи матрицы $\hat{P}_{\mathbf{e}}$:

$$\hat{P}_{\mathbf{e}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Проектор на плоскость будет к нему дополнительным: $\hat{P} = \hat{1} - \hat{P}_{\mathbf{e}}$.

• **H₇₄** *Собственные векторы не эрмитовой матрицы 2x2* (стр. 369)

Залишем характеристическое уравнение: \triangleright Приведём пример матрицы 2x2 (не эрмитовой!) у которой есть только один собственный вектор:

$$\det(\hat{A} - a\hat{1}) = (1 - a)^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad a = 1.$$

Решая уравнение $(\hat{A} - a\hat{1})\mathbf{a} = \mathbf{0}$ для $\mathbf{a} = (\alpha \ \beta)^T$, получаем $\alpha = 0$ при любом β . Поэтому единственный вектор имеет вид $\mathbf{a} = (0 \ 1)^T$. Напомним, что в силу линейности уравнения на собственные значения, собственные векторы определены с точностью до произвольного множителя, поэтому решение выбирается наиболее простым (в данном случае нормированным $\|\mathbf{a}\| = \mathbf{a}^T \mathbf{a} = 1$).

• **H₇₅** Собственные векторы эрмитовой матрицы 3x3 (стр. 369)

Решение характеристического уравнения $a(2-a)^2 = 0$ приводит к двум собственным значениям $a_1 = 0$ и $a_2 = 2$, одно из которых двукратно вырождено. Для $a = 0$ решение уравнения $(\hat{A} - a\hat{1})\mathbf{a} = \mathbf{0}$ даёт:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \alpha = i\gamma \\ \beta = 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Для собственного значения $a = 2$ имеем:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} i\alpha = \gamma \\ \beta - \text{любое} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ i\alpha \end{pmatrix},$$

Так как два числа α и β произвольны, можно выбрать только два линейно независимых вектора, положив либо $\alpha = 0$ либо $\beta = 0$. Поэтому окончательно:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{P.3})$$

Несложно видеть, что эти три вектора ортонормированы. Двукратно вырожденным является собственное значение $a = 2$.

• **H₇₆** Инвариантность алгебры (стр. 370)

$$\hat{C}' = \hat{U}^{-1} \hat{C} \hat{U} = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{B} \hat{U} = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} \hat{U}^{-1} \hat{B} \hat{U} = \hat{A}' \hat{B}'.$$

• **H₇₇** Сохранение унитарности (стр. 370)

Если $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то

$$\hat{A}'^+ = (\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U})^+ = \hat{U}^+ \hat{A}^+ (\hat{U}^+)^+ = \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} = \hat{A}'.$$

• **H₇₈** Диагонализирующая матрица (стр. 370)

Для матрицы 3x3 из (V.57), используя её собственные векторы (< H₇₅), имеем следующую унитарную матрицу:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{U}^{-1} = \begin{pmatrix} -i/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Перемножая матрицы $\hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U}$, получаем диагональную матрицу \hat{A}' , с собственными значениями 0, 2, 2 на диагонали.

- **H₇₉** Неравенство $|\alpha + \beta|^2 \leq 2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2$ (стр. 373)

Запишем модуль суммы, перейдя в конце к экспоненциальной записи комплексных чисел $\alpha = a e^{iA}$, $\beta = b e^{iB}$, где $a, b \geq 0$:

$$|\alpha + \beta|^2 = (\alpha^* + \beta^*)(\alpha + \beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha^*\beta + \alpha\beta^* = a^2 + b^2 + 2ab \cos(A - B),$$

Далее, т.к $\cos(A - B) \leq 1$:

$$a^2 + b^2 + 2ab \cos(A - B) \leq a^2 + b^2 + 2ab \leq 2a^2 + 2b^2,$$

так как $(a - b)^2 = a^2 - 2ab + b^2 \geq 0$.

- **H₈₀** Коэффициенты разложения (стр. 374)

Подставляя разложение для функции $f(x)$ и учитывая условие ортогональности, имеем:

$$\int_a^b f(x) \varphi_k^*(x) dx = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \int_a^b \varphi_i(x) \varphi_k^*(x) dx = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \delta_{ik} = \alpha_k.$$

-
- **H₈₁** Норма вектора (стр. 375)

Запишем выражение для квадрата нормы вектора $\|\mathbf{f}\|^2$:

$$\int_a^b f^*(x) f(x) dx = \sum_{i,j=0}^{\infty} \alpha_i \alpha_j \int_a^b \varphi_i(x) \varphi_j^*(x) dx = \sum_{i,j=0}^{\infty} \alpha_i \alpha_j \delta_{ij} = \sum_{i=0}^{\infty} |\alpha_i|^2.$$

-
- **H₈₂** Норма остатка $\|\mathbf{r}_n\|$ (стр. 375)

Норма равна:

$$\|\mathbf{r}_n\|^2 = \int_a^b |f(x) - \sum_{k=0}^n \alpha_k \varphi_k(x)|^2 dx.$$

Вычисляя под интегралом квадрат модуля, имеем:

$$\int_a^b (|f(x)|^2 - \sum_{k=0}^n (f^*(x) \alpha_k \varphi_k(x) + f(x) \alpha_k^* \varphi_k^*(x)) + \sum_{i,j=0}^n \alpha_i^* \alpha_j (x) \varphi_i^*(x) \varphi_j(x)) dx,$$

откуда

$$\|\mathbf{r}_n\|^2 = \|\mathbf{f}\|^2 - \sum_{k=0}^n 2|\alpha_k|^2 + \sum_{k=0}^n |\alpha_k|^2 = \|\mathbf{f}\|^2 - \sum_{k=0}^n |\alpha_k|^2.$$

- **H₈₃** Ортогональность фурье-базиса (стр. 341)

Если $k \neq j$:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \varphi_k^*(x) \varphi_j(x) dx = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{i(j-k)x}}{2\pi} dx = \frac{e^{i(j-k)x}}{2\pi(j-k)} \Big|_{-\pi}^{\pi} = 0,$$

так как $= e^{in\pi} - e^{-in\pi} = e^{-in\pi}(1 - e^{2in\pi}) = 0$. Если же $k = j$, то интеграл равен 1.

- **H₈₄** Ряд Фурье для $f(x) = x$ (стр. 341)

-
- **H₈₅** $e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \dots$ (стр. 379)

Беря производную от $\hat{U}(t)$, имеем:

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = e^{t\hat{B}} \hat{B} \hat{A} e^{-t\hat{B}} - e^{t\hat{B}} \hat{A} \hat{B} e^{-t\hat{B}} = e^{t\hat{B}} [\hat{B}, \hat{A}] e^{-t\hat{B}}.$$

Ещё одна производная даёт $[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]$ между экспонентами, и т.д. Разложение $\hat{U}(t)$ в ряд Тейлора при $t = 1$ приводит к тождеству (V.77).

Предметный указатель

- θ -функция Хевисайда, 189
- Стандартная модель, 7
- адрон, 7
- алгоритм
- Метрополиса, 118
- ангармонический осциллятор, 34
- аргумент Дайсона, 34
- аргумент комплексного числа, 160
- барион, 7
- бозон, 7
- гамильтониан, 26
- гармонический осциллятор, 32
- гильбертово пространство, 18
- диаграммы Фейнмана
- осциллятора, 72
- импульсное представление, 29
- кварк, 7
- классический радиус электрона, 13
- комптоновская длина, 13
- коэффициент
- симметрийный, 88
- лептон, 7
- мезон, 7
- множители Лагранжа, 156
- оператор
- рождения, 32
 - самосопряженный, 22
- ортогональность
- собственных векторов, 22
- основное состояние, 32
- осциллятор
- ангармонический, 34
 - гармонический, 32
- представление
- Гейзенберга, 27
 - Шрёдингера, 27
 - импульсное, 29
 - координатное, 28
 - энергетическое, 29
- принцип суперпозиции, 22
- радиус боровской орбиты, 13
- ряд
- Фурье, 190
- самосопряженный оператор, 22
- семплирование с отказом, 116
- симметрийный коэффициент, 88
- скобка Пуассона, 26
- смешанное состояние, 106
- соотношение неопределенностей, 25
- состояние, 24
- основное, 32
 - смешанное, 106
 - чистое, 106
- спектр, 22
- тождество
- Якоби, 26
- уравнение
- Дайсона, 68
 - Шрёдингера, 27

- на собственные значения, 22
- условие полноты, 22
- фермион, 7
- формула
 - Муавра, 160
 - Эйлера, 160
- функция ступеньки, 189
- чистое состояние, 106
- энергетическое представление, 29
- эргодичность, 119
- эрмитово сопряжение, 19

Литература

- [1] Степанов С. С. “Релятивистский мир”.
- [2] Степанов С. С. “Векторы, тензоры и формы: руководство для физиков”.
- [3] Справочник по специальным функциям под ред. Абрамовица М., Стигана И., М.: Наука (1979)
- [4] Давыдов А. С. “Квантовая механика”, ФМ, М.: 1963
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Квантовая механика, Т3 (2002)
- [6] Грин Х. Матричная квантовая механика : 2000
- [7] Bender C. B., Wu T. T. “Anharmonic Oscillator,” Phys.Rev. V.184, N.5, pp.1231-1260, (1969)
- [8] Попов В.С., Елецкий В.П., Турбинер А.В. “Высшие порядки теории возмущений и суммирование рядов в квантовой механике и теории поля”, препринт ИТЭФ (1978)
- [9] Суслов И.М. “Расходящиеся ряды теории возмущений” ЖЭТФ, 127, 6, стр. 135-1402, (2005)
- [10] Halliday I.G., Suranyi P. “Convergent perturbation series for the anharmonic oscillator” - Phys.Lett. (1979)
- [11] Stevenson P.M. “Optimized perturbation theory” - Phys.Rev. (1981)
- [12] Gendenshtein L.E. (1983)
- [13] Bagrov V.G., Gitman D. “Exact Solutions of Relativistic Wave Equations” (1990)
- [14] Barone F.A., Boschi-Filho H., Farinac C. “Three methods for calculating the Feynman propagator”, Am.J.Phys. V71, N5 (2003)
- [15] Рамон П. “Теория поля. Современный вводный курс”, М.: Мир (1984)

- [16] Stepanov S.S., Tutik R.S. “A new $1/n$ -expansion technique” Zh.Eksp.Teor.Fiz (1991)
- [17] Stepanov S.S., Tutik R.S. “A new approach to the $1/N$ -expansion for the Dirac equation” Phys.Lett. A (1992)
- [18]