

Министерство образования и науки РФ

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

# Квантовая физика

## Том 4

Релятивистская квантовая механика, квантовая теория  
многих тел, квантовый хаос

Учебное пособие

**Автор:** Зелевинский В. Г.

**Редактор перевода:** д.ф.-м.н. Дмитриев В. Ф.

**Рецензент:** д.ф.-м.н., профессор Сербо В. Г.

Учебное пособие содержит современное изложение основных фундаментальных положений квантовой физики с их применением в атомной и ядерной физике. В четвертом томе курса подробно рассматриваются релятивистская квантовая механика, квантовая теория многих тел, квантовый хаос. Вводится уравнение Дирака, рассматриваются свойства его решений, в том числе для свободного движения, для атома водорода, для движения в магнитном поле. Обсуждаются симметрии элементарных частиц, свойства нейтрино и каонов. Вводится вторичное квантование в применении к атомным и ядерным многочастичным конфигурациям. Подробно рассматриваются свойства систем тождественных частиц, коллективные явления, сверхпроводимость. Вводится понятие о квантовом хаосе. Изложение материала в каждой из глав осуществляется по принципу от простого к сложному. Разделы глав, наряду с теорией, включают задачи и их решения в количестве, достаточном для полноценного усвоения материала. Издание предназначено для студентов физических и физико-технических факультетов университетов.

Учебное пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009–2018 гг.

## Оглавление

<b>1</b>	<b>На пути к релятивистской квантовой механике</b>	<b>1</b>
1.1	Ограничения подхода . . . . .	1
1.2	Релятивистские единицы . . . . .	2
1.3	Преобразования Лоренца . . . . .	2
1.4	Энергия и импульс . . . . .	4
1.5	Тензоры и обозначения . . . . .	5
1.6	Уравнение Клейна–Гордона . . . . .	9
1.7	Сохранение тока . . . . .	11
1.8	Частицы и античастицы . . . . .	12
1.9	Электромагнитное поле . . . . .	14
1.10	Минимальная электромагнитная связь . . . . .	16
1.11	Фотоабсорбция при высоких энергиях . . . . .	19
1.12	Ядерный фотоэффект . . . . .	21
1.13	Оценки процессов в КЭД . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Уравнение Дирака: Формализм</b>	<b>29</b>
2.1	Введение уравнения Дирака . . . . .	29
2.2	Ковариантная форма и алгебра . . . . .	31
2.3	Ток . . . . .	33
2.4	Зарядовое сопряжение . . . . .	35
2.5	Релятивистские преобразования . . . . .	37
2.6	Оператор спина . . . . .	39
2.7	Билинейные коварианты . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Уравнение Дирака: решения</b>	<b>47</b>
3.1	Свободное движение . . . . .	47
3.2	Море Дирака . . . . .	48
3.3	Явные решения . . . . .	50
3.4	Полный набор решений . . . . .	53

3.5	Уравнение Паули . . . . .	56
3.6	Эффекты второго порядка . . . . .	58
3.7	Центральное поле . . . . .	60
3.8	Кулоновское поле . . . . .	64
3.9	Стационарное однородное магнитное поле . . . . .	68
<b>4</b>	<b>Дискретные симметрии, нейтрино и каоны</b>	<b>71</b>
4.1	Преобразование четности для дираковской частицы . . . . .	71
4.2	Преобразование обращения времени . . . . .	73
4.3	$CP$ преобразование . . . . .	75
4.4	Безмассовые частицы . . . . .	76
4.5	Нейтрино в безмассовом пределе . . . . .	78
4.6	Пересмотр несохранения четности . . . . .	80
4.7	Осцилляции нейтрино . . . . .	83
4.8	Нейтрино Майорана . . . . .	86
4.9	Странность . . . . .	88
4.10	Нейтральные каоны и $CP$ -четность . . . . .	89
4.11	Нейтральные каоны и квантовая регенерация . . . . .	92
<b>5</b>	<b>Идентичные частицы</b>	<b>97</b>
5.1	Неразличимые частиц . . . . .	97
5.2	Перестановочная симметрия . . . . .	98
5.3	Бозоны и фермионы . . . . .	100
5.4	Волновые функции невзаимодействующих частиц . . . . .	103
5.5	Двухнуклонные состояния . . . . .	107
5.6	Рассеяние тождественных частиц . . . . .	118
5.7	Интерферометрия интенсивности . . . . .	122
<b>6</b>	<b>Изоспин</b>	<b>127</b>
6.1	Введение изоспина . . . . .	127
6.2	Изоспиновая инвариантность . . . . .	129
6.3	Изоспин системы многих тел . . . . .	131
6.4	Изоспин и пространственно-спиновая симметрия . . . . .	132
6.5	Беглый взгляд на более общую картину . . . . .	136
6.6	Соотношения между сечениями . . . . .	138
<b>7</b>	<b>Вторичное квантование</b>	<b>145</b>
7.1	Представление числа занятости . . . . .	145
7.2	Введение во вторичное квантование . . . . .	147
7.3	Статистика Бозе . . . . .	149

7.4	Ферми-статистика . . . . .	151
7.5	алгебраические соотношения . . . . .	152
7.6	Операторы одного тела . . . . .	154
7.7	Операторы двух тел . . . . .	158
7.8	Межчастичное взаимодействие в базисе плоской волны . . . . .	159
7.9	Межчастичное взаимодействие в конечной системе . . . . .	162
<b>8</b>	<b>Атомные и ядерные конфигурации</b>	<b>165</b>
8.1	Приближение независимой частицы . . . . .	165
8.2	Добавление вращательной инвариантности . . . . .	166
8.3	Конфигурации многих частиц . . . . .	168
8.4	Обменное взаимодействие . . . . .	174
8.5	Двухэлектронная система . . . . .	176
8.6	Атом гелия — оптический спектр . . . . .	181
8.7	Правила Хунда . . . . .	182
8.8	Симметрия частица—дырка . . . . .	184
8.9	Структура оболочки . . . . .	186
<b>9</b>	<b>Фермионы</b>	<b>189</b>
9.1	Идеальный Ферми-газ . . . . .	189
9.2	Спиновый парамагнетизм . . . . .	195
9.3	Орбитальный диамагнетизм . . . . .	198
9.4	Введение в среднее поле . . . . .	200
9.5	Статистическая модель . . . . .	203
9.6	Экранирование в электронном газе . . . . .	207
9.7	Приближение Хартри—Фока . . . . .	209
9.8	Пространственно однородные системы . . . . .	212
9.9	Кулоновский газ . . . . .	214
9.10	Теория функционала плотности . . . . .	217
<b>10</b>	<b>Коллективные возбуждения</b>	<b>221</b>
10.1	Линейная цепочка . . . . .	221
10.2	Фононы . . . . .	226
10.3	Фононные моды . . . . .	228
10.4	Спиновые волны . . . . .	231
10.5	Возбуждения частица—дырка . . . . .	239
10.6	Флуктуации плотности . . . . .	241
10.7	Приближение случайных фаз . . . . .	243

<b>11</b>	<b>Бозоны</b>	<b>247</b>
11.1	Бозе–Эйнштейновская конденсация . . . . .	247
11.2	Конденсат как резервуар; химический потенциал . . . . .	250
11.3	Слабо неидеальный газ . . . . .	252
11.4	Фононы . . . . .	254
11.5	Сверхтекучесть . . . . .	257
11.6	Канонические преобразования . . . . .	258
11.7	Фононы как волны плотности . . . . .	262
11.8	Приближение локальной плотности . . . . .	264
11.9	Неоднородный газ . . . . .	267
<b>12</b>	<b>Спаривание фермионов и сверхпроводимость</b>	<b>271</b>
12.1	Спаривание . . . . .	271
12.2	Пары и старшинство . . . . .	274
12.3	Мультипольные моменты в схеме старшинства . . . . .	277
12.4	Вырожденная модель и квазиспин . . . . .	278
12.5	Каноническое преобразование . . . . .	282
12.6	Теория БКШ. Пробная волновая функция. . . . .	286
12.7	Минимизация энергии . . . . .	289
12.8	Энергетическая щель . . . . .	291
12.9	Спектр возбуждений . . . . .	295
12.10	Энергия конденсации . . . . .	300
12.11	Амплитуды переходов . . . . .	301
<b>13</b>	<b>Матрица плотности</b>	<b>305</b>
13.1	Смешанные состояния и матрица плотности . . . . .	305
13.2	Свойства матрицы плотности . . . . .	307
13.3	Тепловое равновесие . . . . .	311
13.4	Поляризационная матрица плотности . . . . .	315
13.5	Применение к рассеянию . . . . .	320
13.6	Энтропия ансамбля . . . . .	323
13.7	Эволюция матрицы плотности . . . . .	326
13.8	Ещё о линейном отклике . . . . .	327
13.9	Электропроводность . . . . .	329
<b>14</b>	<b>Квантовый хаос</b>	<b>333</b>
14.1	Классический и квантовый хаос . . . . .	333

14.2	Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона	336
14.3	Гауссовый ортогональный ансамбль. . . . .	342
14.4	Распределение межуровневых интервалов. . . . .	345
14.5	ГОА и информация. . . . .	349
14.6	Классы универсальности. . . . .	350
14.7	Полукруговой закон . . . . .	353
14.8	Хаотические собственные функции . . . . .	360
14.9	Сложность и информационная энтропия . . . . .	365
14.10	Распределение Портера-Томаса и связанные с ним распределения	368
<b>15</b>	<b>Квантовые запутанные состояния</b>	<b>371</b>
15.1	Квантовая запутанность . . . . .	371
15.2	Телепортация . . . . .	373
15.3	Математика запутывания . . . . .	375
15.4	Квантовые неравенства Белла . . . . .	378
15.5	Парадокс ЭПР(Б) и скрытые переменные . . . . .	381
15.6	Экспериментальные тесты . . . . .	385
15.7	Декогерентность и парадокс измерения . . . . .	386
	<b>Литература</b>	<b>391</b>





Квантовомеханически, решения с отрицательной энергией внутренне присущи любой релятивистской теории. Даже если мы запретим их вначале, квантовые взаимодействия неизбежно восстановят их позже.

М.Каку, *Квантовая теория поля*

## Глава 1

### На пути к релятивистской квантовой механике

#### 1.1 Ограничения подхода

Эта глава посвящена релятивистскому обобщению квантовой теории. Здесь мы ограничиваемся *одночастичной проблемой* рассматривая свободное движение уединенной частицы и движение во внешнем электромагнитном поле.

Как отмечалось в разделе I.5.10, одночастичное описание имеет ограниченную применимость. Внешнее поле должно быть существенно гладким в пространстве и времени. Количественно, характерный масштаб  $R$  или характерное время  $t$  заметных изменений поля не может быть слишком малым. В соответствии с (I.5.85), пространственный масштаб  $R$  должен превышать комптоновскую длину волны частицы, а  $t$  должно быть больше характерного времени,

$$R > \frac{\hbar}{mc}, \quad t > \frac{\hbar}{mc^2}. \quad (1.1)$$

Если неравенства (1.1) нарушаются, и поле слишком сильно локализует частицу в пространстве и времени, импульс и энергия частицы приобретают слишком большую неопределенность

$$\Delta p > mc, \quad \Delta E > mc^2. \quad (1.2)$$

В этом случае уже нельзя гарантировать *одночастичный* характер движения.

Удобно выполнить Фурье анализ поля. Тогда можно сформулировать eqs. (1.1) как ограничение на волновой вектор  $k$  и частоту  $\omega$  поля,

$$k \simeq \frac{1}{R} < \frac{mc}{\hbar}, \quad \omega \simeq \frac{1}{t} < \frac{mc^2}{\hbar}. \quad (1.3)$$

В противном случае энергия  $\hbar\omega$ , поглощаемая от поля порядка массы частицы, которая приводит к неопределенности числа частиц. Ясно, что эти ограничения, имеющие релятивистскую природу, явно выражаются через скорость света  $c$ .

## 1.2 Релятивистские единицы

Все уравнения сильно упрощаются, если записаны в подходящих единицах. В релятивистской области наиболее удобно положить  $\hbar = 1$  and  $c = 1$ . Тогда пространственные переменные и время имеют одинаковую размерность («длины»), в то время как импульс, энергия, масса, частота и волновой вектор имеют одинаковую размерность обратной длины. Например, комптоновская длина волны частицы с массой  $m$ , есть  $\lambda = \hbar/mc \Rightarrow 1/m$ . Очевидно, угловой момент, действие и скорость  $v$  теперь безразмерны; для любого физического сигнала  $v < 1$ .

Элементарный заряд  $e$  также становится безразмерным, а постоянная тонкой структуры  $\alpha = e^2 \approx 1/137$ . В любое время можно вернуться к «нормальным» единицам, вставляя обратно  $\hbar$  и  $c$  и вычисляя заново численное значение

$$\hbar c \approx 197 \text{ MeV} \cdot \text{fm}. \quad (1.4)$$

Повсюду в этой главе мы используем почти исключительно только релятивистские единицы. Отдельные использования других единиц отмечены явно.

## 1.3 Преобразования Лоренца

Лоренцева ковариантность является необходимым требованием, чтобы любая теория была правомерной в релятивистской области. Во всех уравнениях различные члены должны одинаковые свойства при преобразованиях Лоренца между инерциальными системами отсчета. Лишь в этом случае уравнения будут *ковариантны*, то есть будут сохранять свой вид, в соответствии с идеей эквивалентности всех инерциальных систем отсчета в специальной теории относительности.

Пространственно-временные координаты события образуют *4-вектор*

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, \mathbf{r}). \quad (1.5)$$

Стандартное преобразование Лоренца к системе, движущейся со скоростью  $v$  вдоль оси  $x$  по отношению к исходной системе, выражают координаты

## 1.3 Преобразования Лоренца

3

того же события в новой системе :  $x^\mu \rightarrow x'^\mu$ ,

$$x'^0 = \gamma(x^0 - vx^1), \quad x'^1 = \gamma(x^1 - vx^0), \quad x'^2 = x^2, \quad x'^3 = x^3, \quad (1.6)$$

где релятивистский фактор ( $\gamma \geq 1$ ) определяется выражением

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}. \quad (1.7)$$

Обратное преобразование дается теми же формулами (1.6) с  $v \rightarrow -v$ .

Аналогично инвариантности  $\mathbf{r}^2 = \sum_{i=1,2,3} (x^i)^2$  при евклидовых вращениях, преобразование Лоренца сохраняет релятивистский *интервал* между двумя событиями. Если одно событие задано в качестве начала отсчета пространственно-временного континуума,  $x^\mu = 0$ , а второе имеет координаты (1.5), интервал между ними равен  $\sqrt{x^2}$ , где

$$x^2 \equiv (x^0)^2 - \sum_{i=1,2,3} (x^i)^2 = t^2 - \mathbf{r}^2. \quad (1.8)$$

The invariance directly follows from (1.6),

$$x'^2 = x^2. \quad (1.9)$$

Величина (1.8) может рассматриваться как *норма* 4-вектора  $x^\mu$  в *пространстве Минковского*. К счастью, не будет путаницы с обозначением нормы,  $x^2$ , которая одновременно означает вторую пространственную координату в уравнении (1.5); в самом деле, нам не понадобится второе значение, за исключением случая вектора импульса ниже.

В противоположность евклидовым векторам, норма в пространстве Минковского не является положительно определенной. Векторы  $x^\mu$  с  $x^2 > 0$  являются *временеподобными*, а векторы  $x^2 < 0$  — *пространственноподобными*. Только события, разделенные времениподобными интервалами могут быть связаны физическими сигналами. В произвольной лоренцевской системе отсчета их упорядоченность во времени сохраняется. Нулевой интервал  $x^2 = 0$  соответствует сигналу с  $v = 1$  (распространение фронта световой волны, см. *задачу 4.3*). Временеподобные события с  $t > 0$  располагаются в верхней («будущее») половине внутренней области светового конуса, образованного мировыми линиями  $x^2 = 0$  светового сигнала. Они не могут быть переданы в нижнюю («прошлое») область, соответствующую  $t < 0$  с помощью непрерывного преобразования Лоренца. Следовательно *причинность* гарантирована, и события могут быть причинно связанными. Пространственноподобные интервалы разделяют события, которые не могут быть

связаны каким-либо физическим сигналом с  $v \leq 1$ . Подобные события не являются причинно связанными; их упорядоченность во времени зависит от системы отсчета, и существует системы, в которой они одновременны.

## 1.4 Энергия и импульс

Переменные с тем же самым законом преобразования Лоренца, что и координаты (1.6) называются *ковариантными* 4-векторами. Пометим их координаты верхними индексами,  $\mu = 0$  (временные компоненты) и  $\mu = 1, 2, 3$  (пространственные компоненты). Р?ной пример дает вектор энергии-импульса

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) \equiv (\varepsilon, \mathbf{p}). \quad (1.10)$$

Квадрат нормы Минковского

$$p^2 = (p^0)^2 - \sum_{i=1,2,3} (p^i)^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 \quad (1.11)$$

разумеется, является инвариантом преобразования Лоренца. Он определяет инвариантную массу  $m$  объекта,

$$p^2 = m^2. \quad (1.12)$$

В неподвижной системе координат ( $\mathbf{p} = 0$ ) объекта, его масса совпадает с полной энергией  $\varepsilon$ . В произвольной системе координат *дисперсионное соотношение* выражает энергию частицы уву функцию ей импульса

$$\varepsilon^2 = \mathbf{p}^2 + m^2. \quad (1.13)$$

Физическая частица обладает вещественной массой и времениподобным 4-импульсом,  $p^2 > 0$ . Более того,, устойчивая система имеет основное состояние с минимально возможной энергией. Появление новой частицы увеличивает энергию системы; иначе системы могла бы быть неустойчивой по отношению к генерации бесконечного множества частиц . Это означает, что физический корень дисперсионного соотношения (1.13) есть

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}. \quad (1.14)$$

Р?ключительный случай нулевого 4-импульса,  $p^2 = 0$ , соответствует *безмассовым* частицам. Такая частица в любой системе отсчета движется со скоростью света, и

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = |\mathbf{p}|. \quad (1.15)$$

В заданной системе отсчета, энергия (1.14) может рассматриваться как Гамильтониан свободной классической частицы. Уравнение движения Гамильтона определяет скорость

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{\varepsilon}. \quad (1.16)$$

В терминах скорости, энергия и импульс частицы массой  $m$  определяются как

$$\varepsilon = \gamma m, \quad \mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}, \quad (1.17)$$

где релятивистский фактор  $\gamma$  был определен в (1.7). В случае медленного движения,  $v \ll 1$  и энергия частицы (1.14) может быть представлена как ее масса + нерелятивистская кинетическая энергия + релятивистские поправки, см. уравнение (I.23.36),

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} \approx m + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3} + \dots \quad (1.18)$$

В квантовой механике, такое же выражение (1.16) определяет *групповую скорость*, раздел I.5.4, узкого волнового пакета, образованного плоскими волнами

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \text{const } e^{-i(\varepsilon_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \quad (1.19)$$

описывающего свободное движение подобных частиц. Обычно, групповая скорость может быть ассоциирована с распространением физического сигнала (за исключением областей аномальной дисперсии в средах). Как видно из (1.14) и (1.16),  $|\mathbf{v}| \leq 1$ , равенство становится справедливым для безмассовых частиц.

## 1.5 Тензоры и обозначения

Правило (1.8, 1.11) образования Лоренц-инвариантов может быть обобщено для тензоров высшего ранга с помощью *метрического тензора* в пространстве Минковского. Оно позволяет вводить весьма удобные тензорные обозначения. Заметим, что в нашей системе обозначений мы не используем мнимые компоненты времени 4-векторов, как это часто делают многие авторы.

Определим метрический тензор  $g_{\mu\nu}$  as  $4 \times 4$  matrix ( $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ ), который является диагональным с ненулевыми матричными элементами

$$g_{00} = 1, \quad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1. \quad (1.20)$$

Р?ногда говорят, что он имеет *сигнатуру*  $(+, -, -, -)$ . Для произвольного контравариантного 4-вектора  $a^\nu = (a^0, \mathbf{a})$ , метрический тензор (1.20) определяет его *ковариантное* дополнение, маркируемое нижними, а не верхними индексами,

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu, \quad (1.21)$$

таким образом. что  $a_0 = a^0$ ,  $a_i = -a^i$ . Греческие индексы всегда пробегают значения 0,1,2,3 во время, как латинские имеют значения 1,2,3. С этого момента мы будем опускать знак суммирования, подобно (1.21), используя стандартное правило - опускаются повторяющиеся индексы (один верхний, другой нижний), по которым производится суммирование. Например, вместо (1.21) мы будем писать  $a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$ .

С метрическим тензором (1.20), скалярное произведение двух 4-векторов  $a$  и  $b$  определяется как

$$(ab) \equiv a \cdot b = a^0 b^0 - \sum_{i=1,2,3} a^i b^i = a^\mu g_{\mu\nu} b^\nu = a^\mu b_\mu = a_\nu b^\nu. \quad (1.22)$$

Ранее обсуждавшиеся величины  $x^2$  and  $p^2$  являются скалярными квадратами  $x_\mu x^\mu$  and  $p_\mu p^\mu$ , соответственно. Очевидно, любое скалярное произведение (1.22) является лоренцевым инвариантом.

Контравариантные *4-тензоры* ранга  $r$  задаются множествами  $4^r$  компонентов  $T^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_r}$ , которые при преобразовании Лоренца преобразуются как произведения контравариантных 4-векторов  $a^{\mu_1} a^{\mu_2} \dots a^{\mu_r}$ . Умножение на  $g_{\mu_l \nu_l}$  с суммированием по  $\mu_l$ , где  $l$  - один из  $1, \dots, r$ , образует смешанный тензор с опущенным (контравариантным) верхним индексом  $\{\mu_i\}$ , where  $\mu_i$ , и (ковариантным) нижним индексом  $\nu_l$ . Таким образом можно получить тензоры, которые контравариантны по  $s$  индексам,  $s = 1, \dots, r$ , и ковариантны по оставшимся  $r - s$  индексам, вплоть до полностью ковариантного тензора  $T_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_r}$ .

Для каждой пары контравариантных и ковариантных индексов операция *свертки* позволяет преобразовать исходный тензор  $T_{(q)}^{(p)}$  ранга  $r = p + q$  в новый тензор  $T_{(q-1)}^{(p-1)}$  ранга  $r - 2$ , котрый является суммой  $T_{\dots \mu \dots}^{\dots \mu \dots}$ . Таким образом. для тензора второго ранга  $T^{\mu\nu}$  свертка приводит к *скаляру* (инвариантный тензор ранга 0),

$$T^{\mu\nu} \Rightarrow g_{\lambda\nu} T^{\mu\nu} = T_\lambda^\mu \Rightarrow T_\mu^\mu. \quad (1.23)$$

Другими словами, свертка выполняется перемножением  $g_{\mu\nu} T^{\mu\nu} = T_\mu^\mu$ .

Для самого метрического тензора, определим контравариантный двойник  $g^{\mu\nu}$ , как тензор обратный к  $g_{\mu\nu}$ . Численно это соответствует оригинальному тензору (1.20),  $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$ . Смешанный тензор в этом случае есть просто единичный кронекеров тензор  $\delta^\mu_\nu$  со всеми диагональными элементами равными 1 и нулевыми внедиагональными элементами,

$$g_{\lambda\nu}g^{\mu\nu} = \delta^\mu_\lambda. \quad (1.24)$$

Метрический тензор инвариантен по отношению к преобразованию Лоренца.

В качестве примера, рассмотрим операторы *градиента* ( $\partial/\partial t$  и  $\nabla$ ). Стандартное соответствие между вектором энергии-импульса (1.10) и квантовыми операторами (отмеченными крышечкой при необходимости) это

$$p^0 = \varepsilon \Rightarrow \hat{p}^0 = i\frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\nabla. \quad (1.25)$$

Так как  $p^0$  и  $\mathbf{p}$  образуют контравариантный вектор (1.10), имеем

$$p^\mu \Rightarrow \hat{p}^\mu = i\left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) \equiv i\partial^\mu, \quad (1.26)$$

что определяет *контравариантный градиент*

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (1.27)$$

образуемый частными производными по отношению к *ковариантным* координатам  $x_\mu = (t, -\mathbf{r})$ . аналогично этому, *ковариантный градиент*,

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right) \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad (1.28)$$

образован производными по отношению к контравариантным координатам  $x^\mu$ . Во всех уравнениях различные члены должны иметь тензор той же самой структуры и те же самые свободные индексы в тех же самых позициях (верхних или нижних).

Общее преобразование Лоренца [конкретный пример дан в (1.6)] является линейным преобразованием  $\Lambda$  контравариантных координат 4-вектора, и может быть записано в матричной форме

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (1.29)$$

Здесь сложения индексов определяются контравариантностью вектора  $x^\mu$ . В матрицах  $M^\mu_\nu$  верхний индекс  $\mu$  нумерует строку, а нижний индекс  $\nu$

соответствует столбцу. Таким образом, для преобразования Лоренца вдоль оси  $x$ , уравнение (1.6), матрица преобразования

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v & 0 & 0 \\ -\gamma v & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(1 - v\sigma_x) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Второе представление использует матрицу  $4 \times 4$ , записанную с использованием блоков  $2 \times 2$ , которые формально выражаются через матрицы Паули.

Преобразование ковариантных компонент видно из простой цепочки равенств,

$$x'_{\mu} = g_{\mu\lambda} x'^{\lambda} = g_{\mu\lambda} \Lambda^{\lambda}_{\sigma} x^{\sigma} = \Lambda_{\mu\sigma} g^{\sigma\nu} x_{\nu} = \Lambda_{\mu}^{\nu} x_{\nu}. \quad (1.31)$$

Здесь используются правила поднятия и опускания компонент тензора. Матрицы в (1.31) и (1.30) отличаются знаком скорости,

$$\Lambda_{\mu}^{\nu} = \begin{pmatrix} \gamma(1 + v\sigma_x) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.32)$$

Группа Лоренца является группой преобразований, сохраняющих норму Минковского векторов,

$$(x'y') = x'^{\mu} y'_{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} y_{\sigma} \Lambda^{\sigma}_{\mu} = (xy), \quad (1.33)$$

которая подразумевает, что матрицы группы должны удовлетворять соотношению

$$\Lambda^{\sigma}_{\mu} \Lambda^{\mu}_{\nu} = \delta^{\sigma}_{\nu}. \quad (1.34)$$

Легко проверить, что, как мы уже отмечали, метрический тензор инвариантен относительно преобразования Лоренца. В самом деле, тензоры преобразуются как произведения векторов (1.29),

$$g^{\mu\nu} \rightarrow g'^{\mu\nu} = \Lambda^{\mu}_{\sigma} \Lambda^{\nu}_{\rho} g^{\sigma\rho} = \Lambda^{\mu\rho} \Lambda^{\nu}_{\rho}, \quad (1.35)$$

где на последнем шаге используется правило поднятия и опускания индексов. Опуская верхний индекс  $\mu$  см. (1.34), получим

$$g'^{\mu\nu} = \Lambda^{\rho}_{\tau} \Lambda^{\nu}_{\rho} g^{\mu\tau} = \delta^{\nu}_{\tau} g^{\mu\tau} = g^{\mu\nu}. \quad (1.36)$$

Мы не будем изучать здесь общую структуру группы Лоренца, см. [Wei1998].



## 1.6 Уравнение Клейна–Гордона

Нерелятивистское уравнение Шрёдингера для движения может быть «выведено» подстановкой квантовых операторов (1.25) для энергии  $\varepsilon$  и импульса  $\mathbf{p}$  в нерелятивистское дисперсионное соотношение  $\varepsilon = \mathbf{p}^2/2m$ . Плоские волны (1.19) образуют полный набор решений. Произвольное решение может быть представлено суперпозицией плоских волн с амплитудами, определенными Фурье-разложением исходных функций  $\Psi(0, \mathbf{r})$ .

Явный релятивистский аналог должен иметь решение для плоской волны с определенным импульсом и энергией, связанными *релятивистским законом дисперсии*, (1.13) который включает массу покоя. В притивоположность уравнению Шрёдингера, производные по времени и пространству должны появляться в том же порядке, чтобы гарантировать Лоренц-ковариантность. Этого можно достичь, если использовать оператор подстановки уравнения (1.25),

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \Psi = \left[(-i\nabla)^2 + m^2\right] \Psi, \quad (1.37)$$

или, в явной форме Лоренц-инвариантности (сравни не операторное выражение (1.12)),

$$\hat{p}^2 \Psi \equiv -\partial^2 \Psi = m^2 \Psi. \quad (1.38)$$

Здесь 4-вектор  $\hat{p}^\mu = i\partial^\mu$  является 4-градиентом (1.26), а дифференциальный оператор второго порядка в уравнении (1.38) это *оператор д'Аламбера*

$$\partial^2 \equiv \square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \quad (1.39)$$

Это скалярный квадрат (1.22) вектора  $\partial^\mu$ , который дает Лоренц-инвариантное 4-мерное обобщение трехмерного оператора Лапласа. Заметим, что, вследствие второго порядка,  $\Psi$  and  $\Psi^*$  являются решениями того же самого уравнения (обратимая во времени инвариантность свободного релятивистского движения). Нужно также упомянуть, что второго порядка производных по времени, заданная начальная волновая функция  $\Psi(t_0)$  не полностью определяет будущее эволюционной системы, здесь необходимо знать также начальное значение производной  $\dot{\Psi}(t_0)$ . Это относится к конкретной форме плотности вероятности, которая, вообще говоря, включает производную по времени волновой функции, см. ниже уравнение (1.46).

В (1.37) мы «вывели» уравнение *Клейна–Гордона–Фока*, или проще. уравнение *Клейна–Гордона*, (УКГ), которое является основным релятивистским волновым уравнением для любой свободной частицы. Это скалярное уравнение для однокомпонентной волновой функции  $\Psi(x)$ . Для *бесспиновых* частиц это единственное волновое уравнение. Волновые функции для частиц с ненулевым спином — *многокомпонентные* объекты. Р?С... компоненты определяют амплитуды различных внутренних состояний, связанных с внутренней структурой. Соответствующие волновые уравнения описывают динамику этих компонент, и, следовательно, они более сложны, чем УКГ. Однако, дисперсионное соотношение для частицы в целом по-прежнему задается соотношением (1.13). Следовательно, даже в этом случае волновая функция свободного движения должна быть решением УКГ. По построению, отыскивая решение (1.38), как собственное состояние оператора  $\hat{p}$ ,

$$\Psi(x) \equiv \Psi(t, \mathbf{x}) = \text{const} \cdot e^{-i(p \cdot x)} = \text{const} \cdot e^{-i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}, \quad (1.40)$$

где  $p^\mu = (\epsilon, \mathbf{p})$  — собственное значение  $\hat{p}^\mu$ , мы находим желаемое дисперсионное соотношение (1.13) между  $\epsilon$  и  $\mathbf{p}$ .

Другие виды решений, отвечающие полю, создаваемому источником частиц, описываются УКГ. Пусть, например, тяжелая точечная частица расположена в начале координат. В модели ядра сильные взаимодействия создают *пионное поле* вокруг источника. Реальные пионы с массой  $m_\pi$  удовлетворяют УКГ, но в нуклонном поле кванты виртуальны. *статическое* сферически симметричное решение для пионного поля должно иметь сингулярность в центре, как в электростатическом случае. Такое решение

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} e^{-r/\lambda_\pi}, \quad (1.41)$$

где  $\lambda_\pi = 1/m_\pi$ , или  $\hbar/m_\pi c$  в обычных единицах, есть комптоновская длина волны пиона. Поле экспоненциально падает на расстоянии  $\sim \lambda_\pi$ , в соответствии с простейшими оценками *Задача I.5.15*. Пион, как легчайшая частица сильного взаимодействия (*адрон*) определяет диапазон ядерных сил, Рис. I.5.12. На ближних расстояниях, силы определяются более тяжелыми мезонами с меньшей комптоновской длиной волны. В пределе, когда масса пиона ничтожно мала, *потенциал Юкавы* (1.41), см. *Задача I.1.8*, накладывается на обычный кулоновский потенциал точечного заряда, когда силы переносятся безмассовыми частицами (фотоны в электродинамике).

## 1.7 Сохранение тока

Сохранение вероятности есть неотъемлемое свойство теории. Такие свойства, *локальные законы сохранения*, выражаются уравнениями того же типа, что и уравнение непрерывности (I.2.11). В релятивистском случае мы рассматриваем *векторное поле тока*

$$j^\mu(x) = (j^0(x), \mathbf{j}(x)) \quad (1.42)$$

зависящее от координат  $x = (t, \mathbf{r})$ , где  $j^0(x) = \rho(x)$  - плотность сохраняемого количества. В соответствии с уравнением (I.2.12), сохраняемая полная постоянная движения является объемным интегралом временной компоненты тока по всему пространству,

$$Q = \int d^3x j^0. \quad (1.43)$$

Ток, удовлетворяющий уравнению непрерывности, называется *консервативным током*. Электрический ток консервативен, поскольку полный электрический заряд является точной константой движения. Другие константы движения могут генерировать свои собственные консервативные токи.

Вводя 4-вектор градиента (1.26), перепишем уравнение непрерывности как  $\partial^0 j^0 - (-\nabla \cdot \mathbf{j}) = 0$ , которое ничего не значит, но инвариантное скалярное произведение (1.22) 4-градиента и 4-тока (1.42), или the 4-дивергенция тока,

$$\partial^\mu j_\mu \equiv \partial_\mu j^\mu = 0. \quad (1.44)$$

В более общих случаях можно получить сохраняющийся тензор более высокого ранга, удовлетворяющий

$$\partial_\mu T^{\alpha \cdots \mu \cdots \omega} = 0. \quad (1.45)$$

Тогда все компоненты объемного интеграла  $\int d^3x T^{\alpha \cdots 0 \cdots \omega}$  являются постоянными движения. Сохранение нерелятивистского тока, раздел I.7.3, следует из уравнения Шрёдингера для свободного движения и для движения в любом внешнем потенциале  $U(t, \mathbf{r})$ . Этот закон сохранения эквивалентен унитарности - сохранению полной вероятности экспериментов, сделанных с частицей. Однако, переменные  $\rho$ , уравнение (I.2.5), и  $\mathbf{j}$  из уравнения (I.7.54) не образуют 4-вектор, так как описание, очевидно, не является Лоренц-ковариантным.

Определим 4-ток для УКГ, как релятивистское обобщение шрёдингеровского вероятностного тока (I.7.54),

$$j^\mu(x) = \frac{1}{2im} [\Psi^*(\partial^\mu \Psi) - (\partial^\mu \Psi^*)\Psi]. \quad (1.46)$$

Легко проверить, что этот ток сохраняется. Уравнение (1.44) удовлетворяется, поскольку в выражении  $\partial_\mu j^\mu$  члены с произведением градиентов взаимно уничтожаются, в то время как члены с  $\partial^2$  уничтожаются в силу УКГ для  $\Psi$  и  $\Psi^*$ .

Релятивистский ток (1.46) можно представить как 4-градиент фазы, также как в (I.7.61). Он исчезает для вещественных полей  $\Psi = \Psi^*$ , подобно тому, как это было в случае *пространственных* компонент тока  $\mathbf{j}$  в нерелятивистской задаче. Однако, *временная* компонента в (1.46) очевидно ведет себя не так, как в нерелятивистском случае (I.2.5). Чтобы понять разницу, вычислим ток (1.46) для плоской волны (1.40). Это дает, в полной аналогии с шрёдингеровским случаем, уравнения (I.2.27, I.2.33),

$$j^\mu = \frac{p^\mu}{m} |\Psi|^2. \quad (1.47)$$

Временная компонента тока (1.46)

$$j^0 = \rho = \frac{\varepsilon}{m} |\Psi|^2. \quad (1.48)$$

Р?Р. (1.17) ясно, что разница с нерелятивистским случаем обусловлена  $\gamma$ -фактором (1.7),  $\gamma = \varepsilon/m$ . В неподвижной системе отсчета частицы  $\varepsilon \rightarrow m$ , и (1.48) сводится к (I.2.5). Это приблизительно справедливо для медленного движения вплоть до поправок  $\sim p^4$  к кинетической энергии (1.18). В системе отсчета, в которой частица движется со скоростью  $v$ , имеет место лоренцевское сокращение длины вдоль направления движения на величину  $1/\gamma$ . Чтобы сохранить значение консервативной величины, плотность должна возрастать на множитель  $\gamma = \varepsilon/m$ . Это то, что мы получили в уравнении (1.48). Важно, что плотность это временная компонента 4-вектора, а не лоренцевский скаляр.

## 1.8 Частицы и античастицы

Вследствие линейности УКГ (1.38), любая суперпозиция плоских волн (1.40) с правильным соотношением (1.13) между энергией и импульсом снова является решением УКГ. Наоборот, плоские волны образуют полный

набор, таким образом, любое решение УКГ может быть представлено их суперпозицией.

Однако, дисперсионное соотношение (1.13), выведенное из УКГ, квадратично и разрешает оба знака для  $\varepsilon$ , в противоположность «нормальному» физическому требованию положительности энергии (1.14). С другой стороны, решения с  $\varepsilon < 0$  не могут быть отвергнуты как нефизические, поскольку это может разрушить *полноту* решений для плоских волн и нарушить принцип суперпозиции. Следует заключить, что такие решения допустимы, но  $\varepsilon < 0$  не может интерпретироваться как энергия частицы.

Отметим, что сохраняемая плотность (1.48) отрицательная для решений с отрицательной «энергией». Следовательно, невозможно интерпретировать эту плотность, как вероятностную плотность, как это было сделано в нерелятивистской квантовой механике. Сохраняемая величина — это некий *заряд* иакой, что для решений в виде плоской волны, знаки для положительной и отрицательной  $\varepsilon$  противоположны.

Мы приходим к идее *античастиц*, которые описываются состояниями, удовлетворяющими тому же самому уравнению, но с  $\varepsilon < 0$ . Любой сохраняемый заряд принимает противоположные значения для частиц и античастиц. Для вещественного поля  $j^\mu = 0$ ; отсутствие сохраняемых зарядов делает в этом случае частицы тождественными их античастицам (*нейтральное поле*).

Для  $\varepsilon < 0$  положительная величина  $-\varepsilon = |\varepsilon|$  должна интерпретироваться как энергия античастицы. Иногда удобно говорить о положительной и отрицательной «энергиях» имея ввиду различные решения УКГ. Для  $|\varepsilon| \geq m$  в случае массивного поля,  $m \neq 0$ , эти классы решений разделены *энергетическим промежутком*  $\Delta\varepsilon = 2m$  (верхний и нижний континуум). Существование античастиц, в этом смысле, является следствием лоренцевской инвариантности. Попытка обойти проблему знака энергии выполнением квантования (1.25) в уравнении (1.14) вместо (1.13) может привести к уравнению с производной по времени первого порядка, но пространственные производные до бесконечного порядка возникают из-за квадратного клорня в (1.14).

Переосмысление в терминах частиц и античастиц с положительными энергиями, но противоположными зарядами получает большую ясность в квантовой теории поля. После *вторичного квантования*, раздел 18, поле  $\Psi(x)$  становится оператором в *пространстве Фока*. Это пространство объединяет все состояния Гильбертовых пространств с произвольным числом частиц и античастиц.  $\Psi$ -оператор уничтожает частицы и создает античастицы в обоих случаях, уменьшая заряд системы. Соответствующие члены

в разложении плоской волны  $\Psi$ -оператора являются формой (1.40) с положительной и отрицательной  $\varepsilon$ , соответственно. Тогда в обоих случаях  $\varepsilon$  дает разность энергии  $E_i - E_f$  между начальным и конечным состояниями системы с числом частиц  $N_f = N_i \mp 1$ . Полная формулировка дается аналогично квантованию электромагнитного поля, раздел 4.3.

Для того, чтобы увидеть, что движения частиц и античастиц — непротиворечивы в простейшем случае ненулевого заряда, а именно, электрического заряда, мы должны расширить УКГ, чтобы описать движение во внешнем электромагнитном поле иначе, чем свободное движение.

## 1.9 Электромагнитное поле

Вектор-потенциал  $\mathbf{A}(x)$  и скалярный потенциал  $\varphi(x) \equiv A^0(x)$  образуют 4-вектор электромагнитного потенциала

$$A^\mu(x) = (A^0(x), \mathbf{A}(x)) \quad (1.49)$$

со стандартным поведением, уравнение (1.29), при лоренцевских преобразованиях.

Как уже обсуждалось в разделе I.13.2, электромагнитные потенциалы не определяются единственным образом электромагнитными полями. Сохраняя векторный характер  $\mathbf{A}(t, \mathbf{r})$  можно сделать *калибровочное преобразование*,

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) \Rightarrow \mathbf{A}'(t, \mathbf{r}) = \mathbf{A}(t, \mathbf{r}) + \nabla f(t, \mathbf{r}), \quad (1.50)$$

$$\varphi(t, \mathbf{r}) \Rightarrow \varphi'(t, \mathbf{r}) = \varphi(t, \mathbf{r}) - \frac{\partial f}{\partial t} \quad (1.51)$$

с той же функцией  $f(t, \mathbf{r})$ , как в (1.50). В ковариантных обозначениях уравнения (1.26), калибровочное преобразование (1.50, 1.51) 4-векторного потенциала (1.49)

$$A^\mu(x) \Rightarrow A'^\mu(x) = A^\mu(x) - \partial^\mu f(x). \quad (1.52)$$

Используя два 4-вектора, градиент (1.26) и векторный потенциал (1.49), введем *тензор поля*

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (1.53)$$

По построению, этот тензор антисимметричный,  $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ , и следовательно, имеет шесть независимых (вне диагональных) компонент. Прямое сравнение с (13.6) и (13.7) показывает, что ( $j, l = 1, 2, 3$ )

$$F^{j0} = -F^{0j} = \mathcal{E}^j \quad (1.54)$$

(электрическое поле) и

$$F^{jk} = -\varepsilon_{jkl}\mathcal{B}^l \quad (1.55)$$

(магнитное поле). Здесь  $\varepsilon_{jkl}$  – 3-мерный антисимметричный тензор. Таким образом, «векторы» электромагнитного поля  $\vec{\mathcal{E}}$  и  $\vec{\mathcal{B}}$  действительные компоненты антисимметричного тензора, а не векторы в пространстве Минковского.

Следующая тождественность является формальным следствием определения (1.53):

$$\partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} = 0. \quad (1.56)$$

Легко видеть, что эта комбинация антисимметрична по отношению ко всем трем индексам и, следовательно, (1.56) содержит только  $(4 \cdot 3 \cdot 2)/3! = 4$  независимых уравнения, которые соответствуют *первой паре уравнений Максвелла*, независимо от зарядов и токов,

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{B}} = 0, \quad (1.57)$$

$$\operatorname{curl} \vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathcal{B}}}{\partial t}. \quad (1.58)$$

*Вторая пара* аоказывает, как поля генерируются зарядами и токами,

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{E}} = 4\pi\rho_{\text{ch}}, \quad (1.59)$$

$$\operatorname{curl} \vec{\mathcal{B}} = \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{j}_{\text{ch}}. \quad (1.60)$$

Эти уравнения, выраженные в терминах тензора (1.53) и вектора тока устроены как в (1.42), явно Лоренц-ковариантны,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j_{\text{ch}}^\nu. \quad (1.61)$$

Уравнение (1.56) может быть выражено в другой форме, используя полностью антисимметричный 4-тензор  $\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho}$ , аналогично 3-тензору (4.38), но имеет  $6!$  независимых компонент, равных  $\pm 1$ . Свертка тензора поля (1.53) дает так называемый *дуальный тензор*

$$\tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho}F^{\lambda\rho}. \quad (1.62)$$

Этот новый тензор также является антисимметричным и изменяет роль электромагнитных полей:

$$F_{0j} = \mathcal{B}_j, \quad F_{jl} = -\varepsilon_{jlk} \mathcal{E}_k. \quad (1.63)$$

Теперь мы можем выписать уравнение (1.56) в форме

$$\varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho} \partial^\nu F^{\lambda\rho} = 0 \quad (1.64)$$

где очевидно, что существуют только четыре независимых уравнения.

### 1.10 Минимальная электромагнитная связь

Система уравнений Максвелла достаточна, чтобы определить поля, заданные распределением зарядов и токов во времени и в пространстве. Вторая пара (1.59, 1.60) накладывает ограничения на эти распределения. Поскольку  $\text{div curl} \equiv 0$ , эти уравнения совместны, только если плотность заряда и плотность тока удовлетворяют уравнению непрерывности. Это следует немедленно из ковариантной формы (1.44), (1.61): поскольку антисимметрия тензора поля,  $\partial_\mu \partial_\nu F^{\mu\nu} \equiv 0$ . Таким образом, электромагнитное поле взаимодействует с *сохраняющимся током*. Характер взаимодействия может быть зафиксирован требованием *калибровочной инвариантности*.

Мы знаем, что калибровочная инвариантность эквивалентна фазовому преобразованию (I.13.26) волновой функции заряженной частицы; в наших единицах,

$$\Psi \rightarrow \Psi e^{ief(x)}, \quad (1.65)$$

где  $e$  - электрический заряд частицы, а  $f(x)$  — произвольная регулярная калибровочная функция координат и времени. С подобным преобразованием,

$$\partial^\mu \Psi \rightarrow \left( (\partial^\mu \Psi) + ie(\partial^\mu f) \Psi \right) e^{ief}. \quad (1.66)$$

Уравнения, содержащие оператор 4-импульса (1.26) будут изменяться в соответствии с

$$\hat{p}^\mu \Psi \rightarrow \left( (\hat{p}^\mu \Psi) - e(\partial^\mu f) \Psi \right) e^{ief}. \quad (1.67)$$

Теперь изменение калибровки (1.65) волновой функции будет компенсироваться, если заряд взаимодействует с *вектором поля*  $A^\mu$  с помощью «длинной производной»,

$$\partial^\mu \rightarrow D^\mu \equiv \partial^\mu + ieA^\mu, \quad (1.68)$$



м поле, возникающее таким образом, должно иметь свое калибровочное преобразование (1.52) с той же функцией  $f(x)$ , как в (1.65). На этом языке электромагнитное поле является *калибровочным векторным полем*, и мы приходим к процедуре введения взаимодействия заряженной частицы с электромагнитным полем путем подстановки

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - eA^\mu, \quad (1.69)$$

использованной ранее, раздел I.13, по аналогии с классической теорией. Это так называемая *минимальная связь*. Ситуация более сложная для частиц со сложной внутренней структурой.

УКГ (1.38) для заряженной частицы, взаимодействующей с электромагнитным полем  $(\varphi, \mathbf{A})$  берется в форме

$$(\hat{p} - eA)^2 \Psi \equiv \left\{ \left( i \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 - (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 \right\} \Psi = m^2 \Psi. \quad (1.70)$$

Например, для отрицательного пиона заряд  $-e$ ; в статическом кулоновском поле ядер заряд  $Ze$ ; аналог уравнения Шрёдингера для атома водорода

$$\left\{ \left( i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 \right\} \Psi = m^2 \Psi. \quad (1.71)$$

Это уравнение можно применить для пионных (или каонных, с отрицательным каоном вместо пиона) атомов для состояний, которые не проникают вглубь ядер, где ядерные силы игнорируются в уравнении (1.71) становятся доминирующими. Даже на атомных орбитах, далеких от ядер, эти силы все еще важны, становясь ответственными за возможный ядерный захват пиона или каона, эффект, который вместе с электромагнитным (обычно рентгеновским) излучением, делает все мезоатомные орбиты, включая основное состояние, квазистационарными. Пренебрегая захватом, мы можем определить водородоподобные спектры таких мезоатомов.

### Задача 1.1

Использование нерелятивистского уравнения Шрёдингера для атома водорода в качестве реперной точки, чтобы найти спектр граничных состояний, предсказанных уравнением (1.71).

**Решение** Стационарные состояния с энергией  $E$  являются решениями проблемы собственных значений

$$\left\{ \hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 - \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.72)$$

со стандартной процедурой разделения угловых переменных, которая может быть переписана для радиальной функции  $R_\ell(r) = u_\ell(r)/r$  частичной волны  $\ell^{\text{th}}$  как

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1) - Z^2 e^4}{r^2} - \frac{2EZe^2}{r} \right\} u_\ell = (E^2 - m^2)u_\ell. \quad (1.73)$$

Это согласуется с уравнением (I.18.2) для атома водорода с очевидным соответствием:

$$\ell(\ell+1) \Rightarrow \ell(\ell+1) - Z^2 e^4, \quad k^2 \Rightarrow E^2 - m^2, \quad e^2 \Rightarrow e^2 \frac{E}{m}. \quad (1.74)$$

В уравнении Шрёдингера спектр граничного состояния (I.18.14) дан уравнением

$$E_{n\ell} = -\frac{mZ^2 e^4}{2n^2}, \quad (1.75)$$

где главное квантовое число (I.18.13),  $n = N + \ell + l$ , отличается от  $\ell$  на *целое*. Теперь вместо  $\ell$  мы должны использовать  $\ell'$ , как это следует из первого равенства (1.74),

$$\ell' = \sqrt{(\ell + 1/2)^2 - Z^2 e^4} - 1/2 \equiv \ell - \Delta_\ell, \quad (1.76)$$

где  $\Delta_\ell$ , определенное этим уравнением есть требуемый сдвиг  $\ell$ , м, следовательно, также главным квантовым числом. Подстановками (1.74) и (1.76), получим, вместо (1.75),

$$\frac{E_{n\ell}^2 - m^2}{2m} = -\frac{mZ^2 e^4}{2(n - \Delta_\ell)^2} \frac{E_{n\ell}^2}{m^2}. \quad (1.77)$$

Это новое уравнение для  $E_{n\ell}$  с результатом

$$E_{n\ell} = \frac{m}{\sqrt{1 + [Z^2 e^4 / (n - \Delta_\ell)^2]}}. \quad (1.78)$$

Появляется «дополнительное» кулоновское вырождение, раздел II.3.2, и уровни в той же главной оболочке разделяются в соответствии с их угловым моментом  $\ell$ . Нерелятивистский предел соответствует разложению в ряды по степеням  $Z^2 e^4 = (Z\alpha)^2$ ,

$$\Delta_\ell \approx \frac{(Z\alpha)^2}{2\ell + 1}, \quad E \approx m \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left[ \frac{3}{8n} - \frac{1}{2\ell + 1} \right] \right\}. \quad (1.79)$$

Эта теория перестает работать при  $Z\alpha > 1/2$ , когда, в соответствии с (1.76),  $\Delta_0$  становится комплексной. В таких сильных полях одночастичная аппроксимация не работает, и размер орбиты порядка комптоновской длины волны, при нарушении релятивистских соотношений (1.3).

Релятивистские поправки, предсказанные УКГ, не согласуются с экспериментальными данными по тонкой структуре водородоподобного спектра для ионов с одним электроном. Это показывает, что УКГ для скалярной функции  $\Psi$  не описывает квантовое поведение релятивистских электронов. Однокомпонентная функция  $\Psi$  соответствует частице со спином  $s = 0$ . Для частиц с большим спином существует внутренняя *многокомпонентная* динамика, в дополнение к общерелятивистскому требованию, чтобы каждая компонента удовлетворяла УКГ.

### 1.11 Фотоабсорбция при высоких энергиях

Здесь мы должны совершить поверхностный обзор процессов при энергиях выше, чем могут быть описаны в основах нерелятивистской квантовой механики. Чтобы облегчить сравнение по порядку величины мы должны использовать обычные единицы.

Сечение атомного фотоэлектрического эффекта падает при  $\hbar\omega \gg mc^2$ , как это обсуждалось в разделе 5.8. Фэтоэффект - это главный канал поглощения мягкого гамма-излучения до энергий  $\hbar\omega \sim (10 - 100) \text{ КэВ}$ . Наши результаты хорошо работают до  $\hbar\omega \approx mc^2/2$ , и фотоабсорбция от  $K$ -оболочки является главной частью полного эффекта. Когда мы доходим до  $\hbar\omega$  порядка нескольких МэВ, главный механизм поглощения гамма-лучей это эффект Комптона, раздел I.1, рассеяние света от электронов, которые могут рассматриваться как свободные частицы при таких больших значениях  $\hbar\omega$ . Используя наши вычисления раздела 5.8, мы можем отследить превращение света внеграницных электронов в комптоновском рассеянии, где электрон может рассматриваться как свободная частица.

При возрастании  $\omega$ , длина волны фотона становится меньше размеров атома. В матричных элементах (6.61) и (6.62), функция  $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$  осциллирует на размерах атома, и амплитуда рассеяния с переходом электрона в дискретный спектр быстро убывает. Это то же самое, что и уменьшение атомного форм-фактора с увеличением передачи импульса, обсужденная в разделе 3.3. Тогда, по аналогии с рассеянием заряженных частиц, роль процессов, связанных с излучением электрона атома в пространство, возрастает. Если конечный импульс электрона близок к  $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , осциллирующая экспонента  $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}$  уничтожается плоской волной электрона. В этом случае,

для заданного угла рассеяния  $\theta$  между  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , частота  $\omega'$  рассеянного фотона определяется законами сохранения импульса и энергии, которые те же самые, что и для рассеяния свободного электрона, - это тот же эффект Комптона. Это проявляется в сдвиге узкой линии с частотой  $\omega'$ , определенной выражением (I.1.7),

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + (\hbar\omega/mc^2)(1 - \cos\theta)}. \quad (1.80)$$

Ширина линии Комптона (1.80) зависит от неопределенности  $\Delta p$  импульса электрона в атоме. В пределе  $\hbar\omega/mc^2 \ll 1$  это дает Томсоновское рассеяние свободных электронов с сечением (6.86).

При высоких энергиях,  $\hbar\omega \gg mc^2$ , для не слишком малых углов рассеяния, конечная длина волны  $\lambda' = 2\pi\lambda_C(1 - \cos\theta)$  не зависит от начальной частоты  $\omega$ , поскольку определяется комптоновской длиной волны  $\lambda_C$ . Точное вычисление комптоновского рассеяния в квантовой электродинамике дается *формулой Клейна-Нишины-Тамма, 1929-1930* [Akh1965],

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \frac{\omega'^2}{4\omega^2} \left( \frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - 2 + 4(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)^2 \right), \quad (1.81)$$

где  $\mathbf{e}$  and  $\mathbf{e}'$  - векторы поляризации для исходного и конечного фотонов, соответственно,  $r_0$  - классический радиус электрона (I.1.40), и  $\omega'$  определяется через угол рассеяния (1.80). Для  $\omega' = \omega$ , мы снова приходим к томсоновскому рассеянию (6.83).

### Задача 1.2

Вычислить полное сечение рассеяния неполяризованных фотонов на  $\nu = \hbar\omega/mc^2 \gg 1$ .

### Решение

$$\sigma = \pi r_0^2 \frac{1}{\nu} \left( \ln(2\nu) + \frac{1}{2} \right). \quad (1.82)$$

Для атома результат должен быть умножен на число  $Z$  электронов. Сечение падает с ростом частоты  $\omega$ . Это означает, что проникающая способность гамма-лучей или жесткого рентгена возрастает.

Новый процесс,  $e^+e^-$  *рождение пары*, становится возможным для  $\nu > 2$ , то есть  $\hbar\omega > 2m_e c^2 \approx 1$  МэВ. Это возможно в присутствии ядер, которые получают недостающий импульс, чтобы удовлетворить законам сохранения. В то же время, энергия отдачи ядра мала, поскольку велика его масса.

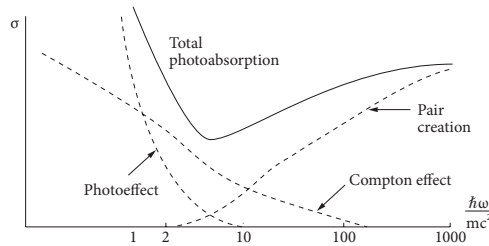


Рис. 1.1. Роль различных механизмов фотопоглощения

. Сечение рождения пары [Akh1965] возрастает с частотой  $\propto Z^2 \ln \omega$ , и непрерывно зависит от  $\omega$  для широкого диапазона частот. При  $\nu > 10$ , создание пары является доминирующим механизмом фотопоглощения. Рис. 11.1 грубо иллюстрирует относительную роль различных механизмов фотопоглощения тяжелыми атомами, как функцию энергии фотона.

## 1.12 Ядерный фотоэффект

Начиная с энергии фотонов в несколько МэВ, становится возможным *ядерный фотоэффект*. Фотон поглощается ядром, пока один или несколько нуклонов не будут вытолкнуты (энергия удержания нуклона в ядре обычно 7-8 МэВ, хотя может быть существенно меньше, до сотен КэВ, в крупных ядрах). Вследствие сильного взаимодействия между нуклонами в ядре, существуют относительно долгоживущие состояния с энергией возбуждения выше порога распада. Эти квазистационарные состояния имеют чрезвычайно сложные волновые функции в терминах одночастичных переменных. Качественная картина такова: можно сказать, что энергия возбуждения распределена по многим степеням свободы, и средняя энергия на нуклон недостаточна, чтобы нуклон вылетел — *составные ядра*, один из лучших примеров *квантового хаоса многих тел*, раздел 24.

Эта картина (*N. Bohr, 1936*) может быть интерпретирована в духе термодинамика, как «нагретая капля» ядерной материи. Ее время жизни превышает время Вайскопфа (10.82) расплывания волнового пакета, аналог времени расплывания Пуанкаре в классической механике. Существует вероятность редких флуктуаций с энергией возбуждения, сконцентрированной на отдельном нуклоне, который может покинуть ядро. Однако, этот процесс отличен от собственно фотоэффекта. Вытолкнутый нуклон *теряет память* канала возбуждения, который создан сложным ядром, и

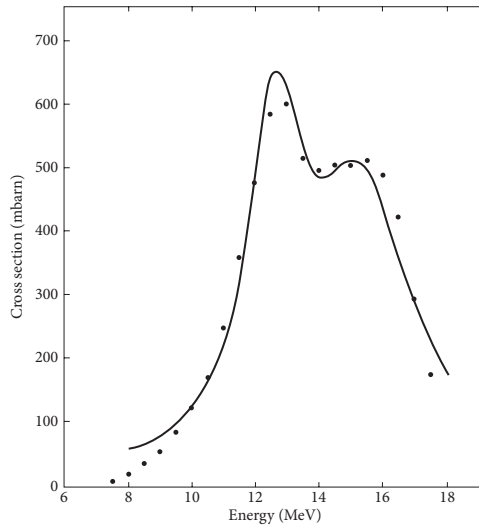


Рис. 1.2. Гигантский резонанс в ядерной фотоабсорбции; два пика соответствуют колебаниям вдоль оси деформации растяжения (меньшие частоты) и вдоль одной из двух более коротких осей (большие частоты и двойная ширина) [Spi1958]

излучение напоминает *испарение* из жидкой капли. Угловое распределение эмиттируемых частиц, в противоположность к (5.74), близко к изотропному, в то время как энергетический спектр близок к максвелловскому. Вместо испарения ядра, могут также эмиттироваться гамма-лучи зависящие от доступных дискретных состояний при низкой энергии возбуждения ядра. Конечно, составное ядро может быть создано не только гамма-лучами, но также и в различных ядерных реакциях.

Во всех ядрах наблюдается широкий (шириной 3-4 МэВ) максимум фотоабсорбции при энергиях в среднем обратно пропорциональных радиусу ядра, Рис. 11.2. Этот максимум возбуждается электрическим дипольным переходом, и обычно называется *гигантским дипольным резонансом*. Похожие, но менее выраженные резонансы существуют для других низких мультиполярностей. Этот резонанс может грубо интерпретироваться как коллективное дипольное колебание фотонов по отношению к нейтронам. Сечение фотоабсорбции проинтегрированное по резонансу,  $\int dE_\gamma \sigma$ , почти переполняет полную сумму диполей, *Задачи 5.3, 5.4*. Большая ширина показывает, что состояние гигантского резонанса имеет короткое время жизни (действительно, всего несколько периодов колебаний). Будучи в состоянии

разрешить тонкую структуру спектра в области резонанса, можно увидеть огромное число узких квазистационарных состояний с промежутками в  $\sim 1 - 10$  эВ, которые упоминались выше как хаотические смешанные состояния, распадающиеся в процессе медленного испарения. Будучи однажды возбуждены, когерентная суперпозиция смешанных состояний гигантского резонанса, см. главу 20, типичное коллективное возбуждение типа частица-дырка (см. также раздел I.10.8), которое распространяется также на свои некогерентные компоненты с немного разной энергией. Это порождает *уширение* резонанса; прямой выход дает лишь малую долю полной ширины гигантского резонанса. В экзотических ядрах с большим преобладанием нейтронов, наблюдается нижележащая ветвь (так называемый *пигмей*) дипольного резонанса, предположительно индуцируемая колебаниями нейтронной оболочки относительно сердцевины ядра.

При энергиях  $\hbar\omega$  порядка ГэВ, отдельно от атомных и ядерных процессов (включая комптоновское рассеяние нуклонов), становится возможным образование фотонов или других частиц. При достаточно высокой энергии, гамма-лучи могут генерировать электрон-позитронный *ливень*: частицы рождаются парами при торможении первичного фотона в поле ядер, и испускать новые фотоны, которые, в свою очередь, порождают новые пары итд.

### 1.13 Оценки процессов в КЭД

Точные вычисления вероятностей электродинамических процессов с релятивистскими частицами возможны только при использовании КЭД-формализма, который находится вне рассмотрения нашего курса. Ниже мы попытаемся дать некоторые качественные оценки, основанные на нашем прежнем опыте. Здесь мы используем обычные единицы.

Интенсивность дипольного излучения электроном, движущимся с ускорением  $\dot{v}$  можно оценить классической формулой,

$$I \sim \frac{\ddot{d}^2}{c^3} \sim \frac{e^2}{c^3} \dot{v}^2. \quad (1.83)$$

Для частоты осциллятора  $\omega$ , темп эмиссии фотонов

$$\dot{v} \sim \frac{I}{\hbar\omega} \sim \frac{e^2}{\hbar\omega c^3} \omega^2 v^2 \sim \alpha\omega \left(\frac{v}{c}\right)^2. \quad (1.84)$$

При усреднении один фотон эмиттируется за  $(1/\alpha)(c/v)^2$  периодов ( $T \sim 1/\omega$ ) колебаний. Следовательно, время жизни возбужденного осциллятора

$\tau \sim (c/v)^2(1/\alpha\omega)$ , или, для атома, где  $(v/c) \sim Z\alpha$ ,  $\hbar\omega \sim mc^2(Z\alpha)^2$ ,  $m = m_e$ ,

$$\tau \sim \frac{1}{\alpha\omega} \frac{1}{(Z\alpha)^2} \sim \frac{\hbar}{mc^2} \frac{1}{\alpha(Z\alpha)^4} \sim \frac{10^{-9} \text{ s}}{Z^4}. \quad (1.85)$$

Отношение времени жизни к периоду колебаний,  $\tau/T \sim \omega\tau \sim \alpha^{-1}(Z\alpha)^{-2} \gg 1$ , определяет малость ширины уровня  $\Gamma = \hbar\gamma$  в сравнении с его энергией:  $E/\Gamma \sim \hbar\omega/\hbar\gamma \sim \omega\tau \gg 1$  (высокая *добротность* атомного осциллятора). Предельная длина цепочки световых волн (*длина когерентности*)

$$c\tau \sim \frac{\hbar}{mc} \frac{1}{\alpha(Z\alpha)^4} \sim \frac{10 \text{ cm}}{Z^4}. \quad (1.86)$$

Чтобы оценить процессы излучения для быстро движущейся частицы, мы можем снова использовать уравнение (1.83). Если скорость электрона изменяется на  $\Delta v$  в течение времени  $\Delta t$ , интенсивность излучения может быть оценена как

$$I\Delta t \sim \frac{e^2}{c^3} \left( \frac{\Delta v}{\Delta t} \right)^2 \Delta t \sim \frac{e^2}{c^3} \frac{(\Delta v)^2}{\Delta t}. \quad (1.87)$$

Взяв  $\Delta t$  в качестве характерного времени движения электрона, мы ожидаем, что спектр излучения содержит, главным образом, частоты  $\omega \sim 1/\Delta t$  (мы здесь не рассматриваем ультрарелятивистское движение с  $E \gg mc^2$ ). Типичная энергия испущенного фотона  $E_\gamma \sim \hbar\omega \sim \hbar/\Delta t$ , а полная вероятность испускания

$$w_1 \sim \frac{I\Delta t}{\hbar\omega} \sim \frac{e^2}{c^3} \frac{(\Delta v)^2}{\Delta t} \frac{\Delta t}{\hbar} \sim \frac{e^2}{\hbar c^3} (\Delta v)^2 \sim \alpha \left( \frac{\Delta v}{c} \right)^2. \quad (1.88)$$

Последовательные акты испускания почти независимы, поэтому вероятность испускания двух фотонов, по порядку величины, есть корень квадратный из вероятности одиночного испускания,

$$w_2 \sim w_1^2 \sim \left[ \alpha \left( \frac{\Delta v}{c} \right)^2 \right]^2 \ll w_1. \quad (1.89)$$

Даже для релятивистских частиц, когда  $\Delta v/c \sim 1$ , испускание дополнительного фотона подавляется малым множителем  $\sim \alpha$ .

Подобным образом можно оценить вероятность аннигиляции пары ( $e^+$ ,  $e^-$ ). Аннигиляция пары (при свободном движении или в состоянии *позитрония*)



) на один реальный фотон запрещена законами сохранения. Однако, этот процесс возможен как виртуальный. Например, связь с полем излучения дает возможность позитронию на короткое время стать фотоном, а это приводит к наблюдаемому сдвигу энергетических уровней позитрония. Мы можем оценить этот сдвиг.

Электрон не может быть локализован точнее, чем на размере его комптоновской длины волны  $\lambda_C$ , уравнение (1.5.85). Для аннигиляции, позитрон и электрон должны находиться внутри этого пространственного интервала. Если так, вероятность передачи однофотонному состоянию может быть оценена как  $w_1$ , уравнение (1.88), с  $\Delta v \sim c$ , i.e.  $w_1 \sim \alpha$ . Это означает, что для времени, проведенного партнерами на этом расстоянии  $\leq \lambda_C$ , доля  $\alpha$  может быть ассоциирована с виртуальным состоянием фотона. В основном состоянии позитрония, партнеры находятся в среднем на относительном расстоянии порядка радиуса Бора,  $a \sim \lambda_C/\alpha$ . Они приближаются друг к другу на расстояние  $\sim \lambda_C$  на долю времени, равную отношению соответствующих объемов,  $(\lambda_C/a)^3 \sim \alpha^3$ . Наконец, полная доля времени, которая может быть идентифицирована с однофотонным состоянием  $\alpha \cdot \alpha^3 = \alpha^4$ . Эти соображения справедливы лишь для  $s$ -состояния относительного движения, иначе вероятность тесного сближения становится слишком малой. Таким образом,  $s$ -состояние позитрония обладает сдвигом уровня, равным произведению этой вероятности,  $\alpha^4$  на изменение энергии,  $\sim mc^2$ , при переходе на состояние фотона,

$$\delta E \sim \alpha^4 mc^2. \quad (1.90)$$

Отметим, что этот сдвиг того же порядка, что тонкое или сверхтонкое расщепление в позитронии, раздел I.24. В отличие от энергии, угловой момент сохраняется в матричном элементе перехода. Поскольку спин фотона равен 1, энергетический сдвиг (1.90) существует только для *ортопозитрония* (триплет,  $J = S = 1$ ) и отсутствует для *парапозитрония* (синглет,  $J = S = 0$ ).

Для *реального* процесса *двухфотонной аннигиляции*, электрон и позитрон должны приблизиться на относительное расстояние  $\sim \lambda_C$  и испустить два фотона с энергией  $\hbar\omega \sim mc^2$ . В сравнении с однофотонным процессом с вероятностью  $\sim \alpha^4$ , необходимо испустить еще один фотон в течение времени  $\Delta t$  существования однофотонного состояния. Соотношение неопределенности,  $\Delta t \sim \hbar/mc^2$  определяет скорость испускания второго фотона  $\alpha/\Delta t \sim \alpha mc^2/\hbar$ , и полную скорость двухфотонной аннигиляции  $\dot{w} \sim \alpha^4 \cdot \alpha mc^2/\hbar \sim \alpha^5 mc^2/\hbar$ . Отсюда мы можем получить время жизни

парапозитрония

$$\tau_{\text{para}} \sim \frac{\hbar}{mc^2} \frac{1}{\alpha^5} \sim 10^{-9} \text{ s.} \quad (1.91)$$

Сравнение (1.91) с (1.86) показывает, что для *парапозитрония* отдельные времена жизни возбужденных состояний по отношению к излучению и основного состояния по отношению к двухфотонной аннигиляции имеют одинаковый порядок. Как видно из (1.91), ширина основного состояния парапозитрония  $\Gamma_{\text{para}} \sim \hbar/\tau_{\text{para}} \sim mc^2\alpha^5$ , что в  $\alpha$  раз меньше, чем интервалы тонкой структуры (1.90). Это исключает, что при аннигиляции *ортопозитрония* допустимы только три фотона (это объясним позже). Соответствующая вероятность содержит дополнительный множитель  $\alpha$ , поэтому время жизни  $\tau_{\text{ortho}}$  больше на два порядка,  $\sim 10^{-7} \text{ s}$ .

### Задача 1.3

Рассмотрим эффект Зеемана в основном состоянии позитрония, предполагая величину магнитного поля такой, что этот эффект сравним с расщеплением между пара- и ортопозитронием; соответствующий Гамильтониан может быть записан как

$$\hat{H}' = A(\hat{\mathbf{s}}_+ \cdot \hat{\mathbf{s}}_-) - \mu_B \mathcal{B}(\hat{s}_{+z} - \hat{s}_{-z}). \quad (1.92)$$

Здесь  $\mathbf{s}_{\pm}$  относится к спину электрона и позитрона.

**Решение** Нужно диагонализировать Гамильтониан (1.92) в  $4 \times 4$  пространстве (синглет парапозитрония и триплет ортопозитрония). полная проекция спина  $S_z$  сохраняется. Триплетные состояния,  $S_z = \pm 1$ , аналогичны  $2p$  и  $2s$  уровням водорода в случае линейного электрического поля, *Задача I.24.5*, являются правильными линейными комбинациями в присутствии магнитного поля. Состояния триплета и синглета с  $S_z = 0$  смешанны, вековое уравнение дает

$$\delta E(S_z = 0) = -\frac{A}{4} \left[ 1 \pm \sqrt{4 + \left( \frac{4\mu_B \mathcal{B}}{A} \right)^2} \right]. \quad (1.93)$$

Высшее состояние при  $\mathcal{B} = 0$  отвечает ортопозитронию; при  $\mathcal{B} \neq 0$  оно является суперпозицией состояний синглета и триплета.

### Задача 1.4

Вследствие синглетной смеси, время жизни верхнего состояния *Задача 11.3* сокращается в присутствии магнитного поля (*подавление ортопозитрония*). Оценим поле  $\mathcal{B}$ , которое сокращает время жизни  $\tau_{\text{ortho}}$  в 10 раз.

Процессы с виртуальными парами вносят вклад также в рассеяние света зарядом, раздел 6. В дополнение к поглощению фотона с последующим испусканием и процесс с обратной последовательностью, Рис. 6.4, который приводит к сечению  $\sim r_0^2 \sim 10^{-25} \text{ см}^2$ , падающий фотон  $\gamma$  может создавать виртуальную  $e^+ - e^-$  пару. Позитрон пары аннигилирует с исходным электроном в новый квант  $\gamma'$ . Чтобы оценить вероятность аннигиляции, на понадобится произведение вероятности в единицу времени  $\dot{w}^{(1)}$  для фотона быть на нужном расстоянии  $\sim \lambda_C$  от электрона, вероятности  $w^{(2)}$  породить пару, и вероятности  $w^{(3)}$  аннигиляции с испусканием фотона  $\gamma'$ . Как и ранее,  $w^{(2)} \sim w^{(3)} \sim \alpha$ . Скорость  $\dot{w}^{(1)}$  определяется отношением объема трубки (с сечением  $\lambda_C^2$  и длины, равной скорости фотона  $c$ ) к полному объему  $V$ ,  $\dot{w}^{(1)} \sim (\hbar/mc)^2 (c/V)$ . Тогда сечение определяется этой скоростью, деленной на падающий поток  $c/V$ ,

$$\sigma \sim \frac{\dot{w}^{(1)} w^{(2)} w^{(3)}}{c/V} \sim \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{c}{V} \cdot \alpha \cdot \alpha \cdot \frac{1}{c/V} \sim \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \alpha^2 \sim r_0^2, \quad (1.94)$$

будучи того же порядка, что и обычное томсоновское сечение (30.83) для рассеяния свободными электронами. При точных вычислениях, оба типа рассеяния должны подсчитываться сложением их амплитуд, а не вероятностей. Следует также учитывать виртуальные пары при рассеянии заряженных частиц, в особенности при высоких энергиях и для больших углов рассеяния (малый прицельный параметр). Только пары всех заряженных частиц, а не электрон-позитронные пары. Ясно, что для фотонов с энергией  $\hbar\omega$  может оказаться важным только образование виртуальных пар частиц с массами  $M$  незначительно превышающими  $\hbar\omega/c^2$ .



Знаменитый математик Марк Кац однажды поделил гениев на два класса. Он сказал: существуют обычные гении, чьим достижениям могут подражать интеллигентные люди, проделав исключительно тяжелую работу, и поймав удачу. Затем приходят волшебники, изобретения которых так поразительны, так противоположны интуиции их коллег, что трудно догадаться, как человек может представить их. Дирак был волшебником.

## Глава 2

Г. Сегр, *Фауст в Копенгагене*

## Уравнение Дирака: Формализм

### 2.1 Введение уравнения Дирака

Здесь мы введем уравнение, которое рассматривается многими физиками, как наиболее важное и элегантное уравнение всей современной физики. *Уравнение Дирака* описывает частицы со спином  $1/2$ , которые являются главными компонентами материи — электроны, нейтрино, кварки и нуклоны. Внешнее электромагнитное поле также может быть добавлено для электрона с помощью принципа наименьшего действия, раздел 11.10, хотя ситуация для нуклона является более сложной из-за сильных взаимодействий.

Обращаясь к релятивистски ковариантному описанию для частицы со спином  $1/2$  мы должны помнить, что волновая функция должна быть *многокомпонентной*: нам нужно описать два возможных состояния спина и состояния с отрицательной энергией, которые позже будут объяснены заново в терминах античастиц — позитронов, антинейтрино, антикварков и антинуклонов. Таким образом, мы ожидаем, что *минимальное* число компонент волновой функции будет равно четырем. Такая функция называется *биспинором*, и мы можем описать её как столбец  $\Psi$  с четырьмя компонентами  $\Psi_{1,2,3,4}$ . Все операторы, действующие на такие функции, должны быть *матрицами*  $4 \times 4$ . Чтобы иметь стандартную форму Гамильтониана,

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (2.1)$$

и, следовательно, разрешить обычную вероятностную интерпретацию, совместимую с релятивизмом, оператор импульса  $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$  должен входить в Гамильтониан  $\hat{H}$  линейно, поскольку уравнение (2.1) линейно по отношению к производным по времени. Для свободного движения, координаты и

время не могут входить в уравнение явно, если мы предполагаем однородность пространства и времени. Последнее связано, как в классической и нерелятивистской квантовой механике, с сохранением энергии-импульса. Откуда, компоненты импульса  $\hat{p}_i$  могут появляться только с постоянными коэффициентами, которые, однако, должны быть матрицами в пространстве биспиноров. Общая линейная форма в компонентах импульса (как принято ранее,  $\hbar = c = 1$ )

$$\hat{H} = \alpha_1 \hat{p}_1 + \alpha_2 \hat{p}_2 + \alpha_3 \hat{p}_3 + \beta m \equiv (\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + \beta m. \quad (2.2)$$

Здесь  $\alpha_i$  и  $\beta$  — безразмерные постоянные эрмитовы матрицы  $4 \times 4$ , и  $m$  — константа размерности энергии, которая, естественно, должна быть идентифицирована с массой частицы, поскольку для покоящейся частицы мы должны иметь  $E = m$ .

Вследствие принципа суперпозиции, каждая компонента биспинора  $\psi$  представляет возможное состояние свободной частицы с релятивистским законом дисперсии (11.13). Так будет в случае, если

$$\hat{H}^2 = m^2 + \hat{\mathbf{p}}^2. \quad (2.3)$$

С другой стороны, квадрат оператора (2.2) должен быть вычислен с коэффициентами матричной природы, учитывая, что матрицы коммутируют с пространственно-временными производными, но, вообще говоря, не коммутируют друг с другом. Сохраняя правильный порядок матричных множителей, получим

$$\hat{H}^2 = \beta^2 m^2 + m \hat{p}_j [\beta, \alpha_j]_+ + \hat{p}_i \hat{p}_j \alpha_i \alpha_j, \quad (2.4)$$

где присутствует антикоммутатор операторов  $\beta$  и  $\alpha_j$ . Последний член в (2.4) содержит на самом деле только симметричную комбинацию  $\alpha$ -матриц, то есть снова антикоммутатор. Так как уравнения (2.3) и (2.4) должны совпадать, мы получим матричные условия

$$\beta^2 = 1; \quad [\beta, \alpha_j]_+ = 0; \quad (2.5)$$

$$\alpha_j^2 = 1 \quad (j = 1, 2, 3); \quad [\alpha_i, \alpha_j]_+ = 0, \quad i \neq j. \quad (2.6)$$

Уравнения (2.5) и (2.6), в соответствии с эрмитовостью,  $\alpha_j^\dagger = \alpha_j$ ,  $\beta^\dagger = \beta$ , являются лишь условиями, которые определяют алгебру *матриц Дирака*  $\alpha_j$  и  $\beta$ . Этим условиям можно удовлетворить различными наборами матриц, которые взаимосвязаны унитарными преобразованиями. Все такие

наборы физически эквивалентны; переход к другому набору означает просто разные линейные комбинации четырех уравнений (2.1). *Стандартное представление*, где матрицы выбраны как

$$\beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

зачастую удобно. Здесь и ниже мы используем для краткости двумерную форму четырехмерных матриц, где блоки  $2 \times 2$  являются нулевыми матрицами, единичная матрица  $\hat{1}$  и матрицы Паули  $\sigma_i$ . Мы использовали такую форму в уравнении (11.30), где, однако, размерность четыре происходит из пространственно-временной размерности, а не из биспинорной структуры.

Мы приходим к уравнению Дирака для свободной частицы массы  $m$ ,

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{\beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})\} \Psi. \quad (2.8)$$

По построению уравнения (2.3), каждая компонента биспинора удовлетворяет КГ Действительно, общие условия не определяют размерности матриц и волновых функций. Однако, четыре это *минимально* возможная размерность; функции с большим числом компонент могут описывать частицы с большими спинами.

## 2.2 Ковариантная форма и алгебра

Матрицы  $\beta$  и  $\vec{\alpha}$  подходят для рассмотрения в некоторой фиксированной системе отсчета. Чтобы получить явно *ковариантное* выражение, полезен различный набор матриц,  $\gamma_\mu = (\gamma_0, \vec{\gamma})$ ,

$$\gamma_0 = \beta, \quad \vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Их соотношения коммутирования можно легко вывести из (2.5) и (2.6):

$$[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+ = 2g_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3. \quad (2.10)$$

Здесь мы используем стандартный метрический тензор  $g_{\mu\nu}$ , уравнение (11.20). В соответствии с (2.10),

$$\gamma_0^2 = 1, \quad \gamma_{1,2,3}^2 = -1. \quad (2.11)$$

Для того, чтобы выписать уравнение Дирака в новой форме, умножим (2.8) на матрицу  $\gamma_0 = \beta$ , и придем к ( $\hat{E} = i\partial/\partial t \equiv i\partial^0$ )

$$\{\gamma_0 \hat{E} - (\vec{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - m\} \Psi = 0, \quad (2.12)$$

или, в ковариантной форме,

$$(\gamma_\mu \hat{p}^\mu - m) \Psi = 0. \quad (2.13)$$

Иногда также удобно ввести «скалярное произведение»  $\underline{V}$  не матричного вектора  $V^\mu = (V^0, \mathbf{V})$  на матричный  $\gamma_\mu$ ,

$$\underline{V} \equiv \gamma_\mu V^\mu = \gamma_0 V^0 - (\vec{\gamma} \cdot \mathbf{V}), \quad (2.14)$$

таким образом, уравнение Дирака принимает изящную форму

$$(\underline{\hat{p}} - m) \Psi = 0. \quad (2.15)$$

конечно, ковариантные свойства все еще демонстрируются рассмотрением действительного преобразования Лоренца пространственно-временных координат и преобразованием биспинора, порожденного переходом к другой системе отсчета.

В соответствии с четырьмя матрицами  $\gamma_\mu$ , полезна также дополнительная матрица,

$$\gamma_5 = i\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_0. \quad (2.16)$$

В стандартном представлении (2.7),

$$\gamma_5 = - \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Заметим, что в этом представлении матрицы  $\gamma_{0,1,3,5}$  вещественны, в то время как  $\gamma_2$  мнимая, аналогично стандартному представлению двумерные матрицы Паули  $\vec{\sigma}$ . Матрицы  $\gamma_{0,2,5}$  симметричны, а  $\gamma_{1,3}$  антисимметричны. В результате, матрицы  $\gamma_0$  и  $\gamma_5$  эрмитовы, в то время как пространственные матрицы  $\vec{\gamma} = (\gamma_{1,2,3})$  антиэрмитовы. Множество алгебраических свойств инвариантны при изменении представления, будучи полностью определены отношениями коммутации (2.10).

### Задача 2.1

Доказать алгебраические свойства:

$$\gamma_5^2 = 1; \quad [\gamma_5, \gamma_\mu]_+ = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, 3. \quad (2.18)$$



**Задача 2.2**

Показать, что все  $\gamma$ -матрицы имеют нулевой след.

**Решение** Вследствие циклической инвариантности следа и свойств (2.18),

$$\text{tr}(\gamma_\mu) = \text{tr}(\gamma_\mu \gamma_5^2) = \text{tr}(\gamma_5 \gamma_\mu \gamma_5) = -\text{tr}(\gamma_\mu \gamma_5^2) = -\text{tr}(\gamma_\mu) = 0. \quad (2.19)$$

Таким же образом мы покажем, что  $\text{tr}(\gamma_5) = 0$ , и след любого произведения *нечетного* числа  $\gamma$ -матриц исчезает. Для *четного* числа матриц мы получим в силу антикоммутаторов (2.10):

$$\text{tr}(\gamma_\mu \gamma_\nu) = \frac{1}{2} \text{tr}([\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+) = \frac{1}{2} \text{tr}(2g_{\mu\nu}) = 4g_{\mu\nu}. \quad (2.20)$$

Процедура естественно обобщается на большее (четное) число множителей для следа. Мы используем соотношения коммутации, чтобы переставить левый множитель вправо, и в конечном счете циклическая инвариантность позволяет привести след к исходной форме. Накопленные по пути антикоммутаторы дают рост новым следам с уменьшением числа сомножителей вдвое. Например, случай четырех матриц сводится к предыдущему примеру (2.20),

$$\text{tr}(\gamma_\kappa \gamma_\lambda \gamma_\mu \gamma_\nu) = 4(g_{\kappa\lambda} g_{\mu\nu} - g_{\kappa\mu} g_{\lambda\nu} + g_{\kappa\nu} g_{\lambda\mu}). \quad (2.21)$$

Другой полезный пример дается

$$\text{tr}(\gamma_5 \gamma_\kappa \gamma_\lambda \gamma_\mu \gamma_\nu) = -4i \varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}, \quad (2.22)$$

где, как в уравнении (11.62), мы вводим полностью антисимметричный тензор ранга 4  $\varepsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}$ . Результат (2.22) можно легко понять, так как каждый матричный множитель внутри  $\gamma_5$  матрицы должен найти своего партнера среди оставшихся матриц, а это возможно только если все из них различны; вдобавок, результат антисимметричен по отношению к тем матрицам, поскольку они антикоммутируют.

**2.3 Ток**

В противоположность УКГ, для уравнения Дирака возможно построить сохраняющуюся положительно определенную плотность прямым копированием результатов Шрёдингера. Определим эту плотность

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi \quad (2.23)$$

как скалярное произведение (числовая функция координат, а не матрица) эрмитово сопряженного биспинора  $\Psi^\dagger$ , который является строкой,

$$\Psi^\dagger = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*), \quad (2.24)$$

построив комплексно сопряженные компоненты, оригинального биспинора-столбца  $\Psi$ .

Из уравнения Дирака (2.8) придем к уравнению для биспинора

$$-i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} = \Psi^\dagger \beta m + (\hat{\mathbf{p}} \Psi)^\dagger \cdot \vec{\alpha}, \quad (2.25)$$

где  $(\hat{\mathbf{p}} \Psi)^\dagger = i \nabla \Psi^\dagger$ . Комбинируя (2.8) и (2.25), найдем уравнение движения для плотности (2.23):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\Psi^\dagger \vec{\alpha} \Psi). \quad (2.26)$$

Таким образом, получим *уравнение непрерывности*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (2.27)$$

с сохраняющейся плотностью тока

$$\mathbf{j} = \Psi^\dagger \vec{\alpha} \Psi. \quad (2.28)$$

Существование сохраняющегося тока позволяет прямое обобщение полного формализма Гильбертова пространства с плотностью (2.23) понимаемой вероятностным образом, и амплитудой, определяемой как скалярное произведение

$$\langle a|b \rangle_t = \int d^3r \Psi_a^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_b(\mathbf{r}, t). \quad (2.29)$$

Мы можем (формально на этой стадии) представить плотность  $\rho$  и плотность тока  $\mathbf{j}$  как временные и пространственные компоненты, соответственно, 4-тока  $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$ , если определим, вместо эрмитово сопряженного биспинора  $\Psi^\dagger$ , *дираково сопряженный* биспинор

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \beta = \Psi^\dagger \gamma_0. \quad (2.30)$$

Тогда 4-ток

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi. \quad (2.31)$$

## 2.4 Зарядовое сопряжение

Теперь мы покажем, что уравнение Дирака содержит решения, которые можно сгруппировать парами и интерпретировать как относящиеся к частицам и античастицам. Предполагаемая симметрия между частицами и античастицами должна проявиться в том, что *свободное движение* двух типов объектов тождественно. Однако, они могут распознаваться по их поведению во внешнем поле, которое чувствительно к *заряду*, если наша интерпретация решений с отрицательной энергией соответствует частицам с положительной энергией, но противоположным зарядом имеет смысл.

Принцип минимума, применительно к электромагнитному полю, связан с калибровочной инвариантностью, как мы помним из раздела 11.10. Если частица имеет электрический заряд  $e$  и при свободном движении подчиняется уравнению Дирака (2.8), в поле  $A^\mu = (\varphi, \mathbf{A})$ , уравнение должно быть модифицировано введением длинных производных (11.68,69),  $\hat{H} \Rightarrow \hat{H} - e\varphi$ ,  $\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ . В случае уравнения Дирака это приводит к подстановке свободного Гамильтониана:

$$\hat{H} = \beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Rightarrow \beta m + e\varphi + \vec{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}). \quad (2.32)$$

Уравнение Дирака во внешнем поле приобретает вид

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{\beta m + e\varphi + \vec{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\} \Psi, \quad (2.33)$$

или, как обобщение уравнения (2.15),

$$(\underline{\hat{p}} - e\underline{A} - m)\Psi = 0. \quad (2.34)$$

Можно непосредственно проверить, что, поскольку поле  $(\varphi, \mathbf{A})$  вещественно, уравнение непрерывности (2.27) содержит те же самые выражения (2.23) для плотности и (2.28) для плотности тока. Так как оператор импульса входит в уравнение линейно, нет так называемого диамагнитного члена,  $\sim \mathbf{A}|\Psi|^2$ , в выражении для тока (I.14.70), хотя ток изменяется в присутствии поля вследствие изменения волновых функций.

Пусть  $\Psi$  описывает одно из возможных состояний частицы; в стационарном случае это может быть решением в определенной положительной энергией  $E$  и, соответственно, с зависимостью от времени  $\sim \exp(-iEt)$ . Соответствующая античастица это двойник с отрицательной энергией, который должен меняться от времени как  $\exp(iEt)$ . Следовательно, переход

к античастицам, *зарядовое сопряжение*, по-видимому, включает операцию комплексного сопряжения. Комплексно сопряженный биспинор  $\Psi^*$  удовлетворяет уравнению, комплексно сопряженному к (2.33),

$$-i\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \{\beta^*m + e\varphi + \vec{\alpha}^* \cdot (\hat{\mathbf{p}}^* - e\mathbf{A})\}\Psi^*. \quad (2.35)$$

Отметим, что  $\Psi^*$  все еще биспинор *столбец*, но с комплексно сопряженными компонентами, и обе, временная и пространственная производные входят с множителем  $i$  и меняет знак ( $\hat{\mathbf{p}}^* = -\hat{\mathbf{p}}$ ), поскольку внешнее поле вещественно. Теперь изменим знак всех членов в (2.35) и умножим уравнение на постоянную  $4 \times 4$  матрицу  $\mathcal{C}$ , которую выберем позже таким образом, чтобы преобразованное уравнение совпало с исходным:

$$i\frac{\partial(\mathcal{C}\Psi^*)}{\partial t} = \{m\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1} - e\varphi + \mathcal{C}\vec{\alpha}^* \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\mathcal{C}^{-1}\}\mathcal{C}\Psi^*. \quad (2.36)$$

В матричные члены должны быть вставлены  $\mathcal{C}^{-1}\mathcal{C} = 1$ , для того, чтобы иметь во всех членах новый, *зарядово сопряженный*, биспинор

$$\Psi_{\mathcal{C}} = \mathcal{C}\Psi^*. \quad (2.37)$$

Зарядово сопряженный биспинор (2.37) подчиняется тому же уравнению Дирака (2.33), но с противоположным зарядом  $-e$ , если *зарядово сопряженный оператор*  $\mathcal{C}$  удовлетворяет матричным соотношениям

$$\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1} = \beta, \quad \mathcal{C}\vec{\alpha}^*\mathcal{C}^{-1} = \vec{\alpha}. \quad (2.38)$$

Однако, ясно, что такая матрица  $\mathcal{C}$  существует, поскольку матрицы  $\beta' = -\beta^*$  и  $\vec{\alpha}' = \vec{\alpha}^*$  удовлетворяют тем же коммутирующим соотношениям, что и исходные матрицы, и может быть преобразована унитарным преобразованием. Такой выбор даже не единственен.

### Задача 2.3

Найти матрицу  $\mathcal{C}$  в стандартном представлении (2.7) матриц Дирака, налагая дополнительное условие

$$\mathcal{C}^\dagger = \mathcal{C} = \mathcal{C}^{-1}. \quad (2.39)$$

### Решение

$$\mathcal{C} = i\beta\alpha_2 = i\gamma_2. \quad (2.40)$$

Таким образом, у нас есть пара биспиноров,  $\Psi$  и  $\Psi_C$ , описывающих движение (в том же самом внешнем поле) частиц с зарядами  $\pm e$ . Решение  $\Psi_C$  должно принадлежать античастице, если решение  $\Psi$  описывает частицы. Если  $\Psi$  - собственный вектор Гамильтониана с энергией  $E$ , и все его компоненты имеют одинаковую зависимость от времени  $e^{-iEt}$ , все компоненты биспинора  $C\Psi^*$  имеют зависимость от времени  $e^{iEt}$ , как для энергии  $-E$ . При свободном движении  $\Psi$  и  $\Psi_C$  - решения того же уравнения с противоположным знаком энергии. Как обсуждалось в отношении к релятивистскому закону дисперсии, раздел 35.8, решения с энергиями  $\pm E$  появляются парами. Без внешних полей, действующих на заряд, частицы и античастицы неразличимы. Выполняя операцию зарядового сопряжения над решением с отрицательной энергией, мы получим физическое решение с положительной энергией, действительно совпадающее с решением для частицы. В присутствии внешних полей, решение для частицы отлично от решения для античастицы; из решения с  $E < 0$  и заданным зарядом, с помощью зарядового сопряжения мы получим решение с  $E > 0$  и противоположным зарядом. Зарядовое сопряжение позволяет рассмотреть, вместо решения для электрона с  $e < 0$  и  $E < 0$ , решение для позитрона с  $E > 0$  и  $e > 0$ .

## 2.5 Релятивистские преобразования

Физические процессы не зависят от выбора лоренцевской системы отсчета. Во всех таких системах уравнение для физических законов имеют ту же форму, будучи выраженными через величины, относящиеся к выбранной системе отсчета. Наши уравнения можно переписать в *ковариантной* форме, которая ясно показывает, что все члены подчиняются единым правилам преобразования.

Используя контравариантный оператор импульса (11.26), запишем уравнение Дирака (2.15) как

$$(i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\Psi = 0. \quad (2.41)$$

Теперь выполним преобразование Лоренца (11.29), заданные матрицей  $\Lambda$ . Должны ли матрицы  $\gamma_\mu$  преобразовываться как компоненты 4-вектора, если величина  $\gamma_\mu \partial^\mu$  должна быть инвариантом. Тогда волновая функция  $\Psi$  в новой системе отсчета должна удовлетворять тому же уравнению (2.41), то есть должна также быть инвариантом (релятивистский *скаляр*). Однако,

наши величины  $\gamma_\mu$  являются универсальными матрицами, не зависящими от системы отсчета. Следовательно, релятивистская ковариантность уравнения Дирака требует, чтобы волновая функция  $\Psi$  преобразовывалась определенным образом. Должно существовать линейное преобразование  $\mathcal{S}$ ,

$$\Psi' = \mathcal{S}\Psi, \quad (2.42)$$

такое, что новая функция  $\Psi'$  в новой системе координат удовлетворяет уравнению того же самого вида,

$$(i\gamma_\mu \partial'^\mu - m)\Psi' = 0. \quad (2.43)$$

В соответствии с релятивистским законом дисперсии (11.12), масса  $m$  является скаляром; производные  $\partial'^\mu$  относятся к новым координатам.

Матрица  $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\Lambda)$  не может зависеть от координат и должна быть универсальной  $4 \times 4$  матрицей (поскольку биспинор имеет четыре компоненты), полностью определяемой преобразованием Лоренца  $\Lambda$ ; она не сингулярна, поскольку обратное преобразование Лоренца определяет обратную матрицу  $\mathcal{S}^{-1}$ . В уравнении (2.42) новая функция  $\Psi'$  берется в точке  $x'$ , в то время как старая функция  $\Psi$  берется в соответствующей, В смысле уравнения (11.29), точке  $x = \Lambda^{-1}x'$ ,

$$\Psi'_\alpha(x') = \mathcal{S}_\alpha^\beta(\Lambda)\Psi_\beta(\Lambda^{-1}x'). \quad (2.44)$$

Это очевидное обобщение преобразования волновой функции при вращениях, раздел I.16.1. Преобразование 4-градиента дает (11.27)

$$\partial^\mu \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x_\mu} = \frac{\partial \Psi}{\partial x'_\nu} \frac{\partial x'_\nu}{\partial x_\mu} = \Lambda_\nu^\mu \partial'^\nu \Psi. \quad (2.45)$$

используя (2.45) и (2.42), перепишем исходное уравнение Дирака (2.41) как

$$\left(i\Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \partial'^\nu - m\right)\mathcal{S}^{-1}\Psi' = 0, \quad (2.46)$$

или, умножая на матрицу  $\mathcal{S}$  слева,

$$\mathcal{S} i\Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1} \partial'^\nu \Psi' - m\Psi' = 0. \quad (2.47)$$

Уравнение (2.47) для преобразования волновой функции будет удовлетворять условию релятивистской ковариантности, то есть совпадать с (2.41), если

$$\mathcal{S} \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1} = \gamma_\nu \quad \rightsquigarrow \quad \mathcal{S}^{-1} \gamma_\nu \mathcal{S} = \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu. \quad (2.48)$$

Это условие, которое определяет матрицу  $\mathcal{S}$ , и откуда следует правило преобразования (2.42) волновой функции Дирака при преобразованиях Лоренца. Выбор матрицы  $\mathcal{S}$  может быть определен дополнительным условием (в действительности, нормализацией функции  $\Psi$ ), например,

$$\det \mathcal{S} = 1. \quad (2.49)$$

Нетрудно понять смысл условия (2.48). Если волновая функция  $\Psi$  была скаляром ( $\Psi' = \Psi$ ), ковариантность должна означать для  $\gamma_\mu$  преобразование как 4-вектора,

$$\gamma_\nu \Rightarrow \gamma'_\nu = \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu. \quad (2.50)$$

Теперь хотелось бы найти такое преобразование  $\mathcal{S}$ , которое возвращало бы  $\gamma$ -матрицам их исходную форму. Как всегда, при преобразовании (2.42), операторы преобразуются в соответствии с

$$\gamma'_\nu \Rightarrow \gamma''_\nu = \mathcal{S} \gamma'_\nu \mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S} \Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu \mathcal{S}^{-1}. \quad (2.51)$$

Требование  $\gamma''_\nu = \gamma_\nu$  есть лишь условие ковариантности (2.48).

## 2.6 Оператор спина

Возможные преобразование координат системы отсчета включают обычные трехмерные вращения. Генератор этого преобразования связан со спином дираковской частицы.

Здесь, простая техника состоит в прямом обобщении того, что было сделано для нерелятивистской частицы в разделе I.16.2. Мы проиллюстрируем это нахождением матрицы  $\mathcal{S}$  для вращения,  $\mathcal{S} \equiv \mathcal{R}_z(\varphi)$ . Для бесконечно малого угла вращения  $\delta\varphi$ , в соответствии с разделом I.16.1,

$$x' = x - y \delta\varphi, \quad y' = y + x \delta\varphi, \quad z' = z, \quad t' = t. \quad (2.52)$$

Матрица преобразования  $\Lambda$  в окрестности начала координат может быть записана как

$$\Lambda = 1 + \delta\varphi \cdot \lambda, \quad (2.53)$$

где  $4 \times 4$  матрица  $\lambda$  с матричными элементами  $\lambda_\nu^\mu$  играет роль генератора преобразования. Уравнение (2.52) показывает, что

$$\lambda_1^2 = -\lambda_2^1 = -1. \quad (2.54)$$

Матрица  $\mathcal{R}$  также близка к единичной матрице,

$$\mathcal{R} = 1 + \delta\varphi \cdot \tau, \quad (2.55)$$

где матрица  $\tau$  должна быть определена. С той же точностью,  $\mathcal{R}^{-1} = 1 - \delta\varphi \cdot \tau$ , и

$$\mathcal{R}^{-1} \gamma_\nu \mathcal{R} = (1 - \delta\varphi \cdot \tau) \gamma_\nu (1 + \delta\varphi \cdot \tau) = \gamma_\nu + \delta\varphi [\gamma_\nu, \tau]. \quad (2.56)$$

С другой стороны, уравнения (2.48) и (2.53) требует, чтобы это было ничем иным, как

$$\Lambda_\nu^\mu \gamma_\mu = \gamma_\nu + \delta\varphi \lambda_\nu^\mu \gamma_\mu. \quad (2.57)$$

Таким образом, матрица  $\tau$  должна удовлетворять условию

$$[\gamma_\nu, \tau] = \lambda_\nu^\mu \gamma_\mu, \quad (2.58)$$

или, явно,

$$[\gamma_1, \tau] = -\gamma_2, \quad [\gamma_2, \tau] = \gamma_1. \quad (2.59)$$

Решением этих уравнений является

$$\tau = \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2 + \eta, \quad (2.60)$$

где  $\eta$  - матрица, коммутирующая с  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ . Однако, нормализация (2.49) требует выполнения условий

$$\det(1 + \delta\varphi \tau) = 1 + \delta\varphi \operatorname{tr}(\tau) = 1, \quad \rightsquigarrow \quad \operatorname{tr}(\tau) = 0, \quad (2.61)$$

которые исключают матрицу  $\eta$  и дают

$$\tau = \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2. \quad (2.62)$$

В стандартном представлении (2.9) этот результат имеет вид

$$\tau = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_1 \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \sigma_2 \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Теперь естественно определить оператор спина дираковской частицы как

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \vec{\Sigma}, \quad (2.64)$$



Где релятивистские  $4 \times 4$  матрицы спина

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Таким образом, генератор вращений определяется аналогично нерелятивистскому случаю,

$$\tau = -\frac{i}{2} \Sigma_3 = -i\hat{s}_3, \quad (2.66)$$

и аналогично для вращения вокруг других осей.

Алгебра  $4 \times 4$  матриц  $\Sigma_i$  не отличается от той, что для матриц Паули. Как обычно, мы восстановим унитарный оператор вращения,

$$\mathcal{R}_z(\varphi) = e^{\varphi\tau} = e^{-i\varphi\hat{s}_3} = e^{-(i/2)\varphi\Sigma_3} = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \Sigma_3. \quad (2.67)$$

Как должно быть для частицы со спином  $1/2$ , раздел 20, вращение на полный угол  $2\pi$  дает  $\mathcal{R}_z(\varphi + 2\pi) = -\mathcal{R}_z(\varphi)$ .

#### Задача 2.4

Найти преобразование  $\mathcal{S}(v_x)$  волновой функции Дирака, отвечающее лоренцеву растяжению, переходу к системе отсчета, движущейся со скоростью  $v$  вдоль оси  $x$  относительно исходной системы отсчета.

**Решение** Решение дается аналогично случаю вращения, но результат не унитарен,

$$\mathcal{S}(v_x) = \cosh \frac{\xi}{2} + \alpha_1 \sinh \frac{\xi}{2}, \quad \tanh \xi = v, \quad (2.68)$$

или  $\tanh \xi = v/c$  в обычных единицах.

Не унитарность представления группы Лоренца отражает характер преобразований. В противоположность вращению с компактными непрерывными параметрами, углами, растянутый «угол»  $\xi$  не компактен, изменяется от  $-\infty$  до  $+\infty$ . В практических задачах этот параметр, стремительность, может быть удобен, потому что растяжение происходит вдоль той же оси за два шага, с параметрами  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , он будет описан аддитивным образом  $\xi = \xi_1 + \xi_2$ , в противоположность более сложным лоренцевским добавкам скоростей.

## 2.7 Билинейные коварианты

Нам нужно рассмотреть, как физические наблюдаемые величины (матричные элементы различных операторов) преобразуются при преобразованиях Лоренца. Мы начнем с величины, правило преобразования которой может установлено на основании общих соображений.

4-вектор тока  $j^\mu$  (2.31) должен преобразовываться также, как вектор координат  $x^\mu$  (11.5). Используя сопряженный спинор Дирака  $\bar{\Psi}$  и выполняя преобразование Лоренца  $\Lambda$ , получим

$$j^\mu \Rightarrow j'^\mu = \Lambda^\mu_\nu j^\nu = \Lambda^\mu_\nu \bar{\Psi} \gamma^\nu \Psi = \bar{\Psi} (\Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu) \Psi, \quad (2.69)$$

где матрицы  $\gamma^\nu$  определены в соответствии со стандартным правилом (11.21). Условие (2.48) лоренцевой ковариантности уравнения Дирака теперь показывают, что

$$j'^\mu = \bar{\Psi} S^{-1} \gamma^\mu S \Psi. \quad (2.70)$$

Преобразование сопряженного спинора дается выражением

$$\bar{\Psi}' = (\Psi')^\dagger \gamma_0 = \Psi^\dagger S^\dagger \gamma_0 = \bar{\Psi} \gamma_0 S^\dagger \gamma_0. \quad (2.71)$$

Следовательно, преобразование вектора тока должно быть в виде

$$j'^\mu = \bar{\Psi}' \gamma^\mu \Psi' = \bar{\Psi} \gamma_0 S^\dagger \gamma_0 \gamma^\mu S \Psi. \quad (2.72)$$

Два выражения, (2.70) и (2.72) совпадают, если

$$\gamma_0 S^\dagger \gamma_0 = S^{-1}. \quad (2.73)$$

Ниже мы покажем, что это соотношение верно.

### Задача 2.5

Доказать, что оператор  $S \gamma_0 S^\dagger \gamma_0$  коммутирует со всеми матрицами  $\gamma_\mu$ .

**Решение** Запишем условие релятивистской ковариантности для биспинора  $\Psi^\dagger$  и используем свойства эрмитова сопряжения, раздел 36.2,

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_0 \gamma_\mu \gamma_0. \quad (2.74)$$

Существуют 16 линейно независимых  $4 \times 4$  матриц. Мы можем выбрать базис в этом операторном пространстве следующим образом: единичная матрица  $\hat{1}$  — *скаляр*; 4 матрицы  $\gamma_\mu$  — *вектор*; 6 матриц

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] = -\sigma_{\nu\mu} \quad (2.75)$$

— *антисимметричный тензор*; 4 матрицы  $i\gamma_\mu\gamma_5$  — *псевдовектор* (см. определение (2.16) матрицы  $\gamma_5$ ); матрица  $\gamma_5$  — *псевдоскаляр*; множитель  $i$  добавлен для эрмитовости. Значения отдельных членов будут ясны несколько позже, но очевидно, что только единичная матрица коммутирует со всеми  $\gamma_\mu$  (формально это можно требовать, ссылаясь на лемму Шура, раздел I.8.12). Следовательно, результат *Задачи 36.5* показывает, что

$$\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger\gamma_0 = \eta = \text{const} \cdot \hat{1}. \quad (2.76)$$

Теперь мы можем найти константу  $\eta$ . Во-первых, матрица  $\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger$  очевидно, эрмитова. Тогда из (2.76) следует, что  $\eta\gamma_0$  эрмитова, т.е.  $\eta$  вещественна. поскольку  $\det \mathcal{S} = 1$ , мы имеем

$$\det(\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger\gamma_0) = |\det \mathcal{S}|^2 \cdot |\det(\gamma_0)|^2 = 1 = \eta^4. \quad (2.77)$$

Это показывает, что  $\eta = \pm 1$ . Остается понять смысл знака  $\eta$ . Записав снова (2.76) как  $\mathcal{S}\gamma_0\mathcal{S}^\dagger = \eta\gamma_0$  и беря обратный оператор от обеих частей, мы находим

$$(\mathcal{S}^\dagger)^{-1}\gamma_0\mathcal{S}^{-1} = \frac{1}{\eta}\gamma_0 \quad \rightsquigarrow \quad \eta\gamma_0\mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S}^\dagger\gamma_0, \quad (2.78)$$

и, следовательно,

$$\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S} = \mathcal{S}^\dagger\gamma_0\gamma_0\mathcal{S} = \eta\gamma_0\mathcal{S}^{-1}\gamma_0\mathcal{S}. \quad (2.79)$$

Применяя (2.48) условие лоренцевской ковариантности, получим

$$\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S} = \eta\gamma_0\Lambda_0^\mu\gamma_\mu = \eta(\gamma_0\Lambda_0^0\gamma_0 - \gamma_0\Lambda_0^k\gamma_k) = \eta(\Lambda_0^0 - \Lambda_0^k\alpha_k). \quad (2.80)$$

Однако, оператор  $\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S}$  по построению имеет вещественные положительные собственные значения, поэтому его след положителен. В соответствии с (2.80), имеем

$$\text{tr}(\mathcal{S}^\dagger\mathcal{S}) = 4\eta\Lambda_0^0 \geq 0. \quad (2.81)$$

Мы заключаем, что  $\eta = +1$ , если  $\Lambda_0^0 > 0$ , т.е. для преобразований, которые не содержат инверсии времени, и  $\eta = -1$ , если  $\Lambda_0^0 < 0$  для преобразований, включающих обращение времени.

Таким образом, Для преобразований, которые не обращают стрелку времени, уравнение (2.73) справедливо, и ток  $j^\mu$ , поистине, ведет себя как 4-вектор (ток меняет знак при обращении времени). Легко видеть, что любой матричный элемент вида

$$V^\mu = \bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \Psi_2 \quad (2.82)$$

преобразуется как 4-вектор. Плотность вероятности (2.23) является четвертой компонентой вектора, а не скаляром, см. также обсуждение в конце раздела 11.7. Следовательно, наша обычная нормировка  $\Psi^\dagger \Psi = 1$  не является релятивистским инвариантом.

*Инвариантная нормировка* возможна для матричного элемента  $\bar{\Psi}\Psi$ , который аналогичен току, но вместо «векторных» матриц  $\gamma^\mu$ , использует «скалярную» матрицу  $\hat{1}$ . Используя уравнения (2.71) и (2.73), получим (для преобразований без обращения времени)

$$\bar{\Psi}' = \bar{\Psi} S^{-1}, \quad (2.83)$$

и

$$\bar{\Psi}'_1 \Psi'_2 = \bar{\Psi}_1 S^{-1} S \Psi_2 = \bar{\Psi}_1 \Psi_2. \quad (2.84)$$

Матричные элементы «тензорного» оператора (2.75),

$$T_{\mu\nu} = \bar{\Psi}_1 \sigma_{\mu\nu} \Psi_2, \quad (2.85)$$

преобразуются как компоненты антисимметричного тензора второго ранга,

$$T'_{\mu\nu} = \bar{\Psi}_1 \sigma_{\mu\nu} \Psi'_2 = \bar{\Psi}_1 S^{-1} \sigma_{\mu\nu} S \Psi_2, \quad (2.86)$$

и, используя условие ковариантности (2.48),

$$T'_{\mu\nu} = \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\tau \bar{\Psi}_1 \sigma_{\rho\tau} \Psi_2 = \Lambda_\mu^\rho \Lambda_\nu^\tau T_{\rho\tau}. \quad (2.87)$$

### Задача 2.6

Показать, что матричные элементы «псевдоскалярного» оператора  $\gamma_5$ ,

$$P = \bar{\Psi}_1 \gamma_5 \Psi_2, \quad (2.88)$$

преобразуются при преобразовании Лоренца  $\Lambda$  как

$$P \Rightarrow P' = \bar{\Psi}'_1 \gamma_5 \Psi'_2 = P \cdot \det \Lambda. \quad (2.89)$$

Детерминант матрицы  $\Lambda$  является Якобианом перехода от старых координат к новым. Якобиан определяет изменение элемента объема. Для *непрерывных* преобразований Лоренца (без отражений пространства или времени), 4-объем инвариантен [LL2], и Якобиан равен 1. Тогда  $P' = P$ . Для преобразований с инверсией одной из трех координатных осей,  $\det \Lambda = -1$ , и  $P' = -P$ , т.е. матричные элементы (2.88) в самом деле, обладают свойствами псевдоскаляра. Аналогично, можно показать, что «псевдовекторные» матричные элементы,

$$A^\mu = \bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \gamma_5 \Psi_2, \quad (2.90)$$

ведут себя, как компоненты аксиального вектора (как истинный вектор при вращениях растяжениях, но не меняющий знака при пространственных инверсиях).

Мы можем суммировать, что операторы всех физических наблюдаемых для дираковской частицы могут классифицироваться в соответствии с их свойствами по отношению к преобразованиям Лоренца. Эти свойства не зависят от того, совпадают ли биспиноры  $\bar{\Psi}$  и  $\Psi$  или описывают различные состояния, или даже различные дираковские частицы. Если Гамильтониан взаимодействия двух таких частиц сохраняет четность, он должен быть *скаляром*. Тогда он может быть построен, например, сжатием величин с одинаковыми свойствами преобразований, например, как (вектор  $\times$  вектор),

$$(V^\mu)_{12}(V_\mu)_{34} = (\bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \Psi_2)(\bar{\Psi}_3 \gamma_\mu \Psi_4), \quad (2.91)$$

или (псевдовектор  $\times$  псевдовектор),

$$(A^\mu)_{12}(A_\mu)_{34} = (\bar{\Psi}_1 \gamma^\mu \gamma_5 \Psi_2)(\bar{\Psi}_3 \gamma_\mu \gamma_5 \Psi_4). \quad (2.92)$$

Если Гамильтониан не сохраняет четность, можно также иметь взаимодействие типа (вектор  $\times$  псевдовектор),

$$(V^\mu)_{12}(A_\mu)_{34} + (\text{H.c.}). \quad (2.93)$$

Это случай слабого взаимодействия, которое может быть сконструировано как произведение токов  $J^\mu = V^\mu - A^\mu$ , которые содержат перекрестные члены (2.93).

**Дальнейшее чтение:** [Akh1965], [LL4], [Fey1962], [Wig1967], [Bjo1965]



Физическая теория считается удовлетворительной, если с ее помощью мы можем сделать количественные предсказания физических величин.

Дж.М. Джох и Ф. Рорлих, *Теория фотонов и электронов*

## Глава 3

### Уравнение Дирака: решения

#### 3.1 Свободное движение

Мы начнем с основной проблемы свободного движения для частицы Дирака с массой  $m \neq 0$ . Рассматривая стационарное состояние с энергией  $E$ , мы можем отделить временную зависимость стандартным образом и выписать биспинорное решение как

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt}. \quad (3.1)$$

Биспинор, зависящий от времени  $\psi(\mathbf{r})$ , удовлетворяет стационарному уравнению Дирака,

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3.2)$$

с Гамильтонианом (12.2),

$$\hat{H} = \beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (3.3)$$

Оператор импульса  $\hat{\mathbf{p}}$  очевидно сохраняется, и решение может быть взято в виде плоской волны

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}u(\mathbf{p}), \quad (3.4)$$

где  $\mathbf{p}$  теперь - собственное значение импульса, а  $u(\mathbf{p})$  - числовой биспинор, удовлетворяющий задаче на собственные значения

$$\{\beta m + (\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p})\}u(\mathbf{p}) = Eu(\mathbf{p}). \quad (3.5)$$

Другая форма этого уравнения следует из (12.15),

$$(\underline{p} - m)u = 0, \quad (3.6)$$

где 4-вектор импульса  $p^\mu = (E, \mathbf{p})$ . Уравнение (3.5), на самом деле, представляется множеством из четырех связанных линейных однородных уравнений для компонентов биспинора  $u$ ; форма (3.6) дает лишь различные комбинации тех же уравнений.

Мы «вывели» уравнение Дирака в разделе 12.1 из требования, чтобы каждая компонента многокомпонентной волновой функции удовлетворяла УКТ. Уравнение Дирака напоминает квадратный корень из УКТ. Возвращаясь к квадратичному оператору, действуя оператором  $(\beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}))$ , с помощью уравнений (12.5) и (12.6), мы уберем все матрицы и получим положительные и отрицательные собственные значения для энергии,

$$E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2 \quad \rightsquigarrow \quad E = \pm E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (3.7)$$

Теперь нам нужно проверить, что оба знака, на самом деле, возможны и появляются *парами*, т.е. для каждого собственного вектора  $u$  с одним из собственных значений  $E$  уравнения (3.7), существует другой собственный вектор с собственным значением  $-E$ . Это может быть установлено с помощью зарядового сопряжения, раздел 12.4.

### 3.2 Море Дирака

Преобразуем уравнение Дирака аналогично тому, как это было сделано в уравнениях (12.35) и (12.36). Ожидая, что античастицы движутся в том же поле и в направлении, обратном движению частиц, сначала изменим  $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$  в уравнении Дирака (3.5),

$$(\beta m - (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}))u(-\mathbf{p}) = Eu(-\mathbf{p}). \quad (3.8)$$

Теперь возьмем комплексное сопряжение и изменим общий знак,

$$(-\beta^* m + (\boldsymbol{\alpha}^* \cdot \mathbf{p}))u^*(-\mathbf{p}) = -Eu^*(-\mathbf{p}). \quad (3.9)$$

После этого зарядовое сопряжение, раздел 12.4, дает

$$(\mathcal{C}(-\beta^*)\mathcal{C}^{-1}m + (\mathcal{C}\boldsymbol{\alpha}^*\mathcal{C}^{-1} \cdot \mathbf{p}))\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}) = -E\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}). \quad (3.10)$$

С определением (12.38) преобразования  $\mathcal{C}$ , результирующее уравнение имеет вид

$$((\beta m + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}))(\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}))) = -E(\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p})). \quad (3.11)$$



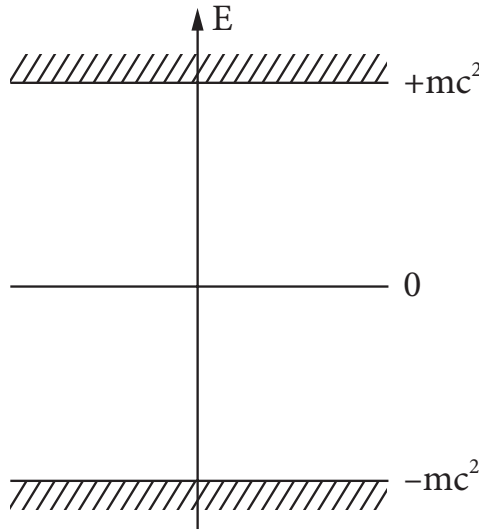


Рис. 3.1. Энергетический спектр уравнения Дирака для свободного движения)

Это означает, что для каждого биспинора  $u(\mathbf{p})$  с энергией  $E$ , существует биспинор-двойник,  $\mathcal{C}u^*(-\mathbf{p})$ , который является решением того же свободного уравнения Дирака с энергией  $-E$ . Их четырех линейно независимых решений для заданного вектора  $\mathbf{p}$ , два отвечают энергии  $E = E_{\mathbf{p}} > 0$ , а два — энергии  $E = -E_{\mathbf{p}} < 0$ . Разрешенный спектр энергии свободного движения, Рис. 37.1, состоит из *двух континуумов*, с энергетическим зазором от  $-mc^2$  до  $+mc^2$ . Понимая буквально, эта картина не может быть удовлетворительной с физической точки зрения. Электроны с  $E > 0$ , в присутствии третьего тела, могут испускать фотоны с энергией  $> 2mc^2$  и выполнять переход к континууму, который не имеет дна. Как обсуждалось в разделе 12.4, разумная интерпретация состоит в том, что решения с положительной энергией описывают *частицу*, электрон, в то время как решения с отрицательной энергией подвержены функции зарядового сопряжения, описывающей *античастицу*, позитрон:

$$u_{\text{el}}(\mathbf{p}, E > 0) = u(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}}), \quad u_{\text{pos}}(\mathbf{p}, E > 0) = \mathcal{C}u^*(-\mathbf{p}, -E_{\mathbf{p}}). \quad (3.12)$$

Оригинальная интерпретация состояний с отрицательной энергией, по Дираку, состояла в следующем. Предположим, что в основном состоянии мира, все состояния с отрицательной энергией заполнены однородным

электронным фоном, *море Дирака*. Будучи абсолютно однородным, фон не влияет на результаты экспериментов с низкой энергией из-за широкого энергетического зазора. Существование заполненного моря делает переход электронов в эти состояния запрещенным *принципом исключения Паули*, раздел 15.4. Внешнее поле достаточно высокой частоты,  $\omega > 2mc^2/\hbar$ , может помочь электрону фона перейти в верхний континуум. Это будет наблюдаться как появление частицы с  $E > 0$  и *дырки* в состоянии с  $E < 0$ . Во внешнем электромагнитном поле все электроны движутся в одном направлении, для энергий обоих знаков. Но это означает, что дырка в фоне движется в противоположном направлении, как это может делать позитрон.

Новая интерпретация зарядового сопряжения помогает избежать введения ненаблюдаемого моря электронов. Возбуждение электрона из нижнего континуума в верхний, естественно, ведет себя как *рождение электрон-позитронной пары* внешним полем. Обратный процесс заполнения состояния дырки электроном это *аннигиляция* пары. Однако, высокая возможность таких процессов налагает ограничение на рассмотрение электрона во внешнем поле, как *одночастичная* проблема. При высоких частотах поля, число частиц перестает быть фиксированным, а это необходимо, чтобы решать *задачу многих тел* для электрона и электрон-позитронных пар. Это приводит к наблюдаемым эффектам КЭД, относящимся к релятивистским соотношениям неопределенности, разделы I.5.10 и 11.1.

### 3.3 Явные решения

Теперь можно найти решение уравнения Дирака (3.5) для свободного движения. Имея ввиду будущий переход к нерелятивистскому пределу, удобно ввести два *двухкомпонентных* спинора  $\varphi, \chi$  вместо четырехкомпонентного биспинора  $u$ . Сгруппируем две верхних и две нижних компоненты в форму

$$u = \begin{pmatrix} u_1 u_2 u_3 u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \chi \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

В стандартном представлении матриц Дирака (12.7), уравнение (3.5) принимает вид

$$E \begin{pmatrix} \varphi \chi \end{pmatrix} - (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \begin{pmatrix} \chi \varphi \end{pmatrix} - m \begin{pmatrix} \varphi - \chi \end{pmatrix} = 0. \quad (3.14)$$

Мы получим множество из связанных попарно уравнений для спиноров  $\varphi$  и  $\chi$ ,

$$E\varphi - (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\chi = m\varphi, \quad E\chi - (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi = -m\chi, \quad (3.15)$$

и можно выразить один из спиноров через другой:

$$\chi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \varphi, \quad \varphi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E - m} \chi. \quad (3.16)$$

Условие разрешимости этого однородного набора снова приводит к собственным значениям для энергии (3.7). Решение содержит произвольный двухкомпонентный спинор. Например, с произвольной  $\varphi$  найдем  $\chi$  для  $E = \pm E_{\mathbf{p}}$ . Двукратное вырождение состояний с определенным знаком энергии относится к произвольности двухкомпонентного спинора, т.е. к возможности двух независимых внутренних состояний частицы,

$$\varphi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{or} \quad \varphi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Эти два внутренних состояния соответствуют спину  $1/2$  дираковской частицы.

Преимущества стандартного представления дираковских матриц становится очевидным, если интересоваться *нерелятивистским пределом*  $v \ll c$ . Для положительной энергии,  $E = E_{\mathbf{p}} > mc^2$ , в этом пределе  $E - mc^2 \ll mc^2$ . Тогда уравнение (3.16) показывает, что верхние компоненты биспинора много больше, чем нижние,

$$\chi \approx \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2m} \varphi \sim \frac{v}{c} \varphi. \quad (3.18)$$

Наоборот, для решений с отрицательной энергией,  $E = -E_{\mathbf{p}}$ , верхние компоненты малы,  $\varphi \sim (v/c)\chi$ . В системе покоя частицы,  $\mathbf{p} = 0$ , один из спиноров исчезает, а оставшиеся две компоненты обеспечивают обычное нерелятивистское описание для частицы со спином  $1/2$ .

Для нерелятивистских приложений мы еще можем использовать нековариантную нормировку для биспинора,

$$(u^\dagger u) = 1. \quad (3.19)$$

Для решения с положительной энергией биспинор равен, уравнение (3.16),

$$u(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \varphi \left( (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) / (E + m) \right) \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Теперь

$$(u^\dagger u) = |N|^2 \left( \varphi^\dagger, \varphi^\dagger \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \right) \begin{pmatrix} \varphi \left( (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) / (E + m) \right) \varphi \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$= |N|^2 \left[ 1 + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2}{(E + m)^2} \right] (\varphi^\dagger \varphi).$$

Полагая двухкомпонентный спинор нормализованным,  $(\varphi^\dagger \varphi) = 1$ , применяя (3.19) и используя алгебру матриц Паули (I.20.16), найдем

$$(u^\dagger u) = |N|^2 \left[ 1 + \frac{p^2}{(E + m)^2} \right] = |N|^2 \frac{2E}{E + m}. \quad (3.22)$$

Окончательно, решение с положительной энергией, нормализованное в соответствии с (3.19) дается выражением

$$u(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{E + m}{2E}} \left( \varphi \left( (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) / (E + m) \right) \varphi \right). \quad (3.23)$$

### Задача 3.1

Используя оператор Гейзенберга уравнения движения, найти оператор скорости для дираковской частицы и его собственные значения.

**Решение** Оператор скорости может быть определен как

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \dot{\mathbf{r}} = -i[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] = -i[\hat{\mathbf{r}}, (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = \vec{\alpha}, \quad (3.24)$$

или  $c\vec{\alpha}$  в обычных единицах. Легко видеть, что собственные значения всех дираковских матриц равны  $\pm 1$ , т.е. собственные значения компонент скорости равны  $\pm c$ .

Парадоксальный результат *Задачи 13.1* может быть положен в основу, если мы вернемся к собственному состоянию некоторой компоненты скорости, или соответствующая матрица Дирака  $\alpha_k$ , нестационарна. Такое состояние является суперпозицией решений с положительными или отрицательными энергиями, поскольку оператор  $\alpha_k$  перемешивает верхние и нижние компоненты. Для такого состояния,  $|\Psi|^2$  содержит быстроосциллирующие члены с промежутком частоты,  $(+E_p) - (-E_p) \cdot_p > 2m$ , так называемое *Zitterbewegung* (дрожащее движение). Это может свободно интерпретироваться как относящееся к квантовым флуктуациям создания и аннигиляции виртуальных пар, сравни с дарвиновским членом, раздел I.23.3. Уравнение (3.24) показывает, что различные компоненты скорости не коммутируют, аналогично тому, что имеет место для частиц в магнитном поле, уравнение (I.13.20). Здесь, эффективное «поле» создается спином частицы, и взаимодействие спина с пространственным движением частицы является неизбежным свойством в релятивистской области.

**Задача 3.2**

Найти ожидаемое значение скорости дираковской частицы в стационарном состоянии.

**Решение** Прямое использование оператора (3.24) к состоянию (3.23) с положительной энергией дает

$$\langle \mathbf{v} \rangle = (u^\dagger \vec{\alpha} u) \frac{E + m}{2E} \left( \varphi^\dagger, \varphi^\dagger \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E + m} \right) \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ ((\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(E + m))\varphi \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

что приводит к правильному релятивистскому выражению для скорости свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$ ,

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \left( \varphi^\dagger \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\vec{\sigma} + \vec{\sigma}(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2E} \varphi \right) = \frac{\mathbf{p}}{E}. \quad (3.26)$$

**3.4 Полный набор решений**

Множество решений для свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$  должно завершаться добавлением решения с *отрицательной* энергией,  $E = -E_{\mathbf{p}}$ , которое может быть найдено тем же способом.

**Задача 3.3**

Построить нормированные биспиноры  $v(\mathbf{p})$  с отрицательной энергией и проверить их ортогональность к биспинорам  $u(\mathbf{p})$  с положительной энергией и тем же импульсом  $\mathbf{p}$ .

**Решение** С нормализацией  $(v^\dagger v) = 1$  и  $(\chi^\dagger \chi) = 1$ ,

$$v(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{|E| + m}{2|E|}} \begin{pmatrix} -((\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})/(|E| + m))\chi\chi \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Присущий спин может быть квантован по отношению к любой оси, чтобы определить два ортогональных двухкомпонентных спинора для каждого знака энергии. Одна возможность, особенно удобная для высоких энергий, состоит в том, чтобы использовать направление импульса  $\mathbf{p}$  в качестве

оси квантования. Проекция спина частицы на направление движения называется *спиральностью*. Соответствующий оператор имеет вид

$$\hat{h}_{\mathbf{p}} = \frac{(\vec{\Sigma} \cdot \mathbf{p})}{|\mathbf{p}|}, \quad (3.28)$$

где  $\vec{\Sigma}$  - релятивистский аналог матриц Паули (12.65). Собственные значения спиральности равны  $\pm 1$ , образуя состояния с правой или левой *продольной поляризацией*, аналог круговой поляризации для фотонов.

### Задача 3.4

Вывести оператор уравнения движения для оператора  $\vec{\Sigma}$  свободной дираковской частицы и показать, что спиральность сохраняется (аксиальная симметрия аокруг направления движения).

**Решение** Для Гамильтониана (12.2), оператор  $\vec{\Sigma}$  не коммутирует с оператором скорости  $\vec{\alpha}$ ,

$$[\Sigma_i, \alpha_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{ijk}\alpha_k, \quad (3.29)$$

где используется коммутатор  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ . Отсюда,

$$[\vec{\Sigma}, \hat{H}] = -2i[\vec{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (3.30)$$

При свободном движении импульс сохраняется и может быть представлен своим собственным значением  $\mathbf{p}$ . тогда

$$[(\vec{\Sigma} \cdot \mathbf{p}), \hat{H}] = 0, \quad (3.31)$$

спиральность сохраняется и может быть использована для двух характерных линейно независимых состояний с заданными  $\mathbf{p}$  и  $E$ .

Мы можем также ввести символ оператора  $\hat{\zeta}_{\mathbf{p}}$ , который характеризуется знаком энергии для заданного  $\mathbf{p}$ ,

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{p}} = \frac{\hat{H}}{E_{\mathbf{p}}}, \quad E_{\mathbf{p}} = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (3.32)$$

Собственные значения  $\hat{\zeta}$  снова равны  $\pm 1$ . Четыре возможных комбинации значений спиральности и  $\zeta$  определяют полный базис  $\psi_{\mathbf{p}\zeta h}$ .

Подытожим: полный набор решений уравнения Дирака для свободного движения может быть выбран как

$$\Psi_{\mathbf{p}\zeta h}(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) - i\zeta E_{\mathbf{p}} t} u_{\zeta h}(\mathbf{p}), \quad (3.33)$$

где биспинор  $u_{\zeta h}(\mathbf{p})$  задан выражениями (3.23) для  $\zeta = 1$  и (3.27) для  $\zeta = -1$ , соответственно. Квантовое число  $h$  фиксирует внутренний двухкомпонентный спинор, и может быть взято, например, в представлении спиральности. Функции (3.33) одновременно являются собственными функциями следующих операторов:

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (3.34)$$

$$\hat{H} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \zeta E_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (3.35)$$

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = \zeta \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}, \quad (3.36)$$

$$\hat{h}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\zeta h} = h \Psi_{\mathbf{p}\zeta h}. \quad (3.37)$$

Явный вид биспиноров  $u$  зависит от представления дираковских матриц; они могут быть нормированы, например, согласно

$$(u_{\zeta' h'}^\dagger(\mathbf{p}) u_{\zeta h}(\mathbf{p})) = \delta_{\zeta' \zeta} \delta_{h' h}. \quad (3.38)$$

[Мы помним, что для *инвариантной* нормализации должен использоваться скаляр  $\bar{u}u$ , eq. (12.84).] Общее решение уравнения Дирака дается суперпозицией

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta=\pm 1} \sum_{h=\pm 1} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} a_{\zeta h}(\mathbf{p}) u_{\zeta h}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) - \zeta E_{\mathbf{p}} t}, \quad (3.39)$$

где коэффициенты  $a_{\zeta h}(\mathbf{p})$  определяются исходным биспинором  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ ,

$$a_{\zeta h}(\mathbf{p}) = \int d^3 r e^{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} u_{\zeta h}^\dagger(\mathbf{p}) \Psi(\mathbf{r}, 0). \quad (3.40)$$

### Задача 3.5

Показать, что *Преобразование Фолди-Ваутхуизена* [Fol1950],

$$\Psi' = \hat{U} \Psi, \quad \hat{H}' = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1}, \quad (3.41)$$

где

$$\hat{U} = e^{i\hat{F}}, \quad \hat{F} = -\frac{i}{2p} \beta(\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \tan^{-1} \left( \frac{p}{m} \right), \quad (3.42)$$

$\beta$  и  $\vec{\alpha}$  — дираковы матрицы (12.7), и  $p = |\mathbf{p}|$ , приводит уравнение Дирака для свободного движения с импульсом  $\mathbf{p}$  к виду, в котором решения с положительной и отрицательной энергиями явно расщеплены.

**Решение** Преобразованный Гамильтониан (3.41) дается выражением

$$\hat{H}' = e^{i\hat{F}} \left( \beta m + (\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \right) e^{-i\hat{F}} = \beta \sqrt{m^2 + p^2}, \quad (3.43)$$

и в стандартном представлении (12.7) мы получим два расщепленных двухкомпонентных уравнения для энергий  $\pm E_{\mathbf{p}}$ . Для доказательства можно использовать эквивалентную форму

$$\hat{F} = -\frac{1}{2} \tan^{-1} \left( i\beta \frac{(\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p})}{m} \right) \quad (3.44)$$

и степенные ряды для  $\tan^{-1}$ , в соответствии с тем, что

$$(\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 = p^2. \quad (3.45)$$

### 3.5 Уравнение Паули

В нерелятивистской квантовой теории, уравнение Паули, *Задача I.23.2*, дает зоршее предсказание для спинового гиромагнитного отношения электрона (или позитрона). Наша задача состоит в том, чтобы вывести уравнение Паули из релятивистского уравнения Дирака.

Уравнение Паули не включает какой-либо явной ссылки на море Дирака для отрицательных энергий. В нерелятивистском пределе,  $v/c \ll 1$ , нижние компоненты биспинора были малы для свободного движения. Теперь нам нужно рассмотреть полное уравнение Дирака (12.33) в присутствии внешнего электромагнитного потенциала  $(A_0, \mathbf{A})$ . Выпишем это уравнение (для стационарного случая с энергией  $E$ ) в терминах двухкомпонентных биспиноров  $\varphi(\mathbf{r})$  и  $\chi(\mathbf{r})$ ; для того, чтобы отслеживать релятивистский параметр  $v/c$ , мы вернемся к основным единицам:

$$(E - eA_0 - mc^2)\varphi = c\vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \chi, \quad (3.46)$$

$$(E - eA_0 + mc^2)\chi = c\vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi, \quad (3.47)$$

Рассмотрим решение для положительной энергии,

$$E = mc^2 + \varepsilon, \quad (3.48)$$



где  $|\varepsilon| \ll mc^2$  в нерелятивистской области. Влияние нижних компонент,

$$\chi = \frac{1}{2mc^2 + \varepsilon - eA_0} c\vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi, \quad (3.49)$$

будет слишком мало, если потенциалы не сдвинут энергию слишком далеко от границы верхнего континуума, и не имеют высоких компонент Фурье, пространственных с  $k > mc/\hbar$  или временных с  $\omega > mc^2/\hbar$ . Тогда нижний спинор порядка  $v/c$ , сравним с верхним, и, пренебрегая эффектами высших порядков, мы можем положить

$$\chi \approx \frac{\vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)}{2mc} \varphi, \quad (3.50)$$

Выражение (3.50), используемое в правой части уравнения (3.46) приводит к замкнутому уравнению для верхнего спинора, оно велико в нерелятивистском пределе,

$$\varepsilon\varphi_0\varphi + c\left(\vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - (e/c)\mathbf{A} \right)\right)\chi \approx \left\{ \frac{\left( \vec{\sigma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c \right) \right)^2}{2m} + eA_0 \right\} \varphi. \quad (3.51)$$

Этой нерелятивистской аппроксимацией *первого порядка* для уравнения Дирака является *уравнение Паули*, где верхний двухкомпонентный спинор  $\varphi$  играет роль обычной шрёдингеровской волновой функции; орбитальный гиромагнитный коэффициент  $g_l = e/2mc$  и спиновое гиромагнитное отношение  $g_s = 2g_l$  предсказываются этим уравнением автоматически. Из вывода ясно, что это прямое следствие спиновой структуры Дирака и минимального пути включения взаимодействия с электромагнитным полем. Небольшая разница (I.1.73) между этими предсказаниями и наблюдаемым магнитным моментом электрона и мюона, *аномальные магнитные моменты*, объясняется аналогично лэйбовскому сдвигу, *радиационными поправками* — взаимодействия с полем вакуума. Для нуклонов аномальные магнитные моменты, уравнение (I.1.72), превышают обычные магнитные моменты, как следует из уравнения Паули. Это причина *сильных взаимодействий*, не учитываемых в уравнении Дирака. Магнитный момент нуклона не может быть вычислен в рамках КЭД (нужно рассматривать кварковую структуру нуклонов, описываемую квантовой хромодинамикой, КХД), и должно быть включено в уравнение Дирака в качестве эмпирического параметра.

### 3.6 Эффекты второго порядка

Тонкая структура атома, в соответствии с нашими простыми оценками раздела I.23, появляется как релятивистская поправка второго порядка,  $\sim (v/c)^2$ . Для аккуратного вывода необходим следующий шаг помимо уравнения (3.50).

Для простоты мы ограничим наше рассмотрение случаем чистого потенциала без магнитного поля,  $\mathbf{A} = 0$ ,  $eA_0 = U(\mathbf{r})$ . Их (3.49) мы получим

$$\chi = \frac{1}{2mc^2 + \varepsilon - U} c(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi \approx \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{\varepsilon - U}{2mc^2}\right) (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (3.52)$$

Исключая  $\chi$  из уравнения (3.46), мы найдем новое уравнение для верхнего спинора,

$$(\varepsilon - U)\varphi = c(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi \approx \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left(1 - \frac{\varepsilon - U}{2mc^2}\right) (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (3.53)$$

Для того, чтобы получить уравнение Шрёдингера с релятивистскими поправками, нужно учесть, что здесь, включая члены второго порядка, верхний спинор  $\varphi$  не может служить в качестве нерелятивистской волновой функции, поскольку он определен другим правилом нормировки. Если *биспинор*  $\Psi(\mathbf{r})$  нормирован на 1, то

$$1 = \int d^3r \Psi^\dagger \Psi = \int d^3r (\varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi), \quad (3.54)$$

и нам нужны поправки, не выше, чем второго порядка, этого достаточно чтобы взять при этом условии нижний спинор  $\chi$  с первым порядком по  $v/c$ , как это найдено в уравнении (3.50),

$$1 \approx \int d^3r \left\{ \varphi^\dagger \varphi + \left( \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{2mc} \varphi \right)^\dagger \left( \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{2mc} \varphi \right) \right\}. \quad (3.55)$$

используя эрмитовость оператора  $(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ , мы найдем с той же самой точностью

$$1 = \int d^3r \varphi^\dagger \left[ 1 + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2}{4m^2c^2} \right] \varphi = \int d^3r \varphi^\dagger \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m^2c^2} \right] \varphi, \quad (3.56)$$

где свойства матриц Паули позволяют нам избавиться от них. Последнее выражение, опять с нужной точностью, может быть симметризовано по отношению к бра- и кет-спинорам,

$$1 \approx \int d^3r \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi^\dagger \cdot \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi. \quad (3.57)$$

## 3.6 Эффекты второго порядка

59

Из (3.57) видно, что новый спинор,

$$\psi = \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi, \quad (3.58)$$

корректно нормализован и может играть роль нерелятивистской волновой функции до второго порядка.

Для того, чтобы вставить новую волновую функцию (3.58) в уравнение (3.53), разумно вычислить

$$\left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U)\psi = \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U) \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] \varphi. \quad (3.59)$$

Пренебрегая членами четвертого порядка, это равно

$$(\varepsilon - U)\varphi + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}(\varepsilon - U)\varphi + (\varepsilon - U)\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}\varphi. \quad (3.60)$$

Здесь, первый член мы можем выразить с помощью уравнения (3.53), которое дает

$$\begin{aligned} & \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right] (\varepsilon - U)\psi \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\varphi + \frac{1}{8m^2c^2} \{ \hat{\mathbf{p}}^2(\varepsilon - U) - 2(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\varepsilon - U)(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + (\varepsilon - U)\hat{\mathbf{p}}^2 \} \varphi. \end{aligned} \quad (3.61)$$

В выражении внутри скобок в (3.61) члены, содержащие  $\varepsilon$  уничтожаются, в то время, как оставшиеся могут быть преобразованы к

$$\{...\} = \hbar^2 \nabla^2 U + 2\hbar (\vec{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}]). \quad (3.62)$$

Уравнение для корректной функции  $\psi$  может быть выведено действием на обе части (3.61) оператора

$$\left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right]^{-1} \approx 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2}. \quad (3.63)$$

В левой части (3.61) мы получим  $(\varepsilon - U)\psi$ , в то время как в правой части нужно умножить на оператор (3.63) только первый член, тогда как второй член уже второго порядка,

$$(\varepsilon - U)\psi = \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m^2c^2} \right) \psi$$

$$+ \frac{1}{8m^2c^2} \left\{ \hbar^2 \nabla^2 U + 2\hbar \left( \vec{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \right) \right\} \psi. \quad (3.64)$$

Мы приходим к аналогу уравнения Шрёдингера,

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.65)$$

с эффективным Гамильтонианом второго порядка (и правильным  $ls$ -членом!)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left( \vec{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \right) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 U. \quad (3.66)$$

Физический смысл выведенных поправок и полученная модель тонкой структуры атомного спектра обсуждались в разделе 23.3.

### 3.7 Центральное поле

Здесь мы рассмотрим уравнение Дирака для частицы в статическом внешнем поле  $U(r)_0(r)$  с центральной симметрией без нерелятивистского упрощения. Однако, нам следует помнить, что многие понятия внешнего поля и соответствующие описания частицы в этом поле с помощью уравнения Дирака имеют ограниченную правомерность.

С использованием внешнего поля и одночастичной формулировки, *радиационные поправки* относящиеся к испусканию и поглощению виртуальных фотонов пренебрежимо малы. Для легких атомов, где  $v/c \sim Z\alpha \ll 1$ , наше прежнее рассмотрение по теории возмущений полностью справедливо. Виртуальные процессы дают лэмбовский сдвиг, раздел 4.8, атомных уровней порядка  $E_b \cdot (Z\alpha)^2 \ln(1/Z\alpha)$ . Это превышает поправки  $\sim (v/c)^4$  от точного решения уравнения Дирака, которые дают вклад  $\sim E_b(Z\alpha)^4$ . Следовательно «точное» решение уравнения Дирака, на самом деле, обычно превышает точность, позволяющую пренебречь радиационными поправками. Тем не менее, в тяжелых атомах, когда  $Z\alpha$  стремится к 1, радиационные поправки от виртуальных процессов играют сравнительно малую роль, и новые эффекты, возникающие при сильных полях заслуживают обсуждения. На практике, здесь также обычно необходимо принимать во внимание конечность размеров тяжелых ядер, поскольку такой потенциал отличается от кулоновского.

Из за присутствия спин-орбитальной связи, спин и орбитальный момент не сохраняются отдельно, а полный угловой момент строго сохраняется. Гамильтониан в центральном поле дается (с  $\hbar = c = 1$ ) выражением

$$\hat{H} = \beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + U(r), \quad (3.67)$$

и вектор орбитального момента  $\hat{\vec{\ell}}$  не коммутирует с импульсом  $\hat{\mathbf{p}}$ ,

$$[\hat{\vec{\ell}}, \hat{H}] = [\hat{\vec{\ell}}, (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})] = i[\vec{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (3.68)$$

Результат (3.30) показывает, что сохраняемый релятивистский оператор полного углового момента

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \frac{1}{2}\vec{\Sigma} \equiv \hat{\vec{\ell}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (3.69)$$

Как и ранее, уравнение (3.13), мы введем верхний  $\varphi$  и нижний  $\chi$  спиноры и выпишем стационарное уравнение Дирака,

$$(\beta m + (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + U(r)) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (3.70)$$

как множество из двух связанных дифференциальных уравнений для двух спиноров,

$$(E - m - U)\varphi = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi, \quad (E + m - U)\chi = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi. \quad (3.71)$$

Мы будем искать стационарные состояния с точными квантовыми числами  $j$  и  $j_z = m$ . соответствующие двухкомпонентные спин-орбитальные функции являются сферическими спинорами  $\Omega_{\ell jm}$ , *Задача 23.1*. Поскольку спиноры  $\varphi$  и  $\chi$  отличаются действием *псевдоскалярного* оператора  $(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ , они должны иметь противоположную четность. Существует только одна пара сферических спиноров с одинаковыми  $j, m$  и различной четностью, *Задача 1.23.3*; они имеют дополнительные значения  $\ell$  и  $\ell'$  орбитального момента (I.23.29),

$$\ell + \ell' = 2j. \quad (3.72)$$

Таким образом, подходящий подход к решению множества (3.71) таков

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r) \Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) G(r) \Omega_{\ell' jm}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

где радиальные функции  $F(r)$  и  $G(r)$  следует определить.

Сферические спиноры  $\Omega_{\ell jm}$  и  $\Omega_{\ell' jm}$  взаимосвязаны оператором  $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  (мы используем радиальный единичный вектор  $\mathbf{n}$ ). Между тем, наши уравнения (3.71) содержат оператор  $(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})$ . Во-первых, нам нужно связать эти два оператора. Используя (I.23.30), мы найдем

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})G(r)\Omega_{\ell' jm}(\mathbf{n})$$

$$= (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})G(r)\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{r})\frac{G(r)}{r}\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}). \quad (3.74)$$

Алгебра спина позволяет проделать следующие вычисления:

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{r}) = (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{r}) + i(\vec{\sigma} \cdot [\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}]) = -i(\operatorname{div} \mathbf{r}) - i(\mathbf{r} \cdot \nabla) - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{\ell}). \quad (3.75)$$

с обозначением  $G' \equiv dG/dr$ ,

$$(\mathbf{r} \cdot \nabla)\frac{G(r)}{r} = r \frac{\partial}{\partial r} \frac{G(r)}{r} = G' - \frac{G}{r}, \quad (3.76)$$

и  $\operatorname{div} \mathbf{r} = 3$ , мы получим

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\chi = -i \left( G' + \frac{1-\nu}{r} G \right) \Omega_{\ell jm}, \quad (3.77)$$

где релятивистское квантовое число  $\nu$  вводится для удобства,

$$\nu = -1 - \langle (\vec{\sigma} \cdot \hat{\ell}) \rangle_{\ell j} = \ell(\ell+1) - j(j+1) - \frac{1}{4} = \begin{cases} -(\ell+1), & j = \ell + 1/2, \\ \ell, & j = \ell - 1/2. \end{cases}, \quad (3.78)$$

это может быть коротко записано как

$$|\nu| = j + 1/2, \quad (3.79)$$

С помощью аналогичной процедуры, применяемой к  $(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi$ , где взято дополнительное значение  $\langle (\vec{\sigma} \cdot \hat{\ell}) \rangle_{\ell j}$ , мы исключим спин-угловые переменные и придем к связанному множеству из двух дифференциальных радиальных уравнений,

$$G' + \frac{1-\nu}{r} G = i(E - m - U)F, \quad F' + \frac{1+\nu}{r} F = i(E + m - U)G. \quad (3.80)$$

Это множество можно слегка упростить стандартным преобразованием для трехмерного движения [ранее мы использовали  $R(r) = u(r)/r$ ],

$$F(r) = \frac{f(r)}{r}, \quad G(r) = -i \frac{g(r)}{r}, \quad (3.81)$$

когда мы найдем для новых функций

$$f' + \frac{\nu}{r} f = (E + m - U)g, \quad g' - \frac{\nu}{r} g = -(E - m - U)f. \quad (3.82)$$

Решить уравнения (3.82) для случая свободного движения.

**Решение** С  $U = 0$ , мы можем исключить одну из компонент, например  $g$ , и получить уравнение типа Шрёдингера,

$$f'' + \left( k^2 - \frac{\nu(\nu+1)}{r^2} \right) f = 0, \quad k = \sqrt{E^2 - m^2}, \quad (3.83)$$

с  $\ell \rightarrow \nu$  с центробежным членом. Общее решение является суперпозицией функций  $\sqrt{r}J_{\pm(\nu+1/2)}(kr)$ , где  $J$  — функция Бесселя, регулярная на исходном решении, для обоих значений  $\nu$ , есть  $\sqrt{r}J_{\ell+1/2}$ . Исходные функции  $F$  и  $G$  — такие же сферические функции Бесселя, как и в нерелятивистском случае, действительно определяемые пространственной геометрией,

$$F(r) = N j_\ell(kr), \quad G(r) = -iN(\text{sign } \nu) \sqrt{\frac{E-m}{E+m}} j_{\ell'}(kr), \quad (3.84)$$

где  $N$  — постоянная нормировки.

### Задача 3.7

Полагая, что потенциал  $U(r)$  в (3.82) спадает достаточно быстро при  $r \rightarrow \infty$ , найти универсальную асимптотическую форму решения.

**Решение** В асимптотике, уравнения (3.82) сводятся к

$$f' \approx (E + m)g, \quad g' \approx (m - E)f. \quad (3.85)$$

Общее решение этого множества дается формклами

$$f(r) \sim e^{-\kappa r} + B e^{\kappa r}, \quad g(r) = -\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} (A e^{-\kappa r} - B e^{\kappa r}). \quad (3.86)$$

Здесь

$$\kappa = \sqrt{m^2 - E^2}. \quad (3.87)$$

Случай  $|E| > m$  (непрерывный спектр,  $\kappa$  мнимая,  $\pm ik$ ) соответствует задаче рассеяния, и обе части решения необходимо описывать убегаящей и приходящей сферическими волнами. Для  $|E| < m$  (внутри энергетического зазора),  $\kappa$  вещественно (для нерелятивистской задачи мы используем то же обозначение  $\kappa$ ). Физически ограниченные состояния с экспоненциальным спадом на больших расстояниях требуют, чтобы  $B(E) = 0$ , что определяет дискретный энергетический спектр, если он существует.

### 3.8 Кулоновское поле

Точное решение уравнения Дирака может быть найдено для кулоновского поля (в наших текущих единицах  $e^2 = \alpha$ ),

$$U(r) = -\frac{Z\alpha}{r}, \quad (3.88)$$

хотя, как отмечалось выше, область его справедливости ограничена тяжелыми атомами. Мы будем искать дискретный спектр, предполагая притяжение,  $Z > 0$ , и вещественное значение  $\kappa$ , уравнение (3.87).

Множество уравнений для решения дается выражениями (3.82),

$$f' + \frac{\nu}{r} f - \left( E + m + \frac{Z\alpha}{r} \right) g = 0, \quad g' - \frac{\nu}{r} g + \left( E - m + \frac{Z\alpha}{r} \right) f = 0. \quad (3.89)$$

Процедура решения проходит те же самые шаги, что и для нерелятивистского случая, раздел 18.2. Введем безразмерную переменную длины

$$\rho = \kappa r, \quad (3.90)$$

определяющую асимптотическое поведение для  $\sim \exp(-\kappa\rho)$ , и степенной закон вблизи начала координат  $\sim \rho^\gamma$ . Главные члены двух уравнений (3.89) в  $r \rightarrow 0$  определяют

$$\gamma = \sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2}; \quad (3.91)$$

положительный знак корня выбран, чтобы избежать сингулярности в начале координат. как обычно, мы должны искать полное решение в форме

$$f(\rho) = e^{-\rho} \rho^\gamma u(\rho), \quad g(\rho) = e^{-\rho} \rho^\gamma v(\rho), \quad (3.92)$$

а гладкие функции  $u(\rho)$  and  $v(\rho)$  могут быть найдены как степенные ряды,

$$u(\rho) = \sum_{k=0} u_k \rho^k, \quad v(\rho) = \sum_{k=0} v_k \rho^k. \quad (3.93)$$

#### Задача 3.8

Вывести рекуррентные соотношения для коэффициентов  $u_k$  и  $v_k$  и определить дискретный спектр граничных энергетических состояний. Показать, что граничные состояния соответствуют конечным полиномиальным решениям.



**Решение** Уравнения для коэффициентов  $k = 0$  разделены,

$$(\gamma - \nu)v_0 - Z\alpha u_0 = 0, \quad (\gamma + \nu)u_0 + Z\alpha v_0 = 0. \quad (3.94)$$

Летерминант этой системы снова определяет поведение (3.91) в начале координат. Для  $k > 0$  получим

$$\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} u_{k-1} + Z\alpha u_k - (\gamma - \nu + k)v_k + v_{k-1} = 0, \quad (3.95)$$

$$\sqrt{\frac{m+E}{m-E}} v_{k-1} - Z\alpha v_k - (\gamma + \nu + k)u_k + u_{k-1} = 0, \quad (3.96)$$

Комбинируя уравнения (3.95) и (3.96), найдем соотношение между коэффициентами  $u_k$  and  $v_k$ ,

$$u_k \left( \sqrt{\frac{m+E}{m-E}} Z\alpha + \gamma + \nu + k \right) = v_k \left( \sqrt{\frac{m+E}{m-E}} (\gamma + \nu + k) - Z\alpha \right). \quad (3.97)$$

Асимптотики рядов при  $k \rightarrow \infty$  показывают, что бесконечные ряды ведут себя при больших  $\rho$  как  $\exp(2\rho)$  с расходимостью  $\propto \exp(+\rho)$  решения (3.92). Следовательно, нам нужны полиномиальные решения, которые обрываются при конечном числе  $k = N$ , таким образом, что  $u_N$  и  $v_N$  последние ненулевые коэффициенты, в то время как  $u_{N+1} = v_{N+1} = 0$ . Если, таким образом, мы найдем из системы (3.95-3.96)

$$\sqrt{m-E} u_N = -\sqrt{m+E} v_N. \quad (3.98)$$

при условии, уравнение (3.97) с  $k = N$  дает

$$\left( \sqrt{m-E} - \sqrt{m+E} \right) Z\alpha = 2\kappa(\gamma + N). \quad (3.99)$$

Окончательно, решение для энергии, мы приходим к дискретному спектру,

$$E(N, \nu) = \frac{m}{\sqrt{1 + [Z\alpha/(N + \gamma)]^2}}, \quad (3.100)$$

где  $\nu$  входит через определение  $\gamma$ , уравнение (3.91).

Наивысшая степень  $N$  играет роль *radial квантового числа*  $N = 1, 2, \dots$ , возможны два значения  $\nu$ . Особый случай при  $N = 0$ . Тогда система уравнений (3.95, 3.96) сводится к

$$\frac{u_0}{v_0} = -\sqrt{\frac{m-E}{m+E}} = \frac{Z\alpha}{\gamma + \nu}. \quad (3.101)$$

Это может быть справедливо, если  $\gamma + \nu = \nu + \sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2} < 0$ , т.е.  $\nu < 0$ . Уровни могут быть расположены как

$$N = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & \nu < 0 \\ 1, 2, \dots, & \nu > 0. \end{cases} \quad (3.102)$$

Иногда  $N$  называется радиальным квантовым числом только для  $\nu < 0$ , в то время, как для  $\nu > 0$  этот термин относится к  $N - 1$ .

Состояния с одинаковыми  $N$  и  $|\nu| = j + 1/2$  вырождены, за исключением уровней с  $N = 0$ ; это следствие «случайного» нерелятивистского кулоновского вырождения по отношению к  $\ell$  для заданного главного квантового числа. Физическое соображение состоит в том, что орбитальный момент  $\ell$  более не сохраняется из-за спин-орбитальной связи. Может быть, болкк правильно здесь говорить о вырождении двух состояний с одинаковыми  $j$  и четностью, определяемой верхним спинором,  $(-)^{\ell}$ .

### Задача 3.9

Найти нерелятивистский предел дираковского спектра (3.100), включающий члены второго порядка.

**Решение** Аналог главного квантового числа

$$n = N + |\nu| = N + j + \frac{1}{2}. \quad (3.103)$$

Разложение уравнения (3.100) по степеням  $(Z\alpha)^2$  дает

$$E(n; \nu) \approx m - \frac{m(Z\alpha)^2}{2n^2} \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left( \frac{1}{|\nu|} - \frac{3}{4n} \right) \right], \quad (3.104)$$

в соответствии с результатом возмущения (I.23.42).

Обладая непрерывной зависимостью энергетических уровней от заряда  $Z$ , мы уже можем охарактеризовать энергетические уровни атома нерелятивистскими квантовыми числами, взятыми для верхнего спинора. Невырожденный уровень каждой оболочки соответствует максимальному орбитальному моменту  $\ell_{\max} = n - 1$ ,  $j = \ell_{\max} + 1/2$ ,  $\nu = -j - 1/2$ , and  $N = 0$ .

Наинизшие состояния таковы

	$n$	$N$	$\nu$	$\ell$	$j$
$1s_{1/2}$	1	0	-1	0	1/2
$2s_{1/2}$	2	1	-1	0	1/2
$2p_{1/2}$	2	1	1	1	1/2
$2p_{3/2}$	2	0	-2	1	3/2
$3s_{1/2}$	3	2	-1	0	1/2
$3p_{1/2}$	3	2	1	1	1/2
$3p_{3/2}$	3	1	-2	1	3/2
$3d_{3/2}$	3	1	2	2	3/2
$3d_{5/2}$	3	0	-3	2	5/2

(3.105)

Здесь, вырожденные дублеты размещены вместе и разделены горизонтальными линиями от других дублетов; Двойные линии отмечают главные оболочки. Разделение дублетов радиационными поправками высшего порядка мало.

Детали волновых функций (выраженные в терминах гипергеометрических функций, раздел I.11.5) можно найти в [Bet1957]. Мы обсудим кратко только поведение вблизи центра, где волновые функции  $\sim \rho^{\sqrt{\nu^2 - (Z\alpha)^2} - 1}$ . Экспонента здесь отрицательна даже при малых  $Z\alpha$ , если  $|\nu| = 1$ , т.е. для всех  $s$ - и  $p$ -уровней. Однако, эта сингулярность очень слабая и не появляется вовсе, если кулоновский потенциал *регуляризован* при  $r \rightarrow 0$  конечным размером ядер. Ситуация становится более опасной при  $Z\alpha > 1$ . Решения сильно осциллируют при  $r \rightarrow 0$ , и это нефизичное поведение показывает, что одночастичное уравнение Дирака теряет достоверность, поскольку необходима регуляризация.

Конечно, граничные кулоновские уровни обладают энергией внутри релятивистского энергетического зазора,  $E < m$ . Энергия основного состояния, в соответствии с (3.100), дается выражением

$$E_{\text{g.s.}} = E(0; -1) = m\sqrt{1 - (Z\alpha)^2}. \quad (3.106)$$

Для заряда величиной  $Z = 1/\alpha \approx 137$  эта энергия обладает мнимой частью, что должно интерпретироваться как распад нестабильного состояния, раздел 5.8. И опять, этого можно избежать регуляризацией потенциала. Однако, Энергия связи убывает с ростом заряда  $Z$ . Существует *критический заряд*  $Z_c$ , при котором энергия основного состояния пересекает границу нижнего континуума,

$$E_{\text{g.s.}} \rightarrow -m \quad \text{at} \quad Z \rightarrow Z_c. \quad (3.107)$$

Точная величина  $Z_c$  зависит от предположения относительно распределения заряда внутри ядер,  $Z_c \approx 170$ .

Точка  $Z = Z_c$  соответствует неустойчивости дираковского вакуума. В самом деле, если существует *электронный уровень* с  $E < -m$ , вакуум неустойчив по отношению к *образованию спонтанных пар*. Электрон отсталой пары занимает этот уровень, в то время как позитронный партнер убегает на бесконечность с нулевой кинетической энергией, — как результат, полная энергия системы *уменьшается* на величину  $|m + E|$  (сумма энергий партнеров). Действительно, *две пары* могут быть созданы вследствие двукратного вырождения спина основного состояния, поэтому часть системы остается после реструктурирования на конечном расстоянии с зарядом  $Z_c - 2$ . Эта теория [Zel1971] до настоящего времени не получила экспериментального подтверждения, вследствие отсутствия стабильных ядер с  $Z_c$  порядка 170. Такие системы могут образовываться на время при столкновении тяжелых ионов, но динамические эффекты, образование позитронов параллельными механизмами и короткое время жизни составной системы не позволяют экспериментально наблюдать реальных эффектов вакуумной неустойчивости при критических полях.

### 3.9 Стационарное однородное магнитное поле

В этой задаче мы можем продолжить аналогичный вывод уравнения Паули, раздел 37.5, но без разложения по степеням  $v/c$ .

Наш Гамильтониан здесь содержит только векторный потенциал  $\mathbf{A}$ , который определяет магнитное поле  $\vec{B} = \text{curl } \mathbf{A}$ ,

$$\hat{H} = \beta m + \vec{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}). \quad (3.108)$$

Система уравнения для двухкомпонентных спиноров выглядит как

$$m\varphi + \vec{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\chi = E\varphi, \quad -m\chi + \vec{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\varphi = E\chi. \quad (3.109)$$

Отсутствие скалярного потенциала позволяет нам исключить вовсе нижний спинор  $\chi$  и получить уравнение Шрёдингера в замкнутом виде для верхнего спинора,

$$\left\{ E^2 - m^2 - \left( \vec{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \right)^2 \right\} \varphi = 0. \quad (3.110)$$

Как выведено в *Задаче I.23.6*,

$$\left( \vec{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \right)^2 (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 - e(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}). \quad (3.111)$$

Ясно, что корректный спиновый магнетизм появляется только вследствие принципа наименьшего действия, включающего электромагнитное взаимодействие, раздел (11.10), что было применено к уравнению Дирака, а не к УКТ, которому удовлетворяет любая компонента при свободном движении.

### Задача 3.10

Найти энергетические уровни дираковской частицы в однородном статическом магнитном поле.

**Решение** Решение аналогично тому, что было проделано для нерелятивистской задачи, раздел I.13.5. С магнитным полем  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$  и калибровкой, выбранной как в уравнении (I.13.12),

$$\left[ E^2 - m^2 - \hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2 - (\hat{p}_x + e\mathcal{B}y)^2 + e\mathcal{B}\sigma_z \right] \varphi = 0. \quad (3.112)$$

Продольный момент сохраняется,  $\hat{p}_z \varphi = p_z \varphi$ . Спинор  $\varphi$  может быть взят, как собственное состояние  $\sigma_z$  с собственным значением  $\sigma = \pm 1$ . При нашей калибровке импульс  $p_x$  также сохраняется и может быть подставлен константой, которая определяет  $y$ -координату центра орбиты,  $y_0 = -p_x/e\mathcal{B}$ . Тогда уравнение принимает вид

$$\left[ \hat{p}_y^2 + (e\mathcal{B})^2(y - y_0)^2 \right] \varphi \left[ E^2 - m^2 - p_z^2 + e\sigma\mathcal{B} \right] \varphi. \quad (3.113)$$

Оператор в левой части (3.112) это нерелятивистский гармонический осциллятор с частотой  $2|e|\mathcal{B}$ . Это определяет энергетический спектр уровней Ландау, вырожденных при  $p_x$ , или  $y_0$ ,

$$E_{n\sigma}^2(p_z) = m^2 + p_z^2 + |e|\mathcal{B}(2n + 1) - e\mathcal{B}\sigma. \quad (3.114)$$

Основной уровень Ландау,  $n = 0$  и  $\sigma = e/|e|$ , не вырожден (орбитальный и спиновый магнитные эффекты отсутствуют), все другие уровни дважды вырождены, например,  $E_{n+1,1} = E_{n,-1}$  for  $e > 0$ . Легко проперить правый нерелятивистский предел: for  $E > 0$ ,

$$E_{n\sigma}(p_z) = m + \frac{p_z^2}{2m} + \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e}{|e|} \mu_B \sigma \mathcal{B}, \quad (3.115)$$

с  $\omega_c = |e|\mathcal{B}/m$  and  $\mu_B = |e|/2m$ . Нижний спинор  $\chi$  может быть найден в виде (3.109) и при нашей калибровке содержит матрицы Паули  $\sigma_z$  and  $\sigma_x$ . Этот внедиагональный характер структуры спина происходит из внутренней нерелятивистской связи между спином и орбитальным движением.



Нарушение симметрии возникает всегда, когда что-либо, что ранее считалось ненаблюдаемым, оказывается в реальности наблюдаемым. Известные примеры таких открытий — это асимметрия физических законов, возникающая при зеркальном отображении, сопряжении частиц и античастиц или обращения хода времени не из прошлого в будущее, а наоборот. Оказывается, все эти явления, которые ранее считались ненаблюдаемыми, фактически наблюдаемы.

## Глава 4

Ц.Д. Ли, *Введение в теорию поля*

### Дискретные симметрии, нейтрино и каоны

#### 4.1 Преобразование четности для дираковской частицы

Если квантовая система инвариантна при пространственной инверсии, соответствующий оператор  $\hat{P}$  коммутирует с гамильтонианом, и стационарные состояния могут классифицироваться по отношению к четности как константы движения. Гамильтониан Дирака (12.2) свободной частицы, очевидно, может вести себя как скаляр по отношению к инверсии, если матричный оператор  $\vec{\alpha}$  мог бы рассматриваться как полярный вектор, который меняет знак при инверсии пространственных координат. Однако, как в случае вращения или лоренцевского растяжения, параграф 12.5, наши матрицы Дирака универсальны, и, следовательно, нам нужно вернуть их к исходной форме в помощью преобразования биспинора  $\Psi$ , сравни с уравнениями (12.50) и (12.51).

Действуя  $4 \times 4$  матрицей инверсии,  $\mathcal{P}$ , аналогично уравнениям (12.42) и (12.43), преобразуем биспинорную волновую функцию как

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \Psi_{\mathcal{P}}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{P}\Psi(-\mathbf{r}, t). \quad (4.1)$$

В преобразованной системе координат ( $\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow -\hat{\mathbf{p}}$ ) уравнение Дирака (12.12) принимает вид

$$\left( i\gamma_0 \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - m \right) \mathcal{P}\Psi(-\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.2)$$

Уравнение будет инвариантным при инверсии, если мы удовлетворим условиям

$$\mathcal{P}^{-1}\gamma_0\mathcal{P} = \gamma_0, \quad \mathcal{P}^{-1}\vec{\gamma}\mathcal{P} = -\vec{\gamma}. \quad (4.3)$$

Решение (4.3) может быть записано как

$$\mathcal{P} = \eta_{\mathcal{P}} \gamma_0, \quad (4.4)$$

где мы можем вставить произвольный фазовый множитель  $\eta_{\mathcal{P}}$ , равный 1 по абсолютной величине.

Таким образом, верхний и нижний двухкомпонентные спиноры преобразуются *противоположным* образом,

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \eta_{\mathcal{P}} \varphi(-\mathbf{r}, t), \quad \chi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow -\eta_{\mathcal{P}} \chi(-\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

Эти спиноры имеют противоположную внутреннюю четность, как мы уже видели в явном решении, уравнение (13.16). Заметим, что две компоненты в  $\varphi$  или  $\chi$  преобразуются тождественно. Это соответствует тому факту, использовавшемуся в нерелятивистской теории, что компоненты нерелятивистского оператора спина не изменяются при инверсии (спин, как любой угловой момент, является *аксиальным вектором*).

Двойная инверсия  $\mathcal{P}^2$  может рассматриваться как тождественное преобразование или как вращение  $2\pi$ . Для частиц со спином  $1/2$ ,  $2\pi$ -вращение меняет знак волновой функции, параграф I.20.1, вследствие двузначного представления группы  $SU(2)$ . Это означает, что двойная инверсия может либо вернуться к исходной волновой функции, либо поменять ее знак,

$$\mathcal{P}^2 = \eta_{\mathcal{P}}^2 \gamma_0^2 = \eta_{\mathcal{P}}^2 = \pm 1. \quad (4.6)$$

Мы получили четыре возможности,  $\eta_{\mathcal{P}} = \pm 1, \pm i$ , и, соответственно, четыре типа частиц Дирака. Эти классы отличаются поведением при зарядовом сопряжении, параграф 12.4.

В самом деле, рассмотрим действие пространственной инверсии на зарядовое сопряжение функции (12.37), предполагая, что эта функция преобразуется *таким же образом*, как и исходная функция,

$$\mathcal{P} \Psi_{\mathcal{C}}(\mathbf{r}, t) = \eta_{\mathcal{P}} \gamma_0 \Psi_{\mathcal{C}}(-\mathbf{r}, t) = \eta_{\mathcal{P}} \gamma_0 \mathcal{C} \Psi^*(-\mathbf{r}, t). \quad (4.7)$$

Для комплексно сопряженной функции имеем

$$\mathcal{P} \Psi^*(\mathbf{r}, t) = \eta_{\mathcal{P}}^* \gamma_0^* \Psi^*(-\mathbf{r}, t), \quad (4.8)$$

потому что

$$\mathcal{P} \Psi_{\mathcal{C}}(\mathbf{r}, t) = \eta_{\mathcal{P}} \gamma_0 \mathcal{C} \frac{1}{\eta_{\mathcal{P}}^*} \gamma_0^* \mathcal{P} \Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (4.9)$$



## 4.2 Преобразование обращения времени

73

или, используя  $\mathcal{C}\gamma_0^*\mathcal{C}^{-1} = -\gamma_0$ , как это следует из (12.38),

$$\mathcal{P}\Psi_{\mathcal{C}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_{\mathcal{P}}}{\eta_{\mathcal{P}}^*}\mathcal{C}\mathcal{P}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_{\mathcal{P}}}{\eta_{\mathcal{P}}^*}\mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}\mathcal{C}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = -\frac{\eta_{\mathcal{P}}}{\eta_{\mathcal{P}}^*}\mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}\Psi_{\mathcal{C}}(\mathbf{r}, t). \quad (4.10)$$

мы приходим к следующему свойству дираковских частиц:

$$\mathcal{P} = -\frac{\eta_{\mathcal{P}}}{\eta_{\mathcal{P}}^*}\mathcal{C}\mathcal{P}\mathcal{C}^{-1}. \quad (4.11)$$

Два вышеупомянутых класса характеризуются различным поведением по отношению к *комбинированной инверсии*  $\mathcal{CP}$ ,

$$\begin{cases} \eta_{\mathcal{P}} = \pm 1, & \mathcal{CP} = -\mathcal{PC}, \\ \eta_{\mathcal{P}} = \pm i, & \mathcal{CP} = \mathcal{PC}. \end{cases} \quad (4.12)$$

Только вторая опция возможна, если свойства преобразования биспиноров  $\Psi$  и  $\Psi_{\mathcal{C}}$  тождественны. В частности, это должен быть случай для *нейтральных* частиц, которые тождественны своим античастицам (*Частицы Майорана*) [Maj1937].

В случае первой опции,  $\mathcal{CP} = -\mathcal{PC}$ , частица и античастица имеют противоположную *внутреннюю четность*: в левой части этого равенства, пространственная инверсия выполняется над частицей, в то время как в правой части этой операции это производится над античастицей. Это соответствует нерелятивистскому пределу уравнения Дирака, в предположении, что внутренняя четность двумерного спинора  $\varphi$  (главная часть решения с положительной энергией) и  $\chi$  (для решения с отрицательной энергией) та же самая. Тогда их четности явно противоположны, поскольку они взаимосвязаны псевдоскаляром ( $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ ), eq. (4.5).

## 4.2 Преобразование обращения времени

Обобщая нерелятивистские результаты, параграф I.8.1, мы ищем *антилинейное* преобразование, которое включает обмен начальными и конечными состояниями в матричных элементах,  $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{U}_{\mathcal{T}}\Psi^*(\mathbf{r}, -t)$ , где дополнительная  $4 \times 4$  матрица  $\hat{U}_{\mathcal{T}} \equiv \mathcal{T}$  необходима, чтобы гарантировать правильность свойств преобразования внутренних переменных, таких как спин, параграф I.20.8.

Мы ищем преобразование уравнения Дирака,

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\beta m + \vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.13)$$

изменяющее  $t \rightarrow -t$ ,

$$-i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\beta m + \vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi(\mathbf{r}, -t), \quad (4.14)$$

и осуществляя комплексное сопряжение,

$$i \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\beta^* m - \vec{\alpha}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Psi^*(\mathbf{r}, -t), \quad (4.15)$$

с учетом того, что  $\hat{\mathbf{p}}^* = -\hat{\mathbf{p}}$ . Действуя унитарным оператором  $\mathcal{T}$  на компоненты биспинора волновой функции, получим

$$i \frac{\partial \mathcal{T} \Psi^*(\mathbf{r}, -t)}{\partial t} = (\mathcal{T} \beta^* \mathcal{T}^{-1} m - \mathcal{T} \vec{\alpha}^* \mathcal{T}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \mathcal{T} \Psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (4.16)$$

Таким образом, функция

$$\Psi_{\mathcal{T}}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{T} \Psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (4.17)$$

удовлетворяет тому же уравнению Дирака, показывая инвариантность, если матрицы Дирака преобразуются согласно

$$\mathcal{T} \beta^* \mathcal{T}^{-1} = \beta, \quad \mathcal{T} \vec{\alpha}^* \mathcal{T}^{-1} = -\vec{\alpha}. \quad (4.18)$$

Это можно сравнить с зарядовым сопряжением (12.38), которое производит прямо противоположное действие.

#### Задача 4.1

Показать, что в стандартном представлении (12.7) мы можем положить

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}^\dagger = \mathcal{T}^{-1} = i\gamma_1\gamma_3. \quad (4.19)$$

Легко видеть, что в присутствии электромагнитного поля  $(\varphi, \mathbf{A})$  инвариантность обращения времени имеет место только, если, вдобавок к преобразованию волновой функции (4.17) и операторов Дирака (4.18), векторный потенциал меняет знак,  $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ , в то время как  $\varphi$  не изменяется. Это объясняется природой векторного потенциала, наведенного *токами*, который должен инвертироваться при обращении времени. Произвольный фазовый множитель  $\eta_{\mathcal{T}}$  с абсолютным значением 1 может также инвертироваться в определении (4.19).

4.3  $CPT$  преобразование

Теория квантового поля утверждает [Wei1998], что при любом подходе с локальными взаимодействиями, который признает относительность и сохранение вероятности (унитарность динамики, параграф 7), инвариантность имеет место по отношению к произведению  $CPT$  трех дискретных преобразований, обращения времени  $T$ , пространственной инверсии  $P$  и зарядового сопряжения  $C$ . Для свободного уравнения Дирака это означает, что после умножения и преобразования (12.40), (4.4) и (4.19),

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow -i\eta_P \gamma_5 \Psi(-\mathbf{r}, -t), \quad (4.20)$$

где матрица  $\gamma_5$  была определена в уравнении (12.16), и мы положили фазовые множители для  $C$ - и  $T$ -преобразований равными 1.

По существу, полное  $CPT$ -преобразование сводится к *четырёхмерной инверсии* координат и времени, дополненной заменой всех частиц на античастицы, это может быть отмечено только для взаимодействия с полем, например, электромагнитным, что вполне допустимо между частицами и античастицами. Этот результат согласуется со старой идеей, что античастицы могут рассматриваться как *частицы, движущиеся обратно во времени*. Поскольку импульс  $\mathbf{p}$  и спин  $\mathbf{s}$  частицы переходят при 4-инверсии в  $\mathbf{p}$  (пространственное отражение отменяется при обращении времени) и  $-\mathbf{s}$  (обращение времени),  $CPT$  инвариантность предсказывает те же вероятности этих двух процессов,

$$\mathbf{p}, \mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{p}', \mathbf{s}' \text{ (particle)}, \quad (4.21)$$

и его  $CPT$ -образ,

$$\mathbf{p}, -\mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{p}', -\mathbf{s}' \text{ (antiparticle)}. \quad (4.22)$$

Универсальность  $CPT$ -инвариантности во всех принятых ныне теориях позволяет судить об инвариантности по отношению к отдельным дискретным преобразованиям по результатам экспериментов, в которых проверялась дополнительная инвариантность. Например, отсутствие инвариантности при *комбинированной инверсии  $CP$*  может рассматриваться как доказательство нарушения инвариантности обращения времени,  $T$ .

#### 4.4 Безмассовые частицы

Рассмотрим ограниченный случай уравнения Дирака для частицы с  $m = 0$ . Такая частица движется в любой системе координат со скоростью света. Приблизительно это также соответствует описанию любого *ультрарелятивистского* движения,  $E \gg m$ . В согласии с этим уравнение Дирака дает (13.7) энергетический спектр ( $c = 1$ )

$$E = \pm |\mathbf{p}| \equiv \pm p. \quad (4.23)$$

Удобно ввести единичный вектор

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{E} = \frac{\mathbf{p}}{p} \text{sign } E. \quad (4.24)$$

Тогда четырехкомпонентные безмассовые спиноры (13.15) удовлетворяют простым уравнениям

$$\varphi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E} \chi = (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \chi, \quad \chi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{E} \varphi = (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \varphi. \quad (4.25)$$

Оператор  $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  совпадает со спиральностью  $\hbar$  для положительной энергии и с  $-\hbar$  для отрицательной энергии.

Мы можем перейти к линейным комбинациям спиноров  $\varphi$  и  $\chi$ ,

$$\psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi \pm \chi). \quad (4.26)$$

Они подчиняются *отдельным уравнениям Вейля*,

$$\psi^{(\pm)} = \pm (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \psi^{(\pm)}. \quad (4.27)$$

В противоположность нерелятивистскому пределу, когда компоненты нижнего спинора малы, в ультрарелятивистском пределе, когда можно пренебречь массой, два спинора входят в уравнение (4.26) с равным весом. Новые спиноры  $\psi^{(\pm)}$  имеют определенную *спиральность*, соответствующие частицы продольно поляризованы. Для такой частицы не нужно четырех компонент, они полностью описываются двухкомпонентными спинорами. В самом деле, частицы Дирака при *свободном движении* сохраняют свою спиральность, *Задача 13.4*. Следовательно, квантовые состояния, описываемые спинорами  $\psi^{(\pm)}$  сохраняют свою индивидуальность без смешивания с партнерами. Это означает, что мы можем использовать просто двухкомпонентное описание вместо уравнения Дирака. Смешивание  $\psi^{(+)}$  и

$\psi^{(-)}$  возможно только внешними полями или взаимодействием с другими частицами.

Важно, что продольная поляризация безмассовой частицы является *релятивистским инвариантом*. Для  $m \neq 0$ , можно найти систему отсчета, движущуюся быстрее частицы. В этой системе спиральность частицы будет иметь противоположный знак. Но для  $m = 0$  такая система не существует. Следовательно, должно быть возможным нахождение явного инвариантного определения спиральности безмассовых частиц. Это можно сделать с помощью оператора  $\gamma_5$ , eq. (12.16). Мы определим проекционный оператор *хиральности* как

$$\Lambda^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \mp \gamma_5). \quad (4.28)$$

Используя стандартное представление (12.17) матрицы  $\gamma_5$  и действуя на произвольный биспинор (13.13), получим

$$\Lambda^{(\pm)} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varphi \pm \chi \\ \pm \varphi + \chi \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

или, в терминах спиноров Вейля (4.26),

$$\Lambda^{(\pm)} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{(\pm)} \\ \pm \psi^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Естественно, проекционный оператор хиральности сводит биспинор к двухкомпонентному спинору определенной *хиральности*. Тот же результат для безмассовой частицы, в силу (4.27), может быть достигнут с помощью оператора спиральности,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( (1 \pm (\vec{\Sigma} \cdot \mathbf{n})) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \pm (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) & 0 \\ 0 & 1 \pm (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{(\pm)} \\ \pm \psi^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Таким образом, для безмассовых частиц спиральность и хиральность эквивалентны,

$$(\vec{\Sigma} \cdot \mathbf{n}) = -\gamma_5, \quad (4.32)$$

это означает, что здесь спиральность является Лоренц-инвариантным псевдоскаляром.

#### 4.5 Нейтрино в безмассовом пределе

Долгое время было широко принято, что нейтрино не имеют массы. Теперь почти определенно, что масса нейтрино конечна, хотя, вероятно, очень мала по сравнению даже с массой электрона, который является легчайшим среди известных частиц; единственно точно безмассовой частицей является фотон (а гравитон может быть добавлен после детектирования гравитационных волн). Из-за малой массы, имеет смысл представить мир безмассовых нейтрино. Прямое измерение масс нейтрино весьма затруднительно, мы можем только обозначить некоторые верхние границы.

Сейчас мы знаем три типа (*поколений*), или *ароматов* нейтрино, связанных с тремя поколениями заряженных *лептонов*, — электрона, мюона и таона ( $\tau$ -лептона). Соответствующие нейтрино и антинейтрино образуются в *слабых взаимодействиях* вместе с их напарниками — заряженными лептонами. Слабые взаимодействия генерируются *левыми токами*. Это означает, что волновая функция сгенерированного или взаимодействующего нейтрино в матричном элементе взаимодействия умножена на левосторонний проекционный оператор  $\Lambda^{(+)}$ . В пределе  $m \rightarrow 0$ , эта левая спиральность может быть инвариантна, и мы имеем только левостороннее нейтрино, — со спином, антипараллельным к импульсу. Частицы  $\bar{\nu}_e$ , образуемые вместе с электроном в обычном  $\beta$ -распаде нейтрона,

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e, \quad (4.33)$$

или в аналогичном  $\beta^-$ -распаде сложных ядер, называются *электронными антинейтрино*. Эта терминология относится к предполагаемому сохранению *лептонного заряда*, при котором электрон имеет лептонный заряд  $+1$ , а его нейтринный партнер должен иметь противоположный лептонный заряд  $-1$ . Частица, образуемая вместе с позитроном в ядерном  $\beta^+$ -распаде ядер  $A$  с  $Z$  протонами и  $N = A - Z$  нейтронами,

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-1)_{N+1} + e^+ + \nu_e, \quad (4.34)$$

является электронным нейтрино с лептонным зарядом  $+1$ . Эксперименты показывают, что антинейтрино в таких процессах (4.33) правополяризованы, в противоположность к нейтрино. Сопоставляя частицу, нейтрино, с решением  $E > 0$ , и антинейтрино с античастицей, мы видим, что обе они  $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = -1$ , поэтому в безмассовом пределе нейтрино, связанные со слабым взаимодействием, описываются уравнениями Вейля (4.27) с нижним знаком. Дополнительная опция может иметь место при взаимодействиях, управляемых *правыми токами*, которые не наблюдались.

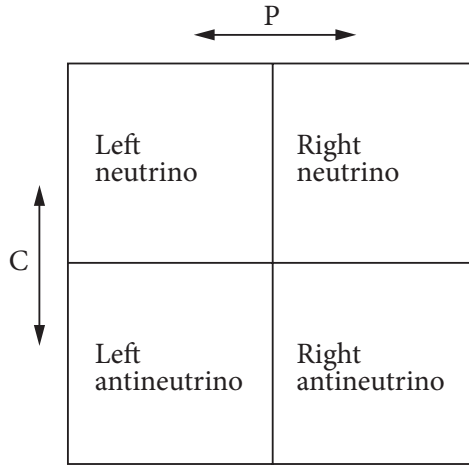


Рис. 4.1. Схема зарядового сопряжения и пространственной инверсии для нейтрино и антинейтрино

Откуда, стационарные волновые функции безмассовых нейтрино характеризуются *псевдоскалярным* квантовым числом спиральности. При пространственной инверсии спиральность меняет знак, поэтому мы не получим ту же самую функцию с знаком  $+$  или  $-$ , как это могло быть в случае состояния с определенной четностью; вместо этого, мы придем к *отличному* от него состоянию. Существование частицы с продольной поляризацией, аналогично круговой поляризации фотона, которая сама не указывает на несохранение четности. В случае фотонов, сохранение четности восстанавливается существованием фотонов с противоположной круговой поляризацией, но с той же энергией. В случае нейтрино этот аргумент не работает, потому что безмассовое нейтрино всегда левополяризовано, и не оно не существует с правой поляризацией. Делая пространственную инверсию и обращая спиральность нейтрино, мы приходим к не существованию (в безмассовом случае) правого нейтрино. Это означает *максимальное несохранение четности*. Эксперимент показывает, что в сильном и электромагнитном взаимодействиях четность сохраняется. Безмассовое нейтрино не принимает участия в этих взаимодействиях, в то время как в слабых взаимодействиях, где нейтрино является активным участником, четность не сохраняется. Структура слабых взаимодействий с только левыми токами оказывается такой, что гарантирует отсутствие перемешивания нейтрино и антинейтрино.

Продольная поляризация безмассового нейтрино означает, в то же время, нарушение инвариантности по отношению к зарядовому сопряжению. Таким же образом, как нарушение инвариантности по отношению к пространственной инверсии  $\mathcal{P}$  выведено преобразование левого нейтрино в невозможное правое нейтрино. При операции  $\mathcal{C}$  спиральность не меняется, левовинтовое нейтрино переходит в несуществующее левовинтовое антинейтрино, Рис. 14.1.

Однако, можно видеть, что при *преобразовании соединения*  $\mathcal{CP}$  мы преобразуем левое нейтрино в правое антинейтрино, описываемое *тем же* уравнением Вейля (4.27) с нижним знаком. При отсутствии разделения  $\mathcal{C}$ - $\mathcal{P}$ -инвариантности, природа в этом пределе, кажется, остается инвариантной при *комбинированной инверсии*  $\mathcal{CP}$ . В соответствии с гипотезой *Л.Д. Ландау, 1956*, сохранение комбинированной четности замещает нарушение инвариантности по отношению к пространственной инверсии и зарядовому сопряжению по отдельности. В первое время небольшое нарушение  $\mathcal{CP}$ -инвариантности наблюдалось [Chr1964] при распаде долгоживущих компонент нейтральных каонов на два пиона; физика нейтральных каонов будет кратко обсуждаться ниже. Эффекты  $\mathcal{CP}$ -нарушения наблюдались также для нейтральных  $B$ -мезонов [Fle2002]. Вследствие  $\mathcal{CPT}$ -теоремы, эти результаты говорят о нарушении инвариантности обращения времени. И наоборот, экспериментальное открытие корреляций  $\mathcal{T}$ -нарушения, например, появление  $\mathcal{T}$ -нечетных членов, таких как  $\mathbf{s}_n \cdot [\mathbf{p}_e \times \mathbf{p}_\nu]$ , в вероятности  $\beta$ -распада (4.33) поляризованных нейтронов может быть подтверждением  $\mathcal{CP}$ -нарушения. Эта зависимость от угла между плоскостью движения электрон-нейтрино и исходным поляризованным нейтроном меняет знак при обращении времени.

## 4.6 Пересмотр несохранения четности

Мы ввели концепцию нарушения четности в параграфе I.8.5. Практически, это несохранение обнаружено во всех процессах, управляемых слабыми взаимодействиями, безотносительно присутствия или отсутствия нейтрино.

В течение долгого времени, так называемый  $\theta$ -распад положительно заряженных каонов на положительный и нейтральный пион,

$$K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0, \quad (4.35)$$

оставался загадкой. *Псевдоскалярные мезоны*, такие как пионы и каоны, имеют нулевой спин  $J$  и отрицательную внутреннюю четность  $\Pi$ . Их квантовые номера спин-четности могут быть записаны как  $J^\Pi = 0^-$ , как те



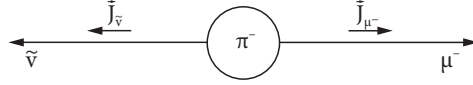


Рис. 4.2. Вынужденная поляризация пионного распада

псевдоскалярные операторы (источник термина «псевдоскалярные мезоны»). Мы можем рассматривать процесс (4.35) в неподвижной системе координат  $K^+$ . Четность  $\Pi_i$  начальной волновой функции определяется как  $\Pi_i = \Pi_K = -1$ . В конечном состоянии мы имеем два пиона, поэтому их комбинированная внутренняя четность положительна, а полная четность конечного состояния  $(-)^{\ell}$ , где  $\ell$  – орбитальный момент относительного движения пионов. Но спины всех трех частиц равны нулю, и сохранение углового момента требует  $\ell = J_K = 0$ . Тогда  $\Pi_f = (-)^{\ell} = +1 = -\Pi_i$ . Поскольку  $\theta$ -распад, который должен быть запрещен сохранением четности, содержит более 20% всех распадов  $K^+$ , четность нарушается при слабых взаимодействиях.

Как отмечалось в параграфе 1.8.5, псевдоскалярные корреляции, такие, как образованные скалярным произведением  $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{J})$  полярного вектора, например, импульса,  $\mathbf{p}$ , и аксиального вектора, например, углового момента или спина,  $\mathbf{J}$ , характерны для несохранения четности. Подобный эффект наблюдался в *принудительной поляризации* мюонов или электронов (свойства заряженных лептонов,  $e, \mu$ , и  $\tau$  аналогичны, за исключением свойств их масс) в пионных распадах,

$$\pi^+ \rightarrow \{ \mu^+ + \nu_{\mu} e^+ + \nu_e ; \quad \pi^- \rightarrow \{ \mu^- + \bar{\nu}_{\mu} e^- + \bar{\nu}_e. \quad (4.36)$$

Рассмотрим снова в неподвижной системе координат такой процесс распада пиона с квантовыми числами  $J^{\Pi} = 0^{-}$ , Рис. 14.2. Здесь удобно использовать базис плоской волны для наших обсуждений. Конечные частицы, движущиеся одна за другой в этой системе должны иметь нулевую проекцию полного спина на направление движения (проекция орбитального момента на направление  $\mathbf{p}$  исчезает). Тогда спины конечного нейтрино (антинейтрино) и позитрона (электрона), или положительного (отрицательного) мюона, противоположны. Но безмассовые нейтрино или антинейтрино всегда поляризованы. Это автоматически фиксирует спиральность заряженного лептона. Например, отрицательный мюон или электрон, *обязательно*, по виртуальным законам сохранения, правополяризован в  $\pi^-$  распаде, в то время как положительный мюон или позитрон, *обязательно* левополяризованы в  $\pi^+$  распаде.

С другой стороны, если дираковская частица с  $m \neq 0$  имеет большую энергию  $E \gg m$ , в её волновой функции можно пренебречь массой. Структура слабого взаимодействия (левые тока) универсальная для всех лептонов; в ультрарелятивистском пределе они будут вести себя как нейтрино, а античастицы как антинейтрино, во всех процессах, управляемых слабыми взаимодействиями. Откуда, существует *естественная поляризация* ультрарелятивистских лептонов: частицы левополяризованы, а античастицы правополяризованы. Таким образом, в так называемых  $K_{e3}$  and  $K_{\mu 3}$  распадах,

$$K^+ \rightarrow \pi^0 + \{ e^+ + \nu_e \mu^+ + \nu_\mu \}, \quad (4.37)$$

в большинстве случаев положительные лептоны  $e^+$  и  $\mu^+$  будут иметь естественную (правую) поляризацию. Здесь не существует строгой корреляции спиральности, как это было в двухчастичных распадах (4.36). Однако, в тех редких случаях, когда нейтральный пион в распадах (4.37) очень медленный и несет малый импульс в неподвижной системе распадающейся частицы, импульсы заряженных лептонов снова антикоррелируют с такими нейтрино. Как в двухчастичных распадах, мы получим корреляцию спиральностей: полный спин должен исчезать, чтобы обеспечить сохранение углового момента ( $J_K = J_\pi = 0$ ). В таких случаях, заряженные лептоны обладают кинематически навязанной поляризацией, противоположной естественной. Для безмассовых позитронов или  $\mu^+$ , такие случаи должны быть строго запрещены. Поскольку  $m_e \ll m_\mu$ , электронные распады пионов (4.36) подавлены этим несоответствием поляризаций гораздо сильнее, чем мюонные распады. В результате, доля (*коэффициента ветвления*) электронных распадов только порядка  $10^{-4}$ , несмотря на то, что, из-за близких масс  $m_\pi$  и  $m_\mu$ , доступный в мюонном распаде фазовый объем, параграф 2.3, значительно меньше, чем в электронном распаде.

#### Задача 4.2

Рассмотреть распад положительного поляризованного мюона,

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu, \quad (4.38)$$

и показать, что наиболее энергичные позитроны движутся вдоль спина исходного мюона.

**Решение** Энергия позитрона максимальна, если электронное нейтрино и мюонное антинейтрино движутся вместе в направлении, противоположном движению позитрона. В этом случае их полная спиральность исчезает,

и спин позитрона должен быть вдоль исходного спина  $\mu^+$ . Но в слабых распадах быстрый позитрон имеет естественную поляризацию античастицы (правовинтовую), т.е. его спин и импульс параллельны. При зарядово сопряженном распаде,

$$\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e, \quad (4.39)$$

максимум углового распределения наиболее энергичных электронов направлен противоположно спину  $\mu^-$ .

## 4.7 Осцилляции нейтрино

Термоядерные реакции на Солнце включают процессы, управляемые слабым взаимодействием, и производят значительную генерацию электронных нейтрино. Надежность солнечных моделей предсказывает поток нейтрино на Землю, приблизительно равный  $6.6 \times 10^{10}$  электронных нейтрино на  $\text{см}^2$  в секунду. Дефицит нейтрино при наблюдениях почти определенно указывает, что нейтрино имеют ненулевую массу, и *осциллируют* между различными ароматами. Высокоэнергичные нейтрино, которые образуются в мюонном распаде в атмосфере [мюон является продуктом пионного распада (4.36), в то время как пионы генерируются первичными компонентами космических лучей, например, протонами, при их столкновении с ядрами в атмосфере] могут также осциллировать.

Осцилляции возникают в результате несоответствия между состоянием нейтрино, образованным в процессе, подобном  $\beta$ -распаду, и Собственными состояниями гамильтониана нейтрино. Обычный  $\beta$ -распад создает заряженные лептонов и соответствующие нейтрино с тем же самым ароматом  $f$  ( $e, \mu$  или  $\tau$ ). Однако, собственные состояния гамильтониана  $\nu_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ , которые имеют определенные массы  $m_\alpha$ , являются *комбинациями* различных ароматов. Преобразование из представления аромата в собственные состояния масс задается унитарной матрицей  $U$  размерности, определяемой числом смешивающихся ароматов,

$$|\nu_f\rangle = \sum_{\alpha} U_{f\alpha} |\nu_\alpha\rangle. \quad (4.40)$$

Мы имеем уже упоминавшуюся выше в *Задаче 2.3* возможность. Таким образом, конечное состояние после  $\beta$ -распада *нестационарно*, что порождает последующие осцилляции.

Мы рассмотрим простейшую модель квантовых осцилляций, предполагая, что они имеют место только для двух ароматов, например, для

электронного и мюонного нейтрино. Предположим, что начальная энергия  $E$ , высвобождаемая в процессе, распределена между двумя частицами, одна из которых - нейтрино в состоянии с определенным ароматом. Например, пионный распад порождает мюон и мюонное нейтрино,  $\nu_\mu$ , что описывается волновой функцией, содержащей две стационарные компоненты,  $\nu_1$  и  $\nu_2$ . Пусть *угол смешивания* будет  $\vartheta$ ,

$$|\nu_\mu\rangle = \cos \vartheta |\nu_1\rangle + \sin \vartheta |\nu_2\rangle, \quad (4.41)$$

в то время как состояние с дополнительным ароматом, например, электронного нейтрино ортогонально,

$$|\nu_e\rangle = \cos \vartheta |\nu_2\rangle - \sin \vartheta |\nu_1\rangle, \quad (4.42)$$

Исходная волновая функция мюонного нейтрино, сгенерированная слабым взаимодействием, в соответствии с (4.41),

$$\Psi(x, t = 0) = \cos \vartheta e^{ip_1 x} |\nu_1\rangle + \sin \vartheta e^{ip_2 x} |\nu_2\rangle. \quad (4.43)$$

Временная эволюция этого нестационарного состояния соответствует двум стационарным компонентам с энергией  $E_{1,2} = \sqrt{m_{1,2}^2 + p_{1,2}^2}$ ,

$$|\Psi(x, t)\rangle = \cos \vartheta e^{i(p_1 x - E_1 t)} |\nu_1\rangle + \sin \vartheta e^{i(p_2 x - E_2 t)} |\nu_2\rangle. \quad (4.44)$$

Для детектирования определенного типа нейтрино, нам нужно использовать слабое взаимодействие с мишенью. Это взаимодействие дает различие между электронным и мюонным нейтрино, так что мы должны отобразить обратно результата (4.44) в терминах состояний с определенным ароматом,

$$|\nu_1\rangle = \cos \vartheta |\nu_\mu\rangle - \sin \vartheta |\nu_e\rangle, \quad |\nu_2\rangle = \cos \vartheta |\nu_e\rangle + \sin \vartheta |\nu_\mu\rangle, \quad (4.45)$$

Волновая функция (4.44) во время  $t$  прослеживается в

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)\rangle &= |\nu_\mu\rangle \left( \cos^2 \vartheta e^{i(p_1 x - E_1 t)} + \sin^2 \vartheta e^{i(p_2 x - E_2 t)} \right) \\ &+ |\nu_e\rangle \cos \vartheta \sin \vartheta \left( e^{i(p_2 x - E_2 t)} - e^{i(p_1 x - E_1 t)} \right). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Предположим, что наш детектор в точке  $x$  регистрирует только электронные нейтрино подсчетом числа электронов образуемых в результате реакции детектирования. Тогда подсчитываемая скорость есть прямое

доказательство преобразования исходных мюонных нейтрино, она пропорциональна

$$I_e(x, t) = |\langle \nu_e | \Psi(x, t) \rangle|^2 = \cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta |e^{i(p_2 x - E_2 t)} - e^{i(p_1 x - E_1 t)}|^2. \quad (4.47)$$

Таким образом, зафиксированная интенсивность осцилляций, как функция времени и координат детектора

$$I_e(x, t) = \frac{1}{2} \sin^2(2\vartheta) [1 - \cos \varphi(x, t)], \quad (4.48)$$

где фаза осцилляции

$$\varphi(x, t) = (p_1 - p_2)x - (E_1 - E_2)t. \quad (4.49)$$

Поскольку масса нейтрино в любом случае очень мала, и они движутся с околосветовой скоростью, мы можем положить  $x \approx t$  (в единицах  $c = 1$ ) и разложить энергии по малому параметру (отношению массы к импульсу),

$$E = \sqrt{p^2 + m^2} \approx p + \frac{m^2}{2p}, \quad (4.50)$$

что приводит к

$$\varphi(x) \approx \left( \frac{m_2^2}{2p_2} - \frac{m_1^2}{2p_1} \right) x \approx \frac{m_2^2 - m_1^2}{2p} x \equiv \frac{\Delta(m^2)}{2p} x, \quad (4.51)$$

где мы можем приближенно положить  $p_1 = p_2 = p$ . Таким образом, осцилляции (4.48) описываются выражением

$$\cos \varphi(x) = \cos \left( \frac{2\pi x}{L} \right), \quad (4.52)$$

где *длина осцилляции*

$$L = \frac{4\pi p}{\Delta(m^2)}. \quad (4.53)$$

Амплитуда осцилляции (4.48) зависит от угла смешивания  $\vartheta$ . Если этот угол близок к максимуму,  $\vartheta \approx 45^\circ$ , эксперимент позволяет определить  $\Delta(m^2)$ , а не сами массы. Для очень большого  $\Delta(m^2)$ , длина  $L$  может стать слишком малой, и осцилляции усредняются детектором. Текущее ограничение,  $\Delta(m^2) \leq 1 \text{ eV}^2$  дает существенно большую длину осцилляций.

## 4.8 Нейтрино Майорана

Существование нейтрино ненулевых масс, которое следует из результатов солнечных и земных экспериментов [Giu2007, Gon2008], заставляет нас вернуться к вопросу о характере этих масс. Мы упоминали, что нейтрино рождаются в слабых взаимодействиях, таких как бета распад, которые левополяризованы. Это может быть прямым указанием только на безмассовые нейтрино, и это заложено в Стандартной Модели элементарных частиц, где мы можем использовать двухкомпонентные нейтрино Вейля. Проблема массы нейтрино, естественно, порождает исследования за рамками Стандартной модели.

Мы обсуждали  $\mathcal{CP}$ -симметрию между левым нейтрино и правым антинейтрино в пределе нулевых масс, Рис. 14.1. Различие между нейтрино и антинейтрино традиционно относят к знаменитым экспериментам *P. Дэвиса, 1955* [Dav1955]. Если мы назовем «*антинейтрино*» частицу  $\bar{\nu}_e$ , полученную в обычном бета-распаде (4.33) вместе с электроном, эта частица, как показано экспериментально, не может индуцировать обратную реакцию типа

$$\bar{\nu}_e + {}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z+1)_{N+1} + e^-. \quad (4.54)$$

Из отсутствия такого процесса можно заключит, что нейтрино (испущенное в бета-распаде позитрона) и антинейтрино из электронного бета-распада являются различными частицами, как на Рис. 14.1. Это можно формально приписать сохранению электроном *лептонного заряда*  $L_e$ , предполагая, что этот заряд равен  $+1$  для частиц  $(e^-, \nu_e)$  и  $-1$  для античастиц  $(e^+, \bar{\nu}_e)$ . Реакция (4.54) должна нарушать  $L_e$  вдвое.

Аналогичное заключение следует из отсутствия *двойного безнейтринного бета-распада*. Имеются случаи, когда обычный бета-распад нестабильных ядер энергетически запрещен, но двойной бета-распад, соответствующий схеме

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-2)_{N+2} + 2e^+ + 2\bar{\nu}_e, \quad (4.55)$$

наблюдается, хотя безнейтринный распад

$${}^A(Z)_N \rightarrow {}^A(Z-2)_{N+2} + 2e^+, \quad (4.56)$$

не был надежно зафиксирован. В качестве механизма для такого процесса можно представить два акта нормального бета-распада с виртуальным антинейтрино, испущенным на первом шаге и затем поглощенным, включая

второй акт, как в (4.54). Безнейтринный процесс может быть экспериментально обнаружен фиксацией полной энергии двух испущенных электронов.

«Однако, теперь мы знаем, что ситуация не столь ясна, как аргументировано выше» [Hol1989]. Если слабое взаимодействие основано на левых токах, антинейтрино из бета-распада, будучи правополяризованным, не может индуцировать реакцию (4.54); аналогично, требования спиральности не позволяют безнейтринный двойной бета-распад. Для схемы частиц на Рис. 14.1 — нет требуемого сохранения лептонного заряда. Тем не менее, эти заключения справедливы только для дираковских безмассовых частиц, которые можно удобно описать двухкомпонентными спинорами Вейля. Как мы теперь знаем, нейтрино не являются безмассовыми, спиральность перестает быть релятивистским инвариантом, и возможность иметь нейтрино и антинейтрино тождественными частицами должна быть рассмотрена снова. В этом случае они должны быть частицами *Майорана*. Поиск безнейтринного двойного бета-распада продолжается.

Определим хиральные левый,  $\Psi_L$  и правый  $\Psi_R$  биспиноры с помощью операторов хиральности (4.28) применительно к произвольному состоянию  $\Psi$ ,

$$\Psi_L = \frac{1 - \gamma_5}{2} \Psi, \quad \Psi_R = \frac{1 + \gamma_5}{2} \Psi, \quad \Psi = \Psi_L + \Psi_R. \quad (4.57)$$

Для уравнения Дирака у нас есть лоренц-инвариантный скалярный член массы (12.84)

$$M_D = m \bar{\Psi} \Psi, \quad (4.58)$$

и, поскольку матрица  $\gamma_5$  антикоммутирует с  $\gamma_0$  в определении сопряженного по Дираку биспинора  $\bar{\Psi}$  (*Задача 12.1*), мы можем переписать (4.58) как

$$M_D = m (\bar{\Psi}_L \Psi_R + \bar{\Psi}_R \Psi_L). \quad (4.59)$$

Дираковский член массы появляется при динамическом преобразовании состояния хиральности. Только безмассовая частица может сохранять свою хиральность.

Другая возможность, *нейтрино Майорана*, появляется, если частицы и античастицы, описываемые зарядово-сопряженными состояниями  $\Psi_C$  (12.37, 12.40), *тождественны*. Конечно, это разрешено только для действительно нейтральных частиц — иначе их заряды должны были быть противоположными. Лептонный заряд нейтрино теряет свой смысл. Формально говоря, дополнительная матрица  $\gamma_2$ , которая отражает, в соответствии с

уравнением (12.40), результат зарядового сопряжения, восстанавливает правильную хиральность в лоренцевском скаляре. Тогда массовые члены для левой хиральности могут иметь вид

$$M_M = \frac{m_L}{2} \{(\bar{\Psi}_L)_C \Psi_L + \text{Н.с.}\}, \quad (4.60)$$

а аналогичные члены с массой  $m_R$  возможны для состояний правой хиральности. Массовые члены этой структуры описывают переход частицы в ей зарядово сопряженную античастицу. Тогда механизм безнейтринного двойного бета распада становится возможным. Даже если безнейтринный двойной бета распад происходит с помощью другого механизма, без промежуточного нейтрино=антинейтрино, эта частица должна быть майорановской природы, поскольку такой процесс может сам быть виртуальным шагом, приводящим к преобразованию нейтрино в антинейтрино [Sch1982]. В принципе, даже наличие обоих типов масс, Дирака и Майорана, не запрещено. Только эксперименты могут решить эту проблемы, что также весьма важно для астрофизики и космологии [Gon2008].

## 4.9 Странность

Нейтральные  $K$ -мезоны, *каоны*, образуются в столкновениях сильновзаимодействующих частиц, *адронов*, в совокупности с другими нестабильными частицами, *гиперонами*, более тяжелыми аналогами нуклонов. Типичная реакция может быть следующей: нейтральный каон  $K^0$  создается вместе с  $\Lambda$ -гипероном в столкновении пиона  $\pi^-$  с протоном,

$$\pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda^0. \quad (4.61)$$

Для всех этих нестабильных частиц ( $\pi, K, \Lambda, \dots$ ), общим свойством является долгое время жизни, порядка  $10^{-(8 \div 10)}$  s, по сравнению с характерным временем  $10^{-23}$  с, пролета на расстояние 1 фм  $= 10^{-13}$  см, ядерных сил. Медленный распад показывает, что слабое, а не сильное (ядерное), взаимодействие ответственно за этот процесс распада, также как для бета распада (4.33). Вероятность создания реакции, подобной (4.61), велика, что, безусловно, указывает на сильное взаимодействие. Можно заключить, что энергетически разрешенные быстрые распады каонов и гиперонов, такие как  $\Lambda^0 \rightarrow p + \pi^-$ , запрещены для сильных взаимодействий новым законом сохранения, который справедлив для сильных взаимодействий, но может нарушаться в слабых процессах. Такая гипотеза (М. Гелл-Манн, К. Нишиджима, 1955) приписывает новое аддитивное квантовое число,



*странность*, адронам. странность  $S$  равна нулю для «обычных» адронов (нуклоны и пионы), но отлична от нуля для *странных частиц*, гиперонов и каонов. Полная несхожесть экспериментальных данных подтверждает, что странность может быть присуща частицам следующим образом:

$$\begin{aligned} &: K^+, K^0 \Rightarrow S = +1; K^-, \bar{K}^0 \Rightarrow S = -1; \\ &: \Lambda^0, \Sigma^{+,0,-} \Rightarrow S = -1; \\ &\Xi^{-,0} \Rightarrow S = -2, \quad \Omega^- \Rightarrow S = -3. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Эта классификация позже находит естественное объяснение в терминах кварковой структуры адронов: каждая единица странности связана с подстановкой одного из легчайших, вверх,  $u$  (электрический  $2e/3$ ), и вниз,  $d$  (заряд  $-e/3$ ), кварков с нулевой  $S = 0$  *странностью*;  $s$ , кварк с зарядом  $-e/3$  странностью  $-1$ . В адронных взаимодействиях, каоны аналогичны пионам, они также имеют спин-четные квантовые числа  $J^P = 0^-$  (псевдоскалярные мезоны); гипероны являются аналогами нуклонов (спин  $1/2$ ). Мы можем представить появление странного кварка, как внутреннее возбуждение  $d$ -кварка. *Сохранение странности* в сильных взаимодействиях объясняет отсутствие быстрых распадов гиперонов в нестранные частицы, нуклоны и пионы. Также благодаря этому сохранению, странные частицы могут рождаться в столкновениях нестранных адронов только парами, как в реакции (4.61), где полная странность продуктов равна нулю. Это называется *ассоциативная продукция*.

Сравните, например, две несомненно похожие реакции,

$$\pi^- + p \rightarrow \Sigma^- + K^+ \quad \text{and} \quad \pi^- + p \rightarrow \Sigma^+ + K^-. \quad (4.63)$$

Только первая из них допускается сильными взаимодействиями; во второй реакции странность не сохраняется,  $S_f = -2 \neq S_i = 0$ . Поскольку все гипероны имеют отрицательную странность, при столкновениях нуклонов только каоны с  $S = +1$ , i.e.  $K^+$  и  $K^0$  могут генерироваться вместе с гиперонами. Их античастицы,  $K^-$  и  $\bar{K}^0$ , имеют  $S = -1$  и могут рождаться только вместе с *антигиперонами*  $\bar{\Lambda}$  и  $\bar{\Sigma}$ , которые имеют  $S = +1$ . Другая сохраняющаяся величина в сильных взаимодействиях это *барионный заряд* равный  $+1$  для протона, нейтрона и гиперонов и  $-1$  для их античастиц. Следовательно, для создания антигиперонов нам нужны исходные антинуклоны.

## 4.10 Нейтральные каоны и $CP$ -четность

Здесь мы обсудим одно из наиболее впечатляющих приложений основных правил квантовой механики, распад нейтральных каонов,  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ .

Эти распады управляются слабыми взаимодействиями, и мы предполагаем, что странность нарушается слабыми взаимодействиями, но инвариантность по отношению к комбинированной инверсии  $\mathcal{CP}$  всё ещё сохраняется.

Начнем с *двухпионного* распада

$$K^0 \rightarrow 2\pi^0 \quad (4.64)$$

в неподвижной системе координат пиона. Нейтральный пион  $\pi^0$  обладает определенной, отрицательной,  $\mathcal{CP}$ -четностью: при пространственной инверсии  $\mathcal{P}$  его волновая функция меняет знак как любой псевдоскаляр (включая также  $K^0$ ), в то время как при зарядовом сопряжении  $\pi^0$  не меняет, потому что  $\mathcal{CP}|\pi^0\rangle = -|\pi^0\rangle$ . Это ясно в кварковой модели, где мезоны построены как пары кварк-антикварк: кварк и антикварк, подобно членам электрон-позитронных пар, обладают противоположной внутренней четностью. Тогда  $\mathcal{CP}$ -операция дает  $-(-)^\ell$ , где  $\ell$  – относительный орбитальный момент кварковой пары равен нулю ( $s$ -волна) для легких мезонов. Полная  $\mathcal{CP}$ -четность конечного состояния в процессе (4.64), отделена от продукта  $(-)^2 = +1$  внутренних  $\mathcal{CP}$ -четностей пионов, включая также четность  $(-)^\ell$  их относительного движения с орбитальным моментом  $\ell$ . Хотя спины  $K^0$  и  $\pi^0$  нулевые, сохранение углового момента требует  $\ell = 0$ . Это дает  $\mathcal{CP}|2\pi^0\rangle = +|2\pi^0\rangle$ , и сохранение  $\mathcal{CP}$ -четности определяет, что она должна быть также  $+1$  для исходного  $K^0$ . Однако, из-за того, что странность,  $K^0$  отличается от ее античастицы  $\bar{K}^0$ , и, следовательно, не имеет определенной  $\mathcal{CP}$ -четности,

$$\mathcal{CP}|K^0\rangle = -|\bar{K}^0\rangle, \quad \mathcal{CP}|\bar{K}^0\rangle = -|K^0\rangle. \quad (4.65)$$

Этот парадокс разрешается таким образом, что состояния  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  создаваемые при сильных взаимодействиях имеют *определенную странность*, но они не являются правильной линейной комбинацией по отношению к слабым взаимодействиям. (Вспомните, что массивные нейтрино, генерируемые в слабых взаимодействиях не были правильными линейными комбинациями по отношению к их гамильтониану масс). Если  $\mathcal{CP}$ -четность сохраняется в слабых взаимодействиях, «диагональные» комбинации являются таковыми с определенной  $\mathcal{CP}$ -четностью,

$$|K_1^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle), \quad |K_2^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle). \quad (4.66)$$

В соответствии с (4.65), имеем

$$\mathcal{CP}|K_1^0\rangle = |K_1^0\rangle, \quad \mathcal{CP}|K_2^0\rangle = -|K_2^0\rangle. \quad (4.67)$$

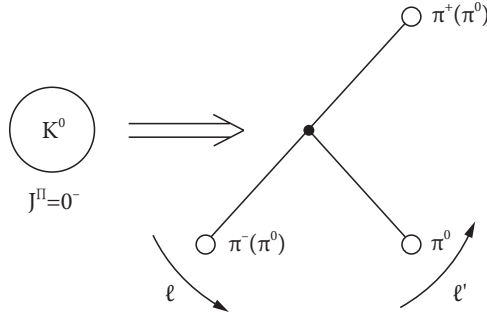


Рис. 4.3. Кинематика векторной добавки орбитальных моментов при трехмезонном распаде  $K^0$

с  $CP$ -сохранением, процесс (4.64) разрешен для комбинации  $K_1^0$ , но не для  $K_2^0$ .

Теперь мы перейдем к *трехпионным* распадам,

$$K^0 \rightarrow 3\pi^0, \quad K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0. \quad (4.68)$$

Мы можем классифицировать конечные состояния, разрешённые в этих процессах. Во всех случаях конечная система должна иметь полный угловой момент  $J = J_K = 0$ . Поскольку спины пионов также нулевые, мы получим ограничения на орбитальный момент их относительного движения. Полный орбитальный момент  $\mathbf{L} = \vec{\ell} + \vec{\ell}'$  построен добавкой относительного орбитального момента  $\vec{\ell}$  пионных пар,  $2\pi^0$  в первом случае или, например,  $\pi^+$  и  $\pi^-$  во втором, и относительного момента  $\vec{\ell}'$  последнего  $\pi^0$  по отношению к центру масс первой пары, Рис. 14.3. Так как  $\mathbf{L} = 0$ , мы должны иметь  $\ell = \ell'$ . В первом случае (4.68), это верно даже потому, что волновая функция двух тождественных пионов должна быть симметрична, см. раздел 15. По этой причине, здесь  $\ell = \ell'$  четны. Следовательно,  $CP$ -четное состояние  $3\pi^0$  определяется только внутренней  $CP$ -четностью пионов и равна  $-1$  для нечетного числа пионов. В итоге, только  $CP$ -нечетная комбинация  $K_2^0$ , уравнение (4.67), может распадаться в  $3\pi^0$ . Для второго процесса (4.68),  $CP$ -четность системы  $(\pi^+\pi^-\pi^0)$  является продуктом  $CP$ -четности подсистемы  $(\pi^+\pi^-)$ ,  $CP$ -четность  $\pi^0$  (равна  $-1$ ), и четность  $(-)^{\ell'}$  орбитального движения  $\pi^0$  относительно пары  $(\pi^+\pi^-)$ . Когда применим к паре  $(\pi^+\pi^-)$ ,  $C$ - и  $P$ -операции эквивалентны, обе меняются  $\pi^+ \leftrightarrow \pi^-$ . Это означает, что  $CP$ -четность  $(\pi^+\pi^-)$  пары всегда  $+1$ . Подитожив наши аргументы, мы заключаем, что  $CP$ -четность состояния  $|\pi^+\pi^-\pi^0\rangle$  есть  $(-)^{\ell'+1}$ , и для

четных  $\ell = \ell'$  трехпионные состояния имеют  $\mathcal{CP} = -1$ , в то время как для нечетных  $\ell = \ell'$  они имеют  $\mathcal{CP} = +1$ .

Мы можем составить список распадов нейтральных каонов, разрешенных сохранением  $\mathcal{CP}$ -четности:

$$\mathcal{CP} = +1 : \quad K_1^0 \rightarrow (2\pi^0), (\pi^+\pi^-), (\pi^+\pi^-\pi^0)_{\ell=\ell'=\text{odd}}; \quad (4.69)$$

$$\mathcal{CP} = -1 : \quad K_2^0 \rightarrow (3\pi^0), (\pi^+\pi^-\pi^0)_{\ell=\ell'=\text{even}}. \quad (4.70)$$

Высвобождаемая в двухмезонных распадах энергия и соответствующий фазовый объем намного больше, чем в трехмезонных распадах. Это определяет, что вероятность распада (4.69) намного больше, чем в (4.70). В то же время, трехмезонный распад  $K_1^0$  подавляется центробежным барьером, поскольку испускание  $\pi^0$  с  $\ell' = 0$  здесь запрещено. В самом деле, эксперимент различает два вида нейтральных каонов, долгоживущие,  $K_L^0$ , и короткоживущие,  $K_S^0$ . Их времена жизни

$$\tau_S = 0.9 \cdot 10^{-10} \text{ s}, \quad \tau_L = 5.4 \cdot 10^{-8} \text{ s}, \quad (4.71)$$

соответственно. Быстрый распад,  $K_S^0$ , встречается в двухпионном режиме, в то время как медленный распад,  $K_L^0$ , развивается в трехмезонных каналах, поэтому возможно идентифицировать  $K_S^0$  с  $K_1^0$ , и  $K_L^0$  с  $K_2^0$ .

В экспериментах *Кронина и др., 1964* [Chr1964], были обнаружены редкие события (с относительной вероятностью  $\approx 0.002$ ), когда долгоживущая компонента  $K_L^0$  распадалась на два пиона. Эти эксперименты показывают, что  $\mathcal{CP}$ -четность не сохраняется в подобных распадах, и, на основании  $\mathcal{CPT}$ -теоремы, инвариантность обращения времени нарушается. Прямо говоря,  $K_S^0$  является, следовательно, не чистым  $K_1^0$  состоянием; Оно содержит примесь  $K_2^0$ . Аналогично,  $K_L^0$  есть, главным образом,  $K_2^0$  с небольшой примесью  $K_1^0$ .  $\mathcal{CP}$ -нарушение делает возможными ненулевые электрические дипольные моменты элементарных частиц, раздел I.22.9. Похожее малое  $\mathcal{CP}$ -несохранение наблюдалось в эксперименте с нейтральными  $B$ -мезонами [Fle2002].

#### 4.11 Нейтральные каоны и квантовая регенерация

Распады нейтральных каонов обнаруживают примечательные свойства основ квантовой физики, даже если мы забудем о малом  $\mathcal{CP}$ -нарушении. Здесь, одно из главных правил квантовой механики, принцип суперпозиции, проявляет себя уникальным образом. Ситуация, некоторым образом, аналогична нейтринным осцилляциям, но она более ясная и легче проверяема экспериментально.

Нейтральные каоны образуются в сильных взаимодействиях, например (4.61), имеет определенную странность по отношению к сильным взаимодействиям. Однако, каоны нестабильны и распадаются через слабые взаимодействия (4.64, 4.68-4.70). Если распады происходят с сохранением  $\mathcal{CP}$ -четности, нам нужно представить порожденные  $K^0$  как суперпозицию состояний (4.66) с определенной  $\mathcal{CP}$ -четностью, но всегда без определенной странности, последняя не сохраняется в слабых взаимодействиях,

$$|K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle), \quad |\bar{K}^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_2^0\rangle - |K_1^0\rangle). \quad (4.72)$$

откуда, порожденный  $K^0$  является комбинацией долгоживущих  $K_2^0$  и короткоживущих  $K_1^0$  компонент.

После интервала времени  $t$ , который много больше, чем время жизни  $\tau_1 K_1^0$ , но все еще мал по сравнению с временем жизни  $K_2^0$ , короткоживущая компонента  $K_1^0$  умирает, и пучок каонов состоит из  $K_2^0$ , но имеет только половину интенсивности,

$$|K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|K_2^0\rangle. \quad (4.73)$$

С определением (4.66) для  $K_2^0$ , мы наблюдаем, что в пучке который исходно состоял из  $K^0$  со странностью  $+1$  теперь появились античастицы,  $\bar{K}^0$ , со странностью  $-1$ :

$$|K^0\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}|K_2^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle). \quad (4.74)$$

Пусть пучок (4.74) проходит через среду. Сильные взаимодействия с ядрами среды, включая рассеяние каонов и генерацию гиперонов, различны для частиц,  $K^0$ , и античастиц,  $\bar{K}^0$ , из-за их различной странности. В столкновении с ядрами, античастицы  $\bar{K}^0$  имеют большую вероятность создания гиперонов с той же странностью  $-1$ , в то время как для частиц (странность  $+1$  отлична от таковой для гиперонов) такие процессы запрещены в сильных взаимодействиях; — только рассеяние  $K^0$  нуклонов возможно.

Предположим, что в достаточно тонкой мишени, античастицы  $\bar{K}^0$  почти полностью поглощаются в результате неупругих столкновений с ядрами. На выходе из мишени, состояние пучка описывается компонентой волновой функции частицы (4.74),

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}|K^0\rangle = \frac{1}{2}|K^0\rangle. \quad (4.75)$$

Это состояние аналогично начальной точке полного процесса. но с  $1/4$  интенсивности Свободно двигаясь,  $K^0$  из уравнения (4.75) снова может быть представлен суперпозицией (4.39) с двумя экспоненциально распадающимися модами. Из-за этого, затухающая короткоживущая компонента  $K_1^0$  испытывала *регенерацию* в среде. После этого мы снова наблюдаем быстрые двухмезонные распады (4.64), характерные для  $K_1^0$ .

В действительном эксперименте регенерация намного более сложная. На практике, нужно принять во внимание рассеяние  $K^0$  на мишени, также как неполное поглощение  $\bar{K}^0$ . Вместо (4.75), волновая функция пучка на выходе из регенератора должна записываться как

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi|K^0\rangle + \eta|\bar{K}^0\rangle\right) = \frac{\xi - \eta}{2}|K_1^0\rangle + \frac{\xi + \eta}{2}|K_2^0\rangle, \quad (4.76)$$

где  $\xi$ ,  $|\xi| = 1$ , описывает упругое рассеяние  $K^0$ , которое не меняет полной интенсивности пучка, но меняет его фазу, а  $\eta$ ,  $|\eta| < 1$ , описывает упругое рассеяние и поглощение  $\bar{K}^0$ . Амплитуда регенерации  $K_1^0$  пропорциональна  $(\xi - \eta)$ . Процесс строго зависит от мельчайшей разности масс  $\Delta m$  между состояниями  $K_1^0$  и  $K_2^0$ . Их виртуальные слабые взаимодействия и, следовательно, их энергии, слегка различны. Эксперимент подтвердил эффект регенерации, который следует из основных квантовых постулатов и позволяет измерить  $\Delta m$ .

### Задача 4.3

Рассмотрим пучок  $K^0$  во время  $t = 0$ . Времена жизни  $K_1^0$  и  $K_2^0$  равны  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , соответственно ( $\tau_2 \gg \tau_1$ ). Найти интенсивность  $\bar{K}^0$  как функцию времени.

**Решение** Исходная волновая функция

$$|\Psi(t=0)\rangle = |K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|K_1^0\rangle + |K_2^0\rangle\right). \quad (4.77)$$

с массами  $m_1$  и  $m_2$  для  $K_1^0$  и  $K_2^0$ , соответственно, время эволюции экспоненциально распадающихся состояний с определенной  $CP$ -четностью устанавливаются как ( $c = \hbar = 1$ )

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{-im_1t-t/2\tau_1}|K_1^0\rangle + e^{-im_2t-t/2\tau_2}|K_2^0\rangle\right\}, \quad (4.78)$$

или, вводя снова базисные состояния с определенной странностью,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left\{\left[e^{-im_1t-t/2\tau_1} + e^{-im_2t-t/2\tau_2}\right]|K^0\rangle - \left[e^{-im_1t-t/2\tau_1} - e^{-im_2t-t/2\tau_2}\right]|\bar{K}^0\rangle\right\}.$$

$$(4.79)$$

Амплитуда  $\bar{K}^0$  компоненты со странностью  $S = -1$  равна ( $\Delta m = m_2 - m_1$ )

$$A(\bar{K}^0; t) = -\frac{1}{2}e^{-(i/2)(m_1+m_2)t} \left[ e^{-(i/2)\Delta m t - t/2\tau_1} - e^{-(i/2)\Delta m t - t/2\tau_2} \right], \quad (4.80)$$

а измеренная интенсивность актами взаимодействия (образование гиперонов,  $\Lambda$  и  $\Sigma$ , вдоль траектории обусловлена только наличием  $\bar{K}^0$ ) пропорциональна

$$N(\bar{K}^0; t) \propto e^{-t/\tau_1} + e^{-t/\tau_2} - 2e^{-(t/2)(1/\tau_1+1/\tau_2)} \cos(\Delta m t). \quad (4.81)$$

Поскольку  $\tau_2 \gg \tau_1$ , в течение интервала времени  $t < \tau_2$  можно наблюдать характерные осцилляции,

$$N(\bar{K}^0; t) \propto 1 + e^{-t/\tau_1} - 2e^{-t/2\tau_1} \cos(\Delta m t). \quad (4.82)$$

Период осцилляции определяется разностью масс  $\Delta m$ . Такие эксперименты определяют  $\Delta m \approx 0.4 \cdot 10^{-5}$  эВ, мельчайшая разница масс, определенная в физике частиц.





Паули доказал, что антисимметричные частицы имеют полуцелый спин, симметричные частицы имеют целый спин. Исключения неизвестны.

Э. Ферми, *Заметки по квантовой механике*

## Глава 5

### Идентичные частицы

#### 5.1 Неразличимые частиц

В нерелятивистской квантовой механике, каждый сорт частиц характеризуется определенными параметрами (масса, спин, заряд и так далее). К счастью, более глубокая теория должна предсказывать возможные значения этих параметров. Мы возьмем их в качестве эмпирических исходных данных. Параметры эти *идентичны* для всех частиц данного типа. Мы разделим частицы на классы, и те, что относятся к одному классу, *неразличимы*. Это подразделение уникально, поскольку сигнатуры квантовые числа — определяющие класс имеют *дискретные* спектры значений. Дискретность является важной для стандартного решения, называемого *парадоксом Гиббса*, имеющего отношение к перемешиванию энтропии различных и одинаковых газов, раздел 23.

В классической механике, система идентичных частиц является лишь предельным случаем общей системы, взятой для случайно совпадающих значений параметров. В квантовой механике идентичность частиц приводит к новым физическим явлениям, основанным на взаимодействии статистик и квантовой интерференции.

Пусть классические уравнения движения имеют решение, когда частица  $a$  движется вдоль траектории  $A$ , в то время как идентичная частица  $b$  движется вдоль траектории  $B$ . Вследствие идентичности частиц, существует обмен множеством начальных условий, который приводит к решению с частицей  $a$ , следующей по пути  $B$ , и  $b$ , следующей по пути  $A$ . Частица с отметкой  $a$  та же самая в конце пути, какой она могла быть, несмотря на факт, что две пары траекторий выглядят одинаково, и соответствующие точки в двух решениях проходятся в те же моменты времени и с теми

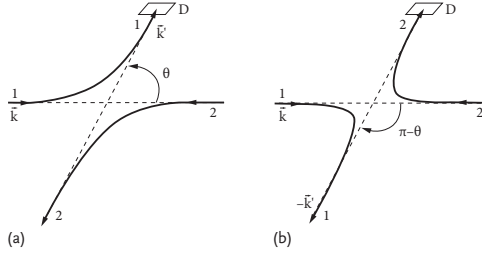


Рис. 5.1. Два пути идентичных частиц, неразличимых в квантовой механике

же скоростями. В квантовой механике нет меток, способных различить идентичные частицы. Можно подготовить неперекрывающиеся начальные условия, выстреливая два протона из различных источников. Пусть они взаимодействуют или просто пересекают перекрывающиеся пространственные области. После этого невозможно сделать различие между двумя конечными состояниями, показанными на Рис. 15.1.

*Амплитуды*, а не вероятности двух событий следует добавить, и мы получим качественно новое явление, интерференцию (конструктивную или деструктивную) идентичных частиц.

## 5.2 Перестановочная симметрия

Все характеристики идентичных частиц  $a$  и  $b$  в гамильтониане  $H(a, b)$  точно те же. Мы используем здесь символы частиц  $a, b, \dots$  для полного набора одночастичных переменных, которые включают также спин и другие внутренние степени свободы.

Чтобы сформулировать ситуацию в терминах симметрий, мы введем оператор *перемещения*  $\hat{P}_{ab} \equiv \hat{P}_{ba}$ , который меняет местами ( $a \leftrightarrow b$ ) *все переменные* наборов  $a$  и  $b$  в волновой функции,

$$\hat{P}_{ab}\Psi(a, b) = \Psi(b, a). \quad (5.1)$$

Аналогичный оператор обмена может быть введен для части переменных также. *Оператор Майорана*  $\hat{P}_{ab}^r$  обменивает только пространственные координаты,  $\mathbf{r}_a \leftrightarrow \mathbf{r}_b$ ; *оператор Барлетта*  $\hat{P}_{ab}^\sigma$  переставляет только спиновые координаты частиц  $a$  и  $b$ . Полный оператор перемещения (5.1) обычно называют *оператором Гейзенберга*. Если нет дополнительных переменных,

## 5.2 Перестановочная симметрия

99

очевидно, что

$$\hat{\mathcal{P}}_{ab} = \hat{\mathcal{P}}_{ab}^r \hat{\mathcal{P}}_{ab}^\sigma. \quad (5.2)$$

Когда их применяют дважды, все операторы перемещения дают единичность,

$$(\hat{\mathcal{P}}_{ab})^2 = (\hat{\mathcal{P}}_{ab}^r)^2 = (\hat{\mathcal{P}}_{ab}^\sigma)^2 = 1. \quad (5.3)$$

Следовательно, любой оператор перемещения имеет два собственных значения, равных  $\pm 1$ , и его собственные функции разделяются на два множества, *симметричное* и *антисимметричное* по отношению к обмену соответствующих переменных. Произвольная функция не имеет определенной симметрии, но она всегда может быть представлена как суперпозиция функций с определенной симметрией,

$$\Psi(a, b) \equiv \frac{1}{2} [\Psi(a, b) + \Psi(b, a)] + \frac{1}{2} [\Psi(a, b) - \Psi(b, a)]. \quad (5.4)$$

В системе *многих тел* из  $N$  идентичных частиц, можно ввести  $N(N-1)/2$  операторов перемещения  $\hat{\mathcal{P}}_{ab}$ . Их последовательное действие позволяет прийти к произвольной *перестановке* переменных относительно исходной функции  $\Psi(a, b, \dots)$ . Полное число функций, полученных таким образом, равно числу  $N!$  различных перестановок. Ситуация многих тел более сложна, чем в уравнении (5.4) вследствие увеличения числа возможных *смешанных симметрий*.

Проблема, возникающая для  $N > 2$  относится к тому, что операторы перемещения, включающие множество объектов *не коммутируют*. Например, Для  $N = 3$  мы находим прямо

$$\hat{\mathcal{P}}_{13} \hat{\mathcal{P}}_{12} \Psi(1, 2, 3) = \hat{\mathcal{P}}_{13} \Psi(2, 1, 3) = \Psi(3, 1, 2), \quad (5.5)$$

откуда, действуя в противоположном порядке, мы получим результат, который, вообще говоря, отличается от (5.5),

$$\hat{\mathcal{P}}_{12} \hat{\mathcal{P}}_{13} \Psi(1, 2, 3) = \hat{\mathcal{P}}_{12} \Psi(3, 2, 1) = \Psi(2, 3, 1), \quad (5.6)$$

то есть  $[\hat{\mathcal{P}}_{13}, \hat{\mathcal{P}}_{12}] \neq 0$ . Правильное соотношение коммутации

$$\hat{\mathcal{P}}_{12} \hat{\mathcal{P}}_{13} = \hat{\mathcal{P}}_{23} \hat{\mathcal{P}}_{12}. \quad (5.7)$$

Будучи некоммутативными, операторы перемещения не имеют полного общего набора собственных функций. Функции смешанной симметрии

ведут себя по-разному при разных перестановках. Это противоречит нашей идее *неразличимости* частиц, так как перестановка идентичных частиц не может менять физики.

Однако, всегда две функции — *одновременно* собственные функции *всех* перестановок. Эти исключительные функции полностью симметричны и полностью антисимметричны. Пусть, в самом деле,  $\Psi(1, 2, 3)$  являются собственными функциями всех трех операторов  $\hat{P}_{12}$ ,  $\hat{P}_{23}$  и  $\hat{P}_{31}$  с собственными значениями (равными  $\pm 1$ )  $\lambda_{12}$ ,  $\lambda_{23}$  and  $\lambda_{31}$ , соответственно. Идентичность (5.7), примененная к  $\Psi(1, 2, 3)$  дает  $\lambda_{12}\lambda_{13} = \lambda_{23}\lambda_{12}$ . Это показывает, что  $\lambda_{13} = \lambda_{23}$ , и таким же образом мы найдем, что  $\lambda_{13} = \lambda_{12}$ . Откуда, все три собственных значения *равны*. Это верно, вообще говоря, потому что  $\Psi(1, 2, \dots, N)$  является общей собственной функцией всех операторов  $\hat{P}_{ab}$  тогда и только тогда, когда все собственные значения  $\lambda_{ab}$  равны их равны их общей величине  $+1$  (*полностью симметричная* функция  $\Psi_S$ ) или  $-1$  (*полностью антисимметричная* функция  $\Psi_A$ ).

Мы заключаем, что только функции  $\Psi_S$  или  $\Psi_A$  совместимы с идеей неразличимости частиц. Достаточно взять функции точной симметрии в качестве начальных условий для эволюции во времени. Будучи симметричными при всех перестановках переменных идентичных частиц, гамильтониан системы многих тел коммутирует со всеми операторами перестановок,

$$[\hat{P}_{ab}, \hat{H}] = 0. \quad (5.8)$$

Все операторы  $\hat{P}_{ab}$ , следовательно, являются константами движения, и исходная симметрия волновой функции сохраняется во времени. Симметрия не может быть разрушена возмущением, потому что для идентичных частиц, возмущенный гамильтониан симметричен, также как остается неизменным закон сохранения (5.8). Уравнение (5.8) является, на самом деле, определением *неразличимости*.

Конечно, нет необходимости конструировать исходное состояние симметризованным или антисимметризованным для всех частиц заданного типа по Вселенной. Если частицы не взаимодействуют и не пересекаются, нет никакой разницы, идентичны они или нет, физические предсказания остаются теми же, когда исключается квантовая интерференция.

### 5.3 Бозоны и фермионы

Теорема квантовой теории поля спина и статистики (В. Паули, 1940) утверждает, что волновые функции идентичных частиц с целым спином должны всегда быть симметричными, а таковые для частиц полуцелого

спина всегда должны быть антисимметричными по отношению к любой перестановке всех переменных идентичных частиц. Это формально следует из закона преобразования волновых уравнений, описывающих соответствующие поля в 4-мерном пространстве Минковского. Только подходящим выбором перестановочной симметрии, квантованные поля будут подчиняться причинности и иметь положительную энергию частиц, которые появляются в качестве квантов поля. В известном смысле, это является геометрическим свойством мира Минковского, которое несправедливо в некоторых моделях низкой размерности. Для бесспиновых частиц требования симметрии следуют [Pes2006] из идентификации точек  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и  $(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  шестимерного конфигурационного пространства и тщательного изучения непрерывности волновой функции в таком пространстве. [Мы встречали случай двух идентичных пионов (частиц с нулевым спином) в распадах нейтральных каонов, раздел 14.10.] Однако, это доказательство трудно обобщить на частицы с ненулевым спином; спин является существенно релятивистским свойством.

Предполагая связь между спином и статистикой, мы существенно уменьшаем число возможных состояний системы многих тел. Только состояния с правильной перестановочной симметрией,  $\Psi_S$  и  $\Psi_A$ , являются разрешенными, и тип симметрии фиксирован для частиц данного типа. Статистические свойства, строго зависящие от числа доступных состояний, весьма различны для этих двух случаев. Частицы целого спина подчиняются симметричной статистике (*Бозе*–*Эйнштейна*), они называются *бозонами*. Частицы полуцелого спина подчиняются статистике (*Ферми*–*Дирака*), они называются *фермионами*. Материя, главным образом, состоит из фермионов - лептонов и барионов, кварков на более глубоком уровне. Однако, мы все еще не знаем состав *темной материи* во Вселенной.

При высокой энергии возбуждения (температуре), когда доступное число квантовых состояний велико, и среднее число частиц на квантовое состояние  $\ll 1$ , эффекты квантового перекрытия можно игнорировать, поэтому система многих тел приходит к *классическому пределу статистики Больцмана*. Легко оценить, когда квантово-статистические эффекты становятся важными для классического газа. Средняя энергия на частицу  $\bar{\epsilon} = (3/2)T$ . (Мы выразили температуру  $T$  в энергетических единицах, положив постоянную Больцмана  $k_B = 1$ ; переход к тепловым единицам дается равенством  $1 = 11600$  К.) Средний импульс частицы с массой  $m$  есть  $p \sim \sqrt{m\bar{\epsilon}} \sim \sqrt{mT}$  соответствует волне де Бройля с температурой  $\lambda_T \sim \hbar/p \sim \hbar/\sqrt{mT}$ . При уменьшении температуры,  $\lambda_T$  увеличивается, в конечном счете, достигаемое значение порядка среднего расстояния между частицами  $r_0 \simeq n^{-1/3}$ ,

где  $n = N/V$  – плотность газа (число частиц на единицу объема). Волновые пакеты, соответствующие разным частицам начинают перекрываться при температуре вырождения  $T_d$ ,

$$T_d \simeq \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m}. \quad (5.9)$$

Тогда картина классического газа, состоящего из различных, пространственно разделенных частиц, теряет смысл, и можно использовать *квантовую статистику*.

Для электронов в типичных металлах, температура вырождения составляет 1-10 эВ, величину, большую температуры плавления. Это означает, что электроны в металлах, в любом случае, должны рассматриваться как *вырожденный* квантовый газ. В полупроводниках можно варьировать плотность и, следовательно, температуру вырождения. Для нуклонов при плотности  $n \approx 0.17 \text{ фм}^{-3}$ , что приблизительно соответствует значению внутри ядер, оценка (5.9) дает  $T_d \sim 10 \text{ МэВ}$ . Это соответствует энергии возбуждения порядка сотни МэВ в ядрах с массовым номером  $A \sim 100$ . Для низкоэнергетической ядерной физики это справедливо ниже  $T_d$  поэтому здесь, как и в металлах, эффекты квантовой статистики являются ключевыми.

Здесь может быть уместен один комментарий. Во многих случаях *составные* объекты выглядят как целые. Тогда нужно подсчитывать число *фермионных составляющих* для того, чтобы определить тип квантовой статистики. Тип статистики для нейтральных атомов определяется паритетом числа *нейтронов* в ядрах (число протонов равно числу электронов). Атом  $^{87}_{37}\text{Rb}_{50}$  состоит из ядер (37 протонов и 50 нейтронов) со спином (полный угловой момент ядра)  $3/2$  и 37 электронов атома с полным спином  $1/2$ , который, на самом деле, определяется одним внешним электроном валентности. Такой атом образует Бозе-газ. *Бозе-конденсация* паров рубидия при сверхнизких температурах порядка  $2 \times 10^{-8} \text{ К}$  наблюдалась в 1995 году в качестве первого примера такого явления, предсказанного давно: все идентичные атомы занимают наинизший энергетический уровень в камере (*атомной ловушки*) [Pet2002]. Пренебрегая взаимодействием между атомами, мы можем записать волновую функцию многих тел, как результат идентичных одноатомных функций,

$$\Psi(1, \dots, N) = \psi_0(1)\psi_0(2) \dots \psi_0(N). \quad (5.10)$$

Такая функция очевидно *симметрична*. Температура конденсации, ниже которой макроскопическая функция атомов, занимающая отдельное микроскопическое состояние, может быть оценена из (5.9) для плотности  $n \sim 10^{12}$

см<sup>-3</sup> в ловушке. Атомы находятся в сверхтонком состоянии (см. раздел I.23.6) с полным угловым моментом  $F = 2$ , который должен рассматриваться как спин целого атома. Ясно, что такая трактовка приближенна. При высоких плотностях электронные оболочки, различных атомов начинают перекрываться, и фермионная природа электронов, которая не позволяет завершить симметрию, вступает в игру. В строгом смысле, нуклоны также являются не просто фермионами, поскольку на малых расстояниях они начинают чувствовать структуру кварков и глюонов. Обычно предполагается, что при нормальных плотностях ядра такие эффекты весьма важны, хотя проблема не изучена тщательно.

### Задача 5.1

Рассмотрим две идентичные частицы на одночастичной орбите, характеризующейся угловым моментом  $j$ . Найти разрешенные значения полного углового момента  $J$  системы двух тел.

**Решение** Как показано в *Задаче I.22.2*, симметрия двухчастичной волновой функции  $\mathcal{P}_{12} = (-)^{2j+J}$ . Для бозонов  $j$  является целым, и статистическое требование  $\mathcal{P}_{12} = +1$  приводит к четному  $J$ . Для фермионов  $j$  полуцелый,  $2j$  является нечетным числом, а требование  $\mathcal{P} = -1$  снова дает четное  $J$ . В обоих случаях только четные значения  $J$  допустимы,

$$J = 0, 2, \dots, 2j, \quad J = 0, 2, \dots, 2j - 1. \quad (5.11)$$

Также полезно вспомнить, что, как показано уравнением (I.20.68), двойное применение операции обращения времени действует по-разному на системы с целым и полуцелым угловыми моментами. Поскольку, с правой спиновой статистикой связи первый (второй) случай реализуется даже для четного (нечетного) числа фермионов, операция  $\mathcal{T}^2$  возможна, чтобы различить эти случаи.

## 5.4 Волновые функции невзаимодействующих частиц

Рассмотрим вначале систему двух невзаимодействующих частиц, которая может занимать два одночастичных состояния (*орбиталли*)  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . нижние индексы 1 и 2 относятся к полному набору переменных частиц (не меток частиц!). Полная волновая функция  $\Psi(1, 2)$  является продуктом одночастичных функций, поэтому имеется четыре возможности:

$$\psi_1(1)\psi_1(2), \quad \psi_2(1)\psi_2(2), \quad \psi_1(1)\psi_2(2), \quad \psi_2(1)\psi_1(2). \quad (5.12)$$

Все опции (5.12) разрешены для различных частиц. В случае Бозе мы должны симметризовать по первым и вторым результатам (5.12) уже симметричны. Объединяя третий и четвертый случаи в нормированную симметричную комбинацию  $\Psi_S$ , мы получим

$$: \quad \psi_1(1)\psi_1(2), \quad \psi_2(1)\psi_2(2), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)]. \quad (5.13)$$

Оставшаяся нормализованная антисимметричная комбинация  $\Psi_A$  также разрешена для фермионов,

$$: \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)]. \quad (5.14)$$

Заметим, что функции разных классов симметрии взаимно ортогональны. Комбинации чистой симметрии в уравнениях (5.13) и (5.14) показывают простейшие квантовые *затруднения* для идентичных частиц без динамического взаимодействия, см. раздел 49.

Фермионная функция (5.14) имеет вид *детерминанта Слетера*,

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) \end{vmatrix}, \quad (5.15)$$

с элементами  $\psi_r(c)$ , где строка с номером  $r$  отмечает занятые орбитали, а столбец с номером  $c$  отмечает переменные частицы. Вообще говоря, в *Ферми-системе* из  $N$  идентичных частиц, волновая функция меняет знак при перемещении  $\mathcal{P}_{ab}$ . При перестановке, выполняемой несколькими,  $p$  перемещениями, конечное изменение знака будет  $(-)^p$ . Полное число перестановок равно  $N!$ . Если волновая функция для различных частиц будет  $\Psi(1, \dots, N)$ , то для идентичных фермионов соответствующая нормированная антисимметричная функция принимает вид

$$\Psi_A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-)^p \hat{\mathcal{P}} \Psi(1, \dots, N). \quad (5.16)$$

Здесь, сумма пробегает по всем  $N!$  перестановкам, подсчитывая их относительные знаки. Аналогично, волновая функция  $N$  идентичных *бозонов* может быть представлена в полностью симметризованной форме,

$$\Psi_S(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \Psi(1, \dots, N). \quad (5.17)$$



Различия между волновыми функциями двух типов статистики ключевые. Вероятность нахождения двух бозонов в одной пространственной точке не исчезающе мала, в то время еще таковая вероятность для двух фермионов с параллельными спинами равна нулю, что отражает статистическое «отталкивание».

В случае невзаимодействующих частиц, фермионная волновая функция (5.16) становится детерминантом Слетера (39.15) для  $N$  частиц,

$$\Psi_A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det}\{\psi_r(c)\}, \quad (5.18)$$

где изучается  $\psi_r$ , которая перечисляет взаимно-ортогональные одночастичные орбитали, занятые частицами в состоянии многих тел, и нам нужны, по крайней мере,  $N$  независимых орбиталей  $\psi_r$ , чтобы разместить  $N$  фермионов. Детерминанты Слетера автоматически антисимметричны, поскольку любая перестановка двух столбцов (или строк) меняет знак детерминанта. Нормирующий множитель перед детерминантом для  $N$  фермионов равен  $1/\sqrt{N!}$ . Если число доступных орбиталей было бы меньше, чем  $N$ , некоторые из частиц должны совместно использовать орбиталь. В этом случае мы можем получить близкий к нулю детерминант с совпадающими строками. Мы приходим к *принципу исключения Паули*: в невзаимодействующих Ферми системах нет частиц, занимающих одну и ту же орбиталь. Принцип Паули есть частный случай общего требования антисимметрии. Функция с более чем одной частицей на той же орбитали, как первый из двух результатов в (5.12), необходимо симметрична по переменным этих частиц.

Очень удобно, особенно в случае больших  $N$ , описать полную функцию многих тел в терминах *чисел занятости* (ожидаемые значения для числа частиц на каждой орбитали). В случае невзаимодействующих фермионов и ортогональных орбиталей, числа занятости могут принимать только значения 0 (пустая орбиталь) и 1 (занятая орбиталь). В случае невзаимодействующих бозонов, развешенные числа занятости это целые от 0 до  $N$ , последний случай соответствует полному конденсату. Представление номера занятости будет развито в разделе 17 в схеме *вторичного квантования* с операторами, действующими на числа занятости (создания и аннигиляции частиц).

### Задача 5.2

$N$  идентичных частиц распределены по  $\Omega$  ортогональным одночастичным орбиталиям. Вычислить полное число  $\mathcal{N}(N, \Omega)$  возможных состояний многих тел точной симметрии для бозонов и фермионов.

**Решение** Для фермионов, полное число  $\mathcal{N}$  разрешенных состояний можно вычислить, комбинируя, в соответствии с принципом Паули,  $\Omega$  возможностей для первой частицы, оставляя  $\Omega - 1$  для второй,  $\Omega - 2$  для третьей и так далее, до  $\Omega - (N - 1)$ ; конечно, должно быть  $N \leq \Omega$ . Поскольку частицы идентичны, результат следует поделить на  $N!$ ,

$$: \mathcal{N}(N, \Omega) \frac{\Omega!}{(\Omega - N)! N!}. \quad (5.19)$$

Как и должно быть, состояние уникально,  $\mathcal{N} = 1$ , для пустого пространства,  $N = 0$ , так же как и для целиком заполненного,  $N = \Omega$ . Ответ симметричен по отношению к *частицам* ( $N$ ) и *дыркам* ( $\Omega - N$ ).

Для бозонов, задача эквивалентна следующей. Поместим  $N$  вдоль прямой и вставим случайно расположенные  $\Omega - 1$  границу между ними, образуя  $\Omega$  ячеек. Каждое положение границы дает конкретное распределение бозонов в  $\Omega$  ящиках. Полное число объектов (частицы + стенки) равно  $\Omega + N - 1$ . Число различных конфигураций  $\Omega - 1$  стенок дает ответ,

$$: \mathcal{N}(N, \Omega) \frac{(\Omega + N - 1)!}{(\Omega - 1)! N!}. \quad (5.20)$$

Для *различимых* частиц число состояний есть просто  $\Omega^N$ . Это следует из обоих уравнений (5.19) и (5.20) после исключения перестановочного множителя  $N!$  в знаменателе, и взяв классический предел низкой плотности,  $N \ll \Omega$ .

С межчастичным *взаимодействием* принятым во внимание, простые [симметризованные, как в (5.10), или антисимметризованные, как детерминанты Слетера (5.15)] результаты одночастичных орбиталей более не являются стационарными. Процесс взаимодействия перемещает частицы между орбиталями. Присутствие или отсутствие существенно влияет на амплитуды переходов. Таким образом, переход фермиона на занятую орбиталь запрещен.

Даже для взаимодействующей Ферми-системы, детерминанты Слетера для всех возможных популяций орбиталей обеспечивают полным набором ортогонализованных антисимметричных волновых функций. Этот набор регулярно используется как базис для решения проблемы многих тел. Отметим, что для этой цели можно использовать любой полный набор одночастичных орбиталей, хотя практически определенный выбор может быть более удобен. Числа занятости различны в разных представлениях. В суперпозиции, представляющей действительное стационарное

состояние, числа занятости, вообще говоря, дробные (между 0 и 1). То же самое справедливо для возбужденных Ферми-систем, встречающихся при рассмотрении теплового ансамбля.

### Задача 5.3

Может быть удобно рассмотреть  $N$  частиц, распределенных по  $N$  *неортогональным* орбиталям  $\psi_\nu, \nu = 1, \dots, N$ , поэтому (анти)симметричная  $N$ -частичная волновая функция дается уравнениями (5.16) и (5.17), где  $\Psi(1, \dots, N)$  является простым произведением  $\psi_1(1) \dots \psi_N(N)$ . Найти перекрытие двух таких функций  $\Psi$  и  $\Phi$ , построенных на множествах  $\{\psi_\nu\}$  and  $\{\varphi_\mu\}$ , соответственно.

**Решение** Если функция системы многих тел этого типа нормирована, результат для фермионов

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \frac{\text{Det } \Theta_{\nu\mu}}{\sqrt{|\text{Det } \Theta_{\nu\nu'}| \cdot |\text{Det } \Theta_{\mu\mu'}|}} \quad (5.21)$$

в терминах детерминантов матрицы скалярных произведений

$$\Theta_{\nu\mu} = \langle \psi_\nu | \varphi_\mu \rangle. \quad (5.22)$$

Для бозонов мы получим *постоянную*, ту же самую комбинацию произведений, как (5.21), но везде со знаками плюс.

## 5.5 Двухнуклонные состояния

В качестве нашего первого реалистического примера, мы рассмотрим простейшее взаимодействие ядерной системы  $N = 2$  нуклонов. Здесь можно ясно увидеть конкретную особенность, которое отличает протон-нейтронную ( $p - n$ ) систему от системы двух идентичных нуклонов,  $p - p$  или  $n - n$ , вопреки тому факту, что ядерные силы в различных парах почти идентичны (*зарядовая независимость* сильных взаимодействий). Поскольку центр масс системы многих тел может быть выделен в общем виде, раздел 17.1, и, предполагая равенство масс протона и нейтрона, такое глобальное движение полностью симметрично, мы можем интересоваться только относительным движением.

Волновые функции относительного движения двух частиц имеют радиальную, угловую и спиновую части. Полный набор состояний может быть образован с использованием сферических гармоник  $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$  для угловой части  $[\mathbf{n}(\theta, \varphi)]$  – единичный вектор вдоль  $\mathbf{r} = r\mathbf{n} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Это

определяет квантовый номер четности  $\Pi = (-)^{\ell}$ . Мы будем использовать стандартные спектроскопические символы  $s, p, d, f, g, h, i, j, \dots$  для значений  $0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$  орбитального момента  $\ell$ . Спиновая функция  $\chi_{SS_z}$  двухнуклонной системы, обсуждавшаяся в разделе 22.3, может соответствовать  $S = 0$  (синглет) или  $S = 1$  (триплет) значениям полного спина

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2. \quad (5.23)$$

Триплетные состояния симметричны по отношению к обмену переменных спина, осуществляемому оператором Бартлетта  $\mathcal{P}^{\sigma}$ , а синглетное состояние антисимметрично

$$\mathcal{P}^{\sigma} = (-)^{S+1}. \quad (5.24)$$

В двухнуклонной системе пространственная симметрия меняет знак относительной координаты, следовательно, это эквивалентно обмену пространственных координат, даваемому оператором Майорана  $\mathcal{P}^r$ . Обращаясь к (5.2), мы получим

$$\mathcal{P}^r = (-)^{\ell}, \quad \mathcal{P} = \mathcal{P}^r \mathcal{P}^{\sigma} = (-)^{\ell+S+1}. \quad (5.25)$$

Вообще говоря, относительный орбитальный момент  $\vec{\ell}$  и спин  $\mathbf{S}$  пары не являются с необходимостью сохраняемыми величинами. Но вращательная инвариантность гарантирует сохранение полного углового момента

$$\mathbf{J} = \vec{\ell} + \mathbf{S}. \quad (5.26)$$

Состояние с заданными значениями  $\ell$  и  $S$  могут быть сведены к  $J = \ell$  для спинового синглета и к  $J = \ell, \ell \pm 1$  для спинового триплета (в исключительном случае  $\ell = 0$  только  $J = S = 1$  возможно). Как в атомной спектроскопии, результирующее состояние можно обозначить как  $^{2S+1}(\ell)_J$ , где  $(\ell)$  употребляется для символа орбитального момента. Используя эту терминологию, все возможные двухнуклонные состояния можно классифицировать как в таблице 15.1.

		$J$	$\ell=0$	1	2	3	4
Таблица 15.1	Singlets, $S = 0$	$J = \ell$	$^1s_0$	$^1p_1$	$^1d_2$	$^1f_3$	$^1g_4$
	Triplets, $S = 1$	$J = \ell - 1$		$^3p_0$	$^3d_1$	$^3f_2$	$^3g_3$
		$J = \ell$		$^3p_1$	$^3d_2$	$^3f_3$	$^3g_4$
		$J = \ell + 1$	$^3s_1$	$^3p_2$	$^3d_3$	$^3f_4$	$^3g_5$

Поскольку единственные точные константы движения это  $J$  и (игнорируя слабые взаимодействия) четность  $\Pi = (-)^\ell$ , удобно использовать сокращенную символику  $J^\Pi$ , указывающую только эти квантовые числа. В двухнуклонной системе четность синглетных состояний  $(-)^\ell = (-)^J$  определяется однозначно величиной  $J$ . Для триплетных состояний квантовые числа  $J$  и  $\Pi$  не полностью определяют состояние: существуют две возможности с разными  $\ell = J \pm 1$ . Триплетные состояния с  $\ell = J$ , а также состояние  ${}^3p_0$  with  $J^\Pi = 0^-$ , являются уникальными. Переупорядочим состояния, соответствующие точным квантовым числам  $J^\Pi$  сильного взаимодействия (Таблица 15.2).

Таблица 15.2 [0.2cm]

	$0^+$	$0^-$	$1^+$	$1^-$	$2^+$	$2^-$	$3^+$	$3^-$	$4^+$
Singlets	${}^1s_0$			${}^1p_1$	${}^1d_2$			${}^1f_3$	${}^1g_4$
Triplets		${}^3p_0$	${}^3s_1, {}^3d_1$	${}^3p_1$	${}^3d_2$	${}^3p_2, {}^3f_2$	${}^3d_3, {}^3g_3$	${}^3f_3$	${}^3g_4$

В принципе, взаимодействие может смешивать состояния с одинаковыми  $J^\Pi$ , но разными  $\ell$  или  $S$ . Существуют две возможные суперпозиции, совместимые с сохранением  $J^\Pi$ . Во-первых, можно смешивать триплетные и синглетные состояния с теми же  $\ell$ , например,  ${}^1p_1$  и  ${}^3p_1$  («вертикальное перемешивание»). Во-вторых, разрешена суперпозиция триплетных состояний с  $\ell = J \pm 1$  («горизонтальное перемешивание»). Механизм горизонтального перемешивания связан с *тензорными силами*, устроенными как скалярное произведение тензоров второго ранга в спиновом пространстве,  $\propto s_{1i}s_{2j} - (1/3)(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)\delta_{ij}$ , и угловой квадрупольный оператор  $\propto Y_{2\mu}(\mathbf{n})$ , ответственен за смешивание двух орбитальных моментов той же четности  $\Delta\ell = 2$ .

Отметим, что состояния, доступные для вертикального перемешивания, имеют противоположную перестановочную симметрию (5.25), а именно, такое же поведение по отношению к  $\mathcal{P}^r$ , но противоположное по отношению к  $\mathcal{P}^\sigma$ . В противовес этому, горизонтальное перемешивание комбинирует два состояния с одинаковой симметрией. Следовательно, лежащая в их основе физика очень разная. В действительности, горизонтальное перемешивание более сильное, и единственно возможное *пограничное* двухнуклонное состояние это *дейтрон*,  $d \equiv {}^2_1\text{H}_1$ , с  $p-n$  волновой функцией, как суперпозицией  ${}^3s_1 + {}^3d_1$ , см. таблицу 39.2.

Мы перечислили двухнуклонные состояния без упоминания, различны ли нуклоны, как в случае дейтрона, или идентичны. Однако, в последнем

случае только *антисимметричные* состояния с величиной  $\mathcal{P} = -1$  оператора обмена (5.25) разрешены статистикой Ферми. Следовательно, только подкласс состояний, выбран для  $n - n$  или  $p - p$  систем, где орбитальная ( $\mathcal{P}^r$ ) и спиновая ( $\mathcal{P}^s$ ) симметрии *дополнительны*, а именно

$$\text{—} : \quad 0^+(^1s_0), \quad 2^+(^1d_2), \quad 4^+(^1g_4), \dots; \quad (5.27)$$

и

$$\text{—} : \quad 0^-(^3p_0), \quad 1^-(^3p_1), \quad 2^-(^3p_2 + ^3f_2), \quad 3^-(^3f_3), \dots \quad (5.28)$$

Наивные ожидания могли быть такими, вследствие зарядовой независимости ядерных сил, существование пограничного дейтрона (электрический заряд  $Z = 1$ ) может предполагать существование пограничных состояний  $n - n$  ( $Z = 0$ , динейтрон) и  $p - p$  ( $Z = 2$ , дипротон или  $^2\text{He}$ ). Такие граничные состояния не существуют. Причина этого могла стать понятной следующим образом.

Дейтрон, с энергией связи 2.225 МэВ (нижнее значение по ядерным масштабам), не имеет возбужденных граничных состояний. Поскольку ядерные силы зарядово независимы, гипотетические граничные состояния  $n - n$  и  $p - p$  должны иметь *те же* квантовые числа  $^3s_1 + ^3d_1$ , что и единственное граничное  $n - p$  состояние. Однако, уравнения (5.27) и (5.28) говорят нам, что такие состояния запрещены статистикой Ферми. Идея зарядовой независимости должна быть сформулирована, как эквивалентность ядерных сил *в тех же самых квантовых состояниях*. Весьма плодотворный путь формулировки зарядовой независимости лежит через введение высшей симметрии, *изобарического спина*, или коротко *изоспина*, другой группы  $SU(2)$ , основанной на представлении протона и нейтрона, как двух состояний *нуклона*. Полный формализм спина представлен здесь, со строгими предсказаниями для многонуклонных систем. Даже более высокие симметрии работают в мире элементарных частиц.

#### Задача 5.4

Пионы  $\pi^-$ , частицы со спином 0 и отрицательным электрическим зарядом, могут быть захвачены на водородоподобную орбиту ядер и образовать кулоновский *мезоатом* (оценить энергию связи и размер наинизшей орбиты для ядер с зарядом  $Z!$ ). Процесс завершается либо распадом (38.36) пиона на мюон и мюонное антинейтрино, либо ядерным захватом пиона. Рассмотреть  $\pi$ -мезоатом дейтерия, где пион, захваченный из основного состояния мезоатома (процесс. управляемый сильным взаимодействием) приводит к

ядерной диссоциации на два нейтрона,

$$\pi^- + d \rightarrow n + n. \quad (5.29)$$

Показать, что процесс (5.29) возможен только, если пион имеет отрицательную внутреннюю четность (*псевдоскалярная частица*), как это использовалось в разделе 14.

**Решение** С бесспиновым пионом в основном  $s$ -состоянии мезоатома и спином дейтрона (полный угловой момент) равным 1, полный угловой момент начального состояния в процессе захвата (5.29) равен  $J_i = 1$ . Следовательно, конечное состояние двух нейтронов должно также иметь угловой момент  $J_f = 1$ . Уравнение (5.25) разрешает единственную комбинацию квантовых чисел двух нейтронов с  $J = 1$ , а именно  ${}^3p_1$  с отрицательной четностью. Четность начального состояния совпадает с внутренней четностью пиона, поскольку для самой нижней  $s$ -орбиты в мезоатоме  $\ell = 0$ , и состояние дейтрона, комбинация  $s$ - и  $d$ -орбиталей, также четная. Из сохранения четности в процессе (5.29) мы заключаем, что пион обладает отрицательной внутренней четностью.

### Задача 5.5

В системе двух идентичных невзаимодействующих бесспиновых бозонов одна частица находится в стационарном состоянии с нормированной волновой функцией  $\psi_1(\mathbf{r})$ , которая имеет положительную четность, в то время как другая частица находится в состоянии с нормированной волновой функцией  $\psi_2(\mathbf{r})$  отрицательной четности. Определить:

- распределение вероятности координат  $w(\mathbf{r})$  для одной частицы, если позитрон или другая частица произвольны;
- вероятность нахождения частицы в верхней полуплоскости  $z \geq 0$ ;
- вероятность нахождения обеих частиц в  $z \geq 0$ .
- Ответить на те же вопросы для двух фермионов в одинаковых состояниях спина.
- Ответить на те же вопросы для двух различимых частиц.

### Решение

- Правильно симметризованные волновая функция двух бозонов

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1) \}. \quad (5.30)$$

Поскольку волновая функция симметрична, требуемая вероятность может быть найдена для любых частиц, например, для  $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}$ , интегрируя по всем возможным позициям  $\mathbf{r}_2$ , получим:

$$w(\mathbf{r}) = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2. \quad (5.31)$$

Одночастичные волновые функции предполагаются нормализованными,

$$\int d^3 r |\psi_1(\mathbf{r})|^2 = \int d^3 r |\psi_2(\mathbf{r})|^2 = 1; \quad (5.32)$$

и они ортогональны вследствие противоположной четности,

$$\int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) = 0. \quad (5.33)$$

Интегрирование в (5.31) дает

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2), \quad (5.34)$$

поскольку мешающий член пропадает вследствие ортогональности (5.33). Множитель 1/2 гарантирует правильность нормировки

$$\int d^3 r w(\mathbf{r}) = 1. \quad (5.35)$$

- б) Для функций определенной четности, интеграл по верхней полуплоскости равен

$$\int_{z \geq 0} d^3 r |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{2}. \quad (5.36)$$

Следовательно, вероятность нахождения одной частицы в верхней полуплоскости, при произвольном положении другой частицы, получается из (5.34),

$$w(z \geq 0) = \int_{z \geq 0} d^3 r w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2}. \quad (5.37)$$

- с) Чтобы найти вероятность нахождения обеих частиц одновременно в полуплоскости, вернемся к полной волновой функции (5.30),

$$w(z_1 \text{ and } z_2 \geq 0) = \int_{z_1, z_2 \geq 0} d^3 r_1 d^3 r_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2. \quad (5.38)$$



Однако, в полуплоскости одночастичные волновые функции не обязательно ортогональны, и их перекрытие дается интегралом

$$I = \int_{z \geq 0} d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}). \quad (5.39)$$

используя уравнения (5.36) и (5.39), мы получим

$$w(z_1 \text{ and } z_2 \geq 0) = \frac{1}{4} + |I|^2. \quad (5.40)$$

- d) В случае фермионов волновая функция должна быть антисимметричной по пространственным переменным (спиновые части  $\chi_1$  и  $\chi_2$  волновой функции идентичны, и, следовательно, их произведение автоматически симметрично). Пространственная часть дается детерминантом Слетера,

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1)] \chi_1 \chi_2. \quad (5.41)$$

Вычисления производятся тем же способом, как для бозонов, предполагая, что спинор  $\chi$  нормирован как  $\langle \chi | \chi \rangle = 1$ . Тогда уравнения (5.34) и (5.36) все еще справедливы. Однако, одновременная вероятность (5.40) должна теперь быть равна

$$w(z_1 \text{ and } z_2 \geq 0) = \frac{1}{4} - |I|^2. \quad (5.42)$$

(Легко доказать, что это выражение всегда неотрицательно).

- e) Для различных частиц нет перестановочной симметрии,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2). \quad (5.43)$$

Вероятности нахождения одной частицы в точке  $\mathbf{r}$  одинаковы для двух частиц,

$$w_1(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2, \quad w_2(\mathbf{r}) = |\psi_2(\mathbf{r})|^2. \quad (5.44)$$

Для каждой частицы вероятность нахождения в верхней полуплоскости равна  $1/2$ , и их одновременные вероятности быть в верхней полуплоскости равны  $1/4$ . Переменные спина, если имеются, не влияют на результат.

Мы видим, что неразличимость частиц вводит эффект интерференции, относящийся к интегралу перекрытия (5.39). В случае бозонов, это приводит к эффективному притяжению частиц, в то время как фермионы с параллельными спинами ощущают эффект расталкивания, как это было сравнено для двух различных частиц (принцип Паули). Для фермионов с противоположной проекцией спина интерференция отсутствует, вследствие ортогональности спиноров, поэтому они ведут себя как различные частицы.

### Задача 5.6

Два идентичных бесспиновых бозона с массами  $m$  образуют молекулу, вследствие потенциального взаимодействия между ними,  $U = (k/2)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$ . Определить спектр стационарных состояний молекулы.

**Решение** Волновая функция движения центра масс по построению симметрична. Волновая функция относительного движения является собственным состоянием гамильтониана

$$H_{rel} = \frac{\mathbf{p}^2}{m} + \frac{1}{2}kr^2, \quad (5.45)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  and  $\mathbf{p}$  — координаты и импульс относительного движения, соответственно, и мы принимаем во внимание, что приведенная масса равна  $m/2$ . Энергетический спектр дается стандартным решением для гармоник изотропного осциллятора, где собственное значение энергии зависит только от главного квантового числа,

$$E(N) = \hbar\omega \left( N + \frac{3}{2} \right), \quad N = n_x + n_y + n_z, \quad \omega = \sqrt{\frac{2k}{m}}. \quad (5.46)$$

В системе многих тел, перестановочная симметрия пространственной волновой функции эквивалентна четности. Для осциллятора это совпадает с  $(-)^N$ ; все орбитальные моменты  $\ell$  при заданном  $N$  имеют ту же четность, что и  $N$ . Только симметричные состояния допустимы для идентичных бозонов, следовательно, разрешенный спектр (5.46) ограничен четными состояниями,

$$N = 0, 2, 4, \dots \quad (5.47)$$

### Задача 5.7

Молекулярный водород  $\text{H}_2$  может существовать в двух формах, пара- и орто-, которые отличаются полным спином ядра  $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$  двух протонов, образующих молекулу, спин ядра равен  $S = 0$ , и  $S = 1$  для пара- и орто-водорода, соответственно. Обсудить возможные состояния молекулы водорода  $\text{H}_2$  с точки зрения статистики идентичных частиц и допустимы квантовые числа [Sch1937].

**Решение** Молекулярная волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки протонов. Электронная и колебательная волновые функции основного состояния симметричны в координатах протона. Функция спина ядра антисимметрична для пара-водорода и симметрична для орто-водорода. Точная полная антисимметрия должна быть обусловлена дополнительной симметрией угловой волновой функции молекулы, симметричной для пара-водорода и антисимметричной для орто-водорода. Двухатомная молекула обладает вращательными спектрами, соответствующими вращению вокруг оси, перпендикулярной к оси молекулы, раздел 1.5.7. Волновая функция ориентации есть просто  $Y_{LM}(\mathbf{n})$ , с единичным вектором  $\mathbf{n}$ , описывающим ориентацию оси молекулы в пространстве. Эта функция приобретает множитель  $(-)^L$  при обмене протонами (для двухчастичной системы это эквивалентно пространственной инверсии). Откуда, только состояния с четным  $L = 0, 2, \dots$  разрешены для пара-водородной молекулы, и только нечетным  $L = 1, 3, \dots$  разрешены для орто-водородной молекулы. Вращательный спектр орто-водорода начинается с  $L = 1$ , что приносит добавочную вращательную энергию в сравнении с основным состоянием пара-водорода,  $L = 0$ . При комнатной температуре, которая выше, чем интервалы вращательной энергии, газообразный водород является статистической смесью двух модификаций с отношением орто:пара=3:1, равным отношению числа магнитных подуровней. При низких температурах, все молекулы релаксируют к пара-водородной фазе. Чтобы сохранить значительную долю орто-водородных молекул при низких температурах, охлаждение должно производиться быстрее, чем время релаксации.

### Задача 5.8

Рассмотрим упругое рассеяние нейтрона молекулами пара- и орто-водорода при очень низкой энергии, когда длина волны нейтрона больше, чем среднее расстояние между протонами молекулы водорода ( $0.75 \text{ \AA}$ ). Показать, что сравнение этих сечений позволяет определить знак длины рассеяния  $n - p$ . Исторически, этот важный эксперимент (*P. Camton и др.*) [Sut1947] по определению знаков длины волны синглета,  $a_s$ , и триплета,  $a_t$ , был выполнен, следуя предложению Дж.Швингера и Е.Теллера [Sch1937]. Знак

амплитуды рассеяния важен для вопроса существования граничного  $n - p$  состояния (отличного от дейтрона).

**Решение** Измерение  $n - p$  сечения рассеяния не дает информации о знаке  $a$ . Более того, эксперимент с неполяризованными нейтронами и протонами может мерить только *усредненное* значение для сечения синглета и триплета : для данного столкновения существует вероятность  $1/4$  иметь пару в синглетном состоянии и  $3/4$  иметь ее в состоянии триплета. Наблюдаемое сечение

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_t. \quad (5.48)$$

Вследствие разницы в допустимых вращательных уровнях, неупругое рассеяние нейтрона различно для пара- и орто-водорода даже без ядерных сил, зависящих от спина.

Для большой длины волны нейтрона, он имеет *когерентное* взаимодействие с двумя протонами, сравни раздел 9.9; мы должны добавить соответствующие *амплитуды* упругого рассеяния. Чтобы получить правильный результат для любого состояния спина, выпишем эффективную длину рассеяния для  $n - p$  взаимодействия как

$$\hat{a} = \frac{1}{2}(1 - \mathcal{P}^\sigma)a_s + \frac{1}{2}(1 + \mathcal{P}^\sigma)a_t. \quad (5.49)$$

Здесь  $a_s$  и  $a_t$  синглетная и триплетная длины  $n - p$  рассеяния, соответственно, а  $\mathcal{P}^\sigma$  оператор обмена для спина (I.22.27). Комбинации  $(1/2)(1 \mp \mathcal{P}^\sigma)$  в (5.49) отражают произвольное состояние его синглетной или триплетной части. Используя явное выражение (I.22.27) оператора спинного обмена, мы получим эффективную длину  $n - p$  рассеяния как оператор, действующий на переменные спина,

$$\hat{a} = \frac{1}{4}[3a_t + a_s + (a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_p)]. \quad (5.50)$$

Теперь мы можем применить это к рассеянию молекулой водорода. В пределе очень низких энергий мы пренебрегаем размером молекулы в сравнении с длиной волны нейтрона. Тогда мы можем просто добавить величины (5.50) для двух протонов и ввести эффективную длину рассеяния, *симметричную* по отношению к протонам,

$$\hat{A} = \hat{a}(1) + \hat{a}(2) = \frac{1}{2}\left[3a_t + a_s + (a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}})\right], \quad (5.51)$$

где  $\mathbf{S}$  — спин ядра молекулы, уравнение (5.23). Учитывая разность фаз, возникающую вследствие перемещения между протонами в молекуле, мы можем получить также члены, которые *антисимметричны* в спинах протонов. Они ответственны за переходы орто-пара и пара-орто. Упругое рассеяние, также как пара-пара и орто-орто возбуждения, управляются симметричными членами.

Упругое рассеяние описывается элементами матрицы  $\langle m' M' | \hat{A} | m M \rangle$ , где  $m, m'$  и  $M, M'$  — начальная и конечная проекции спина для налетающего нейтрона и молекулы, соответственно. Наблюдаемое упругое сечение без поляризации нейтрона или исходного молекулярного газа и без измеряемой конечной поляризации, пропорционально квадрату этого матричного элемента, усредненного по начальным поляризациям и просуммированного по конечным поляризациям,

$$\sigma_{el} \propto \frac{1}{2(2S+1)} \sum_{mMm'M'} |\langle m' M' | \hat{A} | m M \rangle|^2. \quad (5.52)$$

Стандартный путь для вычисления таких сумм следующий. Сумма по начальным и конечным состояниям спина сводится к следу в спиновом пространстве,

$$\sum_{fi} |A_{fi}|^2 = \sum_i \left( \sum_f A_{fi}^* A_{fi} \right) = \sum_i (A^\dagger A)_{ii} = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}). \quad (5.53)$$

Стандартная алгебра спина дает

$$(\vec{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}})^2 = \hat{S}_j \hat{S}_k (\delta_{jk} + i\varepsilon_{jkl}(\sigma_n)_l) = \hat{\mathbf{S}}^2 - (\vec{\sigma}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}). \quad (5.54)$$

След компоненты произвольного углового момента равен нулю. В результате, мы имеем

$$\text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A}) = 2(2S+1) \frac{1}{4} [(3a_t + a_s)^2 + S(S+1)(a_t - a_s)^2]. \quad (5.55)$$

Чтобы сравнить сечения для  $n-p$  и  $n-\text{H}_2$  рассеяний, мы должны подсчитать коэффициенты различных отскоков (приведенные массы),  $m = M/2$  для рассеяния от свободных протонов, и  $m = (2/3)M$  для рассеяния от молекулы. Амплитуда рассеяния пропорциональна приведенной массе, а сечение пропорционально квадрату приведенной массы. Для нейтрона рассеяние вне границы протона в тяжелой молекуле, приведенная масса близка к массе нуклона  $M$ , и сечение может быть в четыре раза больше.

чем для свободного протона. Для обеих модификаций молекулы водорода, мы найдем сечение упругого рассеяния протона как

$$\sigma_{\text{para}} 4\pi \left(\frac{4}{3}\right)^2 \frac{1}{4} (3a_t + a_s)^2 = \frac{16\pi}{9} (3a_t + a_s)^2. \quad (5.56)$$

и

$$\sigma_{\text{ortho}} = \frac{16\pi}{9} [(3a_t + a_s)^2 + 2(a_t - a_s)^2]. \quad (5.57)$$

Сечение для свободных протонов, в тех же обозначениях, равно

$$\bar{\sigma} = 4\pi \left(\frac{3}{4}a_t^2 + \frac{1}{4}a_s^2\right) \frac{\pi}{4} [(3a_t + a_s)^2 + 3(a_t - a_s)^2]. \quad (5.58)$$

Комбинация различных измерений позволяет определить длины рассеяния с их знаками:  $a_t \approx 5.44$  фм,  $a_s \approx -23.72$  фм. Из-за противоположных спинов триплета и синглета длина сечения орто-водорода значительно превышает таковую для пара-водорода. Взглянув снова на нашу иллюстрацию значения длины рассеяния, Рис. 8.5, мы понимаем, что результат находится в соответствии с присутствием граничного состояния триплета (дейтрон) и отсутствием граничного состояния синглета.

## 5.6 Рассеяние тождественных частиц

В духе примера на Рис. 15.1, мы можем рассмотреть процесс рассеяния двух неразличимых частиц. Даже в классической механике мы имеем два случая для регистрации продуктов рассеяния одним и тем же детектором, размещенным (в системе центра масс) под некоторым углом  $\theta$ . В случае I, детектор  $D$  регистрирует частицу  $a$ , рассеянную на угол  $\theta$ ; тогда частица  $b$  может быть зарегистрирована дополнительным детектором при угле  $\pi - \theta$ . В случае II, частица  $a$  рассеяна на угол  $\pi - \theta$  от оси столкновения, в то время как детектор  $D$  находит вместо нее частицу  $b$ , тождественную частице  $a$ .

Наблюдаемое *классическое* сечение - просто сумма элементарных сечений *прямого*,  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ , и *обменного*,  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}'$ , процессов:

$$d\sigma_{\text{cl}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = d\sigma(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + d\sigma(-\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (5.59)$$

В случае центрального поля, дифференциальное сечение зависит только от угла рассеяния  $\theta$ , и (5.59) упрощается до

$$d\sigma_{\text{cl}}(\theta) = d\sigma(\theta) + d\sigma(\pi - \theta), \quad (5.60)$$

поэтому

$$d\sigma_{cl}(90^\circ) = 2 d\sigma(90^\circ). \quad (5.61)$$

Для того, чтобы найти правильный рецепт для *квантового* рассеяния, мы отметим, что правильная (анти)симметричная волновая функция двух тождественных частиц в системе центра масс дается выражением

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (1 \pm \mathcal{P}_{ab}) \psi(\mathbf{r}; s_a, s_b) \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}; s_a, s_b) \pm \psi(-\mathbf{r}; s_b, s_a)], \quad (5.62)$$

где  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$  — релятивистская координата,  $s_a$  а  $s_b$  — переменные спина, и знаки  $+$  и  $-$  относятся к бозонам и фермионам, соответственно. В простом случае, когда пространственные и спиновые переменные разделены,  $\psi(\mathbf{r}; s_a s_b) \rightarrow \psi(\mathbf{r})\chi(s_a, s_b)$ , функция (5.62) может быть записана как

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r})\chi(s_a, s_b) \pm \psi(-\mathbf{r})\chi(s_b, s_a)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\psi_S + \psi_A)(\chi_S + \chi_A) \pm (\psi_S - \psi_A)(\chi_S - \chi_A)], \end{aligned} \quad (5.63)$$

где комбинации центральной симметрии

$$\psi_{S,A} = \frac{1}{2} [\psi(\mathbf{r}) \pm \psi(-\mathbf{r})], \quad \chi_{S,A} = \frac{1}{2} [\chi(s_a, s_b) \pm \chi(s_b, s_a)]. \quad (5.64)$$

Очевидно, подобная (анти)симметризация может быть выполнена также для не факторизованных функций. Таким образом. уравнение (5.63) дает

$$\psi_B(\mathbf{r}, s_a s_b) = \sqrt{2} (\psi_S \chi_S + \psi_A \chi_A) \quad (5.65)$$

в Бозе-случае, и

$$\psi_F(\mathbf{r}, s_a s_b) = \sqrt{2} (\psi_A \chi_S + \psi_S \chi_A) \quad (5.66)$$

в Ферми-случае. Симметрии координатных и спиновых волновых функций всегда дополняют одна другую обеспечивая корректность полной симметрии.

В упругом рассеянии, асимптотический вид пространственной (относительное движение) и спиновой волновых функций дается выражением

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; s_a, s_b) \sim \left[ e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \chi(s_a, s_b), \quad (5.67)$$

где векторы  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{k}' = \mathbf{k}\mathbf{r}/r$  меняют знак при обмене частицами (переход между случаями I и II на Рис. 15.1). Пространственные функции определенной симметрии имеют асимптотику

$$\psi_{S,A} = \frac{1}{2} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \pm e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + \frac{e^{ikr}}{r} [f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \pm f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})] \right\}. \quad (5.68)$$

Например, для *бесспиновых бозонов*, мы имеем просто  $\chi_S = 1$  и  $\chi_A = 0$ , поэтому уравнение (5.65) дает  $\psi_B \sqrt{2} \psi_S(\mathbf{r})$ . Налетающая часть асимптотической волновой функции  $(1/\sqrt{2})\{\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})] + \exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]\}$ , что соответствует потоку  $(1/2)\hbar k/m$  в каждой волне,  $\mathbf{k}$  and  $-\mathbf{k}$ , но нельзя сказать, какая частица движется слева, а какая справа. Рассеянная часть волновой функции равна  $(1/\sqrt{2})(e^{ikr}/r)[f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})]$ , и полный поток рассеянных частиц в заданном направлении является суммой потоков, относящихся к обоим частицам,

$$\mathbf{j}_{\text{scatt}} \cdot d\mathbf{S} = \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})] \right|^2 \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{1}{r^2} dS. \quad (5.69)$$

Как и в стандартной теории рассеяния, мы получаем сечение (нижний индекс 0 указывает спин частицы)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_0}{d\theta} &= |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \\ &= |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + |f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + 2\text{Re} \left( f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(-\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right). \end{aligned} \quad (5.70)$$

В сравнении с классическим результатом (5.59), амплитуды прямого и обменного процессов добавлены когерентно, и мы имеем дополнительный интерференционный член. В частности, для центрального поля мы имеем

$$\frac{d\sigma_0(\theta)}{d\theta} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re} \left( f^*(\theta) f(\pi - \theta) \right), \quad (5.71)$$

и

$$\frac{d\sigma_0(90^\circ)}{d\theta} = 4 \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2. \quad (5.72)$$

Сечение при  $90^\circ$  больше классического результата (5.60) в два раза.

Для *фермионов со спином 1/2*, спиновая ситуация менее тривиальна, поскольку синглет,  $S = 0$ ,  $\chi = \chi_A$ , и триплет,  $S = 1$ ,  $\chi = \chi_S$ , являются допустимыми состояниями спина. Соответственно, мы выбираем дополнительные пространственные функции  $\psi_S$  и  $\psi_A$ .



**ЗАДАЧА 15.9.** Доказать, что синглетное и триплетное сечения для спин-независимых взаимодействий раны

$$\left(\frac{d\sigma_{1/2}}{do}\right)_{S=0} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (5.73)$$

$$\left(\frac{d\sigma_{1/2}}{do}\right)_{S=1} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (5.74)$$

В случае триплета (5.74), знак интерференционного члена противоположен таковому для случая Бозе, и, для центрального поля, сечение для угла рассеяния в  $90^\circ$  обнуляется. Уравнения (5.70) и (5.73) немедленно показывают, что при частичном расширении волны для этих случаев только четные- $\ell$  волны выживают, в то время как только нечетные- $\ell$  волны остаются в случае (5.74).

Если при столкновении двух тождественных фермионов все возможные начальные состояния спина равновероятны, то наблюдаемое сечение есть результат усреднения спина:

$$\frac{d\sigma_{1/2}}{do} = \frac{1}{4} \left(\frac{d\sigma_{1/2}}{do}\right)_{S=0} + \frac{3}{4} \left(\frac{d\sigma_{1/2}}{do}\right)_{S=1}. \quad (5.75)$$

используя (5.73) и (5.74) мы приходим к

$$\frac{d\sigma_{1/2}}{do} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + |f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 - \text{Re} \left( f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(-\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right). \quad (5.76)$$

Для центрального поля это предсказывает

$$\frac{d\sigma_{1/2}(90^\circ)}{do} = \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2 = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\text{cl}}(90^\circ)}{do}. \quad (5.77)$$

Эти результаты позволяют сделать заключение относительно спинов частиц, если силы, например, кулоновская, известны.

### Задача 5.9

Показать, что при столкновении двух *поляризованных* пучков тождественных частиц со спином  $1/2$  имеет место

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{1}{4}(1 - \cos \gamma) |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{1}{4}(3 + \cos \gamma) |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (5.78)$$

где  $\gamma$  — угол между направлениями поляризаций пучков. Для неполяризованных пучков, среднее значение  $\overline{\cos \gamma} = 0$ , и (5.78) приходим к предыдущим результатам уравнений (5.75) и (5.76).

### Задача 5.10

Обобщить результат (5.76) для столкновения неполяризованных пучков тождественных частиц  $s$ .

**Решение** Подсчитывая число спин-симметричных и спин-антисимметричных состояний, мы получим: для целого  $s$ ,

$$\frac{d\sigma_B}{do} = \frac{s+1}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{s}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (5.79)$$

и, для полуцелого  $s$ ,

$$\frac{d\sigma_F}{do} = \frac{s}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \frac{s+1}{2s+1} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (5.80)$$

Отметим, что *полное сечение* теперь должно вычисляться как

$$\sigma = \frac{1}{2} \int do \frac{d\sigma}{do} \quad (5.81)$$

для того, чтобы избежать двойного подсчета актов рассеяния.

## 5.7 Интерферометрия интенсивности

Когда две тождественные частицы прибывают к двум детекторам из удаленного протяженного источника, возникает корреляция, обусловленная тем, что события  $(1, I; 2, II)$ , с прибывшей частицей  $1$  в детектор  $I$  и частицей  $2$  в детектор  $II$ , и  $(1, II; 2, I)$  неразличимы приемным устройством, Рис. 15.2.

Этот принцип был впервые предложен и практически использован *Р. Хенбюри Брайном и Р.К. Твиссом, 1954*, для измерения радиуса звезд с помощью протонных корреляций [НВТ1954] и независимо использован для идентификации частиц (конкретно пионов) образуемых при распадах адронного резонанса [Gol1960]. Ныне, этот метод, *НВТ интерферометрии*, является одним из главных инструментов для изучения особой фазы горячей ядерной материи, создаваемой при столкновении двух тяжелых ультрарелятивистских ядер в исследовании *кварк-глюонной плазмы*. Столкновения служат источником тысяч эмиттируемых частиц, которые могут анализироваться на основе метода событие за событием.

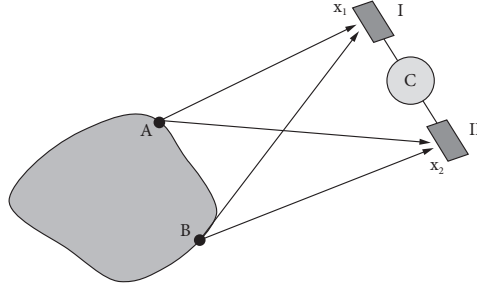


Рис. 5.2. Схема интерферометрии интенсивности

Простейший случай соответствует источнику, который состоит только из двух эмиттеров,  $A$  и  $B$ , Рис. 15.2. Пара детекторов, I и II, регистрируют прибытие двух тождественных частиц с 4-импульсами  $k_1(\omega_1, \mathbf{k}_1)$  и  $k_2(\omega_2, \mathbf{k}_2)$ . Волна, распространяющаяся от эмиттера  $A$  к детектору I, может быть записана как  $\exp[-ik \cdot (x_1 - x_A)]$ , где мы используем четырехмерные обозначения,  $k \cdot x = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ . Каждый акт эмиссии может быть охарактеризован неизвестной фазой  $\alpha_A$  или  $\alpha_B$ . Волна, испущенная эмиттером  $A$  может быть зафиксирована любым детектором, например,

$$A(x_A) \rightarrow (k_1) \rightarrow \text{I}(x_1) : e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_A) + i\alpha_A}. \quad (5.82)$$

В результате, амплитуда вероятности регистрации двух частиц двумя детекторами может быть записана как

$$M(k_1, k_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_A) + i\alpha_A - ik_2 \cdot (x_2 - x_B) + i\alpha_B} \pm e^{-ik_1 \cdot (x_1 - x_B) + i\alpha'_B - ik_2 \cdot (x_2 - x_A) + i\alpha'_A} \right\}. \quad (5.83)$$

Здесь, мы предскажем два возможных типа статистики испущенных частиц и пренебрежимо малый шанс испускания обеих частиц одним и тем же точечным источником.

Вероятность такого коррелированного события пропорциональна

$$W(k_1, k_2) = |M(k_1, k_2)|^2 = \frac{1}{2} [2 \pm f \pm f^*], \quad (5.84)$$

где

$$f = e^{i(k_2 - k_1)(x_A - x_B) + i(\alpha'_A - \alpha_A + \alpha'_B - \alpha_B)}. \quad (5.85)$$

Предполагается, что фазы эмиссии *случайны*, и нужно усреднить  $f + f^*$  по этим фазам. Усреднение приводит к ненулевому результату, если только  $\alpha_A = \alpha'_A$  and  $\alpha_B = \alpha'_B$ . В этой ситуации *хаотических* источников вероятность корреляции сводится к

$$W(k_1, k_2) = 1 \pm \cos\left((k_2 - k_1) \cdot (x_A - x_B)\right) \equiv 1 \pm \cos(q \cdot R), \quad (5.86)$$

где  $q = k_1 - k_2$  – относительный 4-импульс двух частиц, а  $R$  характеризует пространственное и временное расстояние между эмиттерами, т.е. размер и протяженность источника.

Практическое измерение, по существу, подсчитывает долю совпадений для двойного детектора в сравнении с подсчетом от одного. Последний, например, для детектора I, может быть определен в терминах амплитуды

$$m(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-ik(x_1 - x_A) + i\alpha_A} \pm e^{-ik(x_1 - x_B) + i\alpha_B} \right\}. \quad (5.87)$$

Соответствующая вероятность равна

$$w(k) = |m(k)|^2 = \frac{1}{2} \{ 2 \pm (f_1 + f_1^*) \}, \quad f_1 = e^{ik(x_A - x_B) + i(\alpha_A - \alpha_B)}, \quad (5.88)$$

и нормированная *функция корреляции* может быть определена как

$$C(k_1, k_2) = \frac{W(k_1, k_2)}{w(k_1)w(k_2)}. \quad (5.89)$$

Чтобы гарантировать статистическую независимость отдельных включенных множителей в знаменателе, они могут быть взяты от разных событий. При полной хаотичности источников, процедура усреднения независимых фаз  $\alpha_A$  and  $\alpha_B$  дает  $\overline{f_1} = 0$ . Then  $w(k) \rightarrow 1$ , и

$$C(k_1, k_2) = 1 \pm \cos(q \cdot R). \quad (5.90)$$

Здесь мы видим, что *интерференция первого порядка* амплитуд, приходящих от различных источников исчезает, но мы еще наблюдаем *интерференцию второго порядка*, которая объясняет член *интерферометрии интенсивности*.

Различие между двумя типами квантовой статистики становится ясным в уравнении (5.90). Для полностью хаотичных источников, мы имеем при  $q \rightarrow 0$

$$C(q \rightarrow 0) = \begin{cases} 2, & \text{бозоны,} \\ 0, & \text{фермионы,} \end{cases} \quad (5.91)$$

и это показывает *прирост бозонов и фермионную дыру* для тождественных частиц с тем же импульсом,  $k_1 = k_2$ . При больших  $q$  и протяженном источнике размером  $R \gg 1/q$ , усреднение по этому размеру дает корреляционную функцию  $C \rightarrow 1$  для обеих статистик.

### Задача 5.11

Рассмотреть источник с пространственно-временной интенсивностью  $\rho(x)$  и вывести аналог корреляционной функции точечного источника (5.90).

**Решение** Интегрируя по 4-мерному объему источника и вводя Фурье-компоненту

$$\rho_q = \int d^4x e^{i(q \cdot x)} \rho(x), \quad (5.92)$$

мы получим

$$C(q) = 1 \pm |\rho_q|^2. \quad (5.93)$$

При более реалистическом рассмотрении, структуры не полностью хаотичны, и корреляционные функции зависят не только от  $q$ , но также от импульса центра масс двух частиц  $(k_1 + k_2)/2$ .



Гораздо худшая проблема – изобрести новый символ, если мы таким образом убираем не несколько логических трудностей, а уверенность в строгости доказательств.

Ф.Л.Г. Фреге, *Основания арифметики*

## Глава 6

### Изоспин

#### 6.1 Введение изоспина

В стороне от фундаментальных симметрий, связанных с основными свойствами пространства и времени, конкретные взаимодействия обнаруживают дополнительные симметрии, которые, вообще говоря, могут лишь *приближенно* нарушаться другими частями гамильтониана. Если нарушения относительно слабы, имеет смысл начинать с идеальной картины, где симметрия рассматривается как точная, и неинвариантные взаимодействия выключены. Это увеличивает полезность иерархии приближений, способных организовать и упорядочить эмпирические данные.

Основные свойства протона и нейтрона почти одинаковы. Оба они имеют спин  $1/2$  и барионный заряд  $B = 1$ , почти равные массы, и их *сильные взаимодействия* (ядерные силы) почти тождественны. Разница *электромагнитных* свойств зачастую маловажна, поскольку именно сильные взаимодействия управляют наиболее значительной частью ядерной динамики.

Мы приходим к идее считать *нуклоны* двух сортов как различные состояния того же самого сильновзаимодействующего объекта. Этот объект имеет теперь внутреннюю степень свободы, которая определяет его проявления как протона или нейтрона. Таким образом, мы имеем «двухуровневую» систему с двумя базисными состояниями

$$|p\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

Состояния (6.1) имеют определенный электрический заряд,  $Q_p = 1$  and  $Q_n = 0$  в единицах  $e$ , т.е. они являются собственными состояниями оператора заряда  $\hat{Q}$ . Относя к базису (6.1), по аналогии с обычным спином,

как  $z$ -представление, мы можем сказать, что эта «ось квантования» относится к взаимодействию с электромагнитными полями, что позволяет нам различать два зарядовых состояния нуклона.

Назовем пространство, охватываемое базисными спинорами (6.1) *зарядовым пространством*. Все операторы в этом пространстве представлены матрицами  $2 \times 2$ , как в случае спинорных состояний частицы со спином  $1/2$ . Мы можем создать полный набор матриц, действующих в этом двумерном пространстве, используя в качестве базиса единичную матрицу, а матрицы  $\tau_{1,2,3}$  определены в точности как матрицы Паули (I.20.12) в спинорном пространстве. Очевидно, оператор заряда

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + \tau_3). \quad (6.2)$$

Недиагональные операторы, порождают переходы между зарядовыми состояниями нуклона, как это имеет место в бета-распаде, и относятся к слабым процессам. Оператор, повышающий заряд, имеет вид

$$\tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_+|p\rangle = 0, \quad \tau_+|n\rangle = |p\rangle; \quad (6.3)$$

оператор, понижающий заряд

$$\tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = (\tau_+)^\dagger, \quad \tau_-|p\rangle = |n\rangle, \quad \tau_-|n\rangle = 0. \quad (6.4)$$

Операторы  $\tau_\pm$  построены из матриц Паули,

$$\tau_\pm = \tau_1 \pm i\tau_2, \quad (6.5)$$

тем же способом, как повышающий и понижающий операторы  $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$  произвольного оператора углового момента. Мы можем комбинировать матрицы  $\tau_{1,2,3}$  в матричный «вектор»  $\vec{\tau}$ , который полностью аналогичен вектору  $\vec{\sigma}$  спинорных матриц Паули. Однако, нам следует помнить, что ось  $z$  этого пространства фиксирована, будучи определяемой электрическим зарядом, или, вообще говоря, электромагнитными взаимодействиями.

Продолжая аналогию, мы говорим об *изоспине* нуклона

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{1}{2} \vec{\tau}, \quad (6.6)$$

который действует в  $2 \times 2$  зарядовом (изо-) пространстве с естественным базисом (6.1), где основные состояния имеют определенный заряд в качестве



собственного состояния оператора

$$\hat{Q} = \frac{1}{2} + \hat{t}_3. \quad (6.7)$$

Правильное полное произношение сокращения «изоспин» это *изобарический* спин, который объединяет состояния *изобар*, с тем же самым массовым числом, как у протона и нейтрона или ядер с тем же суммарным числом  $A = Z + N$  протонов,  $Z = Q$ , и нейтронов,  $N$ . В ядрах  $A$  совпадает с полным барионным зарядом  $B$  ядер. Невеорно расшифровывать термин «изоспин» как *изотопический*, что имеет отношение к *изотопам*, имеющим одинаковый электрический заряд  $Z$ , но разные массы  $A$  (разные изотопы, относящиеся к одному и тому же химическому элементу). Ядра с одинаковым  $N$  и различными  $A$  называются *изотонами*.

На языке изоспина, протон и нейтрон являются разными проекциями изоспина на ось  $\mathcal{Z}$  изопространства,

$$\hat{t}_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle, \quad \hat{t}_3|n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle. \quad (6.8)$$

Здесь мы используем соглашение, принятое в физике частиц. В ядерной физике традиционно проекции изоспина назначаются разными способами,  $-1/2$  для протона и  $+1/2$  для нейтрона. Тогда для стабильных ядер, имеющих, как правило, больше нейтронов, чем протонов, полная проекция изоспина може быть положительной; оператор заряда (6.7) должен быть переопределен, соответственно, как  $(1/2) - \hat{t}_3$ .

## 6.2 Изоспиновая инвариантность

Мы должны ввести дополнительную степень свободы, связанную с изоспином, без реального увеличения содержания теории. С этой точки зрения, мы получили просто другую классификацию возможных состояний. Настоящая физика войдет в игру с идеей симметрии, лежащей в основе, гамильтониана в изоспиновом пространстве.

*Зарядовая симметрия* соответствует преобразованию обращения знака проекции  $t_3$ :  $p \leftrightarrow n$ . С этой целью можно использовать соответствующий оператор вращения на угол  $\pi$  в изоспиновом пространстве. Мы может макже ввести всевозможные вращения в изопространстве, используя операторы аналогичные (I.20.17), но построенные из  $\tau$ -матриц вместо  $\sigma$ -матриц. Подобные преобразования образуют группу *изоморфную* к группе  $SU(2)$ . Используя основные состояния (6.1) в качестве строительных кирпичей, как

мы делали при рассмотрении теоремы Крамера, раздел I.20.5, мы можем получить мультиплеты (неприводимые представления) с произвольным изоспином, в точности, как это было проделано для кглового момента, по тем же правилам векторной связи. Квантовые числа мультиплетов могут назначаться многоуклонным состояниям.

*Зеркальная симметрия* сильных взаимодействий подразумевает инвариантность при преобразовании зарядовой симметрии. На основании этой симметрии состояния протона и нейтрона должны быть вырождены. Поскольку их электромагнитные свойства различны, это эквивалентно утверждению, что различие их масс обусловлено исключительно электромагнитными взаимодействиями, предположительно кваркового уровня. Преобразование зарядовой симметрии является особым случаем  $SU(2)$  операций. *Зарядовая независимость* ядерных взаимодействий предполагает, что для заданного множества квантовых чисел, обычно относящегося к пространственным и спиновым переменным, ядерные силы одинаковы для любой пары нуклонов,  $nn$ ,  $pp$  или  $np$ . В более смысле, *инвариантность изоспина* предполагает, что сильный гамильтониан инвариантен для *всех* элементов изоспиновой группы. Инвариантность изоспина гамильтониана сильного взаимодействия  $\hat{H}_s$  может быть сформулирована, как закон сохранения для *полного изоспина*  $\hat{\mathbf{T}}$ ,

$$[\hat{\mathbf{T}}, \hat{H}_s] = 0, \quad \hat{\mathbf{T}} = \sum_{a=1}^A \hat{\mathbf{t}}_a = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^A \vec{\tau}_a. \quad (6.9)$$

Если это неверно, стационарные состояния ядра должны содержать определенные квантовые числа изоспина и соответствующую симметрию в зарядовом пространстве. Это, действительно, случай, особенно для легких ядер, где изоспиновая симметрия может быть явно видна в ядерных спектрах, и сечения реакции, а кулоновские эффекты могут рассматриваться как возмущения. В тяжелых ядрах с большим зарядом и большим избытком нейтронов сильное электростатическое поле способно нарушать инвариантность изоспина. Однако, на самом деле, это поле, главным образом, расщепляет энергии стационарных состояний, но, будучи очень гладким внутри ядер, приводит к относительно умеренному перемешиванию уровней с разными изоспинами, делая идею изоспина все еще применимой, даже если это малополезно практически. Позднее мы вернемся к лежащей в основе ее физике, и ее отношению к динамике обычных (спиновых и пространственных) переменных.

### 6.3 Изоспин системы многих тел

Практическое обобщение понятия изоспина для системы многих тел, таких как ядра атомов, впереди. В этом случае мы предполагаем полную вращательную инвариантность (6.9) в изоспиновом пространстве, поэтому стационарные состояния системы многих тел могут быть помечены сохраняющимся квантовым числом  $T$  полного изоспина, которое является изопространственным аналогом полного углового момента, относящимся к собственным значениям «длины» изоспина,  $\mathbf{T}^2 = T(T+1)$ .

Оператор заряда системы дается естественным расширением уравнения (6.7),

$$\hat{Q} = \sum_{a=1}^A \left[ \frac{1}{2} + (\hat{t}_3)_a \right] = \hat{T}_3 + \frac{A}{2}. \quad (6.10)$$

Если мы забудем на минуту об электромагнитных взаимодействиях, которые выделяют ось  $\mathcal{Z}$  и нарушают изотропность изопространства, мы можем классифицировать все ядерные состояния *изомультиплетами*. В случае стационарных состояний, все  $2T+1$  состояния мультиплета могут иметь одну и ту же энергию в пределе точной инвариантности изоспина. Кулоновские эффекты расщепляют мультиплеты, но соответствие между их членами могут еще очевидно служить важным спектроскопическим инструментом. Отметим, что состояния внутри заданного изомультиплета относятся к *различным* ядрам (то же самое  $A$ , но различные  $Z$ ). Они часто называются *изобарическими аналогами* состояний (ИАС). Закон сохранения (6.9) является, конечно, точным для компоненты  $T_3$ , относящейся к электрическому заряду, уравнение (6.10), поскольку все состояния данных ядер (*вертикальная* шкала) имеют одинаковую проекцию

$$T_3 = \frac{1}{2} (Z - N) = Z - \frac{A}{2}. \quad (6.11)$$

Они относятся к разным изомультиплетам (*горизонтальная* шкала).

Так как алгебраические свойства спина и изоспина тождественны, разрешенные значения  $T$  квантованы целыми (полуцелыми) числами в системе с четным (нечетным) числом нуклонов. Это дает рост вырождению мультиплетов с заданным  $T$ , которое содержит  $2T+1$  аналогичные состояния с проекциями  $T_3 = -T, \dots, +T$  в соседних ядрах, или, эквивалентно, с зарядом (6.10). Если ядро состоит из  $Z$  протонов и  $N = A - Z$  нейтронов, мы имеем  $Q = Z$ ,  $T_3 = -(1/2)(N - Z)$  (обычно в стабильных ядрах  $N \geq Z$ ). Тогда

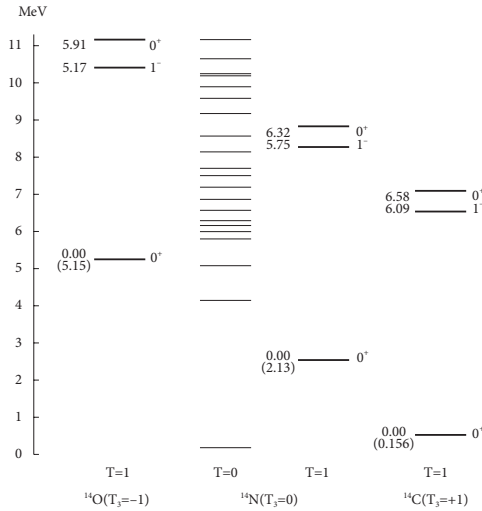


Рис. 6.1. Семейство ядерных изомультиплетов

разрешенные значения изоспина ограничены снизу значением проекции,

$$T \geq |T_3| = \frac{1}{2}|N - Z|. \quad (6.12)$$

Верхняя граница также очевидно определяется максимальной проекцией изоспина в системе из  $A$  нуклонов,

$$T \leq \frac{A}{2}. \quad (6.13)$$

Пример семейства ядерных изомультиплетов дан на Рис. 16.1.

### Задача 6.1

Сравнить ядра  $^{16}_8\text{O}_8$  and  $^{16}_7\text{N}_9$ . Какое из ядер имеет большее число возбужденных состояний?

## 6.4 Изоспин и пространственно-спиновая симметрия

Ядерные силы строго зависят от пространственной и спиновой симметрий рассматриваемого состояния. Сейчас мы можем показать, что инвариантность изоспина и сохранение изоспина физически эквивалентны утверждению, что в ядерных взаимодействиях *пространственно-спиновая*

симметрия волновой функции сохраняется. Мы уже упоминали, что введение изоспина не увеличивает числа степеней свободы ядра, или числа возможных состояний. Это только удобная классификация, связанная с инвариантностью (6.9) сильных взаимодействий. Эта классификация действительно относится к пррестановочной симметрии волновой функции системы многих тел в «обычных» переменных координаты и спина. Если эффекты нарушения инвариантности изоспина, в частности, обусловленные электромагнитными взаимодействиями, могут рассматриваться как малые поправки, мы имеем приближенную изоспиновую симметрию.

Давайте образуем изоспиновые состояния для двухнуклонной системы. Это может быть сделано по точной аналогии со спиновыми состояниями, раздел I.22.3. Для  $A = 2$ , можно построить *изотриплет*  $T = 1$  с подуровнями  $T_3 = -1$  (два нейтрона),  $T_3 = 1$  (два протона), и  $T_3 = 0$  (нейтрон и протон), и *изосинглет*  $T = T_3 = 0$  (нейтрон и протон). Вводя обозначение  $\Omega_{TT_3}$  для изоспиновой волновой функции, мы имеем правильную комбинация  $n - p$  состояний:

$$\Omega_{11} = |p_1 p_2\rangle, \quad \Omega_{1-1} = |n_1 n_2\rangle, \quad \Omega_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1 n_2\rangle + |n_1 p_2\rangle), \quad (6.14)$$

$$\Omega_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1 n_2\rangle - |n_1 p_2\rangle). \quad (6.15)$$

Изотриплетное состояние  $\Omega_{10}$  симметрично по отношению к преобразованию зарядовой симметрии,  $p \leftrightarrow n$ , в то время как изосинглетное состояние  $\Omega_{00}$  антисимметрично. Естественно ввести оператор обмена  $\hat{\mathcal{P}}^\tau$ , который меняет местами зарядовые переменные нуклонов. Его собственные значения в изотриплетном и изосинглетном состояниях равны  $+1$  и  $-1$ , соответственно, поэтому, аналогично случаю спина, можно написать

$$\hat{\mathcal{P}}^\tau = \frac{1}{2}[1 + (\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2)] \Rightarrow \mathcal{P}^\tau = (-)^{T+1}. \quad (6.16)$$

Сейчас мы можем добавить зарядовые переменные к переменным координаты и спина и построить полную двухнуклонную волновую функцию как произведению координатной, спиновой и изоспиновой частей,

$$\Phi(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{SS_z} \Omega_{TT_3}. \quad (6.17)$$

Суть в том, что мы не должны цвеличивать число степеней свободы по сравнению с расщепленным (протон-нейтрон) описанием. Следовательно, должно существовать правило для характерной комбинации множителей пространство-спин и изоспин.

Если нуклоны тождественны, пространство-спиновая часть  $\psi\chi$  антисимметрична, в соответствии со статистикой Ферми. Как видно из (6.14), в этом случае изоспиновая часть  $\Omega$  симметрична, а полная волновая функция (6.17) *антисимметрична* по отношению к полной перестановке *всех* переменных  $\mathcal{P}^r\mathcal{P}^s\mathcal{P}^t$ . Вследствие инвариантности изоспина, силы та же самые для состояния  $\Omega_{10}$ , уравнение (6.14),  $n - p$  системы. Следовательно, мы назначаем состояния  $n - p$  системы, которые антисимметричны в пространственных и спиновых переменных, изоспину  $T = 1$ . У них есть собственные аналоги в случае тождественных нуклонов, а полная волновая функция  $\Phi$  антисимметрична. Произвольные состояния появляются в трехзарядной форме с сигнатурой  $T = 1$ .

Состояния  $n - p$  имеют *симметричную* пространственно-спиновую функцию  $\psi\chi$ , не имеющую аналогов для тождественных нуклонов, и не могут относиться к изотриплету. Необходимая изоспиновая функция в этом случае  $\Omega_{00}$ , которая антисимметрична по зарядовым переменным. В результате, полная функция (6.17) снова *антисимметрична*.

Мы приходим к *обобщенному принципу Паули*: полная двухнуклонная функция антисимметрична по отношению к перестановкам *всех*, пространственных, спиновых, и изоспиновых переменных. Комбинация операторов обмена позволяет выписать этот оператор, как правило выбора для физических состояний с правильной статистикой,

$$\mathcal{P}^r\mathcal{P}^s\mathcal{P}^t = (-)^{\ell+S+1+T+1} = (-)^{\ell+S+T} = -1. \quad (6.18)$$

Возвращаясь к перечислению двухнуклонных состояний, раздел 39.5, теперь мы можем добавить квантовое число изоспина. Все состояния допустимые для тождественных нуклонов, *даже синглеты и нечетные триплеты*, имеют  $T = 1$ ; все оставшиеся состояния, *нечетные синглеты и четные триплеты*, включая состояние дейтрона, имеют  $T = 0$ ,

$$\underline{T = 1}: \quad {}^1s_0, \quad {}^3p_{0,1,2}, \quad {}^1d_2, \dots; \quad (6.19)$$

$$\underline{T = 0}: \quad {}^3s_1, \quad {}^1p_1, \quad {}^3d_{1,2,3}, \dots \quad (6.20)$$

### Задача 6.2

Аргументировать, что если ядерные силы по отношению к пространственной четности и изоспину инвариантны, спин  $S$  системы из двух нуклонов сохраняется.

**Решение** При заданном  $\ell$ , т.е. заданной четности, триплеты и синглеты всегда относятся к разным значениям  $T$ . Если нет случайного вырождения,

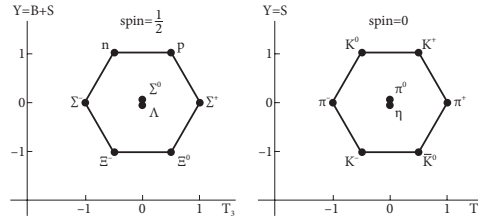


Рис. 6.2. Октет барионов и нонет псевдоскалярных мезонов

стационарное состояние, будучи охарактеризовано определенным изоспином  $T$ , имеет, как следствие, определенный спин  $S$ .

В соответствии с результатом последней задачи, вектикальное перемешивание двухнуклонных состояний, раздел 39.5, не имеет места. Горизонтальное перемешивание возможно и, более того, имеет место в реальности. Единственное граничное состояние двух нуклонов это *дейтрон*, тяжелый изотоп водорода  ${}^2_1\text{H}$ . Такая  $np$  система имеет спин-пространственную волновую функцию, как суперпозицию состояний  ${}^3s_1$  и  ${}^3d_1$ . Отсутствие  $nn$  и  $pp$  аналогов подтверждает *изоскалярный*,  $T = 0$ , характер дейтрона. Можно сказать, поскольку ядерные силы приводят к уникальному граничному двухнуклонному состоянию с такими квантовыми числами, которые не разрешены [см. (6.19)] для  $T = 1$ , существование дейтрона с невозбужденными  $np$ -аналогами, доказывает отсутствие граничных  $nn$  или  $pp$  состояний.

Как теперь ясно из (6.19), сохранение изоспина это просто сохранение пространственно-спиновой симметрии. Для случая двух нуклонов, изоспин и пространственно-спиновая симметрия совпадают в смысле уравнения (6.18). Однако, изоспиновый формализм оказывается исключительно удобным и мощным в проблеме многих тел, где свойства симметрии более сложные. Широко говоря, даже в случае многих тел, состояние с максимальным  $T$  обладает более тождественными нуклонами и, как следствие, проявляет пространственно-спиновую симметрию в меньшей степени. Поскольку ядерные силы обладают притяжением в состояниях с пространственно-спиновой симметрией, ядро имеет основное состояние, соответствующее наименьшему разрешенному изоспину, который равен абсолютному значению проекции,  $T_{g.s.} = |T_3| = |N - Z|/2$ .

## 6.5 Беглый взгляд на более общую картину

Как уже упоминалось, вращательная симметрия в обычном пространстве и изоморфная изобарическая симметрия в зарядовом пространстве описываются преобразованиями группы  $SU(2)$ . Это группа унитарных матриц  $2 \times 2$  с детерминантом, равным 1. Такие матрицы определяют преобразование элементарных объектов, в этом случае двухкомпонентных спиноров, соответствующих спину  $1/2$  или изоспину  $1/2$ , образующих *фундаментальное представление* группы  $SU(2)$ . Объекты с высшими значениями спина или изоспина можно построить комбинацией подходящего числа спиноров. Эта конструкция может быть обобщена на высшие симметрии. Основная симметрия КХД, *уветовая симметрия*, описывается группой  $SU(3)$  преобразований в фундаментальном пространстве цветных *кварков*. *Цвет* вводится как новое квантовое число, которое не следует путать с *ароматом* (характеризующим  $u, d, s$  или более тяжелые кварки). В группе  $SU(2)$  число генераторов равно  $2 \times 2 - 1 = 3$  (независимо от вращений спина). Взаимодействие между кварками требует  $3 \times 3 - 1 = 8$  цветовых состояний для частиц (*глюонов*), изменяющих цвет кварков (мы вычли тождественный оператор). Только «белые», или бесцветные, частицы (*синглеты* по отношению к цветовым  $SU(3)$  преобразованиям, такие как нуклоны (три кварка дополнительных цветов) или мезоны (кварка+антикварк) могут наблюдаться как асимптотически свободные состояния.

В качестве первого шага, идея изоспиновой инвариантности может быть естественным образом расширена до *высших* адронных мультиплетов, Рис. 16.2. Например, сильные взаимодействия инвариантны при преобразованиях внутри триплета *пионов*,  $\pi^{+,0,-}$  с разными электрическими зарядами. Квантовые числа, такие как нулевой спин и отрицательная внутренняя четность, одинаковы для всех пионов. Пионы классифицируются как остояния с изоспином  $T = 1$  и  $T_3 = +1, 0, -1$ , соответственно. И вновь, электромагнитные эффекты приводят к слегка различным массам нейтральных и заряженных пионов и различным временам жизни. Для нейтрального пиона, главным каналом распада служит электромагнитный распад на два протона, который невозможен для заряженных пионов. Распад заряженных пионов происходит значительно медленнее с помощью слабого взаимодействия в мюон (более тяжелый аналог электрона) и соответствующее мюонное нейтрино, например,  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ \nu_\mu$ , уравнение (38.36).

Конечно, абсолютное сохранение электрического заряда не разрешает существования таких систем, как суперпозиция протона и нейтрона (так называемое *правило супервыбора*). однако, все члены изомультиплетов с



разными электрическими зарядами (6.10) для заданного барионного заряда могут существовать и должны иметь почти тождественные свойства по отношению к ядерным силам. Хотя электромагнитные, прежде всего, кулоновские, эффекты нарушения изоспиновой инвариантности, все еще во многих случаях показывают хорошую точность и дают руководство для реконструкции гамильтониана сильных взаимодействий.

Для мезонных триплетов, таких как *пионный*,  $Q = T_3$  (симметрия по отношению к центру мультиплета). Зарядовая симметрия сдвигается барионным зарядом  $B$ , так что для нуклонов ( $B = A = 1$ ) и мезонов ( $B = 0$ ), общее правило идентификации членов мультиплетов может быть записано как

$$Q = \frac{B}{2} + T_3. \quad (6.21)$$

*Барионный октет* объединяет нуклоны и гипероны, все они фермионы со спином  $1/2$ . Возбужденные нуклоны, например, *гипероны*, имеют дополнительные квантовые числа.  $\Sigma^{+,0,-}$ -гипероны характеризуются, раздел 38.9, *странностью*  $S = -1$  (не путать со спином  $s = 1/2$  для всех членов октета), и роль барионного заряда в таких соотношениях, как (6.21) теперь играет *гиперзаряд*  $Y = B + S$ . Для нуклонов мы имеем  $S = 0$ ,  $Y = B = 1$ , для  $\Lambda$  и  $\Sigma$  гиперонов  $S = -1$ ,  $Y = 0$ ). *Каскадные гипероны*,  $\Xi^-$  and  $\Xi^0$ , обладают странностью  $S = -2$  и гиперзарядом  $Y = -1$ . В общем определении,

$$Q = \frac{Y}{2} + T_3. \quad (6.22)$$

Каоны (снова без барионного заряда,  $B = 0$ , м, следовательно  $T_3 = Q - S/2$ ) образуют два изодублета,  $(K^0, K^+)$  со странностью  $S = Y = +1$  и  $(K^-, \bar{K}^0)$  с  $S = Y = -1$ . В центральной части, добавлен изоскалярный  $\eta$ -мезон,  $T = S = Y = 0$ . Все эти частицы *псевдоскаляры*, имеют нулевой спин и отрицательную четность.

Существование семейств, таких как на Рис. 16.2, объясняется *теорией кварков*. Фермионы барионного октета имеют трехвалентные кварки, объединенный в полный спин  $1/2$ ; присутствие *моря пар кварк-антикварк* также возможно. Концепция изоспиновой  $SU(2)$  инвариантности обобщена до *высших симметрий* в КХД, где это относится к тому факты, что два легчайших кварка,  $u$  (up) и  $d$  (down), имеют одинаковые массы и взаимодействия. Верхняя строка в барионном октете дает нуклоны, построенные только с этими валентными кварками. Каждый шаг вниз заменяет один из этих кварков на странный кварк с  $S = -1$ . Более того, в приближении пренебрежения различием  $u, d$  кварков из  $s$  (странный) кварк,

носитель странности, у нас уже были три фундаментальных объекта, таких, что соответствующая группа (приближенной) инвариантности является атоматом- $SU(3)$ , или даже  $SU(6)$ , если взаимодействия не зависят от спина. Мезонный октет (естественно, нонет с включением  $\eta$ -мезона) построен с парой валентных кварка и антикварка с полным нулевым спином. Верхняя строка содержит  $u$  или  $d$  кварк и  $\bar{s}$ , что дает  $S = +1$ . Центральная трока не содержит странных кварков, нижняя имеет  $s$ -кварк и  $\bar{u}$  или  $\bar{d}$  антикварк. Семейство более тяжелых частиц может быть построено аналогичным образом, изменением связи кварковых спинов, добавляя высшие орбитальные функции и/или более тяжелые кварки. Здесь мы не будем вдаваться в детали кварковой теории.

## 6.6 Соотношения между сечениями

Инвариантность изоспина ядерных сил расширяется на все адроны, построенные из  $u$  и  $d$  кварков, позволяет предсказать соотношения между сечениями разных реакций с участием частиц, которые относятся к заданным изобарическим мультиплетам. Сравнение реакций должно быть взято в тождественном центре масс, энергий и углов рассеяния, для одинаковых состояний спина.

В качестве примера, рассмотрим реакции включающие триплет ( $T = 1$ ) пионов,  $\pi^{+,0,-}$ . Уже из *зарядовой симметрии*, не принимая во внимание инвариантность полного изоспина, можно сделать некоторые предсказания. Это преобразование инвертирует  $t_3$ , изменяя  $p \leftrightarrow n$ ,  $\pi^+ \leftrightarrow \pi^-$ ,  $\pi^0 \leftrightarrow \pi^0$ . Это немедленно приводит к равенству сечения для образования  $\pi^+$  и  $\pi^-$  в  $np$  столкновениях

$$p + n \rightarrow n + n + \pi^+, \quad p + n \rightarrow p + p + \pi^-. \quad (6.23)$$

В более сложных случаях нам нужно использовать инвариантность полного изоспина. Исходное и конечное состояния представляются как суперпозиция собственных функций изоспина  $\Omega_{TT_3}$ .

### Задача 6.3

Предполагая изоспиновую инвариантность, сравнить сечения образования пиона и дейтрона в  $np$  и  $pp$  столкновениях,

$$(a) \quad n + p \rightarrow \pi^0 + d; \quad (b) \quad p + p \rightarrow \pi^+ + d. \quad (6.24)$$

**Решение** Поскольку дейтрон имеет  $T = 0$ , в обоих случаях конечное состояние имеет изоспин  $T_f = T_\pi = 1$ . Откуда, реакции возможны только

для начального изоспина  $T_i = 1$ .  $pp$  система всегда имеет  $T = 1$ , в то время как, в соответствии с (6.14) и (6.15),

$$|pn\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Omega_{10} + \Omega_{00}). \quad (6.25)$$

Доля состояния  $T = 1$  равна лишь  $1/2$ . Поскольку при  $T = 1$  обе реакции должны иметь равные амплитуды вследствие изоспиновой инвариантности (конечные состояния представляют различные проекции  $T = 1$ , в то время как физика сильных взаимодействий не зависит от ориентации в изопространстве), мы предсказываем  $\sigma_b = 2\sigma_a$ .

Действительно, соотношения между реакциями в том же изоспиновом канале определяются CGC, которая та же самая для изоспина  $SU(2)$  группы, как и для углового момента  $SU(2)$ . В случае (6.25),  $CGC=1/\sqrt{2}$ . Существует простой способ соединить различные реакции между членами тех мультиплетов, избегая вычисления CGC, так называемая *фабрика Смюш-кевича*. В качестве примера рассмотрим все возможные зарядовые каналы для пион-нуклонного рассеяния (без и с обменом зарядов):

	+	0	-
1) $\pi^+p \rightarrow \pi^+p$	1	0	1
2) $\pi^0p \rightarrow \pi^0p$	0	2	0
3) $\pi^0p \rightarrow \pi^+n$	1	0	1
4) $\pi^-p \rightarrow \pi^-p$	1	0	1
5) $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$	0	2	0

(6.26)

Реакции  $1' - 5'$  зарядовые отражения реакций  $1-5$ , и имеют те же самые сечения,  $\sigma_i = \sigma_{i'}$ . Теперь мы представим, что все реакции (6.26) происходят одновременно внутри черного ящика, начиная с полностью *изоспин-поляризованного* состояния, когда все члены нуклонного и пионного мультиплетов равноправны, т.е. все начальные изоспиновые проекции равновероятны. Вследствие изоспиновой инвариантности, в зарядовом пространстве нет направления, которое может быть выделено как результат реакций — состояние будет оставаться изоспино-неполяризованным. Это означает, что заселенность разных мезонных состояний будет оставаться одинаковой. В свою очередь, это возможно, только если сечения удовлетворяют условию

$$\sigma_1 + \sigma_3 + \sigma_4 = 2(\sigma_2 + \sigma_5). \quad (6.27)$$

Вдобавок, мы можем вспомнить *принцип детального равновесия*, раздел 34.3, который говорит нам, что  $\sigma_3 = \sigma_{3'} = \sigma_5$ , и, окончательно, мы приходим к нетривиальному результату

$$\sigma_2 = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_4 - \sigma_5). \quad (6.28)$$

Из-за быстрого распада  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ , мы не можем на практике осуществить реакции 2 и 3. Тем не менее, мы можем предсказать из сечения в терминах экспериментально наблюдаемых реакций с заряженными пионами.

#### Задача 6.4

Выведем соотношения между сечениями образования пионов в ядерных столкновениях,

$$\sigma(np \rightarrow np\pi^0) + \sigma(pp \rightarrow pp\pi^0) = \sigma(np \rightarrow pp\pi^-) + \frac{1}{2}\sigma(pp \rightarrow pn\pi^0). \quad (6.29)$$

Более детальные результаты могут быть получены при явном использовании CGC применительно к состояниям изоспина. Возьмем в качестве примера пион-нуклонное рассеяние. Пион+нуклонная система может иметь  $T = 1/2$  с  $T_3 = \pm 1/2$  and  $T = 3/2$  с  $T_3 = \pm 1/2, \pm 3/2$ . В предположении точной изоспиновой инвариантности ядерных сил,  $T$  сохраняется. Следовательно, существуют только две независимые амплитуды  $f_T$  для  $\pi N$  рассеяния,  $f_{1/2}$  и  $f_{3/2}$ .

#### Задача 6.5

Выразить наблюдаемые сечения заряженных пионов, рассеивающихся нуклонами через амплитуды  $f_{1/2}$  and  $f_{3/2}$  для рассеяния в состояниях с определенным  $T$ .

**Решение** Достаточно рассмотреть только рассеяние пионов протонами, поскольку рассеяние нейтронами может быть получено с помощью зарядовой симметрии (в действительности, нет чисто нейтронных мишеней, и информация о рассеянии нейтронами может быть извлечена неявно из экспериментов на ядрах, содержащих как протоны, так и нейтроны). Для связи изоспина 1 пионов с нуклонным изоспином  $1/2$ , мы используем CGC, найденную в *Задаче I.22.1* для вектора, связывающего орбитальный момент 1 и спин  $1/2$ , и образующего пион-нуклонные состояния, как правильную комбинацию состояний  $\Omega_{TT_3}$  с определенным изоспином:

$$|\pi^+ p\rangle = \Omega_{3/2\ 3/2}; \quad |\pi^- n\rangle = \Omega_{3/2\ -3/2};$$

$$\begin{aligned}
|\pi^- p\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2-1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2-1/2}; & |\pi^0 n\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2-1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2-1/2}; \\
|\pi^0 p\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2 1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2 1/2}; & |\pi^+ n\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2 1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2 1/2}.
\end{aligned}
\tag{6.30}$$

Отсюда, мы определим амплитуды перехода (элементы матрицы рассеяния),

$$M(\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p) = \langle \Omega_{3/2 3/2} | \hat{f} | \Omega_{3/2 3/2} \rangle = f_{3/2}; \tag{6.31}$$

$$\begin{aligned}
M(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n) &= \left\langle \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{3/2-1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{1/2-1/2} \left| \hat{f} \right| \sqrt{\frac{2}{3}} \Omega_{3/2-1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}} \Omega_{1/2-1/2} \right\rangle \\
&= \frac{\sqrt{2}}{3} \left[ \langle \Omega_{3/2-1/2} | \hat{f} | \Omega_{3/2-1/2} \rangle - \langle \Omega_{1/2-1/2} | \hat{f} | \Omega_{1/2-1/2} \rangle \right] = \frac{\sqrt{2}}{3} (f_{3/2} - f_{1/2});
\end{aligned}
\tag{6.32}$$

$$M(\pi^- p \rightarrow \pi^- p) = \frac{1}{3} (f_{3/2} + 2f_{1/2}). \tag{6.33}$$

Сечение пропорционально  $|M|^2$ .

Эксперименты показывают, что все состояния  $\pi N$  рассеяния имеют резковыраженный явный резонанс с центром при энергии пиона около 190 МэВ. Резонансные сечения относятся как

$$\sigma(\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p) : \sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n) : \sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^- p) = 9 : 2 : 1. \tag{6.34}$$

Это точно то, что должно наблюдаться, если взаимодействие в состоянии  $T = 3/2$  намного сильнее в резонансной области, чем в состоянии  $T = 1/2$ ,  $f_{3/2} \gg f_{1/2}$ . Мы заключаем, что при этой энергии пион-нуклонное взаимодействие осуществляется, главным образом, через промежуточное состояние с  $T = 3/2$ . Анализируя угловое распределение рассеянных частиц, было открыто, что угловой момент этого состояния также равен  $J = 3/2$  (« $\Delta$ -резонанс»). Резонанс может быть описан формулой Брейта–Вигнера с энергией  $E \approx 1236$  МэВ и шириной  $\Gamma \approx 120$  МэВ. Мы видим, что существует квазистационарное состояние, называемое  $\Delta$ -резонансом, или *дельта-изобарой*, как спин-изоспиновое возбуждение нуклона с квантовыми числами  $J = 3/2$  и  $T = 3/2$ . На языке кварков, это состояние с

параллельными спинами и изоспинами трех кварковых составляющих. В соответствии с изоспиновой инвариантностью, должно быть  $2T + 1 = 4$  состояний с проекциями  $T_3 = \pm 1/2, \pm 3/2$  и электрическими зарядами, определенными в соответствии с (6.10) из  $T_3 = Q - B/2 = Q - 1/2$ ,

	$\Delta^{++}$	$\Delta^+$	$\Delta^0$	$\Delta^-$	
	$(\pi^+ p)$	$(\pi^0 p), (\pi^+ n)$	$(\pi^0 n), (\pi^- p)$	$(\pi^- n)$	
$T_3$	$+3/2$	$+1/2$	$-1/2$	$-3/2$	

(6.35)

### Задача 6.6

Установить изоспин конечного состояния в распаде  $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ .

**Решение** Этот распад управляется слабыми взаимодействиями и не сохраняет изоспин. Однако, пространственная структура *конечного* состояния (спины равны нулю) определяет его изоспин. В двухпионной системе вектор связи разрешает для изоспинов  $T = 0, 1, 2$ . Действительное значение  $T_3 = +1$  исключает  $T = 0$ . В случае  $T = 1$ , волновые функции двух пионов могут быть антисимметричны в зарядовом пространстве, как это должно быть для вектора, связывающего два вектора в их векторное произведение, см. раздел I.16.9. Из-за Бозе статистики, пионы (спин 0) рассматриваются в обобщенном смысле как тождественные частицы различных зарядовых состояний, полная волновая функция (пространственная+зарядовая) должна быть симметричной, могло бы требовать пространственную волновую функцию для  $T = 1$  быть антисимметричной. Это эквивалентно отрицательной четности двухпионного состояния, т.е. нечетного значения орбитального момента  $\ell$ . Однако,  $\ell$  должно быть равно нулю вследствие сохранения орбитального момента (спин  $K^+$  равен нулю). Из-за этого противоречия, единственная возможность есть  $T = 2$ .

### Задача 6.7

Показать, что для любого изоспинового инвариантного нуклон-нуклонного взаимодействия, неравенство между сечениями  $n-p$  и  $p-p$  при  $90^\circ$  должно выполняться,

$$\frac{d\sigma_{np}(\pi/2)}{d\omega} \geq \frac{1}{4} \frac{d\sigma_{pp}(\pi/2)}{d\omega}. \quad (6.36)$$

**Решение** Имеются две изоспиновые амплитуды,  $T = 1$  для четного спинового синглета и нечетного триплета, и  $T = 0$  для нечетных синглетов и четных триплетов. Но нечетные состояния не дают вклада при  $90^\circ$ . Для  $p-p$  рассеяния,  $d\sigma_{pp}/d\omega = d\sigma_{T=1}/d\omega$  для любого угла. Для  $n-p$  случая,

мы имеем  $(\theta^\circ)$  спиновые триплеты при  $T = 0$  и спиновые синглеты при  $T = 1$ ; для неполяризованных пучков, синглет и триплет входят со своими статистическими весами. Компоненты с  $T = 1$  одинаковы при  $p - p$  рассеянии и при  $n - p$  рассеянии если спиновая инвариантность имеет место. Это приводит к неравенству (6.36).





Философия, написанная в этой великой книге, Вселенной, которая остается непрерывно открытой нашему взору. Но книга не может быть понята, пока вначале учишься понимать язык и читать буквы, из которых она составлена. Она написана на языке математики. . .

Г. Галилей, *Исследователь*,  
цитируется в С. Дрейк, *Открытия и  
мнения Галилея*

## Глава 7

### Вторичное квантование

#### 7.1 Представление числа занятости

В разделе 15 мы рассмотрели общие свойства проблемы многих тел в квантовой механике и квантовой статистике. Незразличимость тождественных частиц предполагает квантовую интерференцию между различными путями достижения одного и того же конечного состояния. Это статистическая интерференция, или даже кинематическая, явление, которое проявляется безотносительно взаимодействия между частицами. Возникающая перестановочная симметрия разрешает только два класса волновых функций, полностью симметричные и полностью антисимметричные по отношению к перестановкам всех квантовых чисел двух тождественных частиц. Соответственно, мы имеем два типа возможных статистик и два сорта частиц, бозоны и фермионы.

Волновые функции симметричны при перестановках бозонных переменных и антисимметричны при перестановках фермионных. Для любого состояния различимых частиц, можно получить его двойник для тождественных частиц, делая симметризацию или антисимметризацию исходной функции. (Конечно, попытка симметризовать функцию, которая уже антисимметрична, приведет к нулевому итогу.) Результатом является, например, детерминант Слетера для невзаимодействующей Ферми-системы. Его аналог для Бозе-системы, «постоянный», образован как детерминант, но со всеми членами, входящими со знаком  $+$ . С ростом числа частиц, это становится все более сложной задачей работать с такими волновыми функциями в обычном координатном (или импульсном) представлении.

Другой важный момент в том, что во многих случаях мы имеем дело с ситуациями, когда число частиц не фиксировано. Чтобы описать процессы

с переменным числом частиц, нам нужно обобщить концепцию квантовомеханического пространства Гильберта. Гильбертово пространство для заданного числа частиц является только сектором в более обширном *пространстве Фока*, которое включает секторы с различным числом частиц всех типов. Это приводит к абсолютной необходимости в релятивистской квантовой теории, где число частиц до известной степени зависит от масштаба рассмотрения. Следовательно, это очень трудно разработать формализм, который мог бы автоматически навязывать симметрию состояний в соответствии с типом статистики и, в то же время, позволять рассматривать процессы с переменным числом частиц.

Простейший способ делать это состоит в том, чтобы использовать *представление числа занятости*. Пусть  $|\lambda\rangle$  произвольный полный набор *одночастичных* состояний, характеризующихся квантовыми числами  $(\lambda)$ , например,  $(\mathbf{p}\sigma)$  для электронов, иписываемых импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma$ . На этой стадии нам не нужно знать гамильтониан, урпаляющий динамикой. Мы используем только *полноту* множества  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что состояния  $|\lambda\rangle$  ортонормированы,

$$(\lambda|\lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (7.1)$$

хотя это ограничение может также быть убрано, потому что можно работать с неортонормированными множествами также. Символ Кронекера в (7.1), как обычно, должен пониматься как  $\delta$ -функция Дирака для непрерывных квантовых чисел  $\lambda$ . Конечно, на практике некоторые множества  $|\lambda\rangle$  могут быть более удобными, чем другие. Иногда, особенно в приложении к конечным системам (атомы, молекулы, ядра), состояния  $|\lambda\rangle$  будут называться орбитами, или *орбитальями*.

Теперь мы образуем состояния *многих тел* states

$$|\{n_\lambda\}\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_\lambda, \dots\rangle \quad (7.2)$$

введением множеств *целых*  $n_\lambda$ , которые показывают, сколько частиц на каждой орбите  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что орбиты  $|\lambda\rangle$  *упорядочены* каким-то (произвольным) способом, и они всегда появляются в таком порядке в описании состояния многих тел (7.2). Чтобы провести различие между состояниями одной частицы и многих тел, мы используем круглые скобки в определении для первых (позже также и для двухчастичных состояний) и угловые скобки для последних. Числа  $n_\lambda$  являются *числами занятости* в данном базисе  $|\lambda\rangle$ . В соответствии с типом статистики, они могут быть лишь 0 и 1 для Ферми-статистики и произвольными неотрицательными

числами для Бозе-статистики. Нам понадобится формализм, который будет удовлетворять этим требованиям автоматически.

Мы включим в рассмотрение все состояния в различном полным числом частиц

$$N = \sum_{\lambda} n_{\lambda}. \quad (7.3)$$

‘Это означает, что мы работаем в пространстве Фока. С числами занятости, выбранными в соответствии с типом статистики, бесконечное множество состояний многих тел (7.2) является полным в пространстве Фока. Вследствие тождественности частиц, нам не нужно указывать, какие частицы занимают орбиту  $|1\rangle$ , какие занимают орбиту  $|2\rangle$  и так далее. Поскольку все свойства одночастичных орбит известны, представление числа занятости содержит полную информацию. В самом деле, любое состояние многих тел может быть разложено по полному множеству (7.2) состояний с определенными числами занятости, а затем мы можем ответить на вопрос, относящийся к распределению координат, импульсов, вероятностей перехода или какой-либо иной. В произвольном состоянии многих тел, выраженном как суперпозиция состояний (7.2), *ожидаемые значения* занятости орбиталей, вообще говоря, не являются целыми.

## 7.2 Введение во вторичное квантование

Единственные переменные в представлении числа занятости, основанные на орбитальной базе  $|\lambda\rangle$ , это целые  $n_{\lambda}$ , и квантовые операторы, которые должны быть определены как действующие на эти «координаты». Простой пример того, как это можно сделать, дан, следуя примитивным аргументам.

Рассмотрим *невозмущающую* систему частиц, где гамильтониан является суммой независимых одночастичных гамильтонианов,

$$\hat{H} = \sum_a \hat{\varepsilon}(a). \quad (7.4)$$

Здесь суммирование производится по частицам, и мы не задаем их число, поскольку в каждом *векторе* пространства Фока с заданным значением  $N$  гамильтониан имеет вид (7.4). Действительно, он может иметь тот же вид также для различных частиц.

Если частицы тождественны, то все операторы  $\hat{\varepsilon}$  одинаковы. Выбирая орбиты  $|\lambda\rangle$  как собственные функции одночастичного гамильтониана  $\hat{\varepsilon}$ ,

$$\hat{\varepsilon}|\lambda\rangle = \varepsilon_{\lambda}|\lambda\rangle, \quad (7.5)$$

полная энергия системы в состоянии многих тел (7.2)

$$E = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} n_{\lambda}. \quad (7.6)$$

Другими словами, состояние многих тел является собственным состоянием полного гамильтониана, выраженного, вместо уравнения (7.4), в терминах операторов  $\hat{N}_{\lambda}$  чисел занятости с целочисленными собственными значениями  $n_{\lambda}$ ,

$$\hat{N}_{\lambda}|\{n_{\lambda}\}\rangle = n_{\lambda}|\{n_{\lambda}\}\rangle, \quad \hat{H}|\{n_{\lambda}\}\rangle = E|\{n_{\lambda}\}\rangle. \quad (7.7)$$

Это лишь то, что мы хотим: оператор, действующий на числа занятости. В этом случае операторы (7.7) *диагональны*, они не изменяют чисел  $n_{\lambda}$ . Например, для свободного движения, когда  $\lambda \rightarrow (\mathbf{p}, \sigma)$ , гамильтониан это просто то же, что и кинетическая энергия, а полная энергия является суммой индивидуальных энергий, взятая по занятым «орбиталям» (плоским волнам).

Если ты мы взяли другой базис  $|\nu\rangle$  как наше множество одночастичных орбит, оператор  $\hat{\varepsilon}$ , вообще говоря, не должен был быть диагональным,

$$\hat{\varepsilon}|\nu\rangle = \sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'\nu} |\nu'\rangle. \quad (7.8)$$

Если мы возьмем частицу на орбите  $|\nu\rangle$ , действие  $\hat{\varepsilon}$  переносит эту частицу на другую орбиту  $|\nu'\rangle$  с амплитудой переноса, заданной матричными элементами  $\varepsilon_{\nu'\nu}$  оператора  $\hat{\varepsilon}$  в этом базисе. Таким образом, в новом базисе оператор  $\hat{\varepsilon}$  более не диагонален. Например, в стандартном представлении ашпроксимации тесной связи электронов в кристалле, основные состояния находятся на этих локальных орбитах, несмотря на то, что кинетическая энергия действует как оператор перемещения, движущий частицы с одного места на другое. Базис делокализованных волн Блоха подходит для диагонализации кинетической энергии.

Полный гамильтониан  $\hat{H}$  в пространстве Фока также не диагонален в базисе многих тел  $|\{n_{\nu}\}\rangle$ , построенном аналогично (7.2), но с использованием других орбит  $|\nu\rangle$  вместо  $|\lambda\rangle$ . Однако, он все еще *блочко диагональный* по отношению к секторам пространства Фока, если он сохраняет число частиц. Отметим, что гамильтониан невзаимодействующей системы (7.4) содержит только члены, которые могут менять орбиту не более чем одной частицы: это *оператор одного тела*.

Проблема работы в базисе, где гамильтониан не диагонален, относится к тому факту, что исходное «физическое» состояние (7.2), будучи разложено

по полному множеству состояний  $\{|n_\nu\rangle\}$  обязано быть их суперпозицией с *нецелыми* средними занятостями. В исходном базисе  $|\lambda\rangle$  мы имеем целые числа занятости. Но произвольная орбита  $|\lambda\rangle$  является суперпозицией орбит  $|\nu\rangle$ . Даже для одной частицы в состоянии  $|\lambda\rangle$ , орбиты  $|\nu\rangle$  заполнены с дробными вероятностями. Делая переход действием некоторого оператора, следует подсчитывать эти вероятности, поскольку они значительно влияют на результаты. Например, если состояние фермиона уже заполнено на 90%, это должно не позволить другому фермиону занять эту орбиту с той же легкостью, как это могло бы быть для пустого состояния. Нам нужно транслировать все операторы в представление числа занятости таким образом, чтобы результат их действия явно отражал существовавшие занятости орбит. Нам также нужно не только перемещать частицы между орбитами, но создавать и аннигилировать, меняя их полное число (*переход между секторами* в пространстве Фока).

Подходящие инструменты даны построением *операторов создания и аннигиляции*. Мы уже имели подобный опыт: для квантового осциллятора, этот аппарат обсуждался детально в отношении к алгебре Гейзенберга-Вейля, раздел I.11.8; было обобщено для многих фотонных мод электромагнитного поля в разделе 14.3. Интерпретируя различные состояния поля, как имеющие различное число квантов, мы могли генерировать произвольное полное их число. Вследствие их неразличимости, кванты гармонического осциллятора, так же как фотоны, являются бозонами, и это то, откуда мы начинали. Но аналогичное описание возможно также для фермионов.

## 7.3 Статистика Бозе

Операторы создания и аннигиляции позволяют нам работать в представлении числа занятости, где состояния характеризуются числом квантов в разных модах. В системе многих тел тождественных частиц, аналог подобного подхода называется *вторичным квантованием*. Для наших целей достаточно понимать, что этот математический переход от представления, где базичные векторы являются обычными волновыми функциями Шрёдингера  $\Psi(1, 2, \dots, N)$  с числовыми аргументами, комбинирующими все одночастичные переменные, к базису состояния многих тел уравнения (7.2) в представлении числа занятости, который использует определенный одночастичный базис  $|\lambda\rangle$ . Только в релятивистской теории поля вторичное квантование приобретает более глубокое значение.

Процедура вторичного квантования зависит от типа статистики частиц. Для бозонов, формализм практически совпадает с тем, что мы использова-

ли для осцилляторов. Мы определяем базис одной частицы  $|\lambda\rangle$  и строим состояния (7.2) со всеми возможными занятостями  $n_\lambda$ , которые в случае Бозе могут быть произвольными неотрицательными числами. Базис многих тел  $|\{n_\lambda\}\rangle$  нестационарен во взаимодействующей системе, но все еще неполон, и подсчитывает правильно для перестановочной симметрии.

Для каждого одночастичного состояния  $|\lambda\rangle$ , мы вводим аннигиляцию,  $\hat{a}_\lambda$ , и создание,  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , операторов, которые действуют на числа занятости, аналогично тому, что мы использовали для гармонического осциллятора,

$$\begin{aligned}\hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda} |\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= \sqrt{n_\lambda + 1} |\dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (7.9)$$

В этих уравнениях, числа занятости  $n_{\lambda'}$  всех орбит с  $\lambda' \neq \lambda$  неизменны. Мы также определим оператор числа занятости, уравнение (7.7),

$$\hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda \quad (7.10)$$

для каждой орбиты  $|\lambda\rangle$ . Числа  $n_\lambda$  в определении состояний (7.2) являются собственными значениями операторов (7.10). Затем мы воспроизведем все требуемые соотношения операторов, включая правила коммутации, аналогично (I.11.108) и (I.11.113).

Мы предположим, что операторы для *различных* мод  $\lambda$  коммутируют друг с другом. Тогда полная алгебра операторов може быть записана как

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}] = [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (7.11)$$

Операторы числа заполнения (7.10) удовлетворяют лестничной структуре, и их собственные значения – неотрицательные целые. Полное число частиц не фиксировано, и мы включим пространство Фока целиком со всеми возможными значениями полного оператора числа частиц

$$\hat{N} = \sum_\lambda \hat{N}_\lambda. \quad (7.12)$$

Аналогично (I.11.121), нормированный вектор состояния может быть построен явно созданием частиц из состояния вакуума  $|0\rangle \equiv |\{n_\lambda = 0\}\rangle$ ,

$$|\{n_\lambda\}\rangle = \prod_\lambda \frac{1}{\sqrt{n_\lambda!}} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle. \quad (7.13)$$

Все операторы аннигиляции дают нуль, действуя на вакуумное состояние. На основании коммутатора (7.11), все операторы создания (7.13) перестановочны. Это означает, что волновая функция симметрична по отношению к перестановкам, как это и должно быть для Бозе-статистики.

## 7.4 Ферми-статистика

Здесь, возможные числа занятости  $n_\lambda$  могут быть только 0 и 1. Чтобы удовлетворить этому требованию, мы введем самопряженные аннигиляцию,  $\hat{a}_\lambda$ , и создание,  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , операторы, постулированные для них, вместо (7.11), *антикоммутиационных* соотношений,  $[\hat{a}, \hat{b}]_+ \equiv \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$ ,

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}]_+ = [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger]_+ = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}^\dagger]_+ = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (7.14)$$

Величины, удовлетворяющие алгебре (7.14) называются *переменными Грассмана*.

Первые два равенства (7.14) дают для  $\lambda = \lambda'$

$$\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda^\dagger = 0, \quad \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda = 0. \quad (7.15)$$

Это гарантирует *принцип Паули*: запрещено размещение двух тождественных фермионов на одной орбите. Определяя операторов числа занятости для каждой орбиты тем же способом (7.10), как для бозонов, и используя последний антикоммутатор в (7.14), мы получим

$$\hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda, \quad 1 - \hat{N}_\lambda = \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (7.16)$$

Простая алгебра тогда приводит к

$$\hat{N}_\lambda^2 = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger (1 - \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda) \hat{a}_\lambda, \quad (7.17)$$

или, используя (7.15),

$$\hat{N}_\lambda^2 = \hat{N}_\lambda. \quad (7.18)$$

Однако, собственные значения оператора числа занятости равны 0 и 1, как и должно быть для Ферми-статистики.

Вектор состояния для системы многих тел может быть построен как в уравнении (7.13); это состояние автоматически обнуляется, если  $n_\lambda > 1$ . Любая перестановка оператора создания изменяет общий знак вектора состояния вследствие антикоммутативности. Следовательно, волновая функция показывает корректность перестановочной симметрии. Действительно, вектор состояния (7.13) в случае Ферми есть просто произведение операторов создания  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  для всех занятых орбит ( $n_\lambda = 1$ ). Он антисимметричен и, следовательно, соответствует детерминанту Слетера в «*первичном квантовании*».

Следует упомянуть одну тонкую вещь. Мы говорили при определении состояния многих тел (7.2), что множество одночастичных орбит  $|\lambda\rangle$  должно быть *упорядочено* некоторым образом. Это было неважно для случая Бозе из-за симметрии операторов. Но в антисимметричном случае Ферми это содержит большую сложность в сравнении с (7.9), матричные элементы операторов создания и аннигиляции. Легко понять на простых примерах, что матричные элементы должны быть взяты как

$$\begin{aligned}\hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= (-)^{\varphi_\lambda} \sqrt{n_\lambda} |\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle &= (-)^{\varphi_\lambda} \sqrt{1 + n_\lambda} |\dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle,\end{aligned}\quad (7.19)$$

где квадратные корни отражают ограничения принципа Паули, а фаза

$$\varphi_\lambda = \sum_{\lambda' < \lambda} n_{\lambda'} \quad (7.20)$$

определяется числом переходов, которое необходимо для того, чтобы поставить внешний оператор  $\hat{a}_\lambda$  или  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  в его естественное место в доупорядоченной последовательности орбит. Вакуумное состояние удовлетворяет (I.11.112), как в Бозе случае.

## 7.5 алгебраические соотношения

Все операторы могут быть представлены как состоящие из простейших блоков  $\hat{a}_\lambda$ ,  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  или  $\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}$  (аннигиляция, создание или перемещение частицы). Ниже мы даем несколько тождеств, чтобы использовать в практических вычислениях в операторах вторичного квантования. Тождества выведены непосредственным применением элементарных правил, таких как (7.11) и (7.14). Некоторые результаты справедливы для обоих типов статистики. В других верхний (нижний) знак относится к бозонам (фермионам).

### Задача 7.1

Используя цифровые обозначения для орбит, доказать правила коммутации для парных операторных блоков,

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3] = \delta_{12} \hat{a}_3, \quad [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3] = -\delta_{13} \hat{a}_2^\dagger, \quad (7.21)$$

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger] = \delta_{12} \hat{a}_3^\dagger \pm \delta_{13} \hat{a}_2^\dagger, \quad (7.22)$$

$$[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2, \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4] = \delta_{23} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_4 - \delta_{14} \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2, \quad (7.23)$$



и, для операторов создания и аннигиляции пар. важных в приложениях,

$$[\hat{a}_1\hat{a}_2, \hat{a}_3^\dagger\hat{a}_4^\dagger] = \delta_{23}\delta_{14} \pm \delta_{24}\delta_{13} + \delta_{24}\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_1 + \delta_{13}\hat{a}_4^\dagger\hat{a}_2 \pm \delta_{23}\hat{a}_4^\dagger\hat{a}_1 \pm \delta_{14}\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_2. \quad (7.24)$$

Знаки легко прикинуть в соответствии с симметрией или антисимметрией исходных операторов при перестановках. Отметим, что во всех случаях мы вычисляем *коммутаторы*, а не антикоммутаторы.

Для вычисления матричных элементов операторов между состояниями многих тел (7.13), достаточно вставить необходимый оператор между бра- и кет-состояниями и вычислить итоговые *ожидаемые значения вакуума*. Они не исчезают, если только числа операторов создания и аннигиляции равны. Вследствие вакуумного условия (11.112), ожидаемые состояния вакуума равны нулю, если операторы вставлены в *нормальную форму* со всеми операторами создания слева от всех операторов аннигиляции. Для произвольной начальной последовательности операторов в исходном матричном элементе, нужно привести их к нормальной форме коммутаторами или антикоммутаторами. Результат состоит только из  $\delta$ -символов, образованных в этом процессе. Например,

$$\langle 0|\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger|0\rangle = \delta_{12}, \quad (7.25)$$

$$\langle 0|\hat{a}_1\hat{a}_2\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_4^\dagger|0\rangle = \delta_{23}\delta_{14} \pm \delta_{24}\delta_{13}. \quad (7.26)$$

Рецепт для произвольной ожидаемой вакуумной величины ясен. Вы начинаете с вакуума справа и должны вернуться к вакууму слева. По пути любой оператор рождения должен аннигилироваться оператором уничтожения. Необходимо сгруппировать все разделы начального операторного выражения в пары  $\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger$  (в таком *анти-нормальном* порядке!), напомним  $\delta_{12}$  для каждой пары (*сокращение*) и возьмем сумму вкладов (продуктов сокращения) от всех таких разделов. Конечный знак каждого вклада будет + для бозонов. в то время как для фермионов он определяется четностью перестановки, которая приносит партнерам заданное сокращение вблизи друг друга. Это так называемая *теорема Вика*. Например, для тождественных бозонов очевидный результат [он следует немедленно из (I.11.121)],

$$\langle 0|\hat{a}^k(\hat{a}^\dagger)^k|0\rangle = k!, \quad (7.27)$$

соответствует комбинаторному подсчету всех сокращений.

## 7.6 Операторы одного тела

Чтобы применить разработанный формализм к физическим задачам, нам нужно выразить *все операторы наблюдаемых* в виде вторичного квантования. Бкдкт полезно напомнить, что исходный одночастичный базис  $|\lambda\rangle$  достаточно произволен. Как мы делали в (7.8), мы можем произвести унитарное преобразование для другого полного множества орбит  $|\nu\rangle$ ,

$$|\lambda\rangle \rightarrow |\nu\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle (\lambda|\nu). \quad (7.28)$$

Унитарная матрица  $(\lambda|\nu) = (\nu|\lambda)^*$  преобразует операторы рождения и аннигиляции,  $\hat{a}_{\lambda} \rightarrow \hat{a}_{\nu}$ ,  $\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \rightarrow \hat{a}_{\nu}^{\dagger}$ . Новые операторы имеют те же свойства, поэтому преобразование должно быть *каноническим*, сохраняющим коммутационные соотношения.

Новые базисные состояния  $|\nu\rangle$  являются ничем иным, как состояниями  $\hat{a}_{\nu}^{\dagger}|0\rangle$  с одной частицей на вершине вакуумного фона. Это означает, что операторы рождения преобразованы тем же способом, как в уравнении (7.28),

$$\hat{a}_{\nu}^{\dagger} = \sum_{\lambda} (\lambda|\nu) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger}. \quad (7.29)$$

Оператор аннигиляции преобразован в соответствии с сопряженным уравнением,

$$\hat{a}_{\nu} = \sum_{\lambda} (\nu|\lambda) \hat{a}_{\lambda}, \quad (7.30)$$

и коммутатор (или антикоммутатор) сохраняется,

$$[\hat{a}_{\nu}, \hat{a}_{\nu'}^{\dagger}]_{\mp} = \sum_{\lambda\lambda'} (\nu|\lambda) (\lambda'|\nu') [\hat{a}_{\lambda}, \hat{a}_{\lambda'}^{\dagger}]_{\mp} = \sum_{\lambda} (\nu|\lambda) (\lambda|\nu') = \delta_{\nu\nu'}. \quad (7.31)$$

Мы использовали полноту множества  $|\lambda\rangle$ ,

$$\sum_{\lambda} |\lambda\rangle (\lambda| = 1. \quad (7.32)$$

В случае одночастичных переменных с непрерывным спектром,  $\delta$ -символы во всех коммутационных соотношениях должны быть подставлены  $\delta$ -функциями.

Рассмотрим вначале оператор  $\hat{Q}^{(1)}$  типа *одного тела* [как в (7.4)], который задан суммой вкладов  $\hat{q}_a$  всех тождественных частиц. Мы можем взять множество  $|q\rangle$  собственных состояний одночастичного оператора  $\hat{q}$ ,

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle, \quad (7.33)$$

в качестве нового одночастичного базиса  $|\nu\rangle$ , уравнение (7.28). В этом базисе форма оператора вторичного квантования  $\hat{Q}^{(1)}$ , действующего в пространстве Фока очевидна: его собственное значение дается суммой по всем орбитам  $|q\rangle$  вкладов, равных собственному значению  $q$  для заданной орбиты, умноженному на число занятости  $n_q$ . Это собственное значение оператора

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_q q \hat{N}_q = \sum_q q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q. \quad (7.34)$$

Теперь мы используем закон преобразования (7.29, 7.30). чтобы найти форму  $\hat{Q}^{(1)}$  для произвольно выбранного базиса  $|\lambda\rangle$ ,

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_{q\lambda\lambda'} q(\lambda|q)\hat{a}_\lambda^\dagger(q|\lambda')\hat{a}_{\lambda'} = \sum_{\lambda\lambda'} \left( \sum_q (\lambda|q)q(q|\lambda') \right) \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}. \quad (7.35)$$

Поскольку сумма в (7.35) равна матричному элементу оператора  $\hat{q}$ ,

$$\sum_q (\lambda|q)q(q|\lambda') = (\lambda|q|\lambda'), \quad (7.36)$$

мы приходим к общему выражению для произвольного оператора одного тела в форме, инвариантной к унитарным преобразованиям базиса,

$$\hat{Q}^{(1)} = \sum_{12} (1|q|2)\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2. \quad (7.37)$$

Подобный оператор представлен суммой членов, перемещающих уединенную частицу с орбиты  $|2\rangle$  на орбиту  $|1\rangle$ ; амплитуда перехода равна матричному элементу уединенной частицы  $(1|q|2)$ .

Важный пример дается *операторами плотности*

$$\hat{\rho}(q) = \sum_a \delta(q - \hat{q}_a), \quad (7.38)$$

которые определяют вероятность амплитуде получить значение  $q$  для одночастичной переменной  $\hat{q}$  в системе тождественных частиц. В частном

случае оператора положения,  $q \rightarrow \mathbf{r}$ , это обычная пространственная плотность, которая появляется в уравнении непрерывности. Своим значением, оператор (7.38) совпадает с  $\hat{N}_q$ , использованном в (7.34). Форма вторичного квантования оператора плотности является, следовательно, тривиальной в собственном базисе  $|q\rangle$  оператора  $\hat{q}$ , но более сложной в произвольном базисе,

$$\hat{\rho}(q) = \hat{N}_q = \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q = \sum_{\lambda\lambda'} (q|\lambda)^* (q|\lambda') \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}. \quad (7.39)$$

Часто имеют дело с представлениями координаты и импульса, где соответствующие операторы рождения  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$  и  $\hat{a}_\mathbf{p}^\dagger$ ; спин и другие внутренние характеристики могут быть добавлены к  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{p}$  при необходимости. [В координатном представлении обозначение  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$  вместо  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$  также часто используется.] Если координатные плоские волновые функции (I.3.95) нормированы в конечном объеме  $V$ , соотношение между представлениями даетм выражением

$$\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger, \quad \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger = \int d^3r e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger. \quad (7.40)$$

Таким образом, оператор пространственной плотности (7.144)

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \hat{N}_\mathbf{r} = \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger \hat{a}_\mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'}. \quad (7.41)$$

Оператор, диагональный в координат ном представлении, весьма внедиагонален в импульсном представлении.

### Задача 7.2

Для основного состояния идеального Бозе газа ( $N$  частиц в ящике объемом  $V$ ) найти среднее число частиц в объеме  $v < V$ , среднеквадратичную флуктуацию этого числа и корреляционную функцию этой плотности (7.41) в разных точках.

**Решение** Беря среднюю плотность как ожидаемые значения для основного состояния  $|\Psi_0(N)\rangle$  (15.10), мы придем к тривиальному результату:

$$\langle \hat{N}_\mathbf{r} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \langle \hat{a}_\mathbf{k}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}0} N = \frac{N}{V} \equiv n \quad (7.42)$$

который не зависит от координаты  $\mathbf{r}$  внутри объема. Среднее число частиц в меньшем объеме  $v$

$$\langle \hat{N}(v) \rangle = \int_v d^3r \langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \rangle = \int_v d^3r n = nv. \quad (7.43)$$

Для ожидаемого значения квадрата этого оператора мы получим

$$\langle \hat{N}^2(v) \rangle = \frac{1}{V^2} \int_v d^3r \int_v d^3r' \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r} + (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}']} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4} \rangle. \quad (7.44)$$

Здесь матричный элемент

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \Psi_0(N) | \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger | \hat{a}_{\mathbf{k}_4} \Psi_0(N) \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1 0} \delta_{\mathbf{k}_4 0} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} [1 + (N - 1) \delta_{\mathbf{k}_2 0}]. \quad (7.45)$$

Это сводит уравнение (7.44) к

$$\langle \hat{N}^2(v) \rangle = \frac{N}{V^2} \int_v d^3r \int_v d^3r' \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} [1 + (N - 1) \delta_{\mathbf{k} 0}]. \quad (7.46)$$

Поскольку

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \Rightarrow \int \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (7.47)$$

мы находим среднеквадратичную флуктуацию,

$$\left\langle \left( \Delta N(v) \right)^2 \right\rangle = \langle N^2(v) \rangle - \langle N(v) \rangle^2 = N \frac{v}{V} \left( 1 - \frac{v}{V} \right), \quad (7.48)$$

которая, естественно, исчезает для  $v = 0$  и  $v = V$ . *Относительная* флуктуация падает как  $1/\sqrt{N}$ , как всегда для *экстенсивных* статистических величин. Отметим, что такие же результаты для ожидаемых значений (7.43), (7.46) и (7.48) могут следовать из классического *биномиального распределения*

$$P(N_v) = \frac{N!}{N_v! (N - N_v)!} \left( \frac{v}{V} \right)^{N_v} \left( 1 - \frac{v}{V} \right)^{N - N_v}. \quad (7.49)$$

Корреляционная фнкция плотности может быть определена как

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \hat{N}_{\mathbf{r}'} \rangle - n^2. \quad (7.50)$$

Аналогично уравнениям (7.46) и (7.47),

$$\langle \hat{N}_{\mathbf{r}} \hat{N}_{\mathbf{r}'} \rangle = \frac{N}{V^2} [V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + (N - 1)], \quad (7.51)$$

поэтому

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n \left[ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{V} \right]; \quad (7.52)$$

последний член дает только малую поправку  $\sim 1/V$ .

## 7.7 Операторы двух тел

Рассмотрим теперь оператор, зависящий от переменных *пар* тождественных частиц. Наиболее важный пример это гамильтониан взаимодействия двух тел.

Характерная структура *оператора двух тел*

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a \neq b} \hat{f}_{ab}^{(2)}. \quad (7.53)$$

При вторичном квантовании она принимает инвариантную форму

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{1234} (12| \hat{f}^{(2)} |34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \quad (7.54)$$

с прозрачным физическим значением. Чтобы увидеть, как выражение (7.54) появляется, предположим, что  $\hat{f}_{ab}^{(2)}$  зависит от переменных  $q_a$  and  $q_b$  взаимодействующих частиц. Тогда мы можем формально переписать (7.53), включая член самодействия  $a = b$ ,

$$\begin{aligned} \hat{F}^{(2)} &= \sum_{ab} \hat{f}^{(2)}(q_a, q_b) - \sum_a \hat{f}^{(2)}(q_a, q_a) \\ &= \int dq dq' f^{(2)}(q, q') \left\{ \sum_{ab} \delta(\hat{q}_a - q) \delta(\hat{q}_b - q') - \delta(q - q') \sum_a \delta(\hat{q}_a - q) \right\} \end{aligned}$$

Вводя оператор плотности (7.38, 7.39) для переменной  $q$ , это преобразуется к

$$\hat{F}^{(2)} = \int dq dq' f^{(2)}(q, q') \left\{ \hat{N}_q \hat{N}_{q'} - \delta(q - q') \hat{N}_q \right\}. \quad (7.56)$$

Оператор в фигурных скобках в уравнении (7.56), в силу коммутационных соотношений,

$$\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_{q'} - \delta(q - q') \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q = \pm \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}. \quad (7.57)$$

Транспонирование двух последних оператора дает общий знак плюс, потому что оператор (7.56) принимает вид

$$F^{(2)} = \int dq dq' f^{(2)}(q, q') \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_{q'}^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{q'}. \quad (7.58)$$

Преобразование к произвольному базису приводит к уравнению (7.54), где коэффициенты  $(12|f|34)$  являются матричными элементами оператора двух тел  $\hat{f}^{(2)}$  для перехода  $(3,4) \rightarrow (1,2)$ ,

$$(12|\hat{f}^{(2)}|34) = \int dq dq' \psi_1^*(q) \psi_2^*(q') \hat{f}^{(2)}(q, q') \psi_3(q') \psi_4(q). \quad (7.59)$$

Здесь  $\psi_1(q) = (q|1)$  – функции преобразования базиса, т.е. волновые функции состояний  $|1\rangle$  в  $q$ -представлении. Отметим порядок аргументов этих функций в подинтегральном выражении (7.59).

## 7.8 Межчастичное взаимодействие в базисе плоской волны

Как мы отметили, оператор двух тел, главным образом, появляется при рассмотрении взаимодействия между частицами. В системе не очень высокой плотности, наиболее важные взаимодействия происходят парами, и мы ограничимся этим случаем. Если необходимы взаимодействия многих тел, рассмотрение может быть расширено прямым образом.

Если взаимодействие частиц  $a$  и  $b$  можно описать оператором  $U_{ab}$ , полный гамильтониан взаимодействия в системе многих частиц, в соответствии с уравнением (7.53), равен

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} U_{ab}, \quad (7.60)$$

Здесь множитель  $1/2$  необходим, поскольку каждая пара  $a, b$  ( $a \neq b$ ) должна подсчитываться только раз. Для тождественных частиц, это дает рост формы вторичного квантования (7.54),

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234} (12|U|34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4. \quad (7.61)$$

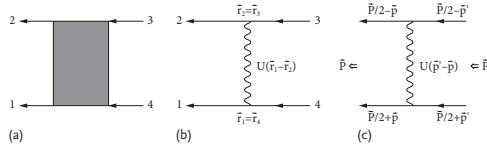


Рис. 7.1. Диаграмма взаимодействия двух тел

Структура взаимодействия, Рис. 17.1a, описывает столкновение двух тел с парой частиц, подвергающихся переходу  $(4, 3 \rightarrow 2, 1)$ , где, в соответствии со структурой матричного элемента (7.59), мы маркируем приходящую и уходящую линии диаграммы против часовой стрелки,  $4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ . Это представление процесса может быть отнесено к *каналу частица-частица*.

Для эрмитова гамильтониана,  $H^\dagger = H$ , матричные элементы двух тел удовлетворяют условию

$$(12|U|34) = (43|U|21)^*. \quad (7.62)$$

Другое свойство матричных элементов следует из коммутационных соотношений одночастичных операторов: для произвольной статистики частиц, одновременная перестановка начальной и конечной частиц не изменяет амплитуды процесса,

$$(12|U|34) = (21|U|43). \quad (7.63)$$

При перестановке только начальной (или только конечной) частиц, оригинальные матричные элементы не имеют никакой симметрии. Однако, полная сумма (7.61) содержит только симметризованную (для) или антисимметризованную (для фермионов) часть. Следовательно, может быть удобным ввести матричные элементы определенной симметрии,

$$\frac{1}{2} (12|\tilde{U}|34) = \frac{1}{2} [(12|U|34) \pm (21|U|43)], \quad (7.64)$$

и записать полный оператор взаимодействия как

$$H' = \frac{1}{4} \sum_{1234} (12|\tilde{U}|34) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4. \quad (7.65)$$

В качестве примера мы рассмотрим случай *потенциального* взаимодействия, которое зависит от относительного расстояния  $r$  между частицами и не несет какой-либо зависимости от дополнительных квантовых чисел



частиц, как спин или изоспин. Множество подходящих одночастичных квантовых характеристик в этом случае  $|1\rangle = |\mathbf{r}_1, \sigma_1\rangle$ , и вершина потенциала, Рис. 17.1b, имеет структуру

$$(12|U|34) = \delta_{\sigma_1\sigma_4} \delta_{\sigma_2\sigma_3} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (7.66)$$

Гамильтониан полного (не симметризованного) взаимодействия дается выражением

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d^3r_1 d^3r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_1}. \quad (7.67)$$

Для спин-спинового взаимодействия  $U_{ab} = U(r_{ab})(\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b)$  мы имеем

$$(12|U|34) = (\mathbf{s}_{\sigma_1\sigma_4} \cdot \mathbf{s}_{\sigma_2\sigma_3}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (7.68)$$

и

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \int d^3r_1 d^3r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) (\mathbf{s}_{\sigma_1\sigma_4} \cdot \mathbf{s}_{\sigma_2\sigma_3}) \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2\sigma_3} \hat{a}_{\mathbf{r}_1\sigma_4}. \quad (7.69)$$

Импульсное представление подходит для пространственно-однородной системы, когда каждое столкновение сохраняет полный импульс пары. Используя снова нормализацию в объеме  $V$ , уравнение (7.40), мы преобразуем гамильтониан (7.67) следующим образом (все импульсы квантованы в том же объеме):

$$H' = \frac{1}{2V^2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2'\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1'\sigma_1} \times \int d^3r_1 d^3r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{(i/\hbar)[\mathbf{r}_1 \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1') + \mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_2')]} \quad (7.70)$$

Вместо четырех импульсов  $\mathbf{p}_a$  частиц в процессе, мы вводит, Рис 17.1c, полные импульсы  $\mathbf{P}'$  и  $\mathbf{P}$  в канале частица-частица и относительные импульсы  $\mathbf{p}'$  и  $\mathbf{p}$ , до и после столкновения, соответственно,

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{p}, \quad \mathbf{p}_2 = \frac{\mathbf{P}}{2} - \mathbf{p}, \quad \mathbf{p}_1' = \frac{\mathbf{P}'}{2} + \mathbf{p}', \quad \mathbf{p}_2' = \frac{\mathbf{P}'}{2} - \mathbf{p}'. \quad (7.71)$$

Интеграл по координатам в уравнении (7.70) теперь разбит на произведение двух независимых интегралов, по координате  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  центра масс и по относительному расстоянию  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  пары,

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 d^3r_2 U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{(i/\hbar)[\mathbf{r}_1 \cdot (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) + \mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2)]} \\ &= \int d^3R e^{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{P}')} \int d^3r U(r) e^{(i/\hbar)\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')}. \end{aligned} \quad (7.72)$$

Интеграл центра масс показывает сохранение импульса,

$$\int d^3R e^{(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{P}')} = V \delta_{\mathbf{P}\mathbf{P}'}, \quad (7.73)$$

в то время как результат рассеяния определяется фурье-компонентой потенциала, соответствующего *передаче импульса*  $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$ , сравни с аппроксимацией Борна (раздел 7.5),

$$U_{\mathbf{p}' - \mathbf{p}} = \int d^3r U(r) e^{(i/\hbar)\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')}. \quad (7.74)$$

Окончательно, гамильтониан взаимодействия в импульсном представлении

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{P} \mathbf{P}'} U_{\mathbf{p}' - \mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p} + \mathbf{P}/2, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p} + \mathbf{P}/2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}' + \mathbf{P}/2, \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{p}' + \mathbf{P}/2, \sigma_1}. \quad (7.75)$$

## 7.9 Межчастичное взаимодействие в конечной системе

Дадим пример пространственно ограниченной системы, где лучший одностичный базис является не одной из плоских волн, а базисом, относящимся к симметрии задачи (атом, молекула, атомные ядра).

В таких приложениях естественное одностичное представление обеспечивается средним полем, раздел 19. Модель ядерной оболочки обычно использует сферический базис  $|1m_1\rangle$  с *спин-орбитальной связью*, где 1 комбинирует все квантовые числа связанной системы ( $\mathbf{j}_1 = \vec{\ell}_1 + \mathbf{s}_1$ ), за исключением проекций полного углового момента,  $j_z = m$ . Гамильтониан двух тел принимает вид

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; \{m\}} (1m_1, 2m_2 | U | 3m_3, 4m_4) \hat{a}_{1m_1}^\dagger \hat{a}_{2m_2}^\dagger \hat{a}_{3m_3} \hat{a}_{4m_4}. \quad (7.76)$$

Если изоспиновая инвариантность учитывается явно, можно аналогично выделить проекцию изоспина  $t_3 = \tau$  каждой частицы.

Сохранение углового момента налагает ограничения на амплитуды. В самом деле, если взаимодействие  $U$  является вращательно инвариантным, полный угловой момент  $L$  исходной пары  $(3,4)$  должен быть равен такому для конечной пары  $(1,2)$ . Начальное связанное состояние  $|3m_3, 4m_4\rangle$  является суперпозицией связанных состояний с определенным значением  $L$  и полной проекции  $L_z = \Lambda$ ,

$$|3m_3, 4m_4\rangle = \sum_{L\Lambda} C_{j_4 m_4 j_3 m_3}^{L\Lambda} |34; L\Lambda\rangle. \quad (7.77)$$

Аналогичное представление справедливо для конечного состояния,

$$(1m_1, 2m_2| = \sum_{L'\Lambda'} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L'\Lambda'} (12; L'\Lambda'|. \quad (7.78)$$

В этих определениях мы упорядочиваем одночастичные состояния таким образом, что, как на Рис. 17.1, квантовые числа  $1$  и  $4$  могут соответствовать, для различных частиц, первой частице, а  $2$  и  $3$  второй.

Матричные элементы  $U$ , как произвольного скалярного оператора, не изменяют вращательные квантовые числа,  $L' = L$ ,  $\Lambda' = \Lambda$ . Более того, матричные элементы скаляра не зависят от проекции  $\Lambda$ . Следовательно, амплитуда процесса может быть записана как

$$(1m_1, 2m_2|U|3m_3, 4m_4) = \sum_{L\Lambda} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{j_4 m_4 j_3 m_3}^{L\Lambda} U_L(12; 34), \quad (7.79)$$

с эффективными матричными элементами  $U_L(12; 34)$ , где  $m$ -зависимость была исключена. Теперь мы можем комбинировать CGC с операторами рождения и аннигиляции и образовывать *рождения пары*,

$$\hat{P}_{L\Lambda}^\dagger(12) = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} \hat{a}_{1m_1}^\dagger \hat{a}_{2m_2}^\dagger, \quad (7.80)$$

и эрмитово-спряжённые операторы *аннигиляции пары*,

$$\hat{P}_{L\Lambda}(12) = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} \hat{a}_{2m_2} \hat{a}_{1m_1}. \quad (7.81)$$

Таким образом, вращательно-инвариантное взаимодействие в канале частица-частица может быть приведено к виду

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; L\Lambda} U_L(12; 34) \hat{P}_{L\Lambda}^\dagger(12) \hat{P}_{L\Lambda}(43). \quad (7.82)$$

В качестве легкого обобщения мы получим для изоспиново-инвариантного взаимодействия

$$\hat{P}_{L\Lambda;tt_3}^\dagger(12) = \sum_{m_1 m_2, \tau_1 \tau_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{1/2 \tau_1 1/2 \tau_2}^{tt_3} \hat{a}_{1 m_1 \tau_1}^\dagger \hat{a}_{2 m_2 \tau_2}^\dagger, \quad (7.83)$$

$$\hat{P}_{L\Lambda;tt_3}(12) = \sum_{m_1 m_2, \tau_1 \tau_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{1/2 \tau_1 1/2 \tau_2}^{tt_3} \hat{a}_{2 m_2 \tau_2} \hat{a}_{1 m_1 \tau_1}, \quad (7.84)$$

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{1234; L\Lambda; tt_3} U_{Lt}(12; 34) \hat{P}_{L\Lambda;tt_3}^\dagger(12) \hat{P}_{L\Lambda;tt_3}(43), \quad (7.85)$$

где  $t$  полный изоспин пары (0 или 1 для нуклонов), и

$$\begin{aligned} & (1m_1\tau_1, 2m_2\tau_2 | U | 3m_3\tau_3, 4m_4\tau_4) \\ &= \sum_{L\Lambda, tt_3} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{L\Lambda} C_{1/2 \tau_1 1/2 \tau_2}^{tt_3} C_{1/2 \tau_4 1/2 \tau_3}^{tt_3} C_{j_4 m_4 j_3 m_3}^{L\Lambda} U_{Lt}(12; 34), \end{aligned} \quad (7.86)$$

Операторы нуклонной пары, уравнения (7.83) и (7.84), имеют простые свойства симметрии, которые следуют из Ферми-статистики и дополнительности между спин-пространственными и изобарическими переменными. Если мы переставим два оператора рождения в сумме уравнения (7.83), результат получит знак минус. Теперь мы восстановим соответствие между CGC и порядком операторов обмена нижней пары индексов в обоих CGC, которые приносят в фазах  $(-)^{j_1+j_2-L}$  и  $(-)^{1/2+1/2-t}$ . В результате, мы получим оператор  $\hat{P}^\dagger$ , но с противоположным порядком невращательных квантовых чисел 1 и 2:

$$\hat{P}_{L\Lambda, tt_3}^\dagger(12) = (-)^{j_1+j_2+L+t} \hat{P}_{L\Lambda, tt_3}^\dagger(21). \quad (7.87)$$

В частности, для пары тех же самых одночастичных орбит,  $1=2$ , сумма  $L+t$  должна быть *нечетным* целым. Это соответствует факту, обсуждающемуся в следующем разделе (вспомним также *Задачу 15.1*), что пара *эквивалентных* фермионов ( $t=1$ ) может иметь только *четный* полный угловой момент  $L$ . Квазидейтронная пара ( $t=0$ ) может иметь только *нечетные* значения  $L$ ; как мы уже обсуждали, реальный дейтрон имеет  $t=0$  и полный угловой момент  $L=1$  (ранее это обозначалось как  $J$ ). Этот результат также является аналогом обобщения принципа Паули (16.18), выведенным в  $ls$ -схеме. Аналогичным образом, мы можем получить только *четные*  $L$  для бозонной пары (без спина или изоспина).

Неразличимость идентичных частиц имеет важные, экспериментально проверяемые следствия. Например, спектры многоэлектронных атомов могли бы быть совершенно различными, если бы электроны атомов были различимы.

Е. Мерцбахер, *Квантовая механика*

## Глава 8

### Атомные и ядерные конфигурации

#### 8.1 Приближение независимой частицы

При хорошей аппроксимации, многоэлектронный атом это система из  $N$  тождественных фермионов со спином  $1/2$  (электроны) в *среднем поле*, создаваемом совместно центральным ядром и всеми электронами. мы оставляем задачу вывода этого поля для следующего раздела и рассматриваем здесь это поле как внешнее. Аналогично, электроны в молекуле также движутся в среднем поле, создаваемом ионами, тяжелая масса которых подтверждает адиабатическую картину, раздел I.19.5, и всеми прочими электронами. В аналогичной манере, атомные ядра могут рассматриваться как система независимых нуклонов в общем среднем поле. В этом случае нет центрального тела, и полное поле обусловлено взаимодействием протонов и нейтронов, но снова мы можем начать с приближения независимых частиц. Новейший пример дается холодными атомами в атомных ловушках, где отдельные атомы в некотором приближении могут рассматриваться как независимые. В этом случае поле ловушки, в самом деле, является внешним.

Волновая функция многих тел системы в целом должна быть полностью симметрична или антисимметрична при перестановках всех, пространственных и спиновых, переменных произвольных пар частиц. Это справедливо безотносительно присутствия межчастичных взаимодействий. В приближении независимых частиц, существует особый одночастичный базис  $|\lambda\rangle$ , который состоит из правильных орбиталей, найденных для заданного внешнего поля. Каждое распределение  $N$  частиц по доступным орбиталям согласуется с типом статистических форм *конфигурации*.

В виде вторичного квантования, волновая функция *многих тел* конфигурации может генерироваться с помощью операторов рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , помещающих все частицы на требуемые орбитали. Если обозначение  $\lambda$  комбинирует все одночастичные квантовые числа, в волновую функцию независимых *фермионов*, каждое занятое состояние появляется только раз. Результат в представлении числа занятости имеет вид

$$|\Psi\rangle = \prod_{\lambda} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle, \quad (8.1)$$

и числа занятости  $n_\lambda$  равны 0 или 1. Это полностью эквивалентно волновой функции, записанной как детерминант Слетера. Здесь принцип Паули содержится в правилах антикоммутации для операторов рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ .

Аналогичным образом, мы можем выписать волновую функцию независимых *бозонов*, но тогда числа занятости  $n_\lambda$  могут принимать произвольные целые значения от 0 до  $N$ . Следовательно, нам нужно добавить нормирующие множители,

$$|\Psi\rangle = \prod_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{n_\lambda!}} (\hat{a}_\lambda^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle, \quad (8.2)$$

которые необходимы из-за неразличимости частиц (предполагая  $0! = 1$ , мы можем использовать ту же самую форму для фермионов также). В обоих случаях, для бозонов и для фермионов, энергия конфигурации независимых частиц дается выражением

$$E^o(\{n_\lambda\}) = \sum_{\lambda} \varepsilon_\lambda n_\lambda, \quad (8.3)$$

где  $\varepsilon_\lambda$  – энергии независимых орбиталей.

## 8.2 Добавление вращательной инвариантности

Предположим, что среднее поле обладает *сферической симметрией*. Это является хорошим приближением во многих случаях для атомов и ядер. В таком поле, одночастичное движение сохраняет угловой момент, квантовые числа частицы:  $\ell, m_\ell$  и  $m_s$  в связанной спин-орбитальной схеме, или  $j, \ell$  (или четность), и  $m_j$  в связанной схеме.

Однако, детерминант Слетера построенный заполнением  $N$  таких орбиталей обычно не имеет определенного значения полного орбитального момента  $L$  и полного спина  $S$ , или полного углового момента  $J$ . Поскольку

стационарные невырожденные состояния вращательно инвариантной системы как целого должны иметь определенные значения полного углового момента, мы вынуждены отказаться от волновой функции как отдельного детерминанта Слетера (8.1) и комбинировать определенное число таких детерминантов способом, определяемым правилами связи углового момента. То же самое справедливо для Бозе-систем, где нам нужно комбинировать состояния (8.2).

В некоторых случаях такая связь осуществляется почти автоматически, и мы видели примеры для двух нуклонов, раздел 15.5. Для фермионных орбиталей без спин-орбитальной связи, когда каждая одночастичная волновая функция является продуктом пространственной и спиновой частей, не более чем две частицы могут иметь те же орбитальные квантовые числа  $(n, \ell, m_\ell)$ . В случае пространственного совпадения для двух частиц, спиновая волновая функция пары,  $\chi_{SM_S}$ , необходимо антисимметрична (синглет  $\chi_{00}$ ). Это то же самое, как результат для рассеяния, когда орбитальная функция симметрична, раздел 15.6. Такая ситуация имеет место в атоме гения. В основном состоянии два электрона занимают низшую  $1s$  орбиту, поэтому они автоматически образуют спиновую синглетную пару. Квантовые числа пары фиксированы без особых усилий:

$$\ell_1 = \ell_2 = L = 0, \quad s_1 = s_2 = 1/2, \quad S = 0, \quad J = 0, \quad (8.4)$$

что соответствует спектроскопическому символу  $^1S_0$ .

Напишем волновую функцию основного состояния гелия в виде вторичного квантования (8.1) с операторами рождения  $\hat{a}_{n\ell m_\ell m_s}^\dagger$ ,

$$|\Psi_0\rangle = \hat{a}_{000\,1/2}^\dagger \hat{a}_{000\,-1/2}^\dagger |0\rangle. \quad (8.5)$$

Здесь мы выстраиваем орбитали в порядке убывания проекций. Волновая функция (8.5) может быть переписана с помощью правил антикоммутиации,

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2}(\hat{a}_{000\,1/2}^\dagger \hat{a}_{000\,-1/2}^\dagger - \hat{a}_{000\,-1/2}^\dagger \hat{a}_{000\,1/2}^\dagger)|0\rangle. \quad (8.6)$$

Этот результат эквивалентен ( $\sigma = m_s$ )

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (-)^{1/2-\sigma} \hat{a}_{000\,\sigma}^\dagger \hat{a}_{000\,-\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (8.7)$$

или, вспоминая значения коэффициентов Клебша-Гордана (I.22.36),

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} C_{1/2\,\sigma\,1/2\,-\sigma}^{00} \hat{a}_{000\,\sigma}^\dagger \hat{a}_{000\,-\sigma}^\dagger |0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{a}_{000,s=1/2}^\dagger \hat{a}_{000,s=1/2}^\dagger] s=0 |0\rangle,$$

(8.8)

где символ  $[A_j B_{j'}]_{JM}$  обозначает вектор связи двух подсистем  $\mathbf{j} + \mathbf{j}' = \mathbf{J}$ . Таким образом, в этом случае исходный детерминант Слетера, в самом деле, дает определенные значения  $L = S = J = 0$ . Конечно, это происходит, потому что мы берем конфигурацию полного  $s$ -уровня.

Перейдем к возбужденным состояниям атома гелия. Если в оболочке  $1s$  остается один электрон, в то время как второй переходит к оболочке с  $\ell > 0$ , они не *эквивалентны* более в том смысле, что нет ограничений на спин волновой функции, поскольку пространственные функции уже разные. Оба, синглетное и триплетное состояния разрешены, и правильная вращательная волновая функция с определенными значениями  $L, M_L$  (автоматически равными  $\ell, m_\ell$  возбужденного электрона) и  $S, M_S$  таковы

$$|\Psi_{n\ell m_\ell S M_S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma\sigma'} C_{1/2\sigma\ 1/2\sigma'}^{S M_S} \hat{a}_{000\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\ell m_\ell \sigma'}^\dagger |0\rangle. \quad (8.9)$$

Если оба электрона размещены на разных орбитах с ненулевым  $\ell$ , нам нужно добавить вектор связи орбитальных моментов  $[\ell\ell']_{LM_L}$ . Создание таких пар может быть описано оператором вторичного квантования пар (17.80). Окончательно,  $L$  и  $S$  должны быть связаны с полным угловым моментом квантовыми числами  $J, M$ . Таким образом, конфигурации всего двух электронов показывают многообразие возможных вращательных мультиплетов.

Здесь мы можем легко изменить определение того, что мы называли *конфигурацией*. При вращательной инвариантности, одночастичные энергии не зависят от сохраняющихся магнитных квантовых чисел,  $m_\ell$  и  $m_s$  в расщепленной схеме, и  $m_j$  со спин-орбитальной связью. Мы будем комбинировать в конфигурации все распределения частиц с одинаковым числом частиц на вырожденных орбиталях. Например, в сложном атоме мы можем положить  $n_1$  частиц на орбите  $\ell_1$ ,  $n_2$  частиц на орбите  $\ell_2$ , и так далее, без точного определения занятых значений  $m_\ell$  и  $m_s$ . Все распределения с одинаковыми значениями  $n_\ell$  относятся к одной конфигурации, в новом значении этого слова; в модели ядерной оболочки это иногда *partition (раздел)*. Внутри раздела, многие значения полного углового момента обычно еще относятся, в отсутствие межчастичных взаимодействий, к одной и той же энергии.

### 8.3 Конфигурации многих частиц

Для двух частиц разрешены состояния, которые были найдены в *Задаче 15.1*. В многочастичной конфигурации, ограничения, наложенные



требованиями квантовой статистики. определяют разрешенные значения вращательных квантовых чисел. Чтобы найти эти значения, можно начать, как мы делали в задачах с обычным связанным угловым моментом, раздел I.22.6, с состояния максимально возможного углового момента. Это обычно легко, поскольку проекции складываются алгебраически. Это «*корневое*» состояние должно быть построено с учетом статистики. Тогда мы можем применить оператор понижения и спускаться вниз, заполняя на каждом шаге открытые ранее мультиплеты, приписывая оставшиеся статистически разрешенные состояния новым мультиплетам. Этот процесс лучше понять на примерах.

### Задача 8.1

Три нейтральных атома, каждый во внутреннем состоянии с полным угловым моментом  $F = 0$ , находятся на орбите с орбитальным моментом  $\ell = 2$  в атомной ловушке. Определить возможные значения полного углового момента системы; проверить полное число состояний с результатом (15.20).

**Решение** Атомы подчиняются статистике Бозе, и полное число состояний, в соответствии с уравнением (15.20) для  $N = 3$  и  $\Omega = 5$  (число различных проекций орбитального момента), равно

$$\mathcal{N}(3, 5) = \frac{7!}{3!4!} 5. \quad (8.10)$$

Чтобы найти возможные значения полного углового момента

$$\mathbf{L} = \vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2 + \vec{\ell}_3, \quad (8.11)$$

во-первых, мы образуем расщепленное состояние  $(m_1, m_2, m_3) = (2, 2, 2)$  с наивысшей проекцией  $M = L_z = 6$ . Такое состояние единственно и это подтверждает существование  $L = 6$ . Проекция  $M = 5$  может быть создана тремя способами,  $(1, 2, 2)$ ,  $(2, 1, 2)$  и  $(2, 2, 1)$ . Но для тождественных бозонов это представляет только одно состояние, поскольку мы должны образовать *симметричную* комбинацию из всех их, например, действуя с  $L_- = \ell_{1-} + \ell_{2-} + \ell_{3-}$  на корневое состояние. Существует только одна симметричная комбинация, она относится к мультиплету с  $L = 6$ , следовательно, у нас нет других состояний с  $M = 5$  и значение  $L = 5$  недопустимо. На следующем шаге,  $M = 4$ , у нас две независимых возможности, симметричная комбинация трех состояний с одной проекцией, равной 0 и двумя другими проекциями, равными 2, и симметричная комбинация трех состояний типа  $(1, 1, 2)$ . Наличие двух симметричных состояний с  $M = 4$  показывает появление, с непрерывным заполнением высшего мультиплета

$L = 6$ , нового мультиплета  $L = 4$ . Следующий шаг вниз,  $M = 3$ , дает три симметричных комбинации типов  $(-1, 2, 2)$ ,  $(0, 1, 2)$  и  $(1, 1, 1)$ . Две комбинации соответствуют предыдущему мультиплету с  $L = 6$  и  $L = 4$ , в то время как присутствие третьей означает, что мультиплет с  $L = 3$  также разрешен. Продолжая этот процесс, мы найдем также возможные значения  $L = 2$  и  $L = 0$ . Таким образом, наш обзор всех возможных состояний дает следующие разрешенные значения  $L$  для трех тождественных бозонов с  $\ell = 2$  («квадрупольные бозоны»):

$$L = 6, 4, 3, 2, 0. \quad (8.12)$$

Полное число состояний равно

$$\mathcal{N} = \sum_L (2L + 1) = 13 + 9 + 7 + 5 + 1, \quad (8.13)$$

в соответствии с уравнением (8.10). Этот результат также применим к колебательным состояниям сферических ядер: квадрупольная форма колебаний может быть моделирована квантованием поверхностных возбуждений волнового типа, *фононы*, обладающих угловым моментом 2.

### Задача 8.2

В средних и тяжелых ядрах спин-орбитальная связь обычно сильна, потому что нуклоны заполняют одночастичные уровни с определенными значениями  $j$ ,  $\mathbf{j} = \vec{\ell} + \mathbf{s}$ . Ядро  $^{43}\text{Ca}$  может быть рассмотрено как конструкция инертной сердцевин  $^{40}\text{Ca}$  и трех валентных нейтронов на орбитали  $(\ell)_j = f_{7/2}$ . Определить возможные значения полного углового момента  $I$  ядра; проверить полное число состояний.

**Решение** Полный угловой момент равен

$$\mathbf{I} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3. \quad (8.14)$$

Число разрешенных состояний, в соответствии с уравнением (15.19) для  $N = 3$  и  $\Omega = 8$ , равно

$$\mathcal{N}(3, 8) = \frac{8!}{3! 5!} = 36 \quad (8.15)$$

Мы можем действовать тем же способом как в предыдущей задаче. Наивысшее состояния можно достичь заполнением, в соответствии с принципом исключения Паули,  $(m_1, m_2, m_3) = (7/2, 5/2, 3/2)$ . Конечно, это означает.

что нам нужно построить детерминант Слетера с теми занятыми одночастичными орбиталями, или использовать три соответствующих оператора рождения. Это дает наивысшее  $M = 15/2$ , и, следовательно, наивысшее  $I = 15/2$ . Это единственное построенное состояние, и, следовательно, нам не нужно объединять несколько детерминантов. Существует также только одно состояние (детерминант Слетера) с  $M = 13/2$ , а именно  $(7/2, 5/2, 1/2)$ . Это состояние относится к предыдущему мультиплету  $I = 15/2$ . Откуда, значение полного углового момента  $I = 13/2$  не разрешено. На следующем шаге,  $M = 11/2$ , мы получаем два возможных распределения проекций,  $(7/2, 3/2, 1/2)$  и  $(7/2, 5/2, -1/2)$ . Одна комбинация этих состояний приводит к  $I = 15/2$ , другая открывает новый мультиплет с  $I = 11/2$  который, в свою очередь, должен иметь члены со всеми возможными проекциями. Покажем

полную процедуру:

$M = 15/2$	$7/2$	$5/2$	$3/2$	$I = 15/2$
$M = 13/2$	$7/2$	$5/2$	$1/2$	—
$M = 11/2$	$7/2$	$3/2$	$1/2$	$I = 11/2$
	$7/2$	$5/2$	$-1/2$	
$M = 9/2$	$5/2$	$3/2$	$1/2$	$I = 9/2$
	$7/2$	$3/2$	$-1/2$	
	$7/2$	$5/2$	$-3/2$	
$M = 7/2$	$5/2$	$3/2$	$-1/2$	$I = 7/2$
	$7/2$	$1/2$	$-1/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$5/2$	$-5/2$	
$M = 5/2$	$5/2$	$1/2$	$-1/2$	$I = 5/2$
	$5/2$	$3/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$5/2$	$-7/2$	
$M = 3/2$	$3/2$	$1/2$	$-1/2$	$I = 3/2$
	$5/2$	$1/2$	$-3/2$	
	$5/2$	$3/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$-1/2$	$-3/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$3/2$	$-7/2$	—
$M = 1/2$	$3/2$	$1/2$	$-3/2$	
	$5/2$	$-1/2$	$-3/2$	
	$5/2$	$1/2$	$-5/2$	
	$5/2$	$3/2$	$-7/2$	
	$7/2$	$-1/2$	$-5/2$	
	$7/2$	$1/2$	$-7/2$	

(8.16)

Состояния с отрицательными значениями  $M$  не дают новой информации. Эта процедура перечисления собирает все возможные значения углового момента (последний столбец). Значения  $I = 13/2$  и  $1/2$  не разрешены. Соответствующее полное число состояний равно

$$\mathcal{N} = \sum_I (2I + 1) = 16 + 12 + 10 + 8 + 6 + 4 = 56, \quad (8.17)$$

в согласии с общим правилом (8.15).

**Задача 8.3**

В атомах  $LS$ -связь ближе к реальности из-за слабого спин-орбитального взаимодействия. Атом азона имеет наименьшую электронную конфигурацию  $1s^2 2s^2 2p^3$ . Определить возможные квантовые числа  $L, S, J$  для этой конфигурации.

**Решение**

Здесь перечисление чуть более сложное, прежде всего, потому что нам нужно перечислить орбитальный момент и проекции спина отдельно, а затем комбинировать их способом, разрешаемым статистикой Ферми. Только  $p$ -уровень доступен для размещения частиц, и доступные  $\Omega = 3 \times 2 = 6$  *одночастичные* состояния  $(m_\ell, m_s)$  суть

$$\begin{aligned} (a) \ (1, 1/2); \quad (a') \ (1, -1/2); \\ (b) \ (0, 1/2); \quad (b') \ (0, -1/2); \\ (c) \ (-1, 1/2); \quad (c') \ (-1, -1/2). \end{aligned}$$

Теперь мы заполняем эти состояния тремя частицами, образуя состояния многих тел. Начнем с максимально возможной проекции полного орбитального момента  $M_L = 2$ . Это можно делать двумя путями, оба включают  $(a)$  и  $(a')$ :  $(aa'b)$ ,  $M_S = 1/2$ , и  $(aa'b')$ ,  $M_S = -1/2$ . Поскольку все ситуации будут симметричны для положительных и отрицательных  $M_L$  и  $M_S$ , мы можем снова ограничиться состояниями с положительными значениями обеих проекций,

$$\underline{M_L = 2} : \quad (aa'b), \ M_S = 1/2. \quad (8.18)$$

Следовательно, состояние с  $L = 2$  и  $S = 1/2$  разрешены, их символ становится  ${}^2D$ ; соответствующий полный угловой момент может быть  $J = 3/2$  или  $5/2$ . Для  $M_L = 1$  мы имеем

$$\underline{M_L = 1} : \quad (aa'c), \ M_S = 1/2; \quad (abb'), \ M_S = 1/2. \quad (8.19)$$

Одна комбинация этих состояний относится к предыдущему мультиплету, другая открывает новый с  $L = 1$  и  $S = 1/2$ , т.е.  ${}^2P$  с  $J = 1/2$  или  $3/2$ . Окончательно, комбинации, разрешенные для  $M_L = 0$ , включают

$$\underline{M_L = 0} : \quad (abc); \quad (abc'); \quad (ab'c); \quad (a'bc), \quad (8.20)$$

с проекцией спина  $M_S = 3/2$  для первого, и  $M_S = 1/2$  для трех остальных случаев. Это показывает новый (третий) мультиплет с  $L = 0$  и  $S = 3/2$ ,

который должен быть отмечен как  ${}^4S$ , и здесь  $J = S$ . Три оставшиеся состояния с  $M_L = 0$  завершают три мультиплета. Теперь мы можем перечислить все возможные члены конфигурации  $p^3$ :

$${}^2D_{3/2,5/2}; {}^2P_{1/2,3/2}; {}^4S_{3/2}. \quad (8.21)$$

Полное число состояний должно быть

$$\mathcal{N}(3, 6) = \frac{6!}{3! 3!}. \quad (8.22)$$

В самом деле, подсчитывая все состояния (8.21) с различными  $J$  и  $M_J$ , мы получим

$$\mathcal{N} = \sum_J (2J + 1) = 4 + 6 + 2 + 4 + 4. \quad (8.23)$$

## 8.4 Обменное взаимодействие

Когда частицы взаимодействуют, волновая функция многих тел, взятая как детерминант Слетера или как произведение независимых одночастичных функций перестает быть стационарной. Мы уже отмечали, базис, даваемый конфигурациями независимых частиц, совместимыми с типом статистики, полон и зачастую удобен. что учитывать эффекты взаимодействий.

Рассмотрим в качестве примера двухчастичную систему (в действительности, это может быть система валентных электронов или нуклоны наверху ядра, которые могут приближенно считаться инертными). Пусть тождественные частицы занимают одночастичные состояния  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  и, пренебрегая их взаимодействием, мы можем иметь энергию пары

$$E^0 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2. \quad (8.24)$$

Мы предполагаем, что взаимодействие  $U$  между частицами может рассматриваться как возмущение. Для различных одночастичных состояний, и только в этом случае, разрешенном для фермионов, невозмущенная волновая функция может быть записана как

$$|\psi_{12}\rangle = \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger |0\rangle, \quad (8.25)$$

где мы используем оператор рождения частицы, и  $|0\rangle$  означает вакуум или состояние инертного ядра, которое не содержит орбиталей  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$ .

Общий вид взаимодействия в форме вторичного квантования дается уравнением (17.61),

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{3456} (34|U|56) \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_5 \hat{a}_6. \quad (8.26)$$

Мы обрамляем этот оператор бра- и кет-векторами (8.25) и вычисляем ожидаемое значение, без возможного возмущения ядра,

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{3456} (34|U|56) \langle 0 | \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_5 \hat{a}_6 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger | 0 \rangle. \quad (8.27)$$

Очевидное правило выбора определяет ненулевой вклад в бесконечную сумму в (8.27): операторы аннигиляции  $5, 6$  должны освобождают от исходных операторов  $2, 1$  (мы не рассматриваем разрушение ядра), и аналогично, операторы  $3, 4$  занимают позиции  $1, 2$ . Это, конечно, тривиально, поскольку мы рассматриваем только двухчастичное взаимодействие с фиксированными начальным и конечным состояниями. Здесь, существование мешающих путей взаимодействия, аналогично Рис. 15.2, входит в игру. Таким образом,

$$\hat{a}_5 \hat{a}_6 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger | 0 \rangle = (\delta_{62} \delta_{51} \mp \delta_{61} \delta_{52}) | 0 \rangle. \quad (8.28)$$

То же справедливо для конечных пар частиц. В результате,

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = \frac{1}{2} \{ (21|U|12) \mp (21|U|21) \mp (12|U|12) + (12|U|21) \}, \quad (8.29)$$

или, на основании очевидной симметрии (41.63),

$$\langle \psi_{12} | U | \psi_{12} \rangle = (21|U|12) \mp (12|U|12). \quad (8.30)$$

Эта автоматическая (анти)симметризация, см. (17.64), соответствует диаграмме Рис. 15.1; знаки  $-$  и  $+$  берутся для фермионов и бозонов, соответственно.

В случае *различимых* частиц, описываемых операторами  $\hat{a}$  и  $\hat{b}$ , вместо (8.30), гамильтониан взаимодействия должен иметь вид

$$\hat{U}^{\text{dist}} = \sum_{3456} (34|U|56) \hat{a}_3^\dagger \hat{b}_4^\dagger \hat{b}_5 \hat{a}_6, \quad (8.31)$$

и мы получаем энергию взаимодействия

$$\langle \psi_{12} | U^{\text{dist}} | \psi_{12} \rangle = (21|U|12), \quad (8.32)$$

независимо от предположения, что операторы  $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$  коммутируют или антикоммутируют с  $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$ . Только *прямой* член,  $(21|U|12)$ , описывает взаимодействие между частицами, тогда как тождественность частиц приводит к дополнительному *обменному* вкладу,  $(12|U|12)$ .

#### Задача 8.4

Вычислить прямые и обменные матричные элементы для взаимодействия двух тождественных частиц в однородной среде, уравнение (17.75), предполагая, что взаимодействие не зависит от спинов частиц.

**Решение** Состояние  $|\psi_{12}\rangle$  есть

$$|\psi_{12}\rangle = \hat{a}_{\mathbf{p}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1\sigma_1}^\dagger |0\rangle. \quad (8.33)$$

Полный импульс пары,  $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ , не изменяется при перестановке частиц, в то время как относительный импульс,  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2$ , меняет знак, ср. раздел 39.6 и Рис. 39.1. Это дает

$$\langle\psi_{12}|U|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{V}(U_0 \mp U_{2\mathbf{p}}\delta_{\sigma_1\sigma_2}). \quad (8.34)$$

Обменный процесс со спин-независимым взаимодействием эффективен только для частиц с одинаковым состоянием спина («параллельные» спины).

### 8.5 Двухэлектронная система

Обменное взаимодействие играет важную роль в определении наиболее энергетически предпочтительных состояний систем с тождественными частицами. Идея того, как это получается, может быть понята из простого примера двухэлектронного атома (гелий или атом с двумя валентными электронами на верхних заполненных оболочках).

Нерелятивистский гамильтониан двухэлектронной системы во внешнем (ядерном) поле дается выражением

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - Ze^2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (8.35)$$

Для простоты, мы будем рассматривать последний член (8.35), электрон-электронного электростатического взаимодействия, как возмущение. В приближении нулевого порядка, мы берем обычную водородоподобную волновую функцию независимых электронов. Полная волновая функция



должна быть построена как правильная антисимметричная комбинация, учитывающая также спиновые переменные. Пусть электроны будут в прост пространственных состояниях  $|\nu\rangle$  с квантовыми числами  $n, \ell, m$  и  $|\nu'\rangle$  с квантовыми числами  $n', \ell', m'$ . Полные *пространственные* волновые функции двух тел с определенной симметрией равны

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_\nu(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2) + \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2) \right) \quad (8.36)$$

и

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_\nu(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2) - \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2) \right) \quad (8.37)$$

для  $\nu \neq \nu'$ , и

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_\nu(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2) \quad (8.38)$$

для  $\nu = \nu'$ . Полная спиновая функция  $\chi_{SM_S}$  должна быть синглетом,  $\chi_{00}$ , и триплетом,  $\chi_{1M_S}$ . Аналогично разделу 39.6, разрешенные атомные волновые функции

$$\Psi_S \cdot \chi_{00} \quad \Psi_A \cdot \chi_{1M_S}, \quad M_S = 1, 0, -1. \quad (8.39)$$

В нулевой аппроксимации, *все четыре функции* (8.39) *вырождены*, и их энергия является суммой энергий Бора для занятых орбит  $\nu$  и  $\nu'$ ,

$$E_{\nu\nu'}^0 = \varepsilon_\nu + \varepsilon_{\nu'}. \quad (8.40)$$

Уже в первом приближении теории возмущений, кулоновское отталкивание расщепляет вырожденные состояния (8.39). Для  $\nu = \nu'$ , антисимметричная пространственная функция (8.37) зануляется, и единственное возможное состояния это спиновый синглет  $\Psi_S \chi_{00}$ , который будет сдвинут вверх кулоновским расталкиванием.

### Задача 8.5

Рассчитать по теории возмущений основное энергетическое состояние гелиеподобного атома и энергию ионизации.

**Решение** Здесь нам понадобится только прямой интеграл, включающий две водородоподобные волновые функции  $\psi_0(r)$  для заряда  $Z = 2$ ,

$$J = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^2(r_1) \psi_0^2(r_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (8.41)$$

Используем мультипольное разложение (I.21.58) кулоновского потенциала,

$$\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell + 1} \frac{r_{<}^\ell}{r_{>^{\ell+1}}} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}_1) Y_{\ell m}(\mathbf{n}_2), \quad (8.42)$$

и примем во внимание только монопольный член  $\ell = m = 0$ , оставшийся после интегрирования изотропных функций. С явным разложением этих функций, (8.41) он сводится к двум радиальным интегралам ( $a$  – радиус Бора),

$$J = \frac{4Z^6 e^2}{\pi a^6} \int_0^\infty dr_1 \left\{ \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 r_1 + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_1^2 r_2 \right\} e^{(-2Z/a)(r_1+r_2)}. \quad (8.43)$$

Элементарное интегрирование дает

$$J = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a}. \quad (8.44)$$

Основное энергетическое состояние в этом приближении равно

$$E_0 = 2\varepsilon_0 + J = -2 \frac{(Ze)^2}{2a} + \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a} = -\frac{Z^2 e^2}{a} \left( 1 - \frac{5}{8Z} \right). \quad (8.45)$$

После ионизации атома мы остаемся с положительным ионом в основном состоянии с энергией  $-(Ze)^2/2a$ ; следовательно энергия ионизации равна

$$E_{\text{ion}} = -\frac{(Ze)^2}{2a} - E_0 = \frac{Z^2 e^2}{2a} \left( 1 - \frac{5}{4Z} \right). \quad (8.46)$$

### Задача 8.6

Улучшить результат теории возмущений предыдущей задачи, подставив заряд ядра варьируемым параметром.

**Решение** Экранировка заряда ядра другим электроном может быть аппроксимирована эффективным зарядом ядер. Следовательно, мы используем пробные водородоподобные волновые функции электронов, подставляя в  $\psi_0$  действительный заряд  $Z$  варьируемым параметром  $\zeta$ . С этой функцией, кинетическая энергия электронов равна

$$K_0 = 2 \frac{(\zeta e)^2}{2a} = \frac{(\zeta e)^2}{2a}; \quad (8.47)$$

потенциальная энергия притяжения к заряду ядра  $Z$  равна

$$U_0 = -2 \frac{Z\zeta e^2}{a}; \quad (8.48)$$

электростатическая энергия электрон-электронного взаимодействия становится, вместо (8.44),

$$J = \frac{5}{8} \frac{\zeta e^2}{a}. \quad (8.49)$$

Полная энергия  $E_0(\zeta) = K_0 + U_0 + J$  достигает минимума при

$$\zeta = Z - \frac{5}{16}, \quad E_0 = -\frac{e^2}{a} \left( Z^2 - \frac{5}{8} Z + \frac{25}{256} \right). \quad (8.50)$$

Энергия ионизации становится [сравни с (8.46)]

$$E_{\text{ion}} = \frac{Z^2 e^2}{2a} \left( 1 - \frac{5}{4Z} + \frac{25}{128Z^2} \right). \quad (8.51)$$

Энергия (8.51) отличается от действительного значения для гелия на 5.5% (как это должно быть, точное основное состояние имеет меньшую энергию, чем его варьированное приближение). Для более тяжелых гелиеподобных атомов, варьированный результат быстро достигает экспериментального значения, показывая увеличение достоверности приближения *среднего поля*.

с  $\nu \neq \nu'$ , все четыре состояния (8.39) разрешены; поскольку взаимодействие спин-независимое, три триплетных состояния будут оставаться вырожденными. Но синглетное и триплетное состояния будут расщеплены. Это чисто квантовый эффект тождественных частиц: даже когда силы не зависят от спинов, полный спин  $S$  определяет *дополнительную симметрию* пространственной части волновых функций и по этой причине влияет на энергию.

Вычисляя, аналогично (8.30), энергетический сдвиг состояний (8.36) и (8.37), мы придем к аналогичному результату: в первом приближении, это дается суммой прямого и обменного вкладов кулоновского взаимодействия  $U$  между электронами,

$$\langle \Psi_S | U | \Psi_S \rangle (\nu\nu' | U | \nu'\nu) + (\nu\nu' | U | \nu\nu'), \quad (8.52)$$

$$\langle \Psi_A | U | \Psi_A \rangle (\nu\nu' | U | \nu'\nu) - (\nu\nu' | U | \nu\nu'), \quad (8.53)$$

обычно *прямой*,  $J_{\nu\nu'}$ , и *обменный*,  $K_{\nu\nu'}$  интегралы введены,

$$J_{\nu\nu'} = (\nu\nu'|U|\nu\nu') = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi_\nu(\mathbf{r}_1)|^2 U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\psi_{\nu'}(\mathbf{r}_2)|^2, \quad (8.54)$$

$$K_{\nu\nu'} = (\nu\nu'|U|\nu\nu') = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_\nu^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu'}^*(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}_1) \psi_\nu(\mathbf{r}_2). \quad (8.55)$$

Только прямой интеграл  $J_{\nu\nu'}$  имеет простой классический аналог — обычное электростатическое взаимодействие пространственно распределенных заряженных облаков  $|\psi_\nu|^2$  и  $|\psi_{\nu'}|^2$ . Обменный интеграл  $K_{\nu\nu'}$  возникает полностью из-за квантовой интерференции

Прямой интеграл дает равный (положительный) сдвиг энергии для обоих значений спина,  $S = 0$  и  $1$ ; такой же сдвиг имеет место для различных частиц. Обменный интеграл также положителен для кулоновского взаимодействия, но для тех же пар  $(\nu\nu')$ , этот член делает пространственно-симметричную функцию  $\Psi_S$  выше по энергии, чем антисимметричный  $\Psi_A$ . Откуда, при отсутствии спин-зависимого взаимодействия, спиновые синглетные состояния оказываются выше, чем триплетные состояния для той же двухэлектронной конфигурации. Это качественно понятно: триплет связан с антисимметричной функцией  $\Psi_A$ , которая имеет *узел* при  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ , поэтому электроны приближаются друг к другу с меньшей вероятностью, что уменьшает положительный эффект кулоновского отталкивания. Окончательно, для  $\nu \neq \nu'$ , имеем

$$\delta E_{\nu\nu'}(S = 0) = J_{\nu\nu'} + K_{\nu\nu'}, \quad \delta E_{\nu\nu'}(S = 1) = J_{\nu\nu'} - K_{\nu\nu'}. \quad (8.56)$$

Для двух электронов в том же пространственном состоянии,  $\nu = \nu'$ , из (8.38) мы находим

$$\delta E_{\nu\nu} = J_{\nu\nu}. \quad (8.57)$$

Здесь, обменный вклад отсутствует, как это было в (8.34) для антипараллельных спинов.

Дополнительный важный урок этого рассмотрения состоит в том, что, как отмечалось ранее, корректная (анти)симметризация волновой функции необходима только если волновые функции тождественных частиц перекрываются. Если состояния  $|\nu\rangle$  and  $|\nu'\rangle$  локализованы в разных пространственных областях, обменный интеграл  $K_{\nu\nu'}$  исчезает, и физические результаты совпадают с теми, что получены с использованием несимметризованной волновой функции (прямой интеграл остается, обладая дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия).

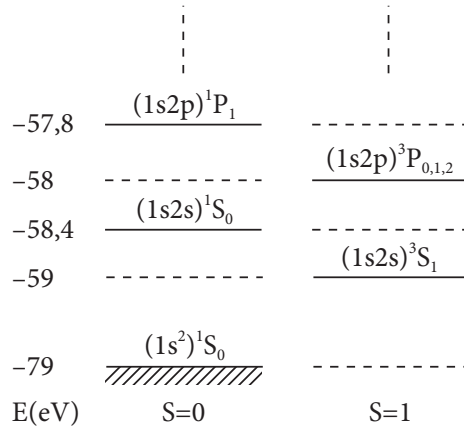


Рис. 8.1. Энергетический спектр наинизшего состояния атома гелия

## 8.6 Атом гелия — оптический спектр

Наши результаты объясняют главные свойства оптического спектра атома гелия, хотя теория возмущений недостаточна для количественных предсказаний.

*Основное состояние* соответствует конфигурации  $1s^2$ , где степень 2 говорит, что мы имеем два эквивалентных *парных* электрона на наинизшей оболочке  $1s$  ( $n = 1, \ell = m = 0$ ). В соответствии с принципом Паули, спиновая волновая функция является синглетом  $\chi_{00}$ , атомные квантовые номера  $L = S = J = 0$ , и с помощью спектроскопических обозначений мы пометим основное состояние атома как

$$^{2S+1}(L)_J \Rightarrow ^1S_0. \quad (8.58)$$

Наинизшие *возбужденные* состояния соответствуют переходу электрона на орбиту  $n = 2$ . В связи с этим, электроны становятся неэквивалентными, и мы получаем возможные члены

	$L$		
$1s2s$	0	$^1S_0$	$^3S_1$
$1s2p$	1	$^1P_1$	$^3P_{0,1,2}$

(8.59)

Мы получили две серии уровней, Рис. 18.1, синглет и триплеты. Синглетное основное состояние может быть названо *парагелий*, по аналогии с пара-

и орто-позитронием. Для всех синглетов,  $J = L$ , и отсутствует тонкая структура. Триплетные состояния начинаются с конфигурации *ортогелия*  $1s2s$  и  $L = 0$ . Для заданной конфигурации, состояния с большим  $L$  обладают более высокими энергиями, как проявляет эффект экранировки из-за электрон-электронного отталкивания. Высшие триплеты,  $L > 0$ , для заданного  $L$  могут иметь три значения  $J = L, L \pm 1$ , которые расщеплены релятивистскими эффектами тонкой структуры.

В оптическом диапазоне излучения мы имеем *электрические дипольные* переходы. Такие переходы между триплетами и синглетами запрещены, вследствие ортогональности спиновых состояний. Следовательно, состояние ортогелия долгоживущее (метастабильное). Будучи возбужденными при атомных столкновениях, атомы в триплетном  $S$ -состоянии образуют иной газ, отличный от парагелия. Последний является диамагнетиком, раздел I.24.11, в то время как ортогелий парамагнетик.

В этом примере мы снова видим, что требования определенной перестановочной симметрии совместимы с классификацией стационарных состояний, отвечающих собственным значениям глобального оператора  $(\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}})$ . Все эти операторы *аддитивны*, т.е. они выражаются как суммы тождественных одночастичных операторов, раздел 17.6, и коммутируют со всеми перестановочными операторами  $\hat{P}_{ab}$ .

## 8.7 Правила Хунда

Энергия обмена (8.56) взаимодействий между двумя тождественными частицами, определенная пространственной и дополнительной спиновой симметриями, может быть выражена как искусственное *спин-спиновое* взаимодействие. Это формально относится к оператору обмена спинами (I.22.27), который выглядит аналогично взаимодействию, зависящему от взаимной ориентации спинов.

Как использовано при решении *Задачи 15.7*, комбинации  $(1 \mp \hat{P}^\sigma)/2$  выделяют синглетную или триплетную часть любой величины, зависящей от спиновых переменных двух частиц. Следовательно, ожидаемое значение  $\delta E_{\nu\nu'}$  электростатической энергии для электронов, занимающих разные орбитали  $\nu$  and  $\nu'$  может быть записано как

$$\begin{aligned} \delta E_{\nu\nu'} &= \frac{1}{4} [3\delta E_{\nu\nu'}(S=1) + \delta E_{\nu\nu'}(S=0)] \\ &+ \frac{1}{4} [\delta E_{\nu\nu'}(S=1) - \delta E_{\nu\nu'}(S=0)] (\sigma_1 \cdot \sigma_2). \end{aligned} \quad (8.60)$$

Здесь спин-зависимый член равен

$$\delta E_{\nu\nu'}^{\text{spin}} = -\frac{K_{\nu\nu'}}{2}(\sigma_1 \cdot \sigma_2), \quad (8.61)$$

что в случае атома эквивалентно эффективному выравниванию спинов ( $K > 0$ ).

В сложных атомах с многими валентными электронами, это эффективное электростатическое взаимодействие расщепляет состояния одной и той же конфигурации, которые были вырождены в приближении независимых частиц, в соответствии с разными схемами связи углового момента. Как мы видели на простом примере атома азота, *Задача 18.3*, в качестве результата электростатического расщепления мы имеем несколько возможных *электронных термов* с комбинациями  $(L, S)$  совместимыми с принципом Паули. Эти термы имеют разные энергии; релятивистские эффекты дальнейшего расщепления каждого  $LS$ -терма на уровни тонкой структуры  $LSJ$  оказываются меньше. Окончательно, мы можем идти вглубь сверхтонкой структуры, характеризуемой квантовыми числами  $LSJF$ .

Эмпирические данные и более точные расчеты для сложных атомов устанавливают *правила Хунда* для определения *наинизшего* по энергии  $LS$ -терма. В соответствии с *первым* правилом, наинизший терм соответствует *максимально* возможному значению полного спина  $S$ . С идеей эффективного спин-спинового взаимодействия (8.61) мы понимаем этот результат как предпочтение для наиболее симметричной полной спиновой волновой функции, которая соответствует статистике Ферми, минимуму пространственной симметрии, и, следовательно, минимальному кулоновскому отталкиванию. *Второе правило* выбирает наинизший терм среди состояний с максимальным  $S$  и различными значениями  $L$ , если имеются несколько возможных. Минимальная энергия соответствует *максимальному* разрешенному значению  $L$ . Это снова соответствует минимальному перекрытию пространственных орбит электростатически отталкивающихся электронов; максимальное перекрытие задано парными электронами на *сопряженных по времени* орбитах  $|\ell, m_\ell\rangle$  и  $|\ell, -m_\ell\rangle$ , раздел I.20.6, которые связаны с минимальным значением  $L = 0$ .

**ЗАДАЧА 18.7.** Определить наинизший терм для атома азота, где возможное множество квантовых чисел было найдено в *Задаче 18.3*.

**РЕШЕНИЕ.** В соответствии с *правилом Хунда*, терм основного состояния должен быть  $^4S_{3/2}$  с максимальным спином  $S = 3/2$  и  $L = 0$ . Это может быть найдено без полного перечисления всех возможных состояний. Достаточно установить, что максимальный спин равен  $3/2$ , и он соответствует выравниванию всех трех электронных спинов. Тогда все орбитальные проекции  $m_\ell$  электронов должны

быть различными добавками к  $M_L = 1 + 0 + (-1) = 0$ . Следовательно,  $L = 0$ , как всегда в случае состояния с максимальным спином для полузаполненной орбитали.

## 8.8 Симметрия частица"—дырка

В атомах, *заполненные оболочки* являются конфигурациями, где все одночастичные состояния с разными проекциями спина,  $m_s$ , и орбитального момента,  $m_\ell$ , возможные для заданных квантовых чисел  $n$  и  $\ell$ , заняты. Тогда полные проекции  $M_S, M_L, M_J$  спина,  $S$ , орбитального,  $L$ , и полного углового момента,  $J$ , обнулены. Состояние заполненных оболочек единственно, и, очевидно, вращательно инвариантно. Соответствующий терм это  $^1S_0$  и  $S = L = J = 0$ .

В ядрах (или тяжелых атомах), спин-орбитальная связь является сильной, и, вместо  $LS$  связи, следует использовать  $jj$ -схему связи, когда мы впервые находим  $\mathbf{j} = \vec{\ell} + \mathbf{s}$  для каждой частицы, а затем связываем их с полным угловым моментом  $\mathbf{J} = \sum_a \mathbf{j}_a$ . В этой схеме индивидуальное значение орбитального момента  $\ell_a$  значительно и определяет четность одночастичной орбитали. Ядерная  $\ell s$ -связь генерирует спин-орбитальный дублет  $j = \ell \pm 1/2$ , с разделением знака противоположно атомному случаю — уровень с большим  $j$  имеет низшую энергию. Тогда мы займем  $j$ -уровни один за другим, и заполним  $j$ -уровень снова показывающий свойства заполненной оболочки  $J = 0$ ; поскольку только  $J$  и четность  $\Pi$  имеют определенные значения, обычно обозначение  $J^\Pi$  используется в спектроскопии, поэтому заполненный уровень соответствует состоянию  $0^+$ .

### Задача 8.7

$N$  протонов в ядре занимают оболочку с угловым моментом  $j$ . Каков наибольший возможный угловой момент  $J_{\max}(N)$  системы?. При каком числе частиц это наибольшее значение достигает максимума?

**Решение** При заданном  $N$ ,

$$J_{\max}(N) = \frac{1}{2} N(2j + 1 - N). \quad (8.62)$$

Наибольшее возможное значение этой величины достигается при полузаполненной оболочке,

$$N = \frac{2j + 1}{2} \rightsquigarrow J_{\max} = \frac{(2j + 1)^2}{8}. \quad (8.63)$$



Если заполненная оболочка может принимать  $\Omega$  фермионов, но в действительном состоянии имеет только  $N \leq \Omega$  частиц в этой оболочке, мы можем также сказать, что состояние многих тел имеет  $\Omega - N$  дырок. Это особенно удобно для оболочки, занятой  $N > \Omega/2$  частицами ( $\Omega$  всегда четное число). Дырки, как отдельные объекты, подчиняются статистике Ферми, поскольку одночастичное состояние занято либо пусто. Формально, мы можем сделать *каноническое преобразование частица-дырка* простым обменом между операторами рождения и аннигиляции. Вакуум в картине дырок является полностью заполненной оболочкой, оператор  $\hat{h}_{jm}^\dagger = \hat{a}_{jm}$  создает дырку с квантовыми числами  $j, m$  (для определенности мы используем здесь  $jj$ -схему; также справедливо в  $ls$ -схеме для операторов  $\hat{a}_{\ell m \ell m_s}$ ), в то время как оператор  $\hat{h}_{jm} = \hat{a}_{jm}^\dagger$  заполняет в пустом месте аннигилирует дырку. Антicomмутационные свойства (41.14) инвариантны при преобразовании частица-дырка.

Рассмотрим состояние из  $N$  частиц в оболочке емкостью  $\Omega$ . Пусть это состояние имеет вращательные квантовые числа  $JM$ . Мы знаем, что в этом случае нам нужно образовать специальную комбинацию детерминантов Слетера, или  $N$  операторов рождения  $\hat{a}^\dagger$ , с правильной вращательной симметрией. Если мы поставим недостающие  $(\Omega - N)$  частиц в дополнительную комбинацию, мы получим заполненную оболочку с квантовыми номерами  $|JM = 00\rangle$ . Это означает, что дополнительная комбинация имеет квантовые номера  $J, -M$ , и существует взаимно однозначное соответствие между состояниями из  $N$  и  $\Omega - N$  частиц, или между состояниями из  $N$  частиц и  $N$  дырок, поэтому

$$|00; \rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_M (-)^{J-M} |JM; N s\rangle |J-M; N\rangle, \quad (8.64)$$

где мы используем правило (I.22.34), образующее вращательный инвариант. Заметим, что дырочная компонента совпадает в уравнении (8.64) с сопряженной по времени, в соответствии с (I.20.68). Результат (8.62) обладает явной симметрией частица-дырка. В схеме  $LS$ -связи, состояния дырок имеют те же значения всех угловых моментов,  $S, L$ , и  $J$ , как и состояния частиц.

### Задача 8.8

Используя правила Хунда, найти наинизший терм для атомных конфигураций  $p^N$  с  $N$  электронами на  $p$ -орбите.

**Решение**  $N$  может принимать значения от нуля до шести, и симметрия частица-дырка гарантирует, что все возможные состояния те же самые для

$N = 0$  и 6, 1 и 5, 2 и 4. Полузаполненная оболочка, *Задача 18.6*, может рассматриваться с точки зрения частицы или дырки. Наинизший терм

$$\begin{array}{ll} N = 0, 6 & {}^1S_0 \\ N = 1, 5 & {}^2P_{1/2}, {}^2P_{3/2} \\ N = 2, 4 & {}^3P_0, {}^3P_2 \\ N = 3 & {}^4S_{3/2}. \end{array} \quad (8.65)$$

Знак расщепления тонкой структуры меняется при полузаполненной оболочке: ниже  $N = \Omega/2$  наинизшее значение  $J$  опускает (нормальная электронная спин-орбитальная связь), в то время как выше  $N = \Omega/2$  тонкая структура определяется дырками с эффективным противоположным зарядом, поэтому тонкая структура инвертируется.

## 8.9 Структура оболочки

Как мы видели в примерах гармонического осциллятора и кулоновского потенциала, уровни частиц имеют тенденцию группироваться в сгустки с более или менее широким зазором между ними. В тех двух исключительных примерах, имеется точное вырождение многих орбиталей с очень разными пространственными формами, но с той же энергией. Это вырождение является следствием особой симметрии, как мы обсуждали в соответствующих разделах. Однако, даже в случаях, где отсутствует точная симметрия, часто мы можем видеть явную оболочечную структуру с одночастичным уровнем плотности *модулированной* максимумами (*оболочки*) и минимумами (*зазоры между оболочками*).

Появление оболочечной структуры дискретного спектра, вообще говоря, имеет полуклассическое происхождение в *почти резонансном* соотношении между частотами отвечающими движению различных степеней свободы. В пределе полного разделения переменных, квантовая энергия частицы является суммой парциальных энергий,

$$E(n_1, n_2, n_3) = \varepsilon_1(n_1) + \varepsilon_2(n_2) + \varepsilon_3(n_3). \quad (8.66)$$

Оболочка образуется, когда малая вариация, скажем, увеличение на  $\delta n_i$  квантового числа может быть с высокой точностью скомпенсировано вариацией,  $-\delta n_j$ , других квантовых чисел так, что полная энергия меняется лишь слегка. Это условие может быть записано для достаточно больших квантовых чисел, когда с парциальными энергиями  $\varepsilon_i(n_i)$  можно приближенно

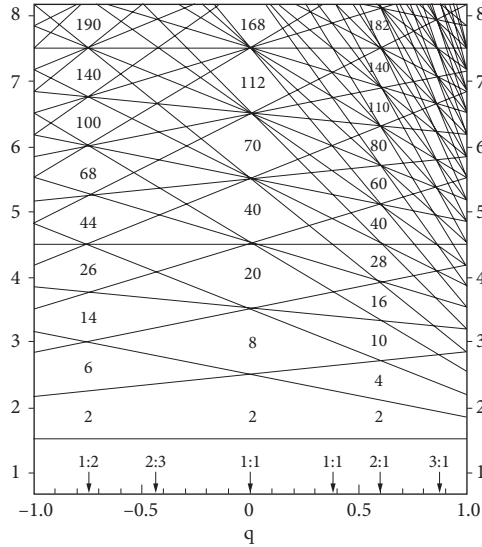


Рис. 8.2. Схема одночастичных уровней в поле анизотропного аксиально-симметричного гармонического осциллятора

обращаться, как с непрерывными функциями

$$\frac{d\varepsilon_i}{dn_i}\delta n_i - \frac{d\varepsilon_j}{dn_j}\delta n_j \approx 0. \quad (8.67)$$

Однако, в полуклассической области, зазор  $d\varepsilon/dn = \Delta$  между смежными дискретными уровнями для данных степеней свободы равен частоте  $\omega$  соответствующей периодическому классическому движению с той же энергией, уравнения (I.1.62 и I.15.78). Следовательно, уравнение (8.67) образования оболочки, на самом деле, является условием приближенного классического резонанса между двумя периодическими движениями,

$$\omega_i \delta n_i \approx \omega_j \delta n_j. \quad (8.68)$$

Для изотропного гармонического осциллятора уравнение (8.68) является точным, поскольку  $\omega_i = \omega_j$ , но оно справедливо приближенно, в некотором интервале квантовых чисел, в случае слегка различных частот  $\omega_i$  и  $\omega_j$ . Когда частоты удаляются, оболочечная структура размывается, но она появляется снова в области следующего резонанса, например, при отношении частот близком к 2:1.

**Задача 8.9**

Нарисовать систему одночастичных уровней для потенциала аксиально-симметричного гармонического осциллятора с различными значениями отношения частот,  $\omega_x/\omega_z = \omega_y/\omega_z \equiv \omega_\perp/\omega_z$ ; сравнить с Рис. I.18.2 для двумерного случая.

**Решение** Смотри Рис. 18.2, где параметр деформации равен  $q = (\omega_\perp - \omega_z)/\omega_0$ ,  $\omega_0 = (2\omega_\perp + \omega_z)/3$ , числа показывают максимальные занятости оболочек. Деформация может быть переведена в отношение осей.

## Глава 9

### Фермионы

Говорят, что вскоре после открытия уравнения Шрёдингера для волновой функции электронов  $\Psi$ , которое блестяще оправдалось для малых систем таких как  $\alpha$  или  $^2\text{He}$ , П.М. Дирак объявил конец химии, поскольку все ее содержание описывалось этим великим по силе уравнением. «К сожалению», как говорят, добавил он, «практически во всех случаях сложность этого уравнения не позволяет получить его решение».

В. Кон, *Нобелевская лекция, 1998*

#### 9.1 Идеальный Ферми-газ

Точное решение реалистической квантовой задачи о системе многих частиц, взаимодействующих между собой и с внешним полем, невозможно (и было бы бесполезным). Нужны приближённые методы, основанные на эвристической информации, физических гипотезах и инструктивных упрощённых моделях. Более того, вместо точной чрезвычайно сложной волновой функции нам нужно ограниченное количество информации, которая может быть непосредственно связана с наблюдаемыми величинами. Взаимодействие обычно не является слабым, и прямолинейное применение теории возмущений на основе картины независимых частиц не работает. Тем не менее мы начнём с идеального газа невзаимодействующих частиц — этот шаг необходим для того, чтобы найти подходы к физике реалистических систем со взаимодействием.

Эта идеализированная картина уже обсуждалась в главе 18 для атомных и ядерных конфигураций. В идеальном Ферми-газе мы имеем  $N$  тождественных фермионов в общем внешнем поле, и нерелятивистский гамильтониан даётся формулой

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^N \left\{ \hat{K}_a + \hat{U}_a \right\} \equiv \sum_{a=1}^N \hat{h}_a. \quad (9.1)$$

Волновые функции системы как целого  $\Psi$  строятся из *одночастичных* функций  $\psi_\lambda$ , удовлетворяющих

$$\hat{h}\psi_\lambda = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda. \quad (9.2)$$

Вследствие неразличимости частиц, все операторы  $\hat{h}_a$  идентичны. Решение уравнения (9.2) даёт полный ортонормированный набор функций  $\{\psi_\lambda\}$  и их энергии  $\varepsilon_\lambda$ . *Многочастичные* стационарные состояния  $\Psi$  даются слэтеровскими детерминантами (или относительно простыми их комбинациями, имеющими определённые значения некоторых интегралов движения), см. главу 18. Эти состояния соответствуют различным распределениям частиц по одночастичным состояниям  $\psi_\lambda$ . На языке вторичного квантования, мы выбираем  $N$  различных *орбиталей*  $\psi_\lambda$  и действуем на вакуум  $|0\rangle$   $N$  операторами рождения  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , по одному на каждую из  $N$  выбранных орбиталей. Энергия каждого стационарного состояния даётся суммой (18.3). Основное состояние соответствует заполнению  $N$  низших орбиталей. Мы называем *энергией Ферми* энергию  $\varepsilon_F$  самого высокого из занятых состояний. Если имеются вырожденные состояния с такой энергией, то они образуют *поверхность Ферми*  $\Sigma_F$ .

В простейшем *пространственно однородном* случае потенциал  $\hat{U}_a \rightarrow U(\mathbf{r}_a)$  в (9.1) определяется стенками большого ящика объёма  $V = L^3$  с периодическими граничными условиями, см. раздел I.3.8. Соответствующие орбитали — это плоские волны  $|\lambda\rangle = |\mathbf{p}\sigma\rangle$  с импульсом  $\mathbf{p}$  и проекцией спина  $\sigma$  на некоторую ось квантования,

$$\psi_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{r}, s_z) = (\mathbf{r}s_z|\mathbf{p}\sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})} \chi_\sigma(s_z). \quad (9.3)$$

Здесь  $\chi_\sigma(s_z)$  — спиновая функция, а компоненты волнового вектора являются дискретными,  $k_i = p_i/\hbar = (2\pi/L)n_i$ . Одночастичные энергии состояний (9.3),

$$\varepsilon_\lambda \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (9.4)$$

не зависят от  $\sigma$  и от направления  $\mathbf{p}$ .

В *основном состоянии* системы все орбитали (9.3) заняты вплоть до энергии  $\varepsilon_F$ , характеризуемой, в соответствии с (9.4), *импульсом Ферми*  $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ . В *термодинамическом пределе* большого объёма  $V$  и большого числа частиц  $N$  при фиксированной *плотности*  $n = N/V$ , импульс Ферми зависит только от плотности. Число частиц равно числу занятых орбиталей  $|\mathbf{p}\sigma\rangle$ ,

$$N = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}, \quad n_{\mathbf{p}\sigma} = 1 \text{ если } p \leq p_F \text{ и } 0 \text{ если } p > p_F. \quad (9.5)$$

Переходя к интегрированию со стандартным подсчётом орбиталей (I.3.94), мы имеем для основного состояния

$$N = g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{p < p_F} d^3p = \frac{gVp_F^3}{6\pi^2\hbar^3}, \quad (9.6)$$

где  $g$  — число вырожденных внутренних состояний частицы, в нашем случае число проекций спина  $(2s + 1)$ . Занятые орбитали образуют *сферу Ферми* в импульсном пространстве, радиус которой равен

$$p_F = \left( \frac{6\pi^2\hbar^3}{g} \frac{N}{V} \right)^{1/3} = \left( \frac{6\pi^2\hbar^3}{g} n \right)^{1/3}. \quad (9.7)$$

Среднее расстояние между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3} \sim 1/k_F$  определяется волновым вектором  $k_F = p_F/\hbar$ .

Таким же образом мы можем вычислить энергию основного состояния идеального Ферми-газа:

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = gV \int_{p < p_F} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m}, \quad (9.8)$$

или, используя (9.6),

$$E_0 = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} N = \frac{3}{5} \varepsilon_F N. \quad (9.9)$$

Средняя кинетическая энергия частицы,  $\bar{\varepsilon} = E_0/N = (3/5)\varepsilon_F$ , растёт с плотностью  $\propto n^{2/3}$ . Это согласуется с основанной на соотношении неопределённостей оценкой температуры (15.9), соответствующей наступлению квантовых эффектов в вырожденном газе. Когда плотность возрастает и расстояние между частицами  $r_0 = [3/(4\pi n)]^{1/3}$  уменьшается, энергия взаимодействия обычно увеличивается. Однако кулоновская энергия газа заряженных частиц увеличивается только как  $\propto 1/r_0 \propto n^{1/3}$ , т.е. *медленнее*, чем кинетическая энергия. Вопреки интуиции, плотный кулоновский газ оказывается ближе по своим свойствам к идеальному газу: *относительная* роль взаимодействия убывает.

Во многих приложениях важную роль играет *плотность состояний на поверхности Ферми*  $\nu_F$ . Поскольку любое слабое возмущение Ферми-газа может повлиять только на слой моря Ферми вблизи поверхности (частицы в глубоких состояниях не могут возбуждаться, поскольку соседние места выше по энергии уже заняты), именно  $\nu_F$  определяет, насколько сильным

будет отклик газа на возмущение. По стандартному определению (I.3.83), см. также §2.5, плотность одночастичных состояний есть число таких состояний на единичный интервал энергий (мы также подразумеваем здесь единичный объём),

$$\nu(\varepsilon) = \frac{g}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \frac{4\pi dp}{d\varepsilon} \quad (9.10)$$

где мы проинтегрировали по телесному углу, предполагая изотропный энергетический спектр  $\varepsilon(p)$ . Для  $\varepsilon(p) = p^2/2m$  мы получаем

$$\nu_F \equiv \nu(\varepsilon_F) = \frac{gm}{2\pi^2\hbar^3} p_F, \quad (9.11)$$

или, сравнивая с выражением (9.6) для плотности  $n = N/V$ , мы приходим к плотности состояний на единичный объём

$$\nu_F = \frac{3mn}{p_F^2} = \frac{3n}{2\varepsilon_F}. \quad (9.12)$$

### Задача 9.1

Рассмотрите атомное ядро ( $Z$  протонов и  $N$  нейтронов) в модели Ферми-газа. Покажите, что нейтрон-протонный дисбаланс  $N - Z$  имеет своей ценой *энергию симметрии*, пропорциональную  $T_3^2/A$ , где  $T_3$  — проекция изоспина (16.11),  $A = N + Z$  — массовое число, и мы предполагаем  $|N - Z|/A \ll 1$ . Выразите коэффициент пропорциональности через энергию Ферми  $\varepsilon_F$  симметричного ядра ( $N = Z$ ).

**Решение** Полная кинетическая энергия нейтронного и протонного Ферми-газов есть

$$E_N + E_Z = \overline{\varepsilon_n} N + \overline{\varepsilon_p} Z \quad (9.13)$$

в терминах кинетических энергий нуклонов. Из (9.9)

$$E_N + E_Z = \text{const} \cdot \left\{ N \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} + Z \left( \frac{Z}{V} \right)^{2/3} \right\} = \text{const} \cdot \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}}, \quad (9.14)$$

поскольку объём ядра пропорционален числу нуклонов  $A$ . Энергия (9.13) минимальна при  $N = Z = A/2$ . Изменение энергии из-за избытка нейтронов равно

$$E_{\text{symm}} = E_N + E_Z - 2E_{A/2} = \frac{\text{const}}{A^{2/3}} \left[ N^{5/3} + Z^{5/3} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{5/3} \right], \quad (9.15)$$



или, вводя изоспин  $2T_3 = Z - N$ ,  $|T_3| \ll A$ ,

$$E_{\text{symm}} = \frac{\text{const}}{A^{2/3}} \left[ \left( \frac{A}{2} - T_3 \right)^{5/3} + \left( \frac{A}{2} + T_3 \right)^{5/3} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{5/3} \right] \propto \frac{T_3^2}{A}. \quad (9.16)$$

Собирая коэффициенты, мы находим

$$E_{\text{symm}} = \frac{4}{3} \varepsilon_F \frac{T_3^2}{A} = \varepsilon_F \frac{(N - Z)^2}{3A}. \quad (9.17)$$

В действительности этот эффект объясняет только около половины энергии симметрии; остальное происходит от нуклонных взаимодействий, зависящих от изоспина, которые сильнее для нейтрон-протонных пар с  $T = 0$ , чем для пар одинаковых частиц ( $T = 1$ ).

## Задача 9.2

19.2 Найдите корреляционную функцию плотностей в различных точках для идеального Ферми-газа в ящике.

**Решение** Оператор плотности для данной проекции спина даётся

$$\hat{N}_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma} \quad (9.18)$$

(ср. с (17.42)), и среднее значение полной плотности в основном состоянии Ферми-газа есть

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{N}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{N}{V} \equiv n, \quad (9.19)$$

причём каждая спиновая компонента даёт вклад  $n/(2s+1)$ . Корреляционная функция плотности содержит

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2) = \langle \hat{N}_{\mathbf{r}_1\sigma_1} \hat{N}_{\mathbf{r}_2\sigma_2} \rangle, \quad (9.20)$$

или

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_2]} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_3\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4\sigma_2} \rangle, \quad (9.21)$$

как это было бы и для различных частиц. Для разных проекций спина  $\sigma_1 \neq \sigma_2$  матричный элемент в (9.21) задаёт  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_3$ , и корреляция плотности отсутствует,

$$K(\mathbf{r}_1\sigma_1; \mathbf{r}_2\sigma_2 \neq \sigma_1) = \frac{1}{V^2} \left( \frac{N}{2s+1} \right)^2 = \frac{n^2}{(2s+1)^2}. \quad (9.22)$$

Корреляции появляются при  $\sigma_2 = \sigma_1 \equiv \sigma$ . Теперь есть два случая, в которых матричный элемент отличен от нуля: первый,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_3$ , приводит к предыдущему нескоррелированному результату (9.22), тогда как вторая возможность,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$ ,  $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ , определяет

$$K(\mathbf{r}_1\sigma; \mathbf{r}_2\sigma) = \frac{n^2}{(2s+1)^2} + \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} n_{\mathbf{k}_1\sigma}(1-n_{\mathbf{k}_2\sigma}). \quad (9.23)$$

В корреляционном члене уравнения (9.23) сумма по  $\mathbf{k}_1$  берётся по занятым состояниям  $k_1 < k_F$ , тогда как сумма по пустым состояниям  $\mathbf{k}_2$  даёт ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ )

$$\left( \sum_{\mathbf{k}_2} - \sum_{k_2 < k_F} \right) e^{i(\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r})}. \quad (9.24)$$

Полная сумма по  $\mathbf{k}_2$  равна  $V\delta(\mathbf{r})$ , так что

$$K(\mathbf{r}_1\sigma; \mathbf{r}_2\sigma) = \left( \frac{n}{2s+1} \right)^2 + \frac{n}{2s+1} \delta(\mathbf{r}) - \left( \frac{I(r)}{V} \right)^2, \quad (9.25)$$

где

$$I(r) = \sum_{k < k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = \int_{k < k_F} \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}, \quad (9.26)$$

и интегрирование приводит к

$$I(r) = \frac{V}{2\pi^2 r^3} [\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)]. \quad (9.27)$$

Таким образом, результат для корреляционной функции (ср. с (17.52)),

$$C(\mathbf{r}_1\sigma, \mathbf{r}_2\sigma) \equiv K(\mathbf{r}_1\sigma, \mathbf{r}_2\sigma) - \left( \frac{n}{2s+1} \right)^2, \quad (9.28)$$

есть ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ )

$$C(\mathbf{r}\sigma) = \frac{n}{2s+1} \delta(\mathbf{r}) \frac{[\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)]^2}{4\pi^4 r^6}. \quad (9.29)$$

Корреляция всегда отрицательна, как и следовало ожидать по принципу Паули (так называемая *корреляционная полость*), но она быстро убывает на больших расстояниях, рис. 19.1; осцилляции показывают интерференционную картину с характерной длиной волны  $1/k_F$  порядка среднего расстояния между частицами. Обратите внимание, что нетривиальные корреляции появляются только из-за обменных эффектов между частицами с параллельными спинами.

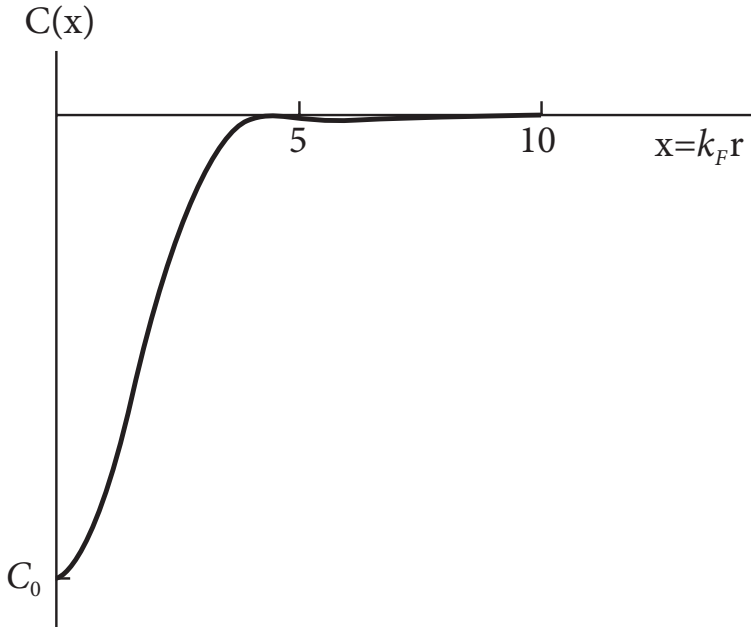


Рис. 9.1. Корреляционная функция плотностей для фермионов с одинаковыми проекциями спина;  $x = k_F r > 0$ ;  $C_0 = 4\pi^4 k_F^6$ .

## 9.2 Спиновый парамагнетизм

Когда на Ферми-газ действует внешнее поле, основное состояние перестраивается так, чтобы минимизировать энергию в новых обстоятельствах.

В качестве примера мы рассмотрим, как электронные спины ведут себя в постоянном магнитном поле.

При отсутствии магнитного поля минимум энергии соответствует равным числам  $N_{\pm}$  электронов с проекциями спинов  $s_z = \pm 1/2$ . (Подобным образом, энергетически наиболее выгодная ситуация по отношению к изоспину достигается при равном числе протонов и нейтронов, см. задачу 19.1. Частицы с обоими проекциями спинов занимают одинаковые сферы Ферми,

$$n_+ = n_- = \frac{n}{2} = \frac{p_F^3}{6\pi^2\hbar^3}. \quad (9.30)$$

Энергии Ферми равны,

$$\varepsilon_F^{(+)} = \varepsilon_F^{(-)} = \frac{p_F^2}{2m}. \quad (9.31)$$

В присутствии магнитного поля  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$  мы должны учесть дополнительную энергию взаимодействия спинов ( $g_s = -|e|\hbar/mc$ ) с полем,

$$-(\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}}) = -g_s \hbar s_z \mathcal{B} = \pm \mu_B \mathcal{B}. \quad (9.32)$$

Одночастичные энергии для двух проекций спина раздвигаются,

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \frac{p^2}{2m} \pm \mu_B \mathcal{B}. \quad (9.33)$$

При данном импульсе, энергия одной проекции спина превосходит энергию другой на  $2\mu_B \mathcal{B}$ . Однако в минимуме полной энергии наибольшие энергии для обеих проекций должны быть одинаковы, поскольку в противном случае было бы выгодно перевести частицы из группы с большей энергией в группу с меньшей. Поэтому основное состояние характеризуется условием

$$\varepsilon_F^{(+)} = \frac{p_F^{(+)^2}}{2m} + \mu_B \mathcal{B} = \varepsilon_F^{(-)} = \frac{p_F^{(-)^2}}{2m} - \mu_B \mathcal{B}, \quad (9.34)$$

или

$$\frac{p_F^{(+)^2}}{2m} + 2\mu_B \mathcal{B} = \frac{p_F^{(-)^2}}{2m}. \quad (9.35)$$

Таким образом, две поверхности Ферми в импульсном пространстве расщепляются, и в основном состоянии  $N_+ < N_-$ . Смещение в слабом магнитном поле, рис. 19.2,

$$\frac{p_F^{(+)^2} - p_F^{(-)^2}}{2m} = \frac{(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} \left( n_+^{2/3} - n_-^{2/3} \right), \quad (9.36)$$

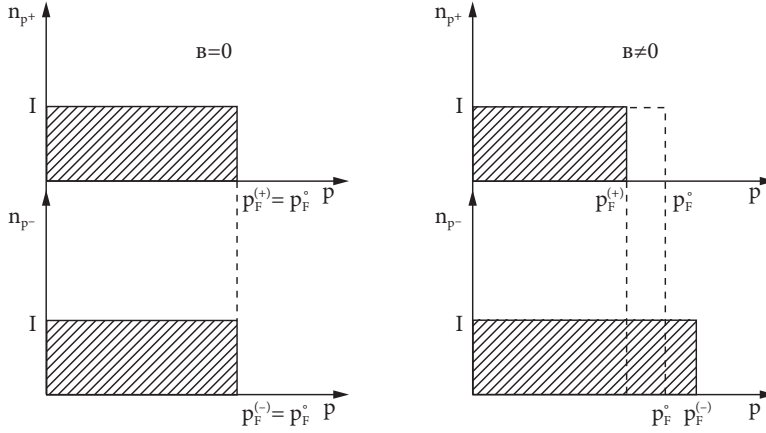


Рис. 9.2. Смещение поверхностей Ферми для двух проекций спина в магнитном поле.

может быть вычислено из (9.35). В слабом поле смещение мало по сравнению с невозмущённой энергией Ферми. Мы можем положить, подобно (9.16),

$$n_+ = \frac{n}{2} (1 - x), \quad n_- = \frac{n}{2} (1 + x), \quad (9.37)$$

и разлагать по степеням  $x$  (сравните с (9.17)):

$$\begin{aligned} \frac{p_F^{(+)^2}}{2m} - \frac{p_F^{(-)^2}}{2m} &= \frac{(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} \left(\frac{n}{2}\right)^{2/3} \left[ (1 - x)^{2/3} - (1 + x)^{2/3} \right] \\ &\approx \frac{4}{3} x \frac{(3\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2}{2m} = \frac{4}{3} x \varepsilon_F, \end{aligned} \quad (9.38)$$

где  $\varepsilon_F$  — нормальная энергия Ферми-газа с полной плотностью  $n$  без магнитного поля. Из этого и уравнения (9.35),

$$x = \frac{3}{2} \frac{\mu_B \mathcal{B}}{\varepsilon_F}; \quad (9.39)$$

практически всегда эта величина действительно весьма мала.

Результат (9.39) определяет магнитный момент системы (на единичный объём),

$$\mu = \mu_B (n_- - n_+) = \mu_B n x = \mu_B^2 \frac{3n}{2\varepsilon_F} \mathcal{B}. \quad (9.40)$$

Мы получили *парамагнетизм Паули*, частичное выстраивание спинов в магнитном поле, и нашли *парамагнитную спиновую восприимчивость*

$$\chi_s = \frac{\partial \mu}{\partial \mathcal{B}} = \mu_B^2 \frac{3n}{2\varepsilon_F}. \quad (9.41)$$

Уравнение (9.12) для плотности состояний на поверхности Ферми позволяет нам записать эту величину как

$$\chi_s = \mu_B^2 \nu_F. \quad (9.42)$$

### Задача 9.3

19.3 Покажите, что результат в виде (9.42) является универсальным — не зависит от энергетического спектра невозмущённого газа  $\varepsilon(p)$ .

**Решение** Энергетический слой, на который влияет поле  $\mathcal{B}$  —  $\Delta\varepsilon \sim \mu_B \mathcal{B}$ . Две поверхности Ферми расщепляются на  $\Delta\varepsilon \sim \mu_B \mathcal{B}$ . Число состояний каждого спина в этом слое на единичный объём есть

$$\Delta n = (1/2) \nu_F \Delta\varepsilon = \mu_B \nu_F \mathcal{B}. \quad (9.43)$$

Магнитный момент равен

$$\mu = \mu_B \Delta n = \mu_B^2 \nu_F \mathcal{B}, \quad (9.44)$$

что эквивалентно (9.42).

## 9.3 Орбитальный диамагнетизм

Орбитальное движение электронов в вырожденном Ферми-газе квантуется, что подробно обсуждалось в главе I.13. В среднем энергия каждого уровня Ландау увеличивается на энергию нулевых колебаний  $\hbar\omega_c/2$  с циклотронной частотой  $\omega_c = |e|\mathcal{B}/mc$ . Поэтому влияние магнитного поля на орбитальное движение должно быть *диамагнитным*, энергия системы увеличивается, в отличие от парамагнитного эффекта выстраивания спинов, уменьшающего энергию системы.

Полная орбитальная энергия в статическом однородном магнитном поле  $\mathcal{B}$  есть энергия занятых уровней Ландау. В слабом поле,  $\mu_B \mathcal{B} \ll \varepsilon_F$ , внутри поверхности Ферми находится очень много уровней Ландау. Поскольку магнитное поле нечётно по отношению к обращению времени, положение энергии Ферми может измениться только во втором порядке по  $\mathcal{B}$ , что

означает, что сдвиг мал по сравнению с расстояниями между уровнями, и им можно пренебречь. В основном состоянии мы занимаем уровни Ландау и соответствующие состояния продольного движения вплоть до  $\varepsilon_F$ , и полная энергия на единичный объём может быть записана как

$$E = 2 \frac{|e|\mathcal{B}}{(2\pi\hbar)^2 c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_n \theta(\varepsilon_F - \varepsilon(n, p_z)) \varepsilon(n, p_z), \quad (9.45)$$

где одночастичная энергия (I.13.61) даётся формулой

$$\varepsilon(n, p_z) = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad (9.46)$$

и мы учли вырождение (I.13.62) каждого уровня Ландау, добавив множитель 2 для проекций спина. Функция  $\theta(y)$  в (9.45) — обычная ступенька, равная 1 при  $y > 0$  и 0 при  $y < 0$ .

С ростом величины  $\mathcal{B}$  увеличиваются также циклотронная частота и ёмкость уровней. Поэтому уровни Ландау пересекают поверхность Ферми  $\Sigma_F$  один за другим и становятся пустыми, тогда как население частиц распределяется по оставшимся уровням ниже  $\Sigma_F$ , которые увеличивают свой объём. После каждого пересечения  $\Sigma_F$  число занятых уровней уменьшается на 1, и вся картина приблизительно повторяется, потому что полное число занятых уровней всё ещё огромно. Поэтому свойства системы приближённо *периодичны* как функция  $\varepsilon_F/\hbar\omega_c$ , или обратного магнитного поля, так называемый *эффект де Гааза–ван Альфена*. Ниже мы вычислим *регулярную* часть орбитального магнетизма, соответствующую усреднению по этим осцилляциям. Относительное изменение магнитного поля между двумя перестройками  $\delta\mathcal{B}/\mathcal{B} \simeq \hbar\omega_c/\varepsilon_F$ .

Усреднение, которое выделяет регулярную (монотонную) часть магнитного отклика, может быть произведено путём замены дискретной суммы по  $n$  в уравнении (9.45) на интеграл с помощью формулы суммирования Эйлера–Маклорена, §4.7. Вместо (4.90) мы получаем с нижним пределом  $a$

$$\int_a^{\infty} dx f(x) \approx \frac{1}{2} f(a) + \sum_{n=1}^{\infty} f(n+a) + \frac{1}{12} f'(a). \quad (9.47)$$

Теперь, беря  $a = 1/2$  и дополняя интеграл в (9.47) куском от 0 до  $1/2$  (внутри этого интервала мы можем интерполировать  $f(x) \approx f(0) + xf'(0)$ ), мы приводим эту формулу к удобному виду

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n+1/2) \approx \int_0^{\infty} dx f(x) + \frac{1}{24} f'(0). \quad (9.48)$$

**Задача 9.4**

19.4 Определяя орбитальную магнитную восприимчивость  $\chi_{\text{orb}}$  как в формуле (I.24.63) вычислите её величину для Ферми-газа [1], §59.

**Решение** Используем формулу суммирования (9.48) в выражении (9.45) для энергии. Член с интегралом в (9.48) даёт часть энергии, которая не зависит от магнитного поля. Весь эффект происходит из поправочного члена  $(1/24)f'(0)$ , т.е. из возникновения *квантованного дискретного спектра*. Этот член легко вычислить прямым интегрированием по  $p_z$ ; производная от  $\theta(y)$  есть  $\delta(y)$ . Этот член даёт

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2} \chi_{\text{orb}} B^2, \quad (9.49)$$

где *диамагнитная восприимчивость* равна

$$\chi_{\text{orb}} = -\frac{1}{3} \mu_B^2 \nu_F, \quad (9.50)$$

со стандартным выражением (9.12) для плотности состояний  $\nu_F$  на поверхности Ферми без магнитного поля.

Таким образом, орбитальный диамагнетизм (*Ландау, 1930*) Ферми-газа равен  $-1/3$  от спинового парамагнетизма (*Паули, 1927*). Полный результат,

$$\chi = \chi_s + \chi_{\text{orb}} = +\frac{2}{3} \mu_B^2 \nu_F, \quad (9.51)$$

является парамагнитным. Существование диамагнитных металлов связано главным образом с тем фактом, что орбитальное движение электронов в металле имеет энергетический спектр, где масса электрона заменяется на *эффективную массу*. Если эта масса мала по сравнению с нормальной массой электрона, то циклотронная частота увеличивается вместе с отрицательной орбитальной восприимчивостью; спиновый парамагнетизм содержит голую массу электрона.

**9.4 Введение в среднее поле**

В реалистических системах частицы взаимодействуют. Если радиус взаимодействия  $R$  не очень маленький, в многочастичной системе на каждую частицу эффективно воздействуют по крайней мере несколько других частиц. Характерным параметром является отношение  $R/r_0 \sim Rn^{1/3}$  радиуса сил к среднему расстоянию между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$ , где  $n$  — плотность



частиц. Если этот параметр велик или по крайней мере сравним с 1, изменение движения одной частицы не приводит к радикальному изменению сил в данном месте. Такая ситуация приближённо реализуется в твёрдых телах, а также в сложных атомах и ядрах.

Мы приходим к идее *эффективного поля*, которое в среднем управляет движением частиц. Эффективное поле производится внешним полем (если оно приложено) и *средним полем* всех остальных частиц. Мы будем стараться найти среднее поле, которое даёт наилучшее приближение к истинному квантовому состоянию многочастичной системы. Оптимальные одночастичные состояния  $|\lambda\rangle$  являются собственными состояниями этого поля. С другой стороны, занимая низшие состояния  $|\lambda\rangle$ , мы получаем слэтеровский детерминант в качестве волновой функции  $|\Psi\rangle$  всей системы. Если среднее поле найдено правильно, то частицы движутся в состоянии  $|\Psi\rangle$  таким образом, что создаваемое ими поле в среднем совпадает с исходным эффективным полем, которое, следовательно, является *самосогласованным*.

Простейшая версия самосогласованного поля может быть найдена с помощью *приближения Хартри*. Хотя пробная волновая функция  $|\Psi\rangle$  даётся слэтеровским детерминантом и поэтому удовлетворяет требованиям статистики Ферми, мы пренебрегаем влиянием антисимметрии на энергию. Например, рассмотрим атом с зарядом ядра  $Z$  и  $N$  электронами (для иона  $N \neq Z$ ). Нерелятивистский гамильтониан электронов даётся выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{a=1}^N \nabla_a^2 - Ze^2 \sum_{a=1}^N \frac{1}{r_a} + \frac{e^2}{2} \sum_{a,b(a \neq b)}^N \frac{1}{r_{ab}}. \quad (9.52)$$

Самосогласованное поле  $\tilde{U}$ , дающее приближение к многочастичному гамильтониану (9.52), формируется полем ядра и средним полем пространственного заряда электронов:

$$\tilde{U}(\mathbf{r}_a) = -\frac{Ze^2}{r_a} + \sum_{b(a \neq b)} \int d^3r_b \frac{\rho_b(\mathbf{r}_b)}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}. \quad (9.53)$$

Теперь мы предположим, что одночастичные электронные волновые функции удовлетворяют уравнению Шрёдингера в этом поле,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) - \varepsilon \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (9.54)$$

Уравнение Хартри (9.54) даёт орбитали  $\psi_\lambda(\mathbf{r})$  с энергиями  $\varepsilon_\lambda$ . Теперь мы должны удовлетворить условию самосогласованности: плотность заряда

равна  $\rho_b = e|\psi_b(\mathbf{r}_b)|^2$ , и сумма по занятым орбиталям  $b$  должна опять дать потенциал  $\tilde{U}$  (9.53). На практике можно начать с правдоподобного анзаца  $U^{(0)}$  для поля, и, после нахождения орбиталей в этом поле, прийти к потенциалу  $U^{(1)}$ . Если он отличается от  $U^{(0)}$ , мы делаем следующую итерацию: решаем одночастичную задачу с этим новым потенциалом, находим подправленные орбитали и вычисляем следующее приближение  $U^{(2)}$ . Обычно после нескольких итераций потенциал воспроизводит себя.

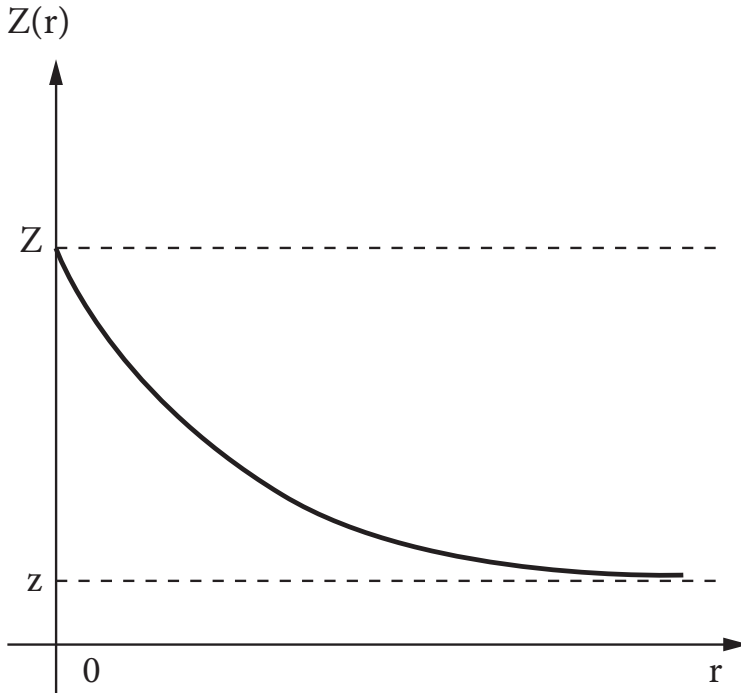


Рис. 9.3. Эффективный заряд, обусловленный электронным экранированием.

Строго говоря, эффективное поле (9.53), действующее на данный электрон, зависит от состояния рассматриваемого электрона, и нет единственного общего потенциала  $\tilde{U}$ . Однако в многочастичных системах общий потенциал может быть хорошим приближением. Таким образом, в сложных атомах можно использовать потенциал *экранированного* заряда ядра,

$$\tilde{U}(r) = \frac{e^2}{r} \tilde{Z}(r), \quad (9.55)$$

где *эффективный заряд*  $\tilde{Z}(r)$  зависит от расстояния до ядра, как показано на рис. 19.3. На малых расстояниях  $\tilde{Z}(r) \rightarrow Z$  (нет экранирования, чистый заряд ядра), тогда как на больших расстояниях электрон находится в поле остаточного заряда  $\tilde{Z}(r) \rightarrow z = Z - (N - 1)$ ; для нейтральных атомов  $z = 1$ .

Мы можем качественно заключить, что самые глубокие атомные орбиты похожи на водородоподобные с зарядом  $Z$ , тогда как внешние орбиты близки к водородным. Таким образом, внешний радиус электронного облака всегда близок к боровскому радиусу атома водорода. Решения уравнения Хартри (9.54) имеют обычные водородоподобные квантовые числа  $n\ell m_\ell$ , однако кулоновского вырождения больше нет. Одночастичные энергии могут быть выражены как

$$\varepsilon_{n\ell} = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2}{a} Z_{n\ell}, \quad (9.56)$$

где  $Z_{n\ell}$  показывает отличие от спектра водородоподобного атома, обусловленное экранированием. Параметр  $Z_{n\ell}$  принимает значения между  $z$  и  $Z$ , убывая с ростом  $n$  и  $\ell$ .

## 9.5 Статистическая модель

В Ферми-системе с достаточно большим числом частиц большинство частиц занимают орбитали с большими квантовыми числами из-за принципа Паули. Эти состояния можно описывать *полуклассически*. В этом случае можно построить статистическую форму метода среднего поля, *приближение Томаса–Ферми*. Применяя такой метод к конечной системе, такой, как сложный атом, ядро или атомы в ловушке, мы не можем надеяться описать детали оболочечной структуры. Цель этого подхода — описание *усреднённых свойств* системы.

Посмотрим, как можно рассмотреть тяжёлые атомы таким образом. Главная идея состоит в том, чтобы использовать среднюю *локальную плотность* электронного облака, сравните с §3.9. В тяжёлом атоме эта плотность велика везде, кроме периферийной области, и *гладко* меняется как функция расстояния до центра (для простоты мы предполагаем сферическую симметрию). Поскольку квазиклассические волновые функции электронов локально характеризуются некоторой длиной волны (вспомните §15.1), мы можем приписать им локальный классический импульс  $\mathbf{p}(r)$ . В каждом месте наинизшая энергия достигается при локальном распределении Ферми, характеризуемом локальным импульсом Ферми  $p_F(r)$ , который связан с

локальной плотностью обычным образом ((9.6) с  $g = 2$ ),

$$n(r) = \frac{p_F^3(r)}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (9.57)$$

Локальная энергия Ферми  $\varepsilon_F$  не может зависеть от координат, потому что тогда состояние системы не было бы стационарным, ток бы перераспределил электроны в области с меньшими  $\varepsilon_F$  и уменьшил энергию. В равновесии, подобно уравнениям (I.3.100) и (9.34),

$$\varepsilon_F = U(r) + \frac{p_F^2(r)}{2m} = \text{const}. \quad (9.58)$$

Здесь  $U(r)$  — потенциал среднего поля, который мы и ищем. Он связан с локальной плотностью (9.57) как

$$n(r) = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} [\varepsilon_F - U(r)]^{3/2}. \quad (9.59)$$

Чтобы потенциал  $U(r)$  был самосогласованным, мы должны решить уравнение Пуассона с плотностью заряда, образованной точечным ядром с зарядом  $Ze$  и электронным облаком с плотностью  $\rho_e(r) = -en(r)$ ,

$$\nabla^2 U = \nabla^2(-e\varphi) = 4\pi e[Ze\delta(\mathbf{r}) - en(r)]. \quad (9.60)$$

Вследствие сферической симметрии мы получаем при  $r \neq 0$ :

$$\nabla^2 U(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) U(r) = -4\pi e^2 n(r) = -\frac{4e^2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} [\varepsilon_F - U(r)]^{3/2}. \quad (9.61)$$

Удобно упростить это уравнение переходом к безразмерным переменным. Заряд ядра определяет граничное условие в начале координат,

$$U(r) \rightarrow -\frac{Ze^2}{r}, \quad r \rightarrow 0. \quad (9.62)$$

Мы вводим новую функцию  $\chi(r)$  как

$$\varepsilon_F - U(r) = \frac{Ze^2}{r} \chi(r), \quad (9.63)$$

так что

$$\chi(r) \rightarrow 1, \quad r \rightarrow 0. \quad (9.64)$$

Тогда уравнение (9.61) может быть переписано как

$$Ze^2 \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \frac{\chi}{r} = \frac{Ze^2}{r} \frac{d^2 \chi}{dr^2} = \frac{4e^2(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \left( \frac{Ze^2}{r} \chi \right)^{3/2}, \quad (9.65)$$

или

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} = \frac{4 \cdot 2^{3/2}}{3\pi} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{r/Z}} = \left[ \frac{2^{7/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{3/2} \frac{\chi^{3/2}}{a^{3/2} \sqrt{r/Z}}. \quad (9.66)$$

Наконец, мы вводим безразмерную координату  $x$ ,

$$r = aZ^{-1/3}bx, \quad b = \left[ \frac{2^{7/3}}{(3\pi)^{2/3}} \right]^{-1} \approx 0.885, \quad (9.67)$$

где  $a$  — боровский радиус, и сводим задачу к универсальному уравнению Томаса–Ферми (без параметров)

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}. \quad (9.68)$$

Чтобы решить это нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка, нам нужно, кроме условия в начале координат (9.64), определить второе граничное условие. Если существует внешняя граница атома  $r = R$ , где  $n(R) = 0$ , то на этой поверхности  $U(R) = \varepsilon_F$ . Снаружи поле должно совпадать с кулоновским полем полного заряда  $Z - N$ , где  $N$  — число электронов. Это ведёт к граничному условию

$$\left[ \frac{dU}{dr} \right]_{r \rightarrow R} = - \frac{(Z - N)e^2}{R^2}. \quad (9.69)$$

Для функции  $\chi$  (9.63) это значит

$$\chi(X) = 0, \quad x \left[ \frac{d\chi}{dx} \right]_{x \rightarrow X} = - \frac{Z - N}{Z}, \quad X = \frac{R}{a} \frac{Z^{1/3}}{b}. \quad (9.70)$$

### Задача 9.5

Докажите, что граничное условие (9.70) обеспечивает правильную нормировку полного заряда электронов,

$$\int_{r \leq R} d^3r n(r) = N. \quad (9.71)$$

Для *нейтрального атома*,  $Z = N$ , потенциал  $U(R) = 0$ , и потому модель потребовала бы  $\varepsilon_F = 0$ . Все электроны имеют меньшие, т.е. отрицательные, энергии, будучи связаны в атоме. Теперь из (9.68) и (9.70) следует, что при некотором конечном значении  $x = X$  функция  $\chi(x)$  и все её производные зануляются, тогда единственное подходящее решение есть  $\chi \equiv 0$ . Это значит, что нетривиальное решение, описывающее нейтральный атом в модели Томаса–Ферми, невозможно при конечном значении  $R$ , и радиус атома  $R$  *бесконечен*. Функция  $\chi$  асимптотически убывает к нулю как

$$\chi(x) = \frac{144}{x^3}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (9.72)$$

Согласно (9.59), это соответствует асимптотическому поведению плотности  $n \propto r^{-6}$ . В то же время радиус *положительных ионов*,  $Z > N$ , конечен. Модель не предсказывает стабильных *отрицательных ионов*. Действительно, при  $Z < N$  наклон  $d\chi/dx$  положителен на границе, тогда как решение внутренней задачи ( $r < R$ ) определённо даёт отрицательный наклон, поскольку плотность убывает, стремясь к нулю на поверхности.

Главное достоинство этой довольно переупрощённой модели в её общих качественных предсказаниях. Для всех нейтральных атомов уравнение Томаса–Ферми и граничные условия универсальны. Поэтому мы приходим к общему распределению электронов, которое меняется от одного атома к другому простым *перемасштабированием*. Из (9.67) следует, что типичный параметр длины порядка  $aZ^{-1/3}$ , так что размер области, которая содержит основную часть электронного заряда, зависит от ядерного заряда как  $\propto Z^{-1/3}$ . Как мы уже заметили, самые внутренние электроны находятся на расстоянии порядка  $a/Z$ , тогда как самые внешние на расстоянии  $\sim a$ .

### Задача 9.6

19.6 Оцените среднюю скорость электронов и энергию полной ионизации атома в модели Томаса–Ферми.

### Решение

$$\frac{\bar{v}}{c} \sim \alpha Z^{1/3}, \quad E_{\text{ion}} \sim Z^{7/3} \text{ Ry}. \quad (9.73)$$

Подход Томаса–Ферми даёт разумные оценки для средней электронной плотности; его можно также обобщить, учтя обменные и релятивистские эффекты. Тем не менее, его область применимости весьма ограничена.

В нём теряется оболочечная структура атома; она заменяется на модель *капли* с гладкой плотностью заряда, так что мы не можем изучать отдельные электронные состояния. Лучше всего модель применима для атомов инертных газов с полностью заполненными оболочками, тогда как для периферийных орбит валентных электронов она недостаточна. Близкая по духу *модель жидкой капли* используется для описания макроскопических свойств сложных ядер; как и для атомов, она должна быть дополнена учётом оболочечной структуры.

## 9.6 Экранирование в электронном газе

Мы можем применить подход Томаса–Ферми к большой однородной электронной системе. Это может быть модель электронной плазмы или электронов в металле, см. также ниже §19.9. Мы предполагаем нулевую температуру, поскольку температура вырождения электронов в металлах очень высока ( $1 \text{ эВ} = 11600 \text{ К}$ ). Электростатическая стабильность системы достигается компенсирующим положительно заряженным фоном, моделирующим ионную решётку. В равновесии система имеет постоянную электронную плотность  $n(r) = n$ , выражающуюся стандартной формулой (9.6) для Ферми-газа.

Поместим внешний точечный заряд  $e_0$  в начале координат. (Это может быть примесь, вакансия или флуктуация ионного фона). В зависимости от знака  $e_0$  в его окрестности появится избыток или недостаток электронной плотности в ответ на нарушение электростатического равновесия. Новое пространственно-неоднородное распределение электронов  $n(r)$  вместе с дефектом генерирует электростатический потенциал  $\varphi(r)$ , удовлетворяющий уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi \{e_0 \delta(\mathbf{r}) - e[n(r) - n]\}. \quad (9.74)$$

Потенциал, действующий на электрон, есть  $-e\varphi(r)$ , так что уравнение согласованности (9.61) принимает вид (при  $r \neq 0$ )

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4e(2m)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \{[\varepsilon_F + e\varphi(r)]^{3/2} - \varepsilon_F^{3/2}\}. \quad (9.75)$$

Для малого возмущения, вызванного внешним зарядом,  $|e\varphi| \ll \varepsilon_F$ ,

$$\nabla^2 \varphi \approx \frac{2e^2(2m)^{3/2}}{\pi\hbar^3} \sqrt{\varepsilon_F} \varphi, \quad (9.76)$$

и, выражая энергию Ферми через невозмущённую плотность  $n$ ,

$$\nabla^2 \varphi = \frac{2e^2(2m)^{3/2}(3\pi^2 n)^{1/3}}{\pi\sqrt{2m}} \varphi = \frac{4\pi n e^2}{m} \frac{3m^2}{p_F^2} \varphi. \quad (9.77)$$

Величина

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} \quad (9.78)$$

является классической *плазменной частотой* (6.37), которая характеризует отклик плазмы на локальное нарушение электронейтральности. Любая локальная неравновесная плотность заряда  $\delta\rho$  генерирует ток  $\delta\mathbf{j}$  по уравнению непрерывности,

$$\frac{\partial(\delta\rho)}{\partial t} = -\text{div}(\delta\mathbf{j}). \quad (9.79)$$

Электронный ток  $\delta\mathbf{j} = -ne\delta\mathbf{v}$  самосогласованно поддерживается электрическим полем,

$$m \frac{d(\delta\mathbf{v})}{dt} = -e(\delta\vec{\mathcal{E}}), \quad (9.80)$$

которое, в свою очередь, создаётся той же самой флуктуацией заряда,  $\text{div}(\delta\vec{\mathcal{E}}) = 4\pi(\delta\rho)$ . В результате, локальная флуктуация ведёт к осцилляциям плотности заряда,

$$\frac{\partial^2(\delta\rho)}{\partial t^2} = -\frac{4\pi n e^2}{m}(\delta\rho) = -\omega_0^2(\delta\rho), \quad (9.81)$$

с электронной плазменной частотой (9.78).

В соответствии с (9.77) возмущение потенциала удовлетворяет ( $v_F = p_F/m$  — скорость на  $\Sigma_F$ )

$$\nabla^2 \varphi = 3 \frac{\omega_0^2}{v_F^2} \varphi. \quad (9.82)$$

Решение этого уравнения, убывающее на бесконечности и переходящее в потенциал  $e_0/r$  заряда  $e_0$  в начале координат, есть

$$\varphi(r) = \frac{e_0}{r} e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{3} \frac{\omega_0}{v_F}. \quad (9.83)$$



Статический внешний заряд *экранируется* подвижными электронами, вспомните задачу I.1.8. Радиус экранирования равен

$$r_p = \frac{1}{\kappa} = \frac{v_F}{\sqrt{3}\omega_0}. \quad (9.84)$$

Это характерная длина смещения электронов в среде, нужного, чтобы сбалансировать внешний заряд и восстановить равновесие (*поляризационная длина*). Возмущение в электронном газе распространяется на это расстояние за время порядка периода плазменных колебаний.

## 9.7 Приближение Хартри–Фока

Сравнивая метод Хартри из §19.4 с соображениями из §18.4, 18.5, мы видим, что потеряли обменные эффекты. Мы можем попытаться включить их в концепцию среднего поля; в результате получится *метод Хартри–Фока*.

Рассмотрим общий фермионный гамильтониан с двухчастичным взаимодействием,

$$\hat{H} = \sum_a (\hat{K}_a + \hat{U}_a) + \frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} \hat{V}_{ab} \equiv \sum_a \hat{h}_a + \frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} \hat{V}_{ab}. \quad (9.85)$$

Применим вариационный подход, взяв в качестве пробной многочастичной функции слэтеровский детерминант, построенный из ортонормированных орбиталей  $\psi_\lambda$ ,  $\lambda = 1, \dots, N$ . Наша цель — найти наилучший набор орбиталей, минимизирующий полную энергию системы. Повторяя рассуждения §18.4, мы можем вычислить среднее значение гамильтониана (9.85). Оно включает сумму одночастичных вкладов и энергию взаимодействия, *как прямые, так и обменные члены* для каждой пары частиц,

$$E = \sum_{\lambda; (\text{occ})} (\lambda | \hat{h} | \lambda) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'; (\text{occ}, \lambda \neq \lambda')} \left( (\lambda\lambda' | \hat{V} | \lambda'\lambda) - (\lambda\lambda' | \hat{V} | \lambda\lambda') \right), \quad (9.86)$$

где сумма берётся по *занятым* орбиталям от 1 до  $N$ . В явном виде,

$$(\lambda | \hat{h} | \lambda') = \int d\tau_1 \psi_\lambda^*(1) (\hat{K}_1 + \hat{U}_1) \psi_{\lambda'}(1), \quad (9.87)$$

и

$$(\lambda_1 \lambda_2 | \hat{V} | \lambda_3 \lambda_4) = \int d\tau_1 d\tau_2 \psi_{\lambda_1}^*(1) \psi_{\lambda_2}^*(2) \hat{V}(1, 2) \psi_{\lambda_3}(2) \psi_{\lambda_4}(1), \quad (9.88)$$

где аргументы (1), (2)... означают весь набор одночастичных переменных, включая спинные, а их элемент объёма обозначен  $d\tau$ .

Чтобы найти функции  $\psi_\lambda$ , мы варьируем энергию (9.86), рассматривая  $\psi_\lambda$  и  $\psi_\lambda^*$  как независимые переменные. Варьирование матричных элементов по  $\psi_\lambda^*$  даёт

$$\delta(\mu|\hat{h}|\mu') = \delta_{\mu\lambda} \int d\tau_1 \delta\psi_\lambda^*(1) \hat{h}(1) \psi_{\mu'}(1); \quad (9.89)$$

$$\begin{aligned} & \delta(\mu\mu'|\hat{V}|\nu'\nu) \\ &= \int d\tau_1 d\tau_2 \left( \delta_{\mu\lambda} \delta\psi_\lambda^*(1) \psi_{\mu'}^*(2) + \delta_{\mu'\lambda} \psi_\mu^*(1) \delta\psi_\lambda^*(2) \right) \hat{V}(1, 2) \psi_{\nu'}(2) \psi_\nu(1). \end{aligned} \quad (9.90)$$

Мы вводим оператор эффективного поля  $\hat{W}$ , действующий на переменную 1 через матричный элемент взаимодействия с другими частицами:

$$W_{\mu\nu}(1) = \int d\tau_2 \psi_\mu^*(2) \hat{V}(1, 2) \psi_\nu(2). \quad (9.91)$$

Изменяя обозначения во втором члене в (9.90), мы можем переписать его как

$$\delta(\mu\mu'|\hat{V}|\nu'\nu) = \int d\tau_1 \delta\psi_\lambda^*(1) [\delta_{\lambda\mu} W_{\mu'\nu'}(1) \psi_\nu(1) + \delta_{\lambda\mu'} W_{\mu\nu}(1) \psi_{\nu'}(1)]. \quad (9.92)$$

Из-за суммы по занятым состояниям в (9.86) два члена в (9.92) дают равные вклады и сокращают множитель 1/2; таким же образом мы можем рассмотреть обменные члены.

Осложняющим обстоятельством является то, что результирующее самосогласованное поле различно для разных одночастичных состояний, и поэтому функции  $\psi_\lambda$  не являются автоматически ортогональными. Мы можем искать минимум энергии при дополнительном условии ортогональности,

$$(\lambda|\lambda') \equiv \int d\tau \psi_\lambda^* \psi_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (9.93)$$

Это можно сделать с помощью  $N(N+1)/2$  множителей Лагранжа  $\varepsilon_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_{\lambda'\lambda}$ . Таким образом, мы решаем вариационную задачу

$$\delta \left( E - \sum_{\lambda\lambda'} \varepsilon_{\lambda\lambda'} (\lambda|\lambda') \right) = 0. \quad (9.94)$$

Параметры  $\varepsilon_{\lambda\lambda'}$  должны определяться в конце из  $N(N+1)/2$  условий ортогональности (9.93).

Собирая все члены в выражении для вариации энергии (9.86), мы получаем

$$\int d\tau_1 \delta\psi_{\lambda}^*(1) \left\{ \hat{h}(1)\psi_{\lambda}(1) + \sum_{\lambda'} [W_{\lambda'\lambda}(1)\psi_{\lambda}(1) - W_{\lambda\lambda'}(1)\psi_{\lambda'}(1) - \varepsilon_{\lambda\lambda'}\psi_{\lambda'}(1)] \right\} = 0. \quad (9.95)$$

Для произвольных вариаций  $\delta\psi_{\lambda}(1)$  уравнение (9.95) приводит к *уравнению Хартри–Фока*,

$$\hat{h}(1)\psi_{\lambda}(1) + \sum_{\lambda'} [W_{\lambda'\lambda}(1)\psi_{\lambda}(1) - W_{\lambda\lambda'}(1)\psi_{\lambda'}(1) - \varepsilon_{\lambda\lambda'}\psi_{\lambda'}(1)] = 0. \quad (9.96)$$

Это нелинейные зацепляющиеся уравнения для функций  $\psi_{\lambda}$ .

Если пренебречь обменными членами и неортогональностью  $\psi_{\lambda}$ , опуская в (9.96) недиагональные члены,  $W_{\lambda'\lambda}$  и  $\varepsilon_{\lambda\lambda'}$  с  $\lambda' \neq \lambda$ , мы получим

$$(\hat{K}_1 + \tilde{U}_1)\psi_{\lambda}(1) = \varepsilon_{\lambda}\psi_{\lambda}(1), \quad (9.97)$$

то есть Шрёдингеровскую задачу на собственные значения для энергий  $\varepsilon_{\lambda} = \varepsilon_{\lambda\lambda}$  и эффективного поля

$$\tilde{U}_{\lambda}(1) = \sum_{\lambda'(\neq\lambda)} W_{\lambda'\lambda}(1) + \hat{U}(1). \quad (9.98)$$

Из определения  $W$  (9.91) мы видим, что поле (9.98) — это среднее значение энергии прямого взаимодействия частицы на орбитали  $\lambda$  с внешним полем и всеми остальными частицами. Таким образом, уравнение (9.98) сводится к уравнению Хартри (9.54).

В некоторых задачах молекулярной и ядерной физики удобно работать с неортогональными одночастичными орбиталями. Например, электронные функции, локализованные около различных ядер в молекуле, не ортогональны, вспомните молекулярный ион водорода, §1.9.6. Некоторые ядра могут иметь кластерную структуру, будучи построены из  $\alpha$  кластеров (ядер  ${}^4\text{He}$ ), нуклонные волновые функции в разных кластерах не ортогональны. Обобщение на такие случаи прямолинейно, вспомните задачу 15.3.

## 9.8 Пространственно однородные системы

Как правило, уравнения Хартри–Фока можно решить только численно итерациями. Во многих случаях (атомы, молекулы, кристаллы) такие вычисления дают результаты в разумном согласии с экспериментом. *Дальнедействующий* характер кулоновского взаимодействия благоприятен для приближения среднего поля, поскольку отталкивание уменьшает важность близких встреч нескольких частиц; такие корреляции недоступны для картины среднего поля. В отличие от этого, в ядрах прямое применение приближения Хартри–Фока работает плохо, главным образом из-за сильного *короткодействующего* отталкивания. Сначала нужно решить двухчастичную задачу в присутствии других частиц. Решение может значительно отличаться от двухчастичного рассеяния в вакууме из-за принципа Паули, который делает многие конечные и промежуточные состояния недоступными. После этого можно построить *эффективное* сглаженное взаимодействие, которое служило бы исходным для конструирования самосогласованного поля. Конечно, необходимо иметь в виду, что метод Хартри–Фока никогда не даёт точного решения многочастичной задачи. В лучшем случае это просто хорошее нулевое приближение. Следующий шаг должен учесть *корреляции* между частицами, которые не описываются их средним независимым движением, нечувствительным к флуктуациям, вызванным малым числом частиц.

Уравнения Хартри–Фока можно точно решить только для *пространственно однородной* системы (в большом объёме  $V$ ). Такая система без взаимодействия есть идеальный Ферми-газ. Предположим, что внешнее поле создаётся только стенками контейнера, а взаимодействие зависит только от относительного расстояния между частицами,  $U(1, 2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Проекция спина каждой частицы  $\sigma$  сохраняется, и матричный элемент  $W_{\mu\nu}$  (9.91) диагонален по спиновым переменным. Тогда член прямого взаимодействия в (9.96) содержит сумму по частицам  $\lambda'$  с обоими проекциями спина  $\sigma = \pm 1/2$ , тогда как в обменном члене сумма берётся по частицам  $\lambda'$  с той же проекцией спина  $\sigma$ , что и у частицы  $\lambda$ .

### Задача 9.7

Покажите, что в только что описанном случае плоские волны (9.3) дают точные орбитали Хартри–Фока, и найдите их энергии.

**Решение** Плоские волны с разными  $(\lambda) = (\mathbf{p}, \sigma)$  ортогональны, и мы можем положить  $\varepsilon_{\lambda\lambda'} = \varepsilon_{\lambda}\delta_{\lambda\lambda'}$ ; величины  $\varepsilon_{\lambda}$  являются Хартри–Фоковскими одностичными энергиями (собственными значениями). Уравнения Хартри–

Фока имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z) + \sum_{\lambda'} \left( W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z) - W_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}) \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}, s_z) \right) = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{r}, s_z). \quad (9.99)$$

Здесь сумма берётся по занятым состояниям. Предполагая, что Хартри–Фоковский базис даётся плоскими волнами (9.3), и используя числа заполнения  $n_{\mathbf{p}\sigma}$ , равные 0 вне  $\Sigma_F$  и 1 внутри  $\Sigma_F$ , мы вычисляем матричные элементы среднего поля. Для прямых вкладов мы получаем

$$M^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda'} W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \Rightarrow \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'} \int d^3r' \sum_{s'_z} \psi_{\mathbf{p}'\sigma'}^*(\mathbf{r}', s'_z) U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}'\sigma'}(\mathbf{r}', s'_z), \quad (9.100)$$

что даёт, с функциями  $\psi$  в виде плоских волн,

$$M^{(\text{dir})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'} \int d^3r' U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = n U_0. \quad (9.101)$$

Здесь мы используем Фурье компоненты взаимодействия,

$$U_{\mathbf{Q}} \equiv \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r})} U(\mathbf{r}), \quad (9.102)$$

и полную плотность

$$n = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (9.103)$$

Таким образом, прямой член сводится к константе, и нулевая Фурье компонента  $U_0$  равна интегралу по объёму от взаимодействия со всеми остальными частицами. В обменном члене мы имеем только одну проекцию спина

$$W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \Rightarrow \frac{1}{V} \int d^3r' e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (9.104)$$

Переходя к интегрированию по относительной координате  $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ , мы получаем в обменном члене

$$\sum_{\lambda'} W_{\lambda'\lambda}(\mathbf{r}) \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}, s_z) \Rightarrow \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}. \quad (9.105)$$

Мы видим, что плоская волна  $\exp[(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})]$  воспроизводится во всех членах, и поэтому она даёт решение уравнений Хартри–Фока. Этот результат очевиден, потому что в однородной системе импульс частицы сохраняется. Коэффициент при этой экспоненте определяет энергию частицы,

$$\varepsilon_\lambda \Rightarrow \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + nU_0 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \quad (9.106)$$

Член  $nU_0$  соответствует (рис. 19.4а) виртуальному рассеянию вперёд частицы  $(\mathbf{p}, \sigma)$  сферой Ферми полной плотности  $n$ , когда передача импульса  $\mathbf{Q} = 0$ . Последний член в (9.106) описывает обменный процесс (рис. 19.4б), когда частица  $(\mathbf{p}, \sigma)$  передаёт импульс  $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$  фоновой частице с квантовыми числами  $\mathbf{p}'$  и  $\sigma' = \sigma$ , и обменивается ролями с этой частицей.

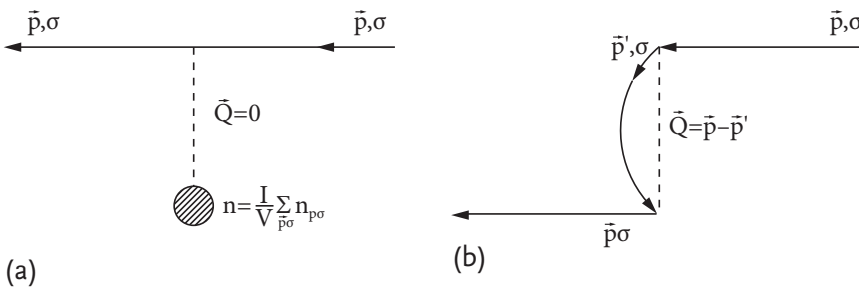


Рис. 9.4. Две диаграммы для приближения Хартри–Фока, прямая (а) и обменная (б), в однородной Ферми-системе.

Поскольку одночастичные волновые функции не меняются по сравнению с невзаимодействующим Ферми-газом и поправка к энергии линейна по взаимодействию, в этом конкретном случае приближение Хартри–Фока на самом деле эквивалентно первому порядку теории возмущений. Для конечной системы (атом, ядро или атомы в ловушке) приближение Хартри–Фока выходит за пределы теории возмущений и определяет равновесную форму среднего поля.

## 9.9 Кулоновский газ

Для электронного газа в металлах или плазме метод Хартри–Фока может применяться с соответствующими изменениями. Из-за дальнегодействующего кулоновского отталкивания такой газ нестабилен. Равновесие достигается

благодаря присутствию нейтрализующего положительного заряда. В металлах это обеспечивается ионами решётки. Если мы пренебрежём эффектами кристаллической структуры, мы можем использовать то же *приближение желе*, что и в §19.6, беря вместо реальной дискретной решётки однородный компенсирующий фон положительного заряда.

Рассеяние электрона фоном точно компенсирует член Хартри  $nU_0$  в уравнении (9.106). С Фурье компонентой (3.17) кулоновского электрон-электронного взаимодействия,

$$U_{\mathbf{Q}} = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{Q^2}, \quad (9.107)$$

и исключая нулевую Фурье компоненту, компенсируемую ионами, мы получаем *закон дисперсии* электронов в приближении однородной среды,

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}} n_{\mathbf{p}'\sigma} U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}} n_{\mathbf{p}'\sigma} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \quad (9.108)$$

### Задача 9.8

19.8 Вычислите энергию электрона  $\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}$  и полную обменную энергию

$$E^{\text{exch}} = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}' (\mathbf{p}' \neq \mathbf{p})} n_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}'\sigma} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}. \quad (9.109)$$

**Решение** Интегрируя в (9.108) и (9.109) по импульсам от  $p = 0$  до  $p_F$ , мы получаем

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar} \left( 1 + \frac{p_F^2 - p^2}{2pp_F} \ln \left| \frac{p + p_F}{p - p_F} \right| \right), \quad (9.110)$$

$$E^{\text{exch}} = -N \frac{3e^2 p_F}{4\pi \hbar}. \quad (9.111)$$

Заметьте, что энергия электрона (9.108) может быть найдена как изменение полной энергии взаимодействия (9.109) при добавлении одного электрона с квантовыми числами  $(\mathbf{p}, \sigma)$ :

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\delta E^{\text{exch}}}{\delta n_{\mathbf{p}\sigma}}. \quad (9.112)$$

В соответствии с простыми аргументами §19.1, кулоновская энергия Ферми-газа (в приближении Хартри–Фока — обменная энергия) меньше, чем кинетическая энергия (9.9), в газе высокой плотности,

$$\frac{E_0}{E^{\text{exch}}} \sim \frac{\varepsilon_F}{(e^2 p_F / \hbar)} \sim \frac{p_F \hbar}{m e^2} \sim \frac{\hbar^2}{r_0 m e^2} \sim \frac{a}{r_0}. \quad (9.113)$$

Ферми-газ с кулоновским взаимодействием приближается к идеальному Ферми-газу,  $E_0 > E^{\text{exch}}$ , при большой плотности, когда среднее расстояние между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3} \sim \hbar/p_F$  становится малым по сравнению с характерной кулоновской длиной, боровским радиусом  $a$ . Часто это выражают через обратный параметр  $r_s = r_0/a$ , который мал в случае высокой плотности — почти идеального Ферми-газа. В противоположном случае малой плотности,  $r_s > 1$ , квантовые статистические эффекты слабее, чем кулоновское взаимодействие, и система приближается к упорядоченному состоянию *Вигнеровского кристалла*, управляемому классическим электростатическим отталкиванием.

### Задача 9.9

Найдите парамагнитную спиновую восприимчивость электронного газа в приближении Хартри–Фока.

**Решение** Уравнение (9.42) всё ещё применимо, но плотность состояний на поверхности Ферми стала другой из-за изменившегося закона дисперсии (9.110). На  $\Sigma_F$ ,

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar} \equiv \varepsilon_F^\circ - \frac{e^2 p_F}{\pi \hbar}. \quad (9.114)$$

Отсюда плотность состояний на единичный объём (9.10)

$$\nu_F = \frac{2p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi dp_F}{d\varepsilon_F} = \frac{\nu_0}{1 - (m e^2 / p_F \pi \hbar)}, \quad (9.115)$$

где  $\nu_0$  — плотность состояний на  $\Sigma_F$  для невзаимодействующего Ферми-газа (9.12). Сравнивая с выражением (9.111) для обменной энергии, мы получаем

$$\nu_F = \frac{\nu_0}{1 + (2/3)E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F^\circ)}. \quad (9.116)$$

Поэтому спиновая парамагнитная восприимчивость даётся выражением

$$\chi_s = \frac{\chi_s^\circ}{1 + (2/3)E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F^\circ)}, \quad (9.117)$$



Из-за отрицательной обменной энергии (9.111) энергетически выгодно выстроить электронные спины в одном направлении. Действительно, обменная энергия — это просто следствие корреляции электронов с параллельными спинами (вспомните также правила Хунда, §18.7). Поскольку внутренняя корреляция помогает ориентировать спины, мы получаем  $\chi_s > \chi_s^0$ . С ростом отношения  $E^{\text{exch}}/(N\varepsilon_F)$  при уменьшении плотности  $\propto p_f^{-1} \propto n^{-1/3}$ , в некоторой точке выигрыш в обменной энергии может стать больше проигрыша в кинетической энергии, и будет выгодно выстроить все спины в одном направлении. Это был бы фазовый переход в *ферромагнитное* состояние. На самом деле этому мешают корреляции между электронами с антипараллельными спинами. Приближение Хартри–Фока пренебрегает такими корреляциями.

К сожалению, приближение Хартри–Фока для электронного газа не вполне удовлетворительно из-за неаналитического результата с сингулярностью спектра (9.112) на поверхности Ферми. Поэтому высшие поправки к энергии основного состояния не могут быть вычислены в теории возмущений.

## 9.10 Теория функционала плотности

Подходы Томаса–Ферми или Хартри–Фока имеют целью построить волновую функцию основного состояния многочастичной системы вариационным методом. На самом деле для макроскопически большого числа частиц такая волновая функция бесполезна. Физические эксперименты обычно имеют дело с макроскопическими наблюдаемыми или с элементарными возбуждениями, т.е. с малыми отклонениями от основного состояния. Первая часть этой задачи решается подходом *функционала плотности* (В. Кон, Л. Шам [?]), который выбирает локальную плотность  $n(\mathbf{r})$  в качестве основной переменной, характеризующей основное состояние [?].

Как следует из задачи I.10.2, плотность основного состояния  $n(\mathbf{r})$  однозначно определяет потенциал  $U(\mathbf{r})$ , действующий на плотность. Взяв

$$\hat{h} = \int d^3r U(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (9.118)$$

мы можем буквально повторить доказательство из этой задачи с

$$\langle \hat{F} \rangle \Rightarrow n(\mathbf{r}) \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle. \quad (9.119)$$

Для данного внешнего потенциала  $U(\mathbf{r})$ , истинная плотность основного состояния  $n(\mathbf{r})$  минимизирует энергию основного состояния, которую можно рассматривать как функционал от плотности,  $E[n(\mathbf{r})]$ . Минимизация должна производиться с дополнительным ограничением для полного числа частиц,

$$\int d^3r n(\mathbf{r}) = N. \quad (9.120)$$

Теория утверждает, что существует функционал энергии, но не определяет его точную форму. Однако всегда можно ввести фиктивные *квазичастицы Кона–Шама*, занимающие такие одночастичные состояния  $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ ,  $\lambda = 1, \dots, N$  что они дают полную плотность

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=1}^N |\varphi_\lambda(\mathbf{r})|^2. \quad (9.121)$$

Тогда минимизация функционала от плотности может быть выражена в терминах одночастичного уравнения для функций  $\varphi_\lambda$ , которое самосогласованно зависит от полной плотности. Вывод производится аналогично приближению Хартри, §19.4, и требует введения лагранжевых множителей  $\epsilon_\lambda$  для нормировки волновых функций квазичастиц,  $\int d^3r |\varphi_\lambda(\mathbf{r})|^2 = 1$ .

Как это обычно делается, мы предполагаем, что полная энергия состоит из классической кинетической энергии  $K[n(\mathbf{r})]$ , внешней потенциальной энергии  $E_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})]$ , энергии взаимодействия типа Хартри, даваемой классическим выражением, соответствующим прямому взаимодействию,

$$E_{\text{int}}[n(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}'), \quad (9.122)$$

и остаточной квантовой поправкой к энергии взаимодействия и кинетической энергии, которую обычно называют *обменно-корреляционной энергией*  $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ ,

$$E[n(\mathbf{r})] = K + E_{\text{ext}} + E_{\text{int}} + E_{\text{xc}}. \quad (9.123)$$

Вариация членов взаимодействия даёт соответствующие потенциалы,

$$U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{ext}}}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad (9.124)$$

$$\frac{\delta E_{\text{int}}}{\delta n(\mathbf{r})} = \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}'), \quad (9.125)$$

$$U_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \frac{\delta E_{\text{xc}}}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (9.126)$$

Вариационная процедура, подобная той, что использовалась в приближении Хартри (9.54), даёт уравнения Кона–Шама для набора функций  $\varphi_\lambda$ ,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U[n(\mathbf{r})] \right\} \varphi_\lambda(\mathbf{r}) = \varepsilon_\lambda \varphi_\lambda(\mathbf{r}), \quad (9.127)$$

с полным эффективным потенциалом

$$U[n(\mathbf{r})] = U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') + U_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]. \quad (9.128)$$

Как и в приближении Хартри или Хартри–Фока, эти уравнения нужно решать самосогласованно, начиная с пробной плотности  $n_0(\mathbf{r})$ , находя эффективный потенциал и функции  $\varphi_\lambda$ , определяя следующую итерацию  $n_1(\mathbf{r})$  и продолжая до сходимости; если используется хорошее приближение для  $U_{\text{xc}}$ , то получившаяся плотность будет близка к истинной функции  $n(\mathbf{r})$ . Таким образом как это ни удивительно, точная плотность и энергия основного состояния (9.123) могут быть вычислены в терминах фиктивных орбиталей невзаимодействующих квазичастиц в поле (9.128).

Не существует точной теории которая могла бы определить обменно-корреляционный член (9.126). Это нужно делать приближённо для каждой конкретной системы. Для металлов можно использовать *приближение локальной плотности* (LDA), в котором предполагается, что локальные свойства реальной системы близки к свойствам *однородного* электронного газа той же плотности. последние можно определить теоретически, см., например, (9.111) для обменных эффектов. Можно улучшить это приближение, учитывая градиенты плотности. Подобный подход используется в ядерной физике с так называемой *параметризацией Скурма*. Эту теорию можно обобщить на случай бозонов, магнитных эффектов и эффектов, зависящих от спина, многокомпонентных и сверхпроводящих (сверхтекучих) систем. Она также даёт полезный подход к тем возбуждённым состояниям, которые могут рассматриваться как флуктуации плотности.



При определенных заданных условиях, и только при этих условиях, у собрания людей появляются новые черты, которые сильно отличаются от характеристик отдельных людей, составляющих это собрание. Чувства и мысли всех собравшихся принимают одно направление, сознательная личность исчезает. Формируется коллективный разум... Таким образом у собрания появляются черты того, что в отсутствии более подходящего выражения я буду называть организованной толпой...

Г. Лебон, *Толпа*

## Глава 10

### Коллективные возбуждения

#### 10.1 Линейная цепочка

В предыдущей главе мы обсуждали многофермионные системы без взаимодействия или в приближении, когда взаимодействие сводится к среднему полю. Теперь мы переходим к ситуации, когда взаимодействие создаёт новые типы коллективного поведения, которые отсутствовали в случае невзаимодействующих частиц.

Простой начальный пример — линейная цепочка  $N$  атомов, связанных упругими силами. Это упрощённая одномерная модель кристалла, где силы имеют электростатическое происхождение, исходя от прямых взаимодействий между ионами и взаимодействий через электронные облака. Как обсуждалось ранее (§19.5), электроны адиабатически подстраивают своё движение под медленно меняющиеся положения ионов. Можно начать с классической картины и квантовать её подобно квантованию электромагнитного поля. Однако мы можем прямо написать квантовый гамильтониан, который зависит от координат ионов  $\hat{x}_j$  и сопряжённых импульсов  $\hat{p}_j$ .

Этот гамильтониан содержит кинетическую энергию,

$$\hat{K} = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2M}, \quad (10.1)$$

где для простоты мы взяли все массы  $M$  одинаковыми, и энергию взаимодействия, которая зависит от расстояний между ионами,

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{jj'} U(x_j - x_{j'}). \quad (10.2)$$

Мы предполагаем, что (i) минимум потенциальной энергии даётся периодической решёткой,  $x_j = X_j = ja$ , с периодом  $a$ , и (ii) решётка *стабильна*, так что типичный размер волновой функции каждого иона (амплитуда нулевых колебаний) мал по сравнению с  $a$ . Тогда удобными координатами являются отклонения атомов от своих равновесных положений,  $\hat{u}_j = \hat{x}_j - X_j$ , и при  $|u_j| \ll a$  мы можем разложить потенциальную энергию по степеням  $\hat{u}_j$ .

В минимуме  $U$  силы обращаются в ноль, и разложение начинается с *квадратичных* членов,

$$\hat{U} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{jj'} C_{jj'} \hat{u}_j \hat{u}_{j'} + \dots \quad (10.3)$$

где мы не выписали явно кубические члены, члены четвёртой степени и т.д. Сила, действующая на атом  $j$ , в линейном приближении есть

$$\hat{F}_j = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial u_j} = -\sum_{j'} C_{jj'} \hat{u}_{j'}. \quad (10.4)$$

Коэффициенты возвращающей силы  $C_{jj'}$  зависят только от расстояния между атомами,  $C_{jj'} = C(j - j')$ . Очевидно также, что полная потенциальная энергия не может измениться при сдвиге всей цепочки как целого,  $\hat{u}_j \rightarrow \hat{u}_j + \text{const}$ . Поэтому должно выполняться тождество

$$\sum_{j'} C(j - j') = 0. \quad (10.5)$$

Нам нужно зафиксировать граничные условия на концах цепочки. Для длинной цепочки точная форма этих условий не очень существенна, и, как мы делали раньше, мы поместим цепочку на кольцо, используя периодические граничные условия,

$$\hat{u}_j = \hat{u}_{j+N}. \quad (10.6)$$

Операторные уравнения движения имеют тот же вид, что и классические уравнения,

$$\dot{u}_j = \frac{\hat{p}_j}{M}, \quad \dot{p}_j = \hat{F}_j. \quad (10.7)$$

Используя (11.4), мы приходим к системе связанных операторных уравнений,

$$M\ddot{u}_j + \sum_{j'} C(j - j')\hat{u}_{j'}(t) = 0. \quad (10.8)$$

Как мы знаем из §8.6, трансляционная симметрия решётки приводит к тому, что стационарные состояния могут характеризоваться *квазиимпульсом*  $k$ . В соответствии с этим, мы ищем *нормальные моды* решётки в виде

$$\hat{u}_j(k, t) = \hat{b}_k(t)e^{ikX_j} = \hat{b}_k(t)e^{ikaj}. \quad (10.9)$$

Квазиимпульс  $k$  квантуется, поскольку условие (11.6) даёт ( $L = Na$  — полная длина цепочки)

$$e^{ikaN} = 1 \quad \rightsquigarrow \quad k = \frac{2\pi}{L} \times (\text{integer}). \quad (10.10)$$

Чтобы перечислить все различные решения, достаточно ограничиться значениями в одной элементарной ячейке обратной решётки, §8.7,

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (10.11)$$

Значения  $k$  вне этой ячейки могут быть сведены к первой зоне Бриллюэна (11.11) прибавлением вектора обратной решётки  $K = 2\pi n/a$ , где  $n$  — целое число, что возвращает к тем же нормальным модам (11.9). С учётом квантования (11.10, 11.11) мы получаем  $N$  нормальных мод вместо исходных  $N$  независимых движений отдельных атомов. Таким образом мы находим *коллективные возбуждения* взаимодействующей системы, хотя число степеней свободы не изменилось.

Операторные амплитуды  $b_k(t)$  *диагонализуют* систему (11.8), приводя к отдельным уравнениям для каждой моды. Используя тот факт, что силовые константы  $C$  зависят только от расстояний, мы получаем

$$\sum_{j'} C(j - j')e^{ikaj'} = e^{ikaj} \sum_{j'} C(j - j')e^{-ika(j-j')} = e^{ikaj} C_k, \quad (10.12)$$

где Фурье компонента силы равна

$$C_k = \sum_n C(n)e^{-ikan}. \quad (10.13)$$

С учётом  $C(n) = C(|n|)$  и симметрии положительных и отрицательных значений  $k$  в (45.11) Фурье компоненты действительны, и мы можем записать уравнение (11.13) как

$$C_k = \sum_n \cos(kan) C(|n|) = C_{-k}. \quad (10.14)$$

Нормальная мода  $k$  удовлетворяет уравнению гармонических колебаний,

$$\ddot{b}_k + \omega_k^2 \hat{b}_k(t) = 0, \quad (10.15)$$

с частотой

$$\omega_k = \sqrt{\frac{C_k}{M}} = \omega(-k). \quad (10.16)$$

Операторные амплитуды  $\hat{b}_k(t)$  имеют гармоническую зависимость от времени  $\sim \exp[-i\omega(k)t]$ , и система стабильна, если все Фурье компоненты  $C_k \geq 0$ , и потому  $\omega(k)$  действительны. Мы можем рассматривать  $\omega(k) \geq 0$ , поскольку полный оператор отклонения эрмитов и должен включать оба члена  $\propto \exp[\pm i\omega(k)t]$ .

Трансляционная инвариантность взаимодействия (11.5) показывает, что

$$C_0 = \sum_n C(|n|) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \omega_{k=0} = 0. \quad (10.17)$$

Для длинной цепочки квазиимпульс  $k$  — почти непрерывная переменная, и мы можем рассматривать непрерывный спектр  $\omega(k)$ . В соответствии с (11.16), при малых  $k$  мы должны иметь

$$\omega^2(k) \approx \omega^2(0) + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2 \omega^2}{dk^2} \right)_{k=0} k^2 + \dots \quad (10.18)$$

Поэтому при малых  $k$  (длина волны много больше периода решётки  $a$ ) спектр — *линейная* функция волнового вектора,

$$\omega(k) \approx v k, \quad (10.19)$$

и, интерпретируя волны, бегущие по решётке, как *звуковые* волны, мы получаем *скорость звука*

$$v = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k=0}. \quad (10.20)$$



Таким образом, коллективное движение с большими длинами волн похоже на волны плотности в сплошной среде, где дискретность атомной структуры не существенна.

### Задача 10.1

45.1 Найдите спектр нормальных мод и скорость звука для цепочки со взаимодействиями только между ближайшими соседями.

**Решение** Как следует из (11.5), в этом случае ненулевые силовые константы — это  $C(1) = C(-1) = -(1/2)C(0)$ , причём должно быть  $C(0) > 0$ . Спектр (рис. 45.1) даётся формулой

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2C(0)}{M}} \left| \sin \left( \frac{ka}{2} \right) \right|, \quad (10.21)$$

а скорость света равна

$$v = \sqrt{\frac{C(0)a^2}{2M}}. \quad (10.22)$$

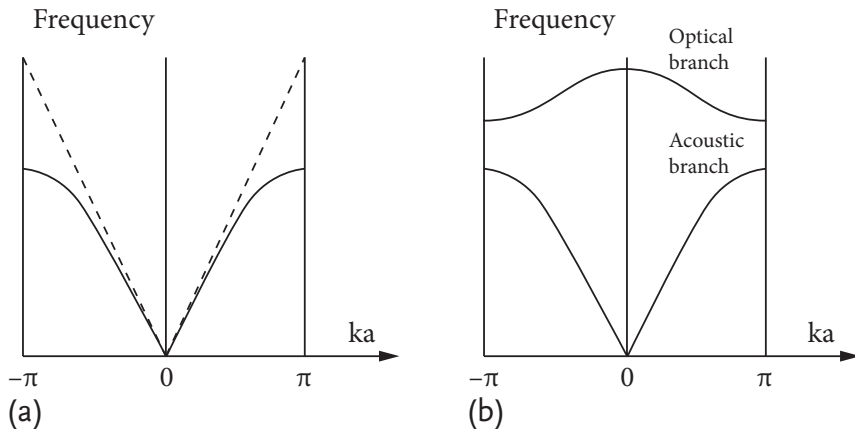


Рис. 10.1. Частотный спектр одномерной цепочки со взаимодействием ближайших соседей.

Нулевая частота волн в *пределе больших длин волн* — это глубокое следствие *спонтанно нарушенной симметрии*. Трансляционная симметрия была нарушена выбором положения цепочки, хотя все другие положения

были бы эквивалентны, имея ту же энергию. Симметрия восстанавливается существованием бесконечно многих вырожденных основных состояний, отличающихся друг от друга только глобальными сдвигами. Но звуковая волна в пределе  $k \rightarrow 0$  есть просто общий сдвиг всех атомов, поскольку фаза колебаний всех атомов одинакова. Этот предел коллективного возбуждения эквивалентен свободной трансляции в другое вырожденное основное состояние, что не требует добавочной энергии, поэтому  $\omega_{k \rightarrow 0} \rightarrow 0$ . Эти аргументы представляют простой пример общей *теоремы Голдстоуна*, которая утверждает присутствие ветви в спектре возбуждений, имеющей нулевую энергию в длинноволновом пределе и восстанавливающей нарушенную симметрию (*голдстоуновская мода*). Строго говоря, это утверждение справедливо только в пределе большой системы, когда можно игнорировать дискретность волновых векторов и говорить о непрерывном спектре возбуждений.

## 10.2 Фононы

Общее решение динамической задачи для периодической цепочки даётся произвольной эрмитовой суперпозицией нормальных мод,

$$\hat{u}_j(t) = \sum_k \left\{ \hat{b}_k e^{ikaj - i\omega(k)t} + \hat{b}_k^\dagger e^{-ikaj + i\omega_k t} \right\}. \quad (10.23)$$

Мы можем найти коммутационные свойства операторных амплитуд  $\hat{b}_k$  и  $\hat{b}_k^\dagger$ , вернувшись к исходным операторам координат и импульсов отдельных атомов, которые удовлетворяют при равных временах соотношению

$$[\hat{p}_j, \hat{u}_{j'}] = -i\hbar \delta_{jj'}. \quad (10.24)$$

В терминах нормальных мод (11.23) импульс атома выражается как

$$\hat{p}_j = M\dot{u}_j = -iM \sum_k \omega(k) \left\{ \hat{b}_k e^{ikaj - i\omega(k)t} - \hat{b}_k^\dagger e^{-ikaj + i\omega_k t} \right\}. \quad (10.25)$$

Коммутатор (11.24) не должен зависеть от времени. Это возможно только, если

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = Z_k \delta_{kk'}, \quad (10.26)$$

с некоторой действительной амплитудой  $Z_k$ . Тогда мы получаем

$$[\hat{p}_j, \hat{u}_{j'}] = -iM \sum_k \omega_k \left( Z_k e^{ika(j-j')} + Z_k^* e^{-ika(j-j')} \right). \quad (10.27)$$

Множитель  $\delta_{jj'}$ , который требуется в (11.24), появляется, если  $\omega_k Z_k$  не зависит от  $k$ , потому что сумма по всем модам даёт

$$\sum_k e^{ika(j-j')} = N\delta_{jj'}. \quad (10.28)$$

Поэтому  $Z_k = \hbar/2MN\omega_k$ . Вводя, по аналогии с квантованием электромагнитного поля, новые операторы

$$\hat{b}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \hat{a}_k, \quad \hat{b}_k^\dagger = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \hat{a}_k^\dagger, \quad (10.29)$$

мы получаем алгебру осцилляторных операторов рождения и уничтожения,

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad (10.30)$$

Эта интерпретация подтверждается тем, что временная зависимость этих операторов,  $\exp(-i\omega t)$  для оператора уничтожения и  $\exp(i\omega t)$  для оператора рождения (с положительным  $\omega$ ), соответствует смыслу этих операторов (§11.7 и §28.3).

Окончательное выражение для атомных переменных через нормальные моды колебаний решётки имеет вид

$$\hat{u}_j(t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} \left\{ \hat{a}_k e^{ikaj - i\omega(k)t} + \hat{a}_k^\dagger e^{-ikaj + i\omega_k t} \right\}. \quad (10.31)$$

Производя ту же реинтерпретацию в терминах частиц, что и в случае фотонов (§28.3), мы приходим к картине *фононов*, квантов колебательного движения многочастичной системы. В этом одномерном примере фононы характеризуются своим волновым вектором (квазиимпульсом в первой зоне Бриллюэна) и соответствующей частотой  $\omega(k)$  или энергией  $\hbar\omega(k)$ . У нас есть явные выражения для физических величин через операторы рождения и уничтожения фононов, которые удовлетворяют статистике *Бозе* (11.30) вне зависимости от статистики исходных ионов.

## Задача 10.2

45.2 Покажите, что те же правила квантования следуют из условия, что исходный гамильтониан (11.1,11.2) имеет вид

$$\hat{H} = U_0 + \sum_k \hbar\omega(k) \left( \hat{N}_k + \frac{1}{2} \right), \quad (10.32)$$

где операторы фононных чисел заполнения с целыми собственными значениями равны

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (10.33)$$

### 10.3 Фононные моды

В общем случае трёхмерной решётки с несколькими атомами в элементарной ячейке можно обобщить результаты, полученные для линейной цепочки. Но имеет смысл подчеркнуть несколько новых особенностей.

#### Задача 10.3

45.3 Найдите фононный спектр линейной цепочки с чередующимися атомами  $a$  и  $b$ .

**Решение** Гамильтониан цепочки с элементарной ячейкой из двух атомов даётся выражением ( $C^{ab} = C_{ba}$ )

$$\hat{H} = \sum_{ja} \frac{(\hat{p}_j^a)^2}{2M_a} + U_0 + \frac{1}{2} \sum_{jj';ab} C^{ab}(j-j') \hat{u}_j^a \hat{u}_{j'}^b. \quad (10.34)$$

Трансляционная инвариантность требует, как и в (11.5),

$$\sum_{nb} C^{ab}(n) = 0. \quad (10.35)$$

Уравнения движения имеют вид

$$\ddot{u}_j^a + \frac{1}{M_a} \sum_{j'b} C^{ab}(j-j') \hat{u}_{j'}^b = 0. \quad (10.36)$$

Мы вводим амплитуды с определённым квазиимпульсом  $\hat{B}_k^a(t) \propto \exp[-i\omega(k)t]$  как в (11.9) и приходим к системе двух связанных уравнений,

$$\omega^2(k) \hat{B}_k^a = \frac{1}{M_a} \sum_b \hat{B}_k^b \left( \sum_n C^{ab}(n) e^{ikan} \right) \equiv \frac{1}{M_a} \sum_b \hat{B}_k^b C_k^{ab}. \quad (10.37)$$

Эта система даёт две ветви спектра,

$$\omega_{\pm}^2(k) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{C_k^{aa}}{M_a} + \frac{C_k^{bb}}{M_b} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{C_k^{aa}}{M_a} - \frac{C_k^{bb}}{M_b} \right)^2 + \frac{4(C_k^{ab})^2}{M_a M_b}} \right]. \quad (10.38)$$

Их свойства можно понять в длинноволновом пределе. Из (11.35) следует, что в этом пределе

$$C_0^{aa} = C_0^{bb} = -C_0^{ab} \equiv C, \quad (10.39)$$

и

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_-^2(k) = 0, \quad (10.40)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_+^2(k) = C \left( \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right). \quad (10.41)$$

Нижняя ветвь (11.40), начинающаяся с нулевой частоты, это опять голдстоуновская мода, и из (11.38) мы находим, что в этой моде  $\hat{B}^a = \hat{B}^b$ , обе подрешётки движутся вместе, как единое целое. Верхняя ветвь начинается с конечной частоты (11.41), и соответствующие амплитуды удовлетворяют  $B^a M_a + B^b M_b = 0$ , т.е. центр масс элементарной ячейки остаётся в покое, и мы имеем только относительное движение двух атомов в ячейке в противофазе, которое определяется приведённой массой двух атомов. Нижняя, *акустическая*, ветвь соответствует звуковым волнам и имеет спектр, начинающийся с линейной зависимости  $\omega(k)$ , как можно увидеть из разложения при малых  $k$ . Верхняя, *оптическая*, ветвь с конечным  $\omega(0)$  — это аналог молекулярных колебаний, распространяющихся от одной ячейки к другой из-за трансляционной симметрии решётки.

Пусть имеется  $s$  атомов  $a = 1, \dots, s$  в ячейке  $\mathbf{j}$ ; их механика характеризуется векторами смещения  $\mathbf{u}_{\mathbf{j},a}$  из положений равновесия. Потенциальная энергия выражается подобно (11.3),

$$\hat{U} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{j}';aa'} C_{\mathbf{j},a;\mathbf{j}',a'}^{\alpha\alpha'} \hat{u}_{\mathbf{j},a}^{\alpha} \hat{u}_{\mathbf{j}',a'}^{\alpha'} + \dots \quad (10.42)$$

Силловые константы, опять же зависящие от расстояний  $\mathbf{j} - \mathbf{j}'$ , теперь являются тензорами, где индексы  $\alpha, \dots$  относятся к декартовым компонентам, поскольку деформация решётки в процессе колебаний в общем случае анизотропна. Любое смещение решётки как целого по-прежнему не меняет её энергии, так что мы имеем, аналогично (11.5),

$$\sum_{\mathbf{j}';a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') = 0. \quad (10.43)$$

Уравнения движения атомов в этом приближении линейны,

$$\ddot{u}_{\mathbf{j},a}^{\alpha} + \frac{1}{M_a} \sum_{\mathbf{j}';a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') \hat{u}_{\mathbf{j}',a'}^{\alpha'} = 0. \quad (10.44)$$

Решения — опять блоховские волны с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ , но теперь, как в случае электромагнитного поля (§28.3), это *векторная* величина, так что нам нужно ввести операторы мод как векторы поляризации  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  для каждого (квантованного) значения  $\mathbf{k}$ . Априорно мы не знаем, куда направлены эти векторы. Поэтому мы ищем решения (11.44) для нормальных мод в виде

$$\hat{\mathbf{u}}_{ja}(\mathbf{k}, t) = \hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k}, t)e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{j})}. \quad (10.45)$$

Квантование квазиимпульса подобно тому, что было в предыдущих моделях.

Компоненты векторных операторов  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  удовлетворяют уравнениям для связанных гармонических колебаний,

$$\ddot{b}_a^\alpha(\mathbf{k}) + \frac{1}{M_a} \sum_{a'} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \hat{b}_{a'}^{\alpha'}(\mathbf{k}) = 0. \quad (10.46)$$

Здесь силовые константы  $C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})$  определены как в уравнении (11.14). Таким образом, для каждого значения  $\mathbf{k}$  мы получаем систему  $3s$  уравнений. Частоты колебаний  $\omega$  получаются из

$$\text{Det} \left\{ C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) - \omega^2 M_a \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{aa'} \right\} = 0. \quad (10.47)$$

Поскольку из-за трансляционной инвариантности (11.43) имеется предельное свойство

$$\lim_{k \rightarrow 0} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{j}} C_{aa'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{j} - \mathbf{j}') = 0, \quad (10.48)$$

система уравнений (11.46) всегда имеет три решения с равными  $b^\alpha(0)$  для всех атомов  $a$  в ячейке, соответствующие нулевой частоте. Это наши знакомые голдстоуновские моды, описывающие произвольное бесконечно малое смещение кристалла в эквивалентное положение без изменения энергии. При  $\mathbf{k} \neq 0$  эти корни дают *акустические ветви* спектра колебаний, в которых не происходит нарушения структуры внутри ячейки, и ячейки движутся как единое целое. В кристаллах с одним атомом в элементарной ячейке существуют только эти ветви.

Остальные  $3(s-1)$  ветвей спектра соответствуют *оптическим* колебаниям. В длинноволновом пределе они имеют конечные частоты, описывающие относительное движение атомов в ячейке, периодически повторяющееся в других ячейках. Векторные амплитуды  $\hat{\mathbf{b}}_a(\mathbf{k})$  являются суперпозициями

монохроматических волн с определёнными поляризациями. Мы можем идентифицировать нормальные моды по взаимно ортогональным векторам  $\mathbf{e}_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{(\lambda)}$ , которые находятся из уравнений (11.46) для каждого квазиимпульса  $\mathbf{k}$ , атома  $a$  в ячейке и собственной частоты  $\omega^2(\lambda\mathbf{k})$ .

#### Задача 10.4

45.4 Введите правильно нормированные (уравнение (11.30)) операторы рождения и уничтожения для фононных мод и выпишите операторное разложение для поля смещения  $\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a}(t)$  в терминах фононов.

**Решение** Подобно уравнению (11.31) мы получаем

$$\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{j}a} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_a\omega_{\lambda\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{(\lambda)} \left( \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}) - i\omega(\lambda\mathbf{k})t} + \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}) + i\omega(\lambda\mathbf{k})t} \right). \quad (10.49)$$

Мы не можем явно найти нормальные моды в общем виде для любого типа решётки. В некоторых случаях соображения симметрии помогают получить результат. В *кубической решётке* три ортогональных главных оси эквивалентны. Пусть волновой вектор  $\mathbf{k}$  смотрит вдоль одной из главных осей. Тогда симметрия показывает, что, в случае одного атома в элементарной ячейке, три нормальные моды  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)}$  соответствуют направлениям главных осей, так что имеется продольная волна и две вырожденных поперечных волны (с равными частотами). В длинноволновом пределе, аналогично (35.19), при  $s = 1$  мы получаем три типа звуковых волн со скоростью звука, зависящей от направления  $\mathbf{k}$  и поляризации  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)}$ . Учитывая высшие члены в разложениях (11.3, 11.34) и (11.42), мы получим *ангармонические* эффекты, которые приводят к *дисперсии* звука, зависимости скорости звука от длины волны. Формально, эти эффекты связаны с членами в гамильтониане, содержащими более двух операторов рождения и уничтожения фононов.

## 10.4 Спировые волны

Как мы обсуждали в §43.4, требования квантовой статистики ведут к специфическому взаимодействию, зависящему от спинов, даже если гамильтониан системы тождественных частиц не содержит спиновых переменных явно. В этом причина правил Хунда (§43.7), которые определяют электронный терм с наибольшим возможным спином  $S$  как энергетически наиболее выгодный среди всех значений спина, совместимых с принципом Паули для данной конфигурации.

Обменная часть электростатического взаимодействия ответственна за *коллективные магнитные явления*, ферромагнетизм и антиферромагнетизм. Хотя настоящий гамильтониан в конденсированной среде может быть очень сложным, основные черты могут быть описаны так называемым *гамильтонианом Гейзенберга*. Этот гамильтониан описывает взаимодействие локализованных атомных спинов таким же образом, как мы видели в простейшем случае (43.61),

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ab(a \neq b)} J_{ab}(\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{s}}_b), \quad (10.50)$$

где *обменные интегралы*  $J_{ab} = J_{ba}$  зависят от расстояния между спинами  $a$  и  $b$  и обычно быстро убывают с ростом расстояния. В кристаллах они могут быть анизотропными, так что мы бы имели тензор  $J^{\alpha\beta}$  (мы не рассматриваем здесь такие случаи).

### Задача 10.5

45.5 Рассмотрите систему  $N$  спинов  $1/2$  в однородном магнитном поле  $\vec{B}(t) = b(t)\mathbf{n}$  фиксированного направления вдоль единичного вектора  $\mathbf{n}$ , но меняющегося со временем по величине. Спины взаимодействуют попарно с одинаковой силой взаимодействия  $J$  в каждой паре,

$$\hat{H}_{\text{int}}(a, b) = J(\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{s}}_b), \quad (10.51)$$

где  $a \neq b$ . Найдите перекрытие  $f(t) = \langle \Psi'(t) | \Psi(t) \rangle$  состояний, которые в начале были одним и тем же состоянием  $|\Psi_0\rangle$ , но подвергались воздействию различных магнитных полей  $b'(t)$  и  $b(t)$  соответственно (такие величины характеризуют *точность воспроизведения* системы; они важны для оценки эффектов неизбежных возмущений).

**Решение** Полагая гиромагнитное отношение отдельных спинов равным  $g$ , получим магнитный член гамильтониана

$$\hat{H}_m = -g\hbar \sum_a (\vec{B}(t) \cdot \hat{\mathbf{s}}_a) = -g\hbar b(t)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \quad (10.52)$$

где  $\hat{\mathbf{S}}$  — полный спин системы. Легко видеть, что величина  $S$  сохраняется, поскольку все пары спинов взаимодействуют одинаково:

$$\sum_{ab(a \neq b)} \hat{s}_a^\mu \hat{s}_b^\mu = \frac{1}{2} (\hat{S}_\mu)^2 - \frac{N}{8}, \quad (10.53)$$



где  $\mu$  помечает оси координат (суммирования по  $\mu$  нет), и мы учли, что  $(\hat{s}_a^\mu)^2 = 1/4$  для всех  $a$  и  $\mu$ . Таким образом,

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{J}{2} \left( \hat{\mathbf{S}}^2 - \frac{3N}{4} \right). \quad (10.54)$$

Все классы состояний с различными значениями  $S$  эволюционируют независимо. Магнитная часть гамильтониана и член взаимодействия коммутируют, и оператор эволюции для поля  $b(t)$  равен

$$\hat{U}(t) = e^{-(i/\hbar) \int_0^t dt' \hat{H}(t')} = e^{i\{\Phi(t)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}}) + (J/2)[\mathbf{S}^2 - (3N/4)]t\}}, \quad (10.55)$$

где

$$\Phi(t) = g \int_0^t dt' b(t'). \quad (10.56)$$

Точность воспроизведения для начального состояния  $|\Psi_0\rangle$  выражается как

$$f = \langle \Psi_0 | (\hat{U}^\dagger)'(t) \hat{U}(t) | \Psi_0 \rangle, \quad (10.57)$$

где  $\hat{U}'$  и  $\Phi'(t)$  соответствуют возмущённой зависимости  $b'(t)$ . В нашем случае

$$f(t) = \langle \Psi_0 | e^{i[\Phi(t) - \Phi'(t)](\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{S}})} | \Psi_0 \rangle. \quad (10.58)$$

Для начального состояния с некоторой проекцией  $S_z = M$  на направление поля

$$f_M(t) = e^{i[\Phi(t) - \Phi'(t)]M} \equiv e^{i\alpha(t)M}, \quad (10.59)$$

результат не зависит от знака  $J$ . Обычно практический интерес представляет средняя точность воспроизведения по начальным состояниям одного класса (спина  $S$ ),

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2S+1} \sum_M f_M(t), \quad (10.60)$$

Суммирование геометрической прогрессии для целого  $S$  ведёт к

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2S+1} \left\{ 1 + \frac{2 \cos[(S+1)\alpha/2] \sin(S\alpha/2)}{\sin(\alpha/2)} \right\}, \quad (10.61)$$

где  $\alpha(t)$  определено в (11.60). В случае малого возмущения  $S\alpha \ll 1$

$$\bar{f}(t) \approx 1 - \frac{S(S+1)}{6} \alpha^2(t). \quad (10.62)$$

Часть, не зависящая от времени, происходит от вклада состояния  $M = 0$ , на которое не влияет магнитное поле. Такой член отсутствует для полуцелых  $S$ , когда результат имеет вид

$$\bar{f}(t) = \frac{2 \cos[(2S+1)\alpha/4] \sin(S\alpha/2)}{(2S+1) \sin(\alpha/4)}. \quad (10.63)$$

Рис. 45.2 показывает результат (11.62) как функцию  $\alpha$  для различных значений  $S$ .

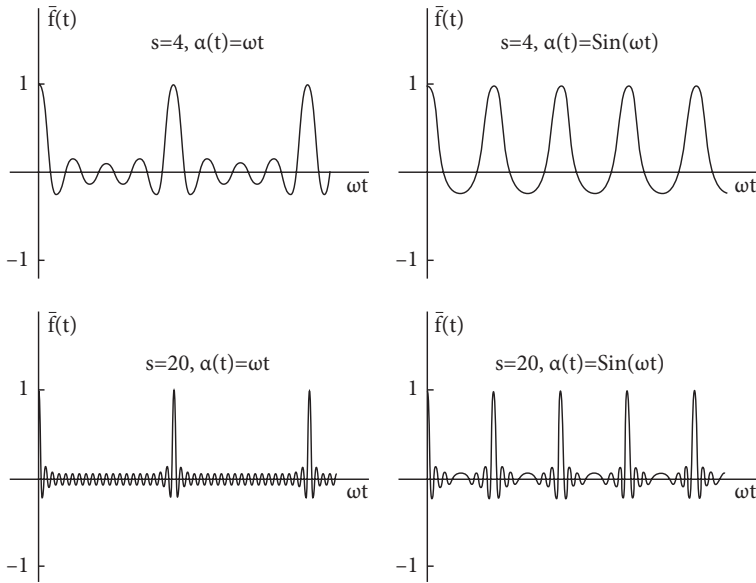


Рис. 10.2. Точность воспроизведения  $\bar{f}(t)$  как функция возмущения  $\alpha(t)$ , уравнение (11.60), для  $S = 1, 4$  и  $20$ .

При положительных  $J_{ab}$  в основном состоянии все спины выстроены параллельно. Тогда спин основного состояния  $\mathbf{S} = \sum_a \mathbf{s}_a$  принимает максимально возможное значение  $S_{\max} = Ns$ , где мы считаем все спины равными, — материал является *ферромагнетиком*. Мы встречаем ситуацию, формально такую же, как в нашем обсуждении сверхизлучения в §31.2, где спины

вводились искусственно для описания чисел заполнения атомных состояний. Основное состояние ферромагнетика сильно *вырождено*, поскольку все проекции  $S_z$  имеют одинаковую энергию. Это очевидное следствие *вращательной инвариантности*. Здесь мы видим ещё один пример спонтанно нарушенной симметрии (выше мы обсуждали нарушение трансляционной инвариантности). Внешнее магнитное поле сняло бы вырождение, определив предпочтительное направление выстраивания спинов. Без поля все направления в пространстве эквивалентны. Фактическое основное состояние выбирается системой в зависимости от её истории, в результате каких-то возмущений в прошлом. Нужно ожидать голдстоуновской моды в спектре возбуждений, связанной с бесконечно малыми поворотами, которые бесплатно переводят систему в состояние с другой эквивалентной ориентацией.

Простейший способ возбудить систему — это изменить ориентацию одного спина, скажем  $\mathbf{s}_a$ . Однако это не ведёт к стационарному состоянию, потому что выбранный спин взаимодействует с соседями. Переворачивая один спин, мы на самом деле возбуждаем *спиновую волну*, распространяющуюся по системе. Ферромагнитное основное состояние  $|0\rangle$  с  $S_z = S$  удовлетворяет

$$\hat{s}_a^z|0\rangle = s|0\rangle, \quad \hat{s}_a^{(+)}|0\rangle = 0 \text{ для всех } a. \quad (10.64)$$

Энергия основного состояния даётся формулой

$$E_0 = -\frac{s^2}{2} \sum_{ab(b \neq a)} J_{ab}, \quad (10.65)$$

где сумма берётся по всем взаимодействующим парам.

Чтобы увидеть, что происходит после переворота одного спина, запишем операторные уравнения движения для компонент  $\hat{s}_a^\alpha$ :

$$i\hbar \dot{\hat{s}}_a^\alpha = [\hat{s}_a^\alpha, \hat{H}] = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_{b(b \neq a)} J_{ab} \hat{s}_b^\beta \hat{s}_a^\gamma. \quad (10.66)$$

Здесь мы использовали стандартные коммутационные соотношения для операторов спина и симметрию  $J_{ab}$ . Возьмём в операторных уравнениях (11.67) для поперечных компонент  $\alpha = x, y$  матричный элемент  $\langle \omega | \dots | 0 \rangle$  между основным состоянием и возбуждённым состоянием с энергией  $E = \hbar\omega$ . Мы ищем операторы, действующие как операторы рождения возбуждений и потому имеющие зависимость от времени  $\propto \exp(i\omega t)$ . В коммутаторе мы получаем  $-\hbar\omega \langle \omega | \hat{s}_a^{x,y} | \omega \rangle$ , тогда как в правой части один из спиновых операторных множителей относится к  $z$ -компоненте и, действуя на основное

состояние, даёт своё собственное значение  $s$ . В результате мы приходим к *линейной* системе уравнений,

$$-\hbar\omega\langle\omega|s_a^x|0\rangle = -is \sum_{b(\neq a)} J_{ab}\langle\omega|s_b^y - s_a^y|0\rangle; \quad -\hbar\omega\langle\omega|s_a^y|0\rangle = is \sum_{b(\neq a)} J_{ab}\langle\omega|s_b^x - s_a^x|0\rangle. \quad (10.67)$$

Нам нужно выбрать *понижающую* компоненту  $\hat{s}^{(-)} = \hat{s}_x - i\hat{s}_y$ , удовлетворяющую

$$\hbar\omega\langle\omega|s_a^{(-)}|0\rangle = s \sum_{b(\neq a)} J_{ab}\langle\omega|s_a^{(-)} - s_b^{(-)}|0\rangle. \quad (10.68)$$

Эта связанная система уравнений показывает, что существует ветвь спектра возбуждений, генерируемая переворотом отдельного спина и включающая все остальные спины через их взаимодействие.

Теперь вспомним трансляционную инвариантность,  $J_{ab} = J(|\mathbf{a} - \mathbf{b}|)$ . Вследствие этого стационарные состояния являются блоховскими волнами с некоторым квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ . Оператор рождения  $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  такого состояния должен быть суперпозицией локальных переворотов спинов с фазами, определяемыми квазиимпульсом,

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_a \hat{s}_a^{(-)} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})}, \quad (10.69)$$

и временной зависимостью  $\propto \exp[i\omega(\mathbf{k})t]$ . Обратное преобразование, в соответствии с (11.28) — это

$$\hat{s}_a^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})}. \quad (10.70)$$

Таким же образом, как в уравнениях (11.13, 11.14), мы вводим

$$J_{\mathbf{k}} = \sum_b J(\mathbf{a} - \mathbf{b}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{b})} = \sum_{\mathbf{b}} J(\mathbf{b}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b})}; \quad J_0 = \sum_{\mathbf{b}} J(\mathbf{b}). \quad (10.71)$$

Координатная зависимость в виде бегущей волны воспроизводится во всех членах, и мы получаем энергетический спектр

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = s(J_0 - J_{\mathbf{k}}). \quad (10.72)$$

Легко видеть, что (в ферромагнитном случае)  $J_0 \geq J_{\mathbf{k}}$ , и энергия возбуждения (11.73) положительна. Как мы и ожидали,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_{\mathbf{k}} = 0, \quad (10.73)$$

что соответствует голдстоуновской моде, генерируемой оператором  $\sum_a s_a^{(-)} = S^{(-)}$  бесконечно малого глобального поворота всех спинов без изменения энергии.

### Задача 10.6

45.6 Найдите спектр спиновых волн для периодической линейной цепочки спинов с периодом  $a$  и взаимодействием ближайших соседей,  $J_{a,a+1} = J_{a+1,a} = J > 0$ . Рассмотрите длинноволновой предел точного решения.

**Решение** Уравнение (11.73) даёт

$$\hbar\omega_k = 2sJ(1 - \cos(ka)). \quad (10.74)$$

При  $ka \ll 1$  мы получаем закон дисперсии

$$\hbar\omega_k = sJa^2k^2, \quad (10.75)$$

начинающийся с нуля и подобный частице с эффективной массой  $\hbar^2/2Jsa^2$ , примерно на порядок тяжелее массы электрона.

Волновая функция спиновой волны может быть записана как

$$|\mathbf{k}\rangle = A\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger|0\rangle = \frac{A}{\sqrt{N}} \sum_a e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})} \hat{s}_a^{(-)}|0\rangle, \quad (10.76)$$

синхронизованная суперпозиция состояний с переворотом отдельных спинов.

### Задача 10.7

Нормируйте состояние спиновой волны соответственно

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (10.77)$$

**Решение** Нормировочный множитель в уравнении (11.74) равен  $A = 1/\sqrt{2s}$ .

Теперь мы можем ввести нормированные операторы рождения спиновой волны,

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2sN}} \sum_a \hat{s}_a^{(-)} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})}, \quad (10.78)$$

и определить сопряжённые операторы уничтожения, осуществляющие переход  $\langle 0 | \dots | \omega_{\mathbf{k}} \rangle$  обратно в основное состояние,

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2sN}} \sum_a \hat{s}_a^{(+)} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})}, \quad (10.79)$$

Они удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \frac{1}{2sN} \sum_{ab} e^{i[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}) - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{b})]} [\hat{s}_a^{(+)}, \hat{s}_b^{(-)}]. \quad (10.80)$$

Коммутатор в правой части уравнения (11.81) равен  $2s_a^z \delta_{ab}$ , так что

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \frac{1}{sN} \sum_a e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{a}} \hat{s}_a^z. \quad (10.81)$$

В любом *симметричном* по спинам состоянии среднее значение  $\langle s_a^z \rangle$  не зависит от  $a$  и определяется средним значением полной проекции  $S_z$ ,

$$\langle \text{symm} | s_a^z | \text{symm} \rangle = \frac{\langle S_z \rangle}{N}. \quad (10.82)$$

Тогда суммирование по  $a$  в уравнении (11.82) даёт  $N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ , и мы получаем коммутатор (11.82):

$$\langle \text{symm} | [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] | \text{symm} \rangle = \frac{\langle S_z \rangle}{sN}. \quad (10.83)$$

В основном состоянии это точно 1, тогда как в состоянии спиновой волны мы вместо этого имеем  $(N-1)/N$ . При очень больших  $N$  поправка пренебрежимо мала для всех состояний, где число перевёрнутых спинов мало по сравнению с полным числом  $N$ , и, игнорируя её, мы можем рассматривать квантованные спиновые волны как гармонические кванты, *магноны*. Роль поправки возрастает с числом возбуждённых магнонов. Это приводит к новому, *кинематическому*, взаимодействию магнонов, которое может быть описано [?] с помощью преобразования Холстейна–Примакова от спиновых операторов к бозонным, см. задачу 16.8 и последующее обсуждение. Оно должно быть добавлено к нормальному *динамическому* взаимодействию, которое может предпочитать образование комплексов перевёрнутых спинов. Отличие от статистики Бозе особенно ярко выражено для спина  $s = 1/2$ . Действительно, в случае бозонов мы должны иметь возможность создать одно и то же возбуждение несколько раз. Однако для спина  $1/2$  возможен

только один переворот, так что узел с перевёрнутым спином не может участвовать в дальнейших возбуждениях.

*Антиферромагнитный* случай  $J_{ab} < 0$  гораздо более сложен. Даже в случае взаимодействия только ближайших соседей и спина  $1/2$  определение основного состояния требует более мощных методов (*анзац Бёте*). Хотя ясно, что соседние спины предпочитают быть в синглетном состоянии пары, данный спин не может быть в синглетном состоянии с обоими соседями одновременно. Можно также упомянуть системы типа *квантового стекла*, где константы взаимодействия  $J_{ab}$  различных пар принимают случайные значения, включая случайный знак. Численные эксперименты вроде бы указывают, что в этом случае спин основного состояния может принимать любое значение, но в среднем он растёт с числом спинов  $\propto \sqrt{N}$ , как и можно было бы ожидать при случайных константах связи отдельных спинов.

## 10.5 Возбуждения частица–дырка

В однородном Ферми-газе простейшие возбуждения можно получить из основного состояния, перемещая частицу из моря Ферми в более высокое одночастичное состояние. Этот процесс создаёт пару из частицы выше  $\Sigma_F$  и дырки внутри  $\Sigma_F$ . Например, обменный процесс, показанный на рис. 44.3b, можно интерпретировать как виртуальное рождение частицы  $(\mathbf{p}, \sigma)$  и дырки  $(\mathbf{p}', \sigma)$  при взаимодействии со внешней частицей  $(\mathbf{p}, \sigma)$ . После взаимодействия внешняя частица получает импульс  $\mathbf{p}'$  и заполняет свободное состояние дырки (аннигилирует с дыркой, как в теории Дирака), тогда как вторичная частица продолжает распространение.

Любое внешнее поле, сохраняющее число частиц, может рождать только парные возбуждения *частица–дырка*. Рассмотрим процесс, когда система получает импульс  $\mathbf{P}$ , и частица переходит в состояние  $\mathbf{p} + \mathbf{P}$  выше  $\Sigma_F$ , оставляя дырку в состоянии  $\mathbf{p}$ , рис. 45.2. Это состояние можно получить действием двух одночастичных операторов на невозмущённое основное состояние  $|0\rangle$  Ферми-газа,

$$|\Phi^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P})\rangle = \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{P}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} |0\rangle. \quad (10.84)$$

Возбуждение может сохранить или перевернуть спин возбуждаемой частицы, но мы здесь опускаем спиновые индексы орбиталей частицы и дырки. Энергия возбуждения этого состояния с полным импульсом  $\mathbf{P}$  равна

$$E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) = \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{P})^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{P})}{m} + \frac{\mathbf{P}^2}{2m}. \quad (10.85)$$

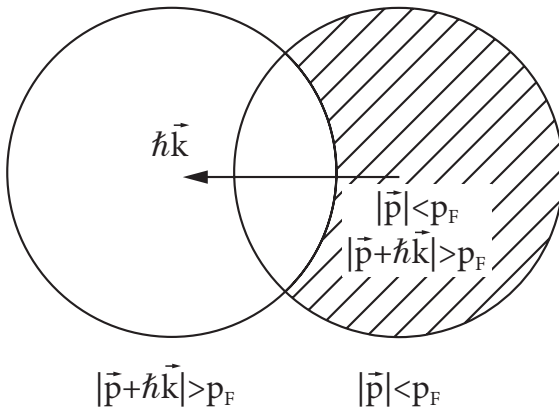


Рис. 10.3. Рождение пары частица–дырка внешним полем.

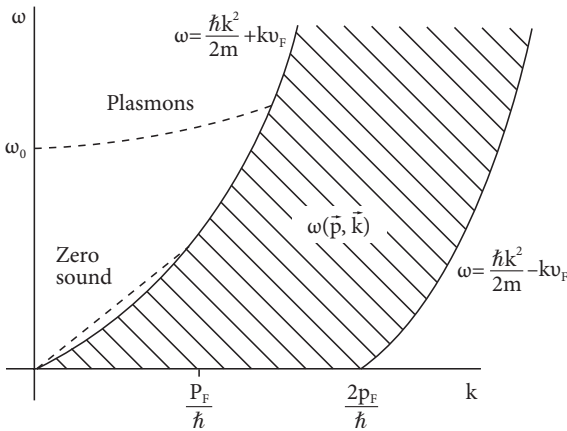


Рис. 10.4. Область пар частица–дырка.

Такое состояние возможно только при  $|\mathbf{p}| < p_F$  и  $|\mathbf{p} + \mathbf{P}| > p_F$ .

Найдём область возможных значений энергии возбуждения (11.86) как функцию полного импульса  $\mathbf{P}$  этого комплекса. Для данного значения  $\mathbf{P}$  импульс дырки  $\mathbf{p}$  может находиться внутри разности объёмов двух сфер Ферми, сдвинутых на  $-\mathbf{P}$  по отношению друг к другу, рис. 45.4. Различные углы между партнёрами в паре частица–дырка определяют (рис. 45.5)



возможные значения энергии возбуждения,

$$0 < E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) \leq P v_F + \frac{P^2}{2m}, \quad P < 2p_F;$$

$$\frac{P^2}{2m} - P v_F \leq E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P}) \leq \frac{P^2}{2m} + P v_F, \quad P > 2p_F, \quad (10.86)$$

где  $v_F = p_F/m$  — скорость частицы на  $\Sigma_F$ . Два разных выражения появляются в (11.87) поскольку при  $P = 2p_F$  перекрытие между сферами Ферми на рис. 45.4 исчезает, и после этого нет никаких ограничений на состояния дырки, их можно брать в любом месте внутри  $\Sigma_F$ .

Рис. 10.5. Континуум состояний частица–дырка.

Энергии  $E^\circ(\mathbf{p}, \mathbf{P})$  образуют *континуум* для каждого значения полного импульса  $\mathbf{P}$  пары частица–дырка. В длинноволновом пределе  $P \ll p_F$  верхняя граница континуума приближённо является прямой линией с наклоном  $dE^\circ/dP = v_F$ . Все возможные возбуждения имеют групповую скорость меньше  $v_F$ . Если внешнее поле создаёт в Ферми-газе волну с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и частотой  $\omega$ , имеющую групповую скорость  $d\omega/dk < v_F$ , то такая волна оказывается в резонансе с некоторыми возбуждениями частица–дырка с той же скоростью внутри континуума. Любое слабое взаимодействие между ними привело бы к резонансной передаче энергии от внешней волны моде частица–дырка с теми же квантовыми числами. Это взаимодействие быстро преобразовало бы энергию волны в возбуждения частица–дырка при выполнении законов сохранения энергии и импульса, и волна стала бы слабее (*затухание Ландау*). В противоположность этому, диссипация гораздо меньше для волн, энергия и импульс которых находятся вне континуума, поскольку она бы потребовала одновременного рождения нескольких пар частица–дырка, что значительно менее вероятно.

## 10.6 Флуктуации плотности

Взаимодействие между фермионами открывает возможность появления волновых возбуждений без затухания Ландау (вне континуума частица–дырка). Мы здесь рассмотрим класс таких волн, связанных с *флуктуациями плотности*. Характерный квантовый оператор — это флуктуация плотности,

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)}. \quad (10.87)$$

Эрмитово сопряжённый оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$  был введён в (7.112) и использовался для вывода правила сумм (7.113). Обратите внимание, что предельное значение

$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_0^\dagger = \hat{N}, \quad (10.88)$$

— оператор числа частиц.

### Задача 10.8

Найдите выражение для оператора (11.88) во вторично-квантованном виде в базисе плоских волн.

**Решение** Оператор (11.88) — Фурье компонента оператора плотности (42.41). По определению из §42.6,

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = \sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}\sigma'\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}'\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} (\mathbf{p}'\sigma' | e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} | \mathbf{p}\sigma). \quad (10.89)$$

Интегрирование в матричном элементе даёт символы сохранения спина и импульса  $\delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}}\delta_{\sigma'\sigma}$ , и в результате

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (10.90)$$

Действуя на основное состояние, оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$  создаёт однородную комбинацию всех возбуждений частица–дырка, доступных в континууме рис. 45.5 вдоль вертикальной прямой с полным импульсом  $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$ .

Мы предполагаем, что частицы взаимодействуют попарно через потенциал  $U(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)$ , зависящий от относительных координат пары,

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = \sum_a \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ab} U(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b). \quad (10.91)$$

Такое взаимодействие можно выразить в терминах операторов флуктуации плотности,

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\rho}_{\mathbf{k}} - \hat{N}), \quad (10.92)$$

где использовались определения (11.88) и (11.89) вместе с Фурье компонентой  $U_{\mathbf{k}}$  потенциала взаимодействия,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}. \quad (10.93)$$

Оператор  $\hat{N}$  в (11.93) компенсирует добавленный член с  $\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_b$ . Конечно, тот же результат легко вывести во вторичном квантовании (11.91).

Как и при выводе правил сумм (§7.8), мы используем тот факт, что операторные функции координат коммутируют с членом взаимодействия. Из кинетической энергии мы получаем уравнение движения для флуктуаций плотности,

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{K}] = i \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right). \quad (10.94)$$

Этот универсальный результат не зависит от взаимодействия: каждая компонента флуктуаций плотности осциллирует со своей частотой, определяемой энергией возбуждения частица–дырка (11.87). Вычисление второй производной по времени уже включает взаимодействие через операторы импульса  $\hat{\mathbf{p}}_a$ , присутствующие в (11.95),

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = - \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\dagger}. \quad (10.95)$$

Эти точные нелинейные уравнения не могут быть решены точно. Мы применим *приближение случайных фаз* (ПСФ) [?], которое хорошо работает для описания коллективных мод в многочастичных системах.

## 10.7 Приближение случайных фаз

Мы хотим изолировать в точных уравнениях движения наиболее когерентные процессы, соответствующие волновому вектору  $\mathbf{k}$ .

Нелинейный (последний) член в (11.96) содержит такой вклад, происходящий от  $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ . Мы предполагаем, что взаимодействие между частицами является *отталкиванием*, так что  $U_{\mathbf{k}} > 0$  по крайней мере при малых  $k$ . Используя обозначение

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \frac{N}{V} k^2 U_{\mathbf{k}} \equiv n k^2 U_{\mathbf{k}}, \quad (10.96)$$

мы имеем

$$\begin{aligned} & \ddot{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \Omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= - \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} U_{\mathbf{k}'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \hat{\rho}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (10.97)$$

Первый член в правой части (11.98) содержит вклад отдельных возбуждений частица–дырка, сравните с (11.87). Рассмотрим большие длины волн,  $\hbar k \ll p_F$ . Поскольку континуум при малых  $k$  сжат вокруг  $\Sigma_F$ , мы можем оценить этот член в среднем

$$\sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \left( \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a)}{m} \right)^2 \approx \overline{(E^\circ(\mathbf{k}))^2} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (10.98)$$

где мы выделили когерентный вклад слоя континуума для данного импульса  $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$ . Нелинейные члены с  $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$  не имеют никакой когерентности. ПСФ пренебрегает этими членами и приводит к предсказанию коллективной моды с законом дисперсии

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger + \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = 0, \quad \omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{\mathbf{k}}^2 + \overline{(E^\circ(\mathbf{k}))^2}. \quad (10.99)$$

Рис. 10.6. Плазменные колебания и континуум частица–дырка.

Важный случай соответствует кулоновскому взаимодействию электронов в твёрдых телах или плазме, где нулевая Фурье компонента  $U_0$  исключается компенсирующим фоном, тогда как при  $\mathbf{k} \neq 0$ , в соответствии с (44.96),

$$U_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e^2}{k^2}. \quad (10.100)$$

Тогда величина  $\Omega_{\mathbf{k}}$ , определённая в уравнении (11.97), переходит в *плазменную частоту*  $\omega_0$ , уравнение (44.66). Поскольку второй член в (11.100) порядка  $(kv_F)^2$  при малых  $k$ , мы приходим к заключению, что при больших длинах волн флуктуации плотности в кулоновском газе являются плазменными колебаниями, определяемыми электронейтральностью. На карте рис. 45.5 эта частота расположена выше континуума. Поэтому такие колебания имеют слабую диссипацию, которое можно вычислить через некогерентные члены, не учитываемые в ПСФ. Вычисление этого затухания требует более продвинутой техники. С ростом  $k$  дисперсионная кривая флуктуаций плотности идёт вверх и входит в континуум, рис. 45.6. Таким образом, затухание плазменных колебаний становится важным при  $k \sim \omega_0/v_F$ . Используя явные выражения для плазменной частоты и скорости Ферми, легко получить оценку критической длины волны колебаний,  $\lambda_c \sim \sqrt{a r_0}$ , где  $a$  — боровский радиус, а  $r_0 \sim n^{-1/3}$  — среднее расстояние между электронами. Более короткие длины волн сильно затухают.

Конечное значение плазменной частоты при малых  $k$  является следствием дальнего действия кулоновского взаимодействия (особенность

$\sim 1/k^2$  в (11.101)). Записывая уравнение (11.100) для кулоновского случая в виде

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = \omega_0^2 + \xi k^2 v_F^2, \quad (10.101)$$

где  $\xi$  — численный коэффициент, близкий к 1, мы видим, что плазменная частота играет роль эффективной массы в “релятивистском” законе дисперсии кванта волны плотности, *плазмона*, — конечной энергии в длинноволновом пределе. Для потенциала  $U$  с конечной Фурье компонентой  $U_0$ , как в газе нейтральных частиц, спектр осцилляций плотности *звукоподобный*, поскольку оба члена в (11.100) ведут себя как  $\propto k^2$ . Как упоминалось в §44.6, плазменные колебания можно возбудить локальным нарушением нейтральности. При  $\delta\rho \propto \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$  электрическое поле  $\delta\vec{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}$  является *продольным* по отношению к волновому вектору  $\mathbf{k}$ . В некотором смысле, соответствующий квант, плазмон, является продольным аналогом поперечного фотона. Это возможно только в материальной среде, и в противоположность безмассовому фотону плазмон имеет ненулевую эффективную массу.



Уникальность конденсата Бозе-Эйнштейна в том, что он представляет собой чисто квантово-статистический фазовый переход, иначе говоря, он реализуется даже при отсутствии взаимодействия. Эйнштейн определял этот переход как конденсацию «без участия сил притяжения»... С другой стороны реальные частицы постоянно взаимодействуют, даже поведение слабо-взаимодействующего Бозе-газа отличается от поведения идеального Бозе-газа.

В. Кеттерле , *Нобелевская лекция 2001 г.*

## Глава 11

### Бозоны

#### 11.1 Бозе–Эйнштейновская конденсация

Как мы кратко упоминали в §5.3, газ невзаимодействующих бозонов при низкой температуре переходит в фазу с *макроскопическим* числом заполнения низшего одночастичного состояния. Конечно, это должно произойти даже для классического газа различных частиц, но только при чрезвычайно низкой температуре, сравнимой с расстоянием до первого возбуждённого одночастичного состояния,  $T \sim \hbar^2/mV^{2/3}$ , где  $V$  — объём системы. В квантовом Бозе-газе эффекты неразличимости делают эту температуру (5.9) больше в  $\sim N^{2/3}$  раз, где  $N$  — число частиц.

Изучение свойств Бозе-газа при конечной температуре  $T$  — задача статистической физики. Здесь нас будет интересовать чисто квантовый предел  $T = 0$ , когда все невзаимодействующие частицы образуют *Бозе–Эйнштейновский конденсат* (БЭК), т.е. занимают низшую орбиталь, и одно одночастичное состояние имеет огромное число заполнения  $N_0 = N$ . В реалистических системах частицы взаимодействуют. Первый вопрос, на который нужно ответить — выживает ли конденсат в присутствии взаимодействия между частицами.

Сначала попробуем учесть эффекты взаимодействия по теории возмущений. Рассмотрим пространственно однородную систему тождественных бесспиновых бозонов в *термодинамическом* пределе больших  $V$  и  $N$ . В основном состоянии  $|0\rangle$  все частицы занимают одночастичное состояние с наинизшей энергией. С периодическими граничными условиями эта орбиталь характеризуется нулевым импульсом  $\mathbf{p} = 0$  и нулевой энергией, так

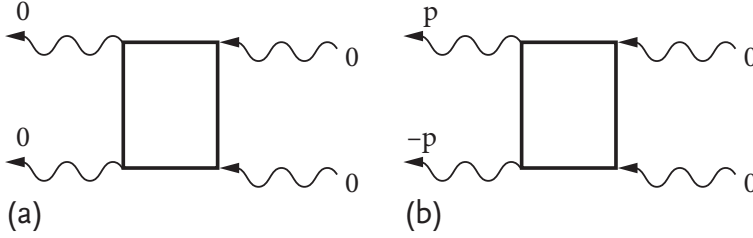


Рис. 11.1. Процесс рассеяния: (а) частиц конденсата; (б) создание занятых состояний  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$  выше конденсата.

что волновая функция конденсата — это просто константа  $1/\sqrt{V}$ . Взаимодействие  $U(\mathbf{r})$  между частицами вызывает процессы рассеяния. В первом порядке теории возмущений нам нужно только среднее значение энергии взаимодействия между частицами конденсата. Применяя уравнение (17.64), мы вычисляем (рис. 21.1а)

$$E_0 = \frac{1}{2V} U_0 \langle 0 | \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger a_0 a_0 | 0 \rangle. \quad (11.1)$$

Оператор здесь равен  $\hat{N}_0(\hat{N}_0 - 1)$ , так что вклад взаимодействия в конденсате в энергию основного состояния,  $\langle \hat{N}_0 \rangle = N$ , равен

$$E_0 = \frac{1}{2} U_0 \frac{N(N-1)}{V}. \quad (11.2)$$

Как и должно быть, в термодинамическом пределе с фиксированной плотностью  $n = N/V$  эта энергия,  $E_0 \approx (1/2)U_0 n N$ , пропорциональна числу частиц (*экстенсивная* величина). Здесь и далее мы предполагаем, что нулевая Фурье-компонента потенциала взаимодействия  $U_0$  конечна, что верно в случае нейтральных атомов.

В следующем приближении нам нужны *недиагональные* матричные элементы оператора взаимодействия. Единственный процесс, разрешённый сохранением импульса, показан на рис. 21.1б — это столкновение двух конденсатных частиц, создающее пару  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ . Невозмущённая энергия этого состояния равна  $2(p^2/2m)$ , и матричный элемент перехода даётся формулой

$$M_{\mathbf{p}} = \langle 0_{N-2}; \mathbf{p}, -\mathbf{p} | \hat{U} | 0_N \rangle, \quad (11.3)$$



где мы указываем число частиц в конденсате. Применяя снова уравнение (17.64), мы находим

$$M_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2V} \langle 0_{N-2} | \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 | 0_N \rangle = \frac{\sqrt{N(N-1)}}{V} U_{\mathbf{p}}. \quad (11.4)$$

Поэтому в линейном порядке по взаимодействию основное состояние приобретает примесь состояний с одной парой  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$  выше конденсата, и амплитуда этого смешивания равна

$$\alpha(\mathbf{p}) = -\frac{M_{\mathbf{p}}}{2(\mathbf{p}^2/2m)} = -\frac{m}{p^2} \frac{\sqrt{N(N-1)}}{V} U_{\mathbf{p}}. \quad (11.5)$$

Маленький квантованный вектор  $\mathbf{p}$  может быть представлен как  $(2\pi\hbar V^{-1/3})\vec{\nu}$ , где безразмерный вектор  $\vec{\nu}$  имеет целые компоненты порядка единицы. Поскольку существенные импульсы малы, удобно для последующего ввести *длину рассеяния*  $a$  (§8.7), которая в борновском приближении даётся выражением

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} f(k) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} U_0. \quad (11.6)$$

Здесь мы учли, что приведённая масса в столкновении двух тождественных частиц массы  $m$  равна  $m/2$ . В этих обозначениях мы получаем для амплитуды смешивания (11.5)

$$\alpha(\mathbf{p}) = -\frac{\sqrt{N(N-1)}}{\pi\vec{\nu}^2} \frac{a}{V^{1/3}} \frac{U_{\mathbf{p}}}{U_0}. \quad (11.7)$$

Для типичного расстояния между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$  и гладкого потенциала,  $U_{\mathbf{p}} \sim U_0$ , мы приходим к оценке

$$|\alpha(\mathbf{p})| \sim \frac{a}{r_0} N^{2/3}. \quad (11.8)$$

Следовательно, в термодинамическом пределе теория возмущений никогда не применима, поскольку её применимость потребовала бы  $a \ll r_0/N^{2/3}$ , что может быть справедливо только при  $a = 0$ . Как ясно из уравнения (11.4), этот результат является следствием эффекта стимулированного усиления любого процесса, который возбуждает частицы из макроскопически заполненного Бозе-конденсата, то же эффект, что и в лазерах. Даже в случае взаимодействия, являющегося слабым в смысле обычного борновского приближения в *двухчастичной* задаче, теория возмущений для *многочастичной* системы не работает, и нам нужны более мощные теоретические инструменты.

## 11.2 Конденсат как резервуар; химический потенциал

Чтобы выяснить, что происходит с конденсатом и низколежащими возбуждёнными состояниями в присутствии взаимодействия, мы предполагаем, что в системе со взаимодействием (которое мы по прежнему считаем слабым) конденсат выживает [?] — макроскопически большое число частиц  $N_0$  занимают одночастичную орбиту с  $\mathbf{p} = 0$ . Это предположение нужно будет проверить по результатам.

Для очень большого числа  $N_0$  операторы  $\hat{a}_0$  и  $\hat{a}_0^\dagger$  могут рассматриваться как  $c$ -числа (сравните с нашими аргументами насчёт макроскопической квантовой когерентности, глава I.14). Разница между  $N_0$  и  $N_0 + 1$  пренебрежима, и коммутатором

$$[\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger] = (\hat{N}_0 + 1) - \hat{N}_0 = 1 \quad (11.9)$$

можно пренебречь по сравнению с  $N_0$ . В истинном основном состоянии  $N_0$  не имеет определённого значения, поскольку процессы рассеяния (рис. 21.1b) удаляют пары частиц из конденсата. Однако среднее значение  $\langle N_0 \rangle$  этой флуктуирующей величины остаётся макроскопически большим во всех слабовозбуждённых состояниях. Поэтому мы можем положить (Шрёдингеровские операторы, не зависящие от времени)

$$\hat{a}_0 \approx \hat{a}_0^\dagger \Rightarrow \sqrt{N_0}, \quad (11.10)$$

где мы опустили скобки в  $\langle N_0 \rangle$ .

Таким образом, частицы с ненулевыми импульсами живут в контакте с макроскопическим *резервуаром* конденсатных частиц. Гамильтониан (17.64) даёт точные уравнения движения для Гейзенберговских операторов бозонов:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{\mathbf{a}}}_{\mathbf{p}} &= [\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{p}}, \hat{H}] \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}' \mathbf{P}} (U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{P}/2} + U_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}) \hat{a}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}, \end{aligned} \quad (11.11)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{\mathbf{a}}}_{\mathbf{p}}^\dagger &= -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{p}}^\dagger - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}' \mathbf{P}} (U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{P}/2} + U_{-\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}) \hat{a}_{\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}'+\mathbf{P}/2}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}}. \end{aligned} \quad (11.12)$$

11.2 Конденсат как резервуар;  
химический потенциал

251

Частный случай этих точных уравнений для частиц конденсата,  $\mathbf{p} = 0$ , есть

$$[\hat{a}_0, \hat{H}] = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{pP}} (U_{\mathbf{p}+\mathbf{P}/2} + U_{\mathbf{p}-\mathbf{P}/2}) \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{P}/2} \hat{a}_{-\mathbf{p}+\mathbf{P}/2}. \quad (11.13)$$

Выделим в сумме в уравнении (11.13) вклады, содержащие конденсатные операторы:

$$i\hbar \dot{a}_0 = \frac{U_0}{V} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left\{ U_{\mathbf{p}} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + (U_0 + U_{\mathbf{p}}) \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_0 \right\} + \widetilde{\sum}, \quad (11.14)$$

где  $\widetilde{\sum}$  не включает конденсатных операторов. Пренебрегая этими членами, относительно маленькими при  $N_0 \gg 1$ , можно искать решение уравнения (11.14) и сопряжённого уравнения для  $\dot{a}_0^\dagger$  в виде

$$a_0(t) = \sqrt{N_0} e^{-(i/\hbar)\mu t}, \quad a_0^\dagger = \sqrt{N_0} e^{(i/\hbar)\mu t}, \quad (11.15)$$

где амплитуды, в духе предыдущих аргументов, представлены как  $c$ -числа, а частота  $\mu$ , связанная с уничтожением или рождением конденсатной частицы, может быть найдена из среднего значения уравнения (11.14) по основному состоянию,

$$\mu = \frac{U_0}{V} N_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left\{ U_{\mathbf{p}} \Delta_{\mathbf{p}} + (U_0 + U_{\mathbf{p}}) n_{\mathbf{p}} \right\}. \quad (11.16)$$

Здесь мы ввели числа заполнения надконденсатных частиц,  $\mathbf{p} \neq 0$ ,

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle, \quad (11.17)$$

и аномальное среднее значение

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle e^{2(i/\hbar)\mu t}, \quad (11.18)$$

которое не зануляется в присутствии конденсата, который может поглощать или производить пары частиц с полным импульсом, равным нулю. Позже мы увидим, что оба средних значения (11.17) и (11.18) по основному состоянию системы не зависят от времени.

Поскольку

$$\langle N_0 - 1 | [\hat{a}_0, \hat{H}] | N_0 \rangle = (E_{N_0} - E_{N_0-1}) \langle N_0 - 1 | \hat{a}_0 | N_0 \rangle, \quad (11.19)$$

конденсатная частота (11.15) описывает изменение энергии, связанное с извлечением частицы из конденсата,

$$\mu = E_{N_0} - E_{N_0-1} \approx \frac{\partial E}{\partial N_0}. \quad (11.20)$$

В самом деле, главный вклад в среднюю энергию конденсата даётся членом (11.1) в гамильтониане, содержащим наибольшее число конденсатных операторов, вместо которых подставляются  $c$ -числа в соответствии с (11.10),

$$E_0 \approx \frac{1}{2V} U_0 N_0^2. \quad (11.21)$$

Производная этого члена по  $N_0$  совпадает с первым членом в уравнении (11.16) Следующий член возникает из-за вкладов в гамильтониан, содержащих два конденсатных оператора.

Таким образом, мы вводим  $\mu$  как *химический потенциал* конденсата. Как обычно в статистической механике, такие величины используются в задачах с переменным числом частиц. Поскольку точное основное состояние должно быть суперпозицией состояний с разными числами частиц в конденсате, нам нужен параметр такого типа, чтобы иметь возможность регулировать в среднем полное число частиц

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} n_{\mathbf{p}}. \quad (11.22)$$

### 11.3 Слабо неидеальный газ

Чтобы найти свойства основного состояния и спектр возбуждений, вернёмся к уравнениям движения (11.11) и (11.12) для  $\mathbf{p} \neq 0$ . В нелинейных членах в правой части сохраним главные вклады, содержащие два конденсатных оператора. Это эквивалентно приближению *слабо неидеального* Бозе-газа, с химическим потенциалом (11.16) упрощённым до первого члена,

$$\mu \approx U_0 \frac{N_0}{V} \equiv n_0 U_0. \quad (11.23)$$

Таким образом мы приходим к системе уравнений ( $\mathbf{p} \neq 0$ )

$$i\hbar \dot{a}_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{V} \left\{ (U_0 + U_{\mathbf{p}}) \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{\mathbf{p}} + U_{\mathbf{p}} \hat{a}_0 \hat{a}_0 \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger \right\}, \quad (11.24)$$

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\hat{a}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} - \frac{1}{V}\left\{(U_0 + U_{\mathbf{p}})\hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_0\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} + U_{\mathbf{p}}\hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{p}}\right\}. \quad (11.25)$$

Здесь в правой части мы имеем конденсатные операторы с их зависимостью от времени (11.15). Мы можем искать решение в виде

$$\hat{a}_{\mathbf{p}}(t) = e^{-(i/\hbar)\mu t}\hat{A}_{\mathbf{p}}(t), \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t) = e^{(i/\hbar)\mu t}\hat{A}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(t). \quad (11.26)$$

Тогда зависимость от времени, связанная с химическим потенциалом, сократится, и мы можем подставить  $c$ -числа  $\sqrt{N_0}$  вместо конденсатных операторов. В результате мы получаем *линейную* систему связанных уравнений,

$$i\hbar\dot{\hat{A}}_{\mathbf{p}} = [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\hat{A}_{\mathbf{p}} + n_0U_{\mathbf{p}}\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}, \quad (11.27)$$

$$i\hbar\dot{\hat{A}}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} = -[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} - n_0U_{\mathbf{p}}\hat{A}_{\mathbf{p}}, \quad (11.28)$$

Здесь мы использовали обозначения

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu, \quad n_0 = \frac{N_0}{V}. \quad (11.29)$$

Решения уравнений (11.27–11.28) — это *нормальные моды* Бозе-газа. Из одного и того же состояния с одним квантом  $|\mathbf{p}\rangle$  можно получить основное состояние либо понижая ( $\sim \hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{p}}$ ) частицу с импульсом  $\mathbf{p}$  в конденсат, либо повышая ( $\sim \hat{a}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}\hat{a}_0$ ) из конденсата партнёра  $-\mathbf{p}$  из пары  $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ . В обоих случаях мы получаем состояние с нулевым полным импульсом, но с разными числами частиц в конденсате,  $N_0 + 1$  и  $N_0 - 1$  соответственно. Основное состояние содержит комбинацию таких практически неразличимых компонент, и в обоих амплитудах конденсатный оператор можно заменить на соответствующую константу. Взяв матричные элементы между основным состоянием  $|0\rangle$  и состоянием с одним квантом возбуждения с импульсом  $\mathbf{p}$  и энергией (относительно основного состояния)  $E_{\mathbf{p}}$ , мы получим

$$E_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle + n_0U_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}|\mathbf{p}\rangle, \quad (11.30)$$

$$E_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}|\mathbf{p}\rangle = -[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]\langle 0|\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}|\mathbf{p}\rangle - n_0U_{\mathbf{p}}\langle 0|\hat{A}_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle, \quad (11.31)$$

Потребовав, чтобы детерминант этой системы алгебраических уравнений обращался в нуль, мы получим энергетический спектр возбуждений  $E_{\mathbf{p}}^{\pm}$  с двумя возможными знаками перед квадратным корнем. По определению, энергия возбуждения должна быть положительной, ток что физический корень — это

$$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{[\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]^2 - (n_0U_{\mathbf{p}})^2} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0U_0)^2 + 2(\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0U_0)U_{\mathbf{p}}}.$$

$$(11.32)$$

Вспоминая значение химического потенциала (11.23) в этом приближении, мы получаем

$$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{m} n_0 U_{\mathbf{p}}}. \quad (11.33)$$

Отрицательный корень той же системы уравнений соответствует матричному элементу  $\langle -\mathbf{p} | \cdots | 0 \rangle$ ; такие переходы опять могут быть произведены либо оператором  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ , либо  $\hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger$ .

## 11.4 Фононы

Мы нашли спектр элементарных возбуждений в Бозе-газе со слабым взаимодействием. Если Фурье-компоненты взаимодействия  $U_{\mathbf{p}}$  не возрастают слишком сильно с ростом импульса, то при достаточно больших импульсах этот спектр сводится к спектру отдельных частиц, возбуждённых из конденсата,

$$E_{\mathbf{p}} \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (11.34)$$

Однако в пределе *больших длин волн* второй член под знаком корня становится главным, и спектр является *линейной* функцией импульса,

$$E_{\mathbf{p}} \approx c p, \quad c = \sqrt{\frac{n_0 U_0}{m}}. \quad (11.35)$$

Таким образом, взаимодействие превращает некогерентное движение частиц в *звуковые волны* со скоростью звука  $c$ , определяемой плотностью конденсата и интегралом от взаимодействия по объёму,  $U_0$ , или длиной рассеяния (11.6). Решение в целом оказывается физически разумным только в случае *отталкивания* с  $U_0 > 0$ . Тогда частицы не образуют двухчастичных связанных состояний. В случае притяжения Бозе-газ был бы нестабилен по отношению к образованию таких связанных групп частиц.

### Задача 11.1

Решите задачу о спектре возбуждений в приближении среднего поля. Это можно сделать путём более тщательного решения уравнений (11.11) и (11.12): произведите линеаризацию, учитывая, в добавок к членам с

двумя конденсатными операторами, также средние значения  $\Delta_p$  и  $n_p$ , уравнения (11.17) и (11.18). Одновременно с этим нужно более точное выражение (11.16) для химического потенциала. покажите, что в таком самосогласованном подходе спектр сохраняет качественные черты, найденные в приближении слабо взаимодействующего газа, а именно переход между двумя режимами (11.34) и (11.35) с фононным спектром при малых импульсах.

Переход между двумя типами спектра возбуждений, корпускулярным (11.34) и волновым (11.35), рис 21.2, происходит при длинах волн, соответствующих

$$p_c \sim mc \sim \sqrt{mnU_0} \sim \hbar\sqrt{na} \quad \rightsquigarrow \quad \lambda \sim \sqrt{\frac{1}{na}} \sim r_0\sqrt{\frac{r_0}{a}}. \quad (11.36)$$

Обычно  $r_0 \gg a$ , иначе систему нельзя назвать газом, она ближе к сильно взаимодействующей жидкости. Понятие звуковых волн имеет ясный смысл только для длин волн, больших расстояния между частицами, когда можно говорить о когерентных многочастичных возбуждениях. В этой задаче коллективный характер поддерживается присутствием конденсата.

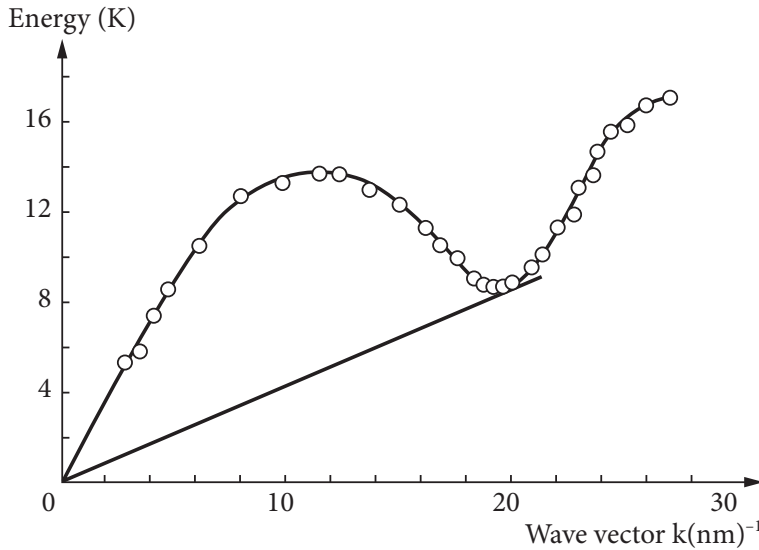


Рис. 11.2. Эмпирический спектр возбуждений жидкого  $^4\text{He}$ ; наклон тонкой линии показывает критическую скорость по критерию Ландау (11.43).

Кванты звуковых волн, *фононы*, определяют все низкотемпературные статистические свойства. Фононный спектр при малых волновых векторах

был предложен *Ландау, 1941*, для объяснения термодинамики жидкого  ${}^4\text{He}$ . При  $p \simeq p_c$  эмпирический спектр меняет характер (так называемый *ротонный минимум*, рис. 21.2), что может объясняться либо заметным изменением эффективных Фурье-компонент взаимодействия (достаточно предположить, что Фурье-компоненты взаимодействия ведут себя как  $U_{\mathbf{p}} \approx U_0 - \text{const} \cdot |\mathbf{p}|$ ), либо другой природой возбуждений (этот вопрос до сих пор обсуждается). При достаточно больших импульсах возбуждения фононного типа становятся нестабильными относительно распада на ротонны [2]. В общем следует помнить, что жидкий гелий — не газ, тогда как наши соображения ограничены случаем слабо взаимодействующего газа.

Фононный спектр можно рассматривать как ещё один пример *голдстоуновской моды*, вспомните главу 44. Здесь труднее увидеть, на каком этапе наше приближённое решение вводит спонтанное нарушение симметрии. Это происходит, когда мы подставляем вместо конденсатных операторов  $\hat{a}_0$  и  $\hat{a}_0^\dagger$  число  $\sqrt{N_0}$ , уравнение (11.10). Вместо этого можно положить

$$\hat{a}_0 \Rightarrow \sqrt{N_0}e^{i\alpha}, \quad \hat{a}_0^\dagger \Rightarrow \sqrt{N_0}e^{-i\alpha} \quad (11.37)$$

с произвольным действительным  $\alpha$ . Это фазовое преобразование конденсата сохраняет коммутационные соотношения и ведёт к другому, но совершенно эквивалентному основному состоянию. Поэтому среди возможных коллективных возбуждений имеется *глобальное* (во всём пространстве) изменение фазы конденсата без изменения энергии, которое является длинноволновым пределом реальной фононной ветви.

И это действительно так. Для бесконечно малого фазового преобразования мы имеем из (11.37)

$$\delta a_0 = i\alpha\sqrt{N_0}, \quad \delta a_0^\dagger = -i\alpha\sqrt{N_0}. \quad (11.38)$$

Это значит, что в голдстоуновской моде

$$\frac{\delta a_0}{\delta a_0^\dagger} = -1. \quad (11.39)$$

В фононной моде мы имеем из (11.30) или (11.31)

$$\frac{\langle 0|A_{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle}{\langle 0|A_{-\mathbf{p}}^\dagger|\mathbf{p}\rangle} = \frac{n_0 U_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}} - [\varepsilon_{\mathbf{p}} + n_0(U_0 + U_{\mathbf{p}})]}. \quad (11.40)$$

При значениях энергии возбуждения (11.33) и химического потенциала (11.23) в пределе  $p \rightarrow 0$  правая часть стремится к  $-1$ , в согласии



с (11.39). Таким образом, присутствие фононной ветви с нулевой энергией в длинноволновом пределе восстанавливает инвариантность относительно фазовых преобразований конденсата (*калибровочную симметрию*). Эта симметрия была нарушена специфическим выбором фазы конденсата.

## 11.5 Сверхтекучесть

Как было установлено в знаменитых экспериментах *Капицы и Аллена и Мизенера, 1940*, жидкий  $^4\text{He}$  является *сверхтекучим* при температурах ниже 2.2 К. Эта жидкость течёт без вязкости через капилляры и щели, непроницаемые даже для газов.

Сверхтекучесть — одно из замечательных макроскопических квантовых явлений. Его понимание основывается на свойствах энергетического спектра элементарных возбуждений системы. Необходимое условие сверхтекучести было сформулировано *Ландау, 1941*. На микроскопическом уровне трение и диссипация энергии в движущейся среде происходит через рождение элементарных возбуждений, которые поглощают энергию глобального движения. Но требуемые передачи энергии и импульса должны быть взаимно согласованы, а это зависит от спектра возбуждений системы. Возьмём простейший случай однородно движущейся квантовой жидкости в лабораторной системе. Это движение ограничено стенками сосуда. Взаимодействие между стенками и системой имеет характер трения если рождение возбуждений (реальных, а не виртуальных) в жидкости за счёт кинетической энергии разрешено законами сохранения. Тот же результат получится, если движущаяся жидкость обтекает макроскопическое препятствие.

Удобно рассматривать систему отсчёта, в которой жидкость покоится, тогда как стенки или макроскопические тела движутся относительно неё со скоростью  $\mathbf{u}$ . Движущийся объект имеет макроскопическую энергию  $E$  и импульс  $\mathbf{P}$ . В элементарном акте взаимодействия стенки или препятствие потеряют энергию  $\Delta E$  и импульс  $\Delta \mathbf{P}$ . В нашей системе с дискретным квантовым спектром этот процесс создаст элементарное возбуждение с импульсом  $\mathbf{p}$  и энергией  $\varepsilon(\mathbf{p})$ . В соответствии с законами сохранения,

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta E, \quad \mathbf{p} = \mathbf{P}. \quad (11.41)$$

Поскольку для макроскопического объекта  $\Delta E = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{P})$ , необходимое условие для обмена энергией-импульсом есть

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{p}). \quad (11.42)$$

Условие (11.42) определяет угол между импульсом новорожденного возбуждения и относительной скоростью. Но оно может быть выполнено только если  $\varepsilon(\mathbf{p}) < up$ , т.е. не при всяком спектре возбуждений. Должно выполняться очевидное ограничение, что относительная скорость  $u$  должна превышать *критическую скорость*  $u_c$ , рис. 45.2,

$$u > u_c, \quad u_c = \min \left( \frac{\varepsilon(p)}{p} \right). \quad (11.43)$$

Если этот *критерий Ландау* выполнен, то относительное движение будет затухать. При скоростях меньше критического значения обмен энергией и импульсом, связанный с рождением элементарного возбуждения, запрещён. Тогда система является *сверхтекучей*.

В идеальном (невзаимодействующем) Бозе-газе в основном состоянии все частицы находятся в конденсате. Элементарное возбуждение, создаваемое оператором  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\hat{a}_0$ , переводит частицу из конденсата в состояние  $\mathbf{p} \neq 0$  и требует энергию  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$ . В соответствии с критерием (11.43), критическая скорость равна нулю. Это значит, что коллективное движение такого газа как целого невозможно — сколь угодно слабое взаимодействие со стенками будет возбуждать отдельные частицы, разрушая макроскопическое движение.

Ситуация меняется в неидеальном Бозе-газе. Даже слабое взаимодействие между частицами радикально меняет спектр, потому что идеальный Бозе-газ неустойчив из-за макроскопического усиления матричных элементов, связанных с конденсатом. Фононный спектр (11.35) удовлетворяет критерию Ландау (11.43) с критической скоростью, равной скорости звука,  $u_c = c$ . Для течения с меньшей скоростью мы можем ожидать сверхтекучести. Из-за ротонного минимума в эмпирическом спектре гелия (рис. 21.2) критическая скорость меньше  $c$ : легче родить элементарное возбуждение, соответствующее этому минимуму. В действительности критическая скорость ещё меньше; вероятно, она определяется рождением маленьких вихревых колец.

## 11.6 Канонические преобразования

Вернёмся к выводу фононного спектра в Бозе-газе. Как мы обсуждали, операторы  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{a}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}$  дают альтернативные пути связи основного состояния с возбуждённым состоянием с одним элементарным возбуждением фононного типа. До тех пор, пока число таких возбуждений много меньше  $N_0$ , они

независимы и могут рассматриваться как *квазичастицы*, подчиняющиеся статистике Бозе.

Это можно сформулировать, введя квазичастичные операторы для  $p \neq 0$  как линейные комбинации операторов  $\hat{A}_{\mathbf{p}}$  и их эрмитово сопряжённых, которые совпадают с исходными операторами  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  и их сопряжёнными при  $t = 0$ , уравнение (11.26),

$$\hat{b}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{A}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}\hat{A}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}, \quad (11.44)$$

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} = u_{\mathbf{p}}^*\hat{A}_{\mathbf{p}}^{\dagger} + v_{\mathbf{p}}^*\hat{A}_{-\mathbf{p}}, \quad (11.45)$$

Это *преобразование Боголюбова* [3] приводит к новым бозонам, если сохраняются коммутационные соотношения,

$$[\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \quad \rightsquigarrow \quad |u_{\mathbf{p}}|^2 - |v_{\mathbf{p}}|^2 = 1; \quad (11.46)$$

в изотропной среде коэффициенты преобразования не зависят от направления импульса,  $u_{\mathbf{p}} = u_p$ ,  $v_{\mathbf{p}} = v_p$ . Все операторы  $b$  автоматически коммутируют, так же, как и операторы  $b^{\dagger}$ . Таким образом, мы имеем *каноническое преобразование* от старых бозонных операторов к новым; детерминант преобразования равен 1.

Линейное преобразование (11.44–11.45) при условии (11.46) можно обратить,

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = u_p^*\hat{b}_{\mathbf{p}} - v_p\hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}, \quad \hat{A}_{\mathbf{p}}^{\dagger} = u_p\hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} - v_p^*\hat{b}_{-\mathbf{p}}, \quad (11.47)$$

Этот формализм близок к тому, что мы использовали в §I.12.8 для сжатых состояний гармонического осциллятора в присутствии источника, который рождает кванты парами. Здесь, как видно из рис. 21.1, роль такого источника играет конденсат. Пары, рождённые при столкновении двух частиц конденсата, состоят из двух различных бозонов  $\mathbf{p}$  и  $-\mathbf{p}$ , сопряжённых друг другу в смысле обращения времени.

### Задача 11.2

21.2 Найдите оператор, соответствующий нормальной моде,  $b_{\mathbf{p}}(t) \propto e^{-i\omega t}$ , покажите, что  $\hbar\omega = E_p$ , уравнение (11.32), и найдите коэффициенты канонического преобразования.

**Решение** Соотношение между коэффициентами имеет вид

$$\frac{v_p}{u_p} = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) - E_p}{n_0U_p} = \frac{n_0U_p}{E_p + \varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p)}. \quad (11.48)$$

с условием нормировки (11.46), мы получаем

$$u_p^2 = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) + E_p}{2E_p}, \quad v_p^2 = \frac{\varepsilon_p + n_0(U_0 + U_p) - E_p}{2E_p}. \quad (11.49)$$

Взяв длинноволновой предел и используя явные выражения для спектра (11.32, 11.33), мы видим, что при  $p \ll mc$  амплитуды  $u_p$  и  $v_p$  возрастают до одного и того же значения (их разность (11.46) мала по сравнению с каждым из них),

$$u_p^2 \approx v_p^2 \approx \frac{mc}{2p}, \quad 0 < p \ll mc. \quad (11.50)$$

Этот результат показывает, что отношение (11.40), которое равно  $-v_p/u_p$  в соответствии с (11.47), действительно стремится к  $-1$  в пределе  $p \ll mc$ , как и должно быть для голдстоуновской моды, уравнение (11.39).

### Задача 11.3

21.3 Выведите все результаты альтернативным путём, в формулировке, не зависящей от времени: введите неизвестный химический потенциал  $\mu$  так, что  $\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$ ; проведите каноническое преобразование и выразите полный гамильтониан через новые операторы  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$ ; выделите члены с четырьмя, двумя и одним конденсатным оператором; замените конденсатные операторы на  $c$ -число  $\sqrt{N_0}$ ; тогда члены с двумя конденсатными операторами дают квадратичную форму от операторов с  $\mathbf{p} \neq 0$ ; эта форма диагонализуется как в §1.12.7 выбором амплитуд  $u, v$ ; коэффициент при диагональном члене  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}}$  определяет энергию элементарного возбуждения, которая совпадает с (11.32) после правильного выбора химического потенциала (11.20), гарантирующего отсутствие энергетической щели в спектре элементарных возбуждений,  $E_{\mathbf{p}} \rightarrow 0$  при  $p \rightarrow 0$ .

Поскольку амплитуды нормальных мод,  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$ , являются Бозе-операторами с определённой частотой, основное состояние системы в этом приближении является вакуумным состоянием  $|\Psi_0\rangle$  относительно этих квантов. Операторы  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  зануляют вакуумное состояние,

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}|\Psi_0\rangle = 0, \quad \mathbf{p} \neq 0, \quad (11.51)$$

тогда как операторы рождения создают кванты нормальных мод,

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger|\Psi_0\rangle = |\mathbf{p}\rangle. \quad (11.52)$$

Теперь мы находим плотность надконденсатных частиц (11.17),

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \Psi_0 | \hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle. \quad (11.53)$$

С помощью канонических преобразований (11.47) и вакуумных правил (11.51) мы получаем

$$n_{\mathbf{p}} = v_p^2 \approx \frac{mc}{2p}, \quad (11.54)$$

где последнее выражение верно при  $p \ll mc$ . Уравнение (11.54) даёт хвост макроскопической плотности конденсата при малых, но ненулевых импульсах.

#### Задача 11.4

21.4 Найдите числа заполнения при больших импульсах,  $p \gg mc$ .

#### Решение

$$n_{\mathbf{p}} \approx \left( \frac{mc}{p} \right)^4, \quad p \gg mc. \quad (11.55)$$

Поскольку при  $p \gg mc$  числа заполнения быстро падают, мы можем оценить полное число надконденсатных частиц как

$$n_{p>0} \approx \int_{p < mc} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{mc}{2p} = \frac{1}{8\pi^2} \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^3. \quad (11.56)$$

Весь этот подход работает, если большинство частиц всё ещё находятся в конденсате. Уравнения (11.56) и (11.35) показывают, что

$$\frac{n_{p>0}}{n_0} = \frac{1}{8\pi^2 n_0} \left( \frac{mn_0 U_0}{\hbar^2} \right)^{3/2} = \sqrt{\frac{n_0 a^3}{\pi}}, \quad (11.57)$$

где  $a$  — длина рассеяния (11.6). Мы видим, что малым параметром приближения слабо неидеального Бозе-газа является  $\sqrt{n_0 a^3} \sim (a/r_0)^{3/2}$ .

#### Задача 11.5

Найдите аномальное среднее значение (11.18).

#### Решение

$$\Delta_p = -u_p v_p = -\frac{\mu}{2E_p}. \quad (11.58)$$

В длинноволновом пределе  $\Delta_p \approx (-mc/2p)$ .

### 11.7 Фононы как волны плотности

Дополнительный взгляд на ситуацию даётся описанием в терминах координатных переменных.

Оператор рождения элементарного возбуждения (11.45) в длинноволновом пределе (11.50), когда  $u_p$  и  $v_p$  приближённо равны, имеет вид

$$\hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \approx u_p(\hat{A}_{\mathbf{p}}^{\dagger} + \hat{A}_{-\mathbf{p}}). \quad (11.59)$$

Сопоставим это с оператором флуктуаций плотности (17.41). В многочастичном представлении этот оператор использовался для вывода правила сумм (§I.7.9). В импульсном базисе вторичного квантования мы имеем вместо (I.7.145) выражение (20.90) для бесспиновых бозонов,

$$\hat{\rho}_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}'}. \quad (11.60)$$

В области малых импульсов слабо неидеального Бозе-газа операторы с  $\mathbf{p} = 0$  соответствуют макроскопическим числам заполнения, и их можно заменить на  $\sqrt{N_0}$ . Тогда флуктуация плотности связана с возбуждением частицы из конденсата, и после этой подстановки уравнение (11.60) сводится к

$$\hat{\rho}_{\mathbf{p}} \Rightarrow \sqrt{N_0}(\hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}). \quad (11.61)$$

Здесь два члена происходят от  $\mathbf{p}' = 0$  и  $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$  в сумме (11.60) соответственно. Поэтому элементарное возбуждение Бозе-газа, создаваемое оператором (11.59), является, в фононной длинноволновой области, ничем иным как флуктуацией плотности, распространяющейся как волна с определённым импульсом. Это позволяет очевидным образом переинтерпретировать голдстоуновскую моду. В пределе  $p \rightarrow 0$  фаза флуктуации плотности везде одинакова и эквивалентна глобальному преобразованию (11.37); постоянная фаза не требует энергии.

Если оператор  $\hat{\rho}_{\mathbf{p}}$  имеет большой матричный элемент между основным состоянием и возбуждённым состоянием  $|\mathbf{p}\rangle$ , то мы предполагаем, что один этот переход *насыщает* правило сумм (I.7.146), которое в явном виде (I.7.130) записывается как

$$\sum_n (E_n - E_0) \left| \langle \Psi_n(\mathbf{p}) | \hat{\rho}_{\mathbf{p}}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle \right|^2 = \frac{p^2}{2m} N, \quad (11.62)$$

где мы суммируем по всем промежуточным состояниям  $|\Psi_n(\mathbf{p})\rangle$  с импульсом  $\mathbf{p}$ . Насыщение означает, что единственное состояние  $|\mathbf{p}\rangle$  с энергией возбуждения  $E_{\mathbf{p}}$  даёт значительный вклад в правило сумм, т.е.

$$E_{\mathbf{p}} |\langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle|^2 \approx \frac{p^2}{2m} N. \quad (11.63)$$

Величина

$$S_{\mathbf{p}} = \langle \Psi_0 | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} \hat{\rho}_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \quad (11.64)$$

называется *статическим формфактором*. Она выражает корреляционную функцию флуктуация плотности. Подставляя в уравнение (11.64) полный набор возбуждённых состояний с импульсом  $\mathbf{p}$  и опять предполагая насыщение, мы получаем

$$S_{\mathbf{p}} = \sum_n \left| (\rho_{\mathbf{p}}^\dagger)_{n0} \right|^2 \approx |\langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_{\mathbf{p}} | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (11.65)$$

Теперь результат (11.63) может быть переписан в виде, предложенном Р. Фейнманом,

$$E_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} \frac{N}{S_{\mathbf{p}}}. \quad (11.66)$$

Статический формфактор (11.64) — это функция, прямо связанная с экспериментально наблюдаемыми величинами, особенно с *парной корреляционной функцией*, которая определяется как

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N(N-1)} \left\langle \sum_{ab(a \neq b)} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right\rangle, \quad (11.67)$$

вероятность найти две частицы на расстоянии  $\mathbf{r}$  друг от друга. Среднее значение в (11.67) берётся либо по основному состоянию  $|\Psi_0\rangle$ , либо по соответствующему тепловому ансамблю при ненулевой температуре. Статический формфактор есть по существу Фурье-образ корреляционной функции:

$$S_{\mathbf{p}} = \left\langle \sum_{ab} e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \right\rangle = \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \left\langle \sum_{ab} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \right\rangle. \quad (11.68)$$

Таким образом,

$$S_{\mathbf{p}} = N + N(N-1) \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} g(\mathbf{r}). \quad (11.69)$$

Здесь член  $N$  происходит от корреляции с самим собой,  $a = b$ .

### 11.8 Приближение локальной плотности

Существуют физические аргументы, позволяющие связать уравнение (11.66) со скоростью звука и, следовательно, с нашим предыдущим результатом (11.35) для спектра элементарных возбуждений при больших длинах волн. Применим к системе слабое статическое возмущение плотности, меняющееся в пространстве с волновым вектором  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ ,

$$\hat{H}' = \lambda \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (11.70)$$

или, в терминах операторов флуктуаций плотности (помечаемых здесь волновым вектором  $\mathbf{k}$ ),

$$\hat{H}' = \frac{\lambda}{2} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}} + \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger). \quad (11.71)$$

Мы предполагаем, что система *стабильна* по отношению к таким слабым ( $\lambda \rightarrow 0$ ) возмущениям. Однородное основное состояние получит модуляцию плотности, и его энергия во втором порядке теории возмущений сводится к

$$E - E_0 = \sum_n \frac{|H'_{n0}|^2}{E_0 - E_n} = -\frac{\lambda^2}{2} \sum_n \frac{|(\rho_{\mathbf{k}}^\dagger)_{n0}|^2}{E_n - E_0} \equiv -\frac{\lambda^2}{2} X_{\mathbf{k}}. \quad (11.72)$$

#### Задача 11.6

Найдите среднее значение оператора флуктуаций плотности и возмущения  $H'$  в возмущённом основном состоянии  $|\Psi'_0\rangle$ .

#### Решение

$$\langle \Psi'_0 | \hat{\rho}_{\mathbf{k}} | \Psi'_0 \rangle = -\lambda X_{\mathbf{k}}; \quad (11.73)$$

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H}' | \Psi'_0 \rangle = -\frac{\lambda^2}{2} 2 X_{\mathbf{k}} = -\lambda^2 X_{\mathbf{k}}. \quad (11.74)$$

Теперь вычислим изменение энергии другим путём, с помощью *макроскопических* аргументов. Полная энергия возмущённого состояния равна

$$E = \langle \Psi'_0 | \hat{H} + \hat{H}' | \Psi'_0 \rangle. \quad (11.75)$$

Чтобы найти среднее значение исходного гамильтониана  $H$  в новом состоянии, мы используем, подобно идее функционала плотности (§19.10),



*приближение локальной плотности.* А именно, если невозмущённая энергия может быть записана как  $E_0 = V\varepsilon(n)$ , то при *больших длинах волн* возмущения, когда  $kr_0 \ll 1$ , большие части системы чувствуют просто плавное изменение локальной плотности, тогда как её градиенты всё ещё достаточно малы. Поэтому мы ожидаем, что *локально* внутренняя энергия системы всё ещё может быть описана тем же функционалом  $\varepsilon(n)$  с плавно меняющейся плотностью  $n(\mathbf{r})$ :

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H} | \Psi'_0 \rangle = \int d^3r \varepsilon(n(\mathbf{r})). \quad (11.76)$$

При малых изменениях плотности,  $n \rightarrow n + \Delta n(\mathbf{r})$ , мы можем использовать разложение

$$\varepsilon(n(\mathbf{r})) \approx \varepsilon(n) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} \Delta n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} (\Delta n)^2 + \dots \quad (11.77)$$

Модуляция плотности возмущением (11.70) может быть найдена из (11.73):

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = n + \Delta n(\mathbf{r}) = n + \frac{1}{V} \langle \rho_{\mathbf{k}} \rangle 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (11.78)$$

что может быть выражено через ту же сумму  $X_{\mathbf{k}}$ , которая была определена в уравнении (11.72),

$$\Delta n(\mathbf{r}) = -2 \frac{\lambda}{V} X_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (11.79)$$

Член первого порядка в разложении (11.77) обращается в нуль после интегрирования осциллирующего косинуса, интеграл по объёму от  $\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2$  во втором члене даёт  $V/2$ , и у нас остаётся

$$\langle \Psi'_0 | \hat{H} | \Psi'_0 \rangle = E_0 + \frac{1}{2} \left( 2 \frac{\lambda}{V} X \right)^2 \frac{V}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} = E_0 + \lambda^2 \frac{X^2}{V} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2}, \quad (11.80)$$

где  $X$  — та же величина  $X_{\mathbf{k}}$ , взятая в длинноволновом пределе  $k \rightarrow 0$ . Собирая все члены порядка  $\lambda^2$  в (11.72, 11.74, 11.75) и (11.80), мы приходим к

$$-\frac{\lambda^2}{2} X = -\lambda^2 X \left( 1 - \frac{X}{V} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right), \quad (11.81)$$

или

$$X = \frac{V}{2} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right)^{-1} = \frac{N}{2n} \left( \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2} \right)^{-1}. \quad (11.82)$$

Теперь мы можем связать величину  $X$ , уравнения (11.72) и (11.82), со скоростью звука. Давление  $P$  в невозмущённой среде равно

$$P = - \left( \frac{\partial E_0}{\partial V} \right)_N, \quad (11.83)$$

но производная по объёму при фиксированном  $N$  может быть выражена как

$$\left( \frac{\partial}{\partial V} \right)_N = - \frac{n}{V} \left( \frac{\partial}{\partial n} \right)_N, \quad (11.84)$$

так что с  $E_0 = V\varepsilon(n)$ ,

$$P = n \frac{\partial \varepsilon}{\partial n} - \varepsilon. \quad (11.85)$$

Как следует из равновесной гидродинамики [4], скорость звука определяется производной давления по массовой плотности  $mn$ ,

$$c^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} = \frac{n}{m} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial n^2}. \quad (11.86)$$

Уравнение (11.82) теперь говорит нам, что

$$X = \lim_{k \rightarrow 0} \sum_n \frac{|(\rho_{\mathbf{k}}^\dagger)_{n0}|^2}{E_n - E_0} = \frac{N}{2n} \frac{n}{2mc^2} = \frac{N}{2mc^2}. \quad (11.87)$$

Это соотношение называется *правилом сумм для обратной энергии*.

Последний шаг в нашей цепочке аргументов состоит в том, что мы ожидаем, что в слабо неидеальном Бозе-газе правила сумм, такие, как (11.87), в длинноволновом пределе насыщаются единственной голдстоуновской ветвью спектра элементарных возбуждений  $E_{\mathbf{p}}$ ,  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ . Тогда уравнение (11.87) определяет физическую нормировку матричного элемента флуктуации плотности,

$$S_{\mathbf{k}} \approx \left| \langle \mathbf{k} | \rho_{\mathbf{p}}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 = E_{\mathbf{p}} X = E_{\mathbf{p}} \frac{N}{2mc^2}. \quad (11.88)$$

Вместе с правилом сумм (11.66) это даёт универсальный фононный спектр,

$$E_{\mathbf{p}}^2 = c^2 p^2, \quad (11.89)$$

с макроскопически определённой скоростью звука. Поскольку при нулевой температуре  $\mu = \partial P / \partial n$ , это определение совпадает с определением, использованным в микроскопических рассуждениях, уравнения (11.20) и (11.38).

## 11.9 Неоднородный газ

До сих пор мы обсуждали основное состояние и элементарные возбуждения в пространственно-однородном случае. Тогда возбуждения характеризуются своим импульсом  $\mathbf{p}$ . Во многих случаях Бозе-система имеет *пространственно-неоднородную* конфигурацию. Все недавние успехи в получении Бозе-конденсации [5] связаны со специальными ловушками, где могут охлаждаться атомы. Ловушку можно описать потенциалом  $U^\circ(\mathbf{r})$ , обычно близком к потенциалу гармонического осциллятора, возможно анизотропного. Тогда гамильтониан газа содержит кинетическую энергию, взаимодействие между частицами через потенциал  $U(\mathbf{r})$  и внешний потенциал  $U^\circ(\mathbf{r})$ . Во вторично-квантованном виде (42.67),

$$\hat{H} = \hat{K} + \int d^3r \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger U^\circ(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}'}^\dagger U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{a}_{\mathbf{r}'} \hat{a}_\mathbf{r}. \quad (11.90)$$

Гейзенберговские уравнения движения для операторов уничтожения имеют вид

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{a}}_\mathbf{r} &= [\hat{a}_\mathbf{r}, \hat{H}] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{a}_\mathbf{r} + U^\circ(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r} + \int d^3r' d^3r \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{a}_{\mathbf{r}'} \hat{a}_\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (11.91)$$

Поскольку нас интересует макроскопически когерентное движение, мы применяем аргументы и формализм главы I.14 и заменяем матричные элементы операторов  $\hat{a}_\mathbf{r}$  и  $\hat{a}_\mathbf{r}^\dagger$  на макроскопическую волновую функцию  $\Psi(\mathbf{r})$ , представляющую конденсат и в общем случае пространственно-неоднородную,

$$i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) + \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}). \quad (11.92)$$

Функция  $\Psi(\mathbf{r})$  удовлетворяет *нелинейному* уравнению типа Шрёдингера. Нелинейность соответствует самосогласованному среднему полю, создаваемому взаимодействующими частицами.

Теорию можно далее упростить для газа низкой плотности с отталкивающим взаимодействием, например, типа *твёрдых сфер*. Тут мы имеем попарные взаимодействия при низких энергиях, так что существенно только  $s$ -волновое рассеяние. Такое двухчастичное взаимодействие полностью описывается длиной рассеяния  $a$ , уравнение (11.6), являющейся точным

решением двухчастичной задачи. Тогда вместо истинного потенциала мы можем использовать в уравнениях движения *псевдопотенциал*

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Rightarrow g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a. \quad (11.93)$$

Это приводит уравнение (11.91) к *локальной* форме:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2\Psi(\mathbf{r}). \quad (11.94)$$

Это уравнение *Питаевского–Гросса* [6, 7] широко используется в физике Бозе-систем; его справедливость для чисто отталкивательного взаимодействия была строго доказана значительно позже [8]. В случае потенциалов типа Ван дер Ваальса (задача 8.6) применимость такой упрощённой формы может быть сомнительна [9] из-за присутствия резонансов в рассеянии, обусловленных притягивательной частью.

Хотя соображения главы 14 о макроскопически когерентном состоянии всё ещё применимы, *нелинейность* уравнения (11.94) привносит много разнообразных физических явлений, успешно изучаемых в атомных ловушках. Здесь мы приводим только пару примеров. В случае решений, не зависящих от времени, макроскопическая волновая функция эволюционирует со временем тривиальным образом, как обсуждалось в (I.14.10) и (I.14.12), в соответствии с

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-(i/\hbar)\mu t}, \quad |\psi(\mathbf{r})|^2 = n(\mathbf{r}), \quad (11.95)$$

где  $n(\mathbf{r})$  — распределение плотности. Стационарное уравнение имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}), \quad (11.96)$$

и интеграл от функции  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  нормирован на полное число частиц  $N$ . Нормировка фиксирована, потому что уравнение теперь нелинейно. Это уравнение определяет, подобно приближению Томаса–Ферми (§19.5), равновесную плотность газа.

Пространственная конфигурация зависит от соревнования характерных длин, корреляционного радиуса  $\xi$ , определяемого взаимодействием, расстояния между частицами  $r_0 \sim n^{-1/3}$  и размера внешнего потенциала  $R$ . Для корреляционного радиуса мы получаем, приравнявая кинетический член  $\sim \hbar^2/(m\xi^2)$  и член взаимодействия  $gn$ , оценку  $\xi \sim \sqrt{\hbar^2/(mgn)}$ . Коллективные колебания, которые мы нашли выше, относятся к фононному типу,

если длина волны больше  $\xi$ . Эта длина больше межчастичного расстояния на множитель

$$\frac{\xi}{r_0} \sim \xi n^{1/3} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{mg} n^{1/6}} \sim (na^3)^{-1/6}, \quad (11.97)$$

где мы использовали длину рассеяния  $a$ . Из-за степени  $1/6$  это отношение не очень велико даже в разреженном газе, когда  $na^3 \sim (a/r_0)^{1/3} < 1$ . Если корреляционный радиус мал по сравнению с типичным размером внешнего потенциала, и мы не интересуемся поведением на таких малых расстояниях, то только внешний потенциал определяет макроскопическое распределение плотности,

$$gn(\mathbf{r}) + U^\circ(\mathbf{r}) = \text{const} = \mu, \quad (11.98)$$

по аналогии с уравнением Томаса–Ферми (19.58).

Для основного состояния решение  $\psi$  может быть взято действительным, тогда как возможная координатная зависимость фазы соответствует присутствию токов, уравнение (I.14.15). Нелинейный член в уравнении (11.94) позволяет найти пространственную структуру *вихря*, где фаза квантуется (§I.14.6) в единицах кванта циркуляции (I.14.54). Считая вихревую линию направленной по оси  $z$ , а фазу равной  $\ell\alpha$ , где  $\alpha$  — азимутальный угол, а  $\ell$  — момент импульса на частицу (I.14.57), мы получаем уравнение Питаевского–Гросса (11.96) для радиальной части функции  $\psi(\mathbf{r}) = A(r) \exp(i\ell\alpha)$ , где  $A(r) = \sqrt{n(r)}$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dA}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell^2}{2mr^2} A(r) + gA^3(r) = \mu A(r). \quad (11.99)$$

Теперь мы видим, что радиус ядра вихря действительно определяется корреляционным радиусом, качественно введённым выше. Определим

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mg n_0}}, \quad (11.100)$$

где  $n_0$  — постоянная равновесная плотность. При  $\xi \ll R$  химический потенциал меняется в присутствии вихря незначительно, и мы всё ещё можем полагать  $\mu = gn_0$ . Тогда, вводя безразмерную радиальную координату  $y = r/\xi$  и относительную плотность  $f(y) = A(\xi y)/\sqrt{n_0}$ , мы можем переписать уравнение (11.99) в приведённой форме:

$$\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \left( y \frac{df}{dy} \right) + \left( 1 - \frac{\ell^2}{y^2} \right) f(y) - f^3(y) = 0. \quad (11.101)$$

На больших расстояниях от вихря,  $y \gg l$ , решение определяется нелинейностью и даёт  $f = f^3$ , что соответствует  $f \rightarrow 1$ , так что плотность равна невозмущённой  $n_0$ . Вблизи оси вихря мы оставляем производную и центробежный член; их совместное действие приводит к типичному поведению  $f \sim y^{|\ell|}$ . При  $\ell \neq 0$  решение обращается в нуль в ядре вихря (область без когерентного конденсата,  $n(r) \rightarrow 0$ ). Размер ядра порядка 1 в приведённых единицах, то есть  $r \sim \xi$ , корреляционный радиус. Поведение решения в промежуточной области может быть найдено численно. Во вращающейся ловушке вихри образуют решётку (§I.14.6), которая имитирует вращение твёрдого тела.

Эксперимент не оставляет сомнения в том, что, с той точностью, которую имеют измерения, сопротивление исчезает. В то же время произошло нечто неожиданное. Исчезновение произошло не постепенно, а *внезапно*.

Х. Камерлинг Оннес, *Нобелевская лекция, 1913*

## Глава 12

### Спаривание фермионов и сверхпроводимость

#### 12.1 Спаривание

Сверхпроводимость твёрдых тел, в соответствии с теорией *Бардина–Купера–Шриффера* (БКШ), является результатом притягивающих парных корреляций между электронами, которые преодолевают их кулоновское отталкивание. Притяжение происходит, как мы обсуждали в §20.8, от деформаций решётки. *Куперовские пары* образуют коллективное состояние, в некоторых отношениях подобное Бозе-конденсату, обладающее свойством сверхпроводимости (сверхтекучести заряженных частиц). С другими источниками притяжения аналогичные эффекты спаривания работают в других Ферми-системах, таких, как жидкий изотоп гелия  $^3\text{He}$ . Особые черты проявляются в *конечных* сверхтекучих системах, таких, как атомные ядра, фермионные атомы в ловушках, или маленькие металлические зёрна. Физика нейтронных звёзд в значительной степени определяется сверхтекучестью нейтронов или других составляющих, включая кварки.

Пусть фермионы движутся в среднем поле, индивидуальные одночастичные состояния в котором будут обозначаться  $|\lambda\rangle$ . Мы предполагаем, что система инвариантна относительно обращения времени, и наиболее сильное притяжение действует между  *$T$ -сопряжёнными* орбитами (§II.5.6). Так обстоит дело для сверхпроводящих металлов и атомных ядер. Такой тип спаривания благоприятен для сил притяжения, поскольку перекрытие между спариваемыми орбиталями максимально. Такая пара инвариантна

относительно обращения времени; в пространственно-однородной системе она должна иметь нулевой полный импульс  $\mathbf{P}$  (квазиимпульс в периодической решётке), а также нулевой полный спин  $S = 0$ , в сферических ядрах пара имеет нулевой полный момент импульса  $\mathbf{J}$ . Известны и более сложные типы спаривания, например в жидком  ${}^3\text{He}$  [?, 10].

Спаривание в конечной вырожденной системе даёт поучительный пример решаемой многочастичной задачи [11]. Волновая функция пары с  $J = 0$  была построена в задаче I.22.4 для одной сферической  $j$ -оболочки, где  $\mathcal{T}$ -сопряжённая орбита определяется соответствующей фазой (II.5.67). Удобно ввести специальное обозначение, не предполагающее сферической симметрии, а основанное исключительно на инвариантности относительно обращения времени. Для каждого одночастичного состояния  $|\lambda\rangle$   $\mathcal{T}$ -сопряжённое состояние будет обозначаться  $|\tilde{\lambda}\rangle$ ; например, в однородной системе состояние с тильдой соответствует противоположному импульсу и проекции спина. С нашим выбором фаз в сферическом базисе, одночастичное обращение времени в произвольном базисе может быть определено через разложение по полному набору сферических состояний,

$$|\lambda\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^{\lambda} |jm\rangle \Rightarrow |\tilde{\lambda}\rangle = \sum_{jm} (A_{jm}^{\lambda})^* (-)^{j-m} |j-m\rangle. \quad (12.1)$$

Важно, как упоминалось в §I.20.6, чтобы двухкратное обращение времени воспроизводило исходное фермионное состояние с *противоположным знаком*,

$$|\tilde{\tilde{\lambda}}\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^{\lambda} (-)^{j-m} (-)^{j+m} |jm\rangle = \sum_{jm} A_{jm}^{\lambda} (-)^{2j} |jm\rangle = -|\lambda\rangle. \quad (12.2)$$

Это следствие статистики Ферми (полуцелые значения  $j$ ).

В общем случае двухфермионное спаренное состояние может быть получено из вакуума действием *оператора пары*

$$\hat{P}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} C_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger}, \quad (12.3)$$

где определение одночастичного оператора  $\hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger}$  для  $\mathcal{T}$ -сопряжённой орбиты включает все фазовые множители, так что  $\hat{C}_{\tilde{\lambda}} = C_{\lambda}$ , и

$$\hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger} = -\hat{a}_{\lambda}^{\dagger}; \quad (12.4)$$

подобное равенство верно и для оператора уничтожения  $\hat{a}_{\lambda}$ .



Обычно эффекты спаривания играют важную роль только в относительно узком слое моря Ферми вблизи поверхности Ферми  $\Sigma_F$ . Это определённо верно для металлов и ядер, где выигрыш в энергии из-за спаривания мал по сравнению с энергией Ферми  $\varepsilon_F$ . (Ситуация может быть другой в сверхпроводниках с высокой температурой перехода в сверхпроводящее состояние; полная теория этого случая всё ещё отсутствует). Точный результат может быть получен в упрощённой модели, где в операторе пары (12.3)  $C_\lambda = 1$ , и все одночастичные состояния дают равные вклады. Это оправдано, если мы пренебрежём различиями кинетической энергии (или, в более общем случае, энергии в среднем поле) частиц в слое, положив  $\varepsilon_\lambda \equiv \varepsilon = \text{const}$ . В более реалистическом рассмотрении мы учтём изменение  $\varepsilon_\lambda$  когда веса разных орбит в операторе пары становятся различными.

Сумма в  $\hat{P}^\dagger$  включает  $\Omega$  членов, где  $\Omega$  — ёмкость слоя (чётное число состояний  $|\lambda\rangle$ , соответствующее  $\Omega/2$   $\mathcal{T}$ -сопряжённым парам). Для одного  $j$ -уровня  $\Omega = 2j + 1$ . Члены, соответствующие  $\lambda$  и  $\tilde{\lambda}$ , на самом деле равны друг другу, что следует из (12.4) и статистики Ферми (17.14). Поэтому можно убрать множитель  $1/2$  перед (12.3) и ограничить суммирование половиной одночастичных состояний, только  $\Omega/2$  “положительными” состояниями. Но проще использовать определение (12.4) с суммированием по всем доступным состояниям. Заметьте также, что оператор (12.3) отличается от  $\hat{P}_{L=\Lambda=0}^\dagger$ , использовавшегося в (17.81), постоянным множителем.

### Задача 12.1

Нормируйте состояния одной пары, получаемые как  $\hat{P}^\dagger|0\rangle$ .

**Решение** Введём эрмитово сопряжённый оператор уничтожения пары  $P$  и вычислим норму

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} \langle 0|\hat{a}_{\tilde{\lambda}}\hat{a}_\lambda\hat{a}_{\lambda'}^\dagger\hat{a}_{\tilde{\lambda}'}^\dagger|0\rangle. \quad (12.5)$$

Свёртывая операторы в матричном элементе, мы приходим к

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} (\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'} - \delta_{\lambda\tilde{\lambda}'}\delta_{\tilde{\lambda}\lambda'}), \quad (12.6)$$

где все фазовые множители включены в определение индексов с тильдой. Суммирование по  $\lambda'$  оставляет  $\delta_{\lambda\lambda} = 1$  в первом члене и, вследствие (12.2),  $\delta_{\lambda\tilde{\lambda}} = -1$  во втором. В результате,

$$\langle 0|\hat{P}\hat{P}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2}\Omega \quad (12.7)$$

что приводит к нормировке состояния одной пары

$$|1 \text{ пара}\rangle = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} \hat{P}^\dagger |0\rangle. \quad (12.8)$$

По сравнению с (II.7.30) для случая одного  $j$ -уровня, нормировка содержит дополнительный множитель  $\sqrt{2}$  из-за статистики Ферми.

## 12.2 Пары и старшинство

Теперь мы начинаем заполнять слой около  $\Sigma_F$  парами. Поскольку они имеют целый (нулевой) спин  $J$ , они являются *квазибозонами*, и мы можем создать их много. В то же время они не являются настоящими бозонами, и их сосуществование в одном месте искажается статистикой Ферми составляющих; мы кратко обсуждали статистику составных объектов в §15.3. Повторное применение оператора  $\hat{P}^\dagger$  содержит перекрывающиеся члены с тем же  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , которые не работают из-за принципа запрета Паули. Несколько похожая ситуация была указана в связи с бозонным представлением Холстейна–Примакова операторов момента импульса, задача I.16.8. Чтобы двигаться дальше, изучим более детально алгебру операторов пар.

### Задача 12.2

Покажите, что

$$[\hat{P}, \hat{P}^\dagger] = \frac{\Omega}{2} - \hat{N}, \quad (12.9)$$

где

$$\hat{N} = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} \quad (12.10)$$

— оператор (17.12) полного числа частиц. Это согласуется с уравнением (12.7), где  $\hat{N}$  и  $\hat{P}$ , действуя на вакуумное состояние, дают нуль.

Уравнение (12.9) помогает вычислить нормировку *состояния двух пар*, полученного повторным действием оператора рождения пары,

$$\langle 0 | \hat{P}^2 (\hat{P}^\dagger)^2 | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{P} ([\hat{P}, \hat{P}^\dagger] + \hat{P}^\dagger \hat{P}) \hat{P}^\dagger | 0 \rangle. \quad (12.11)$$

Оператор  $\hat{N}$  в коммутаторе (12.9) действует в уравнении (12.11) на состояние с одной парой и даёт 2, остальные операторы сводятся к (12.7).

Во втором члене в (12.11) мы опять образуем коммутатор и используем  $\hat{P}|0\rangle = 0$ . Собирая все члены, мы получаем

$$\langle 0|\hat{P}^2(\hat{P}^\dagger)^2|0\rangle = 2\frac{\Omega}{2}\left(\frac{\Omega}{2} - 1\right). \quad (12.12)$$

Поучительно обсудить смысл результата (12.12). Если ёмкость пространства велика и число частиц относительно мало,  $\Omega/2 \gg N$ , то, включая множитель  $\sqrt{\Omega/2}$  в определение  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  и пренебрегая  $\hat{N}$  в (12.9), мы бы свели операторы пар к нормальным бозонам. В этом приближении коммутатор в уравнении (12.11) был бы равен  $2!(\Omega/2)^2$ . Разница между этим бозонным пределом и квазибозонным результатом (12.12) обусловлена эффектом *блокировки Паули*. У нас есть  $\Omega/2$  различных возможностей для первой пары  $(\lambda, \tilde{\lambda})$  и только  $\Omega/2 - 1$  для второй пары, поскольку две орбиты (одно состояние пары) уже заняты первой парой. Для большого  $\Omega/2$  различие невелико, и картина Бозе-конденсата пар качественно верна.

### Задача 12.3

Выведите общий результат для состояния  $N$  частиц, образованного  $n = N/2$  парами ( $N$  чётно),

$$\langle 0|\hat{P}^n(\hat{P}^\dagger)^n|0\rangle = \frac{n!(\Omega/2)!}{[(\Omega/2) - n]!}. \quad (12.13)$$

В уравнении (12.13) множитель  $n!$  — остаток Бозе-конденсата, а другие два факториала отражают блокировку, усиливающуюся, когда оболочка заполняется парами. Блокировка более заметна, если имеются *неспаренные частицы*, так что  $N$  больше  $2n$ , где  $n$  — число пар. Число неспаренных частиц,

$$s = N - 2n, \quad (12.14)$$

называется *старшинством*; эта схема классификации, широко используемая в атомной и ядерной физике, была введена *Рака* [Rach]. Состояние с  $N$  частицами и старшинством  $s$  может обозначаться  $|N; s\rangle$ , где многоточие фиксирует орбиты неспаренных частиц. Например, в ядре с нечётным  $A$  одна орбита  $|\lambda\rangle$  заполнена валентной частицей. Присутствие неспаренной частицы блокирует состояние пары  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , которое становится недоступным для пар. В нашей схеме трёхчастичное состояние с одной парой обозначается  $|3; s = 1_\lambda\rangle$ , где непарная орбита указана явно.

### Задача 12.4

Постройте нормированное состояние с неспаренной частицей на орбите  $|\lambda\rangle$ .

**Решение** Нормировка находится из

$$\langle 0 | \hat{a}_\lambda \hat{P} \hat{P}^\dagger \hat{a}_\lambda^\dagger | 0 \rangle = \frac{\Omega}{2} - 1. \quad (12.15)$$

Здесь для вычисления мы опять используем коммутатор (12.9), где  $\hat{N}$  даёт 1 при применении к одночастичному состоянию. Простой смысл уравнения (12.15) — неспаренная частица удаляет одно состояние пары из доступного объёма.

### Задача 12.5

Обобщите предыдущий результат на состояние с  $N$  частицами и  $n$  парами.

**Решение** Добавление каждой дополнительной пары действует таким же образом, как в (12.13), но доступный объём уменьшается на одно состояние пары,

$$\langle 0 | a_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n a_\lambda^\dagger | 0 \rangle = \frac{n![(\Omega/2) - 1]!}{[(\Omega/2) - 1 - n]!}. \quad (12.16)$$

Уравнение (12.16) определяет нормировку состояния  $|N = 2n + 1; s = 1_\lambda\rangle$ .

Тот же результат (12.16) верен, когда *обе* орбиты пары,  $\lambda$  и  $\tilde{\lambda}$ , заняты неспаренными частицами. Это состояние отличается от спаренного состояния (12.8), где пара равномерно распределена по доступному пространству, а не блокирует некоторую конкретную пару  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбит. Поскольку одно состояние пары уже заблокировано одиночной частицей, присутствие  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра не меняет ситуации. Поэтому, как в (12.16),

$$\langle 0 | \hat{a}_{\tilde{\lambda}} \hat{a}_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^\dagger | 0 \rangle = \frac{n![(\Omega/2) - 1]!}{[(\Omega/2) - 1 - n]!}. \quad (12.17)$$

Наконец, две неспаренные частицы на орбитах  $\lambda$  и  $\lambda'$ , принадлежащих двум различным  $\mathcal{T}$ -сопряжённым парам, блокируют два состояния пар, приводя к

$$\langle 0 | \hat{a}_{\lambda'} \hat{a}_\lambda \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}^\dagger | 0 \rangle = \frac{n![(\Omega/2) - 2]!}{[(\Omega/2) - 2 - n]!}. \quad (12.18)$$

Состояния с двумя неспаренными частицами — это  $|N = 2n + 2; s = 2_{\lambda, \lambda'}\rangle$ . Состояния с более высокими значениями старшинства могут быть

построены подобным образом. Заметьте, что на этом этапе мы не ввели явно гамильтониан, так что схема старшинства просто даёт базис, удобный для описания парных корреляций.

### 12.3 Мультипольные моменты в схеме старшинства

В приложениях к атомной и ядерной физике практически интересно вычислить средние значения мультипольных моментов в чистых состояниях со старшинством  $s = 1$  (одна неспаренная частица). Здесь мы рассмотрим состояние с одной валентной частицей на сферической орбите  $|j, m = j\rangle$ , как требуется определением (22.65) мультипольного момента, поскольку изотропные пары не дают вклада в момент импульса.

Мультипольные моменты относятся к классу одночастичных операторов, во вторично-квантованном виде выражаемых уравнениями (17.34,37). Только диагональные члены в  $|jm\rangle$  базисе дают вклад в средние значения, так что эффективные операторы могут быть записаны в виде

$$\hat{Q} = \sum_m (m|q|m) \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m. \quad (12.19)$$

Пусть чётный остаток состоит из  $n$  пар. Нам нужно вычислить матричный элемент

$$Q(n) = \langle N = 2n + 1; s = 1_j | \hat{Q} | N = 2n + 1; s = 1_j \rangle. \quad (12.20)$$

Удобно перейти к “дырочному” представлению, используя (12.19)  $\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = 1 - a_m a_m^\dagger$ . Для любого мультипольного момента, кроме скалярных, замкнутая оболочка не даёт вклада, и след  $\sum_m (m|q|m) = 0$ . В матричном элементе (12.20) можно перенести оператор  $\hat{a}_m$  влево, а оператор  $\hat{a}_m^\dagger$  вправо, коммутируя их с  $\hat{P}^n$  и  $(\hat{P}^\dagger)^n$  соответственно (это делается бесплатно, поскольку  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  содержат только пары Ферми-операторов). Включая норму (12.16) состояния со старшинством 1, мы получаем

$$Q = - \sum_m (m|q|m) \frac{\langle 0 | \hat{a}_j \hat{a}_m \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{a}_j \hat{P}^n (\hat{P}^\dagger)^n \hat{a}_j^\dagger | 0 \rangle}. \quad (12.21)$$

Матричный элемент в числителе (12.21) обращается в нуль при  $m = j$  вследствие принципа Паули, и дается формулами (12.17) и (12.18) для  $m = \bar{j}$

и  $m \neq j, \tilde{j}$  соответственно. Подставляя отношение норм из уравнений (12.16–12.18), мы получаем

$$Q = -(\tilde{j}|q|\tilde{j}) - \frac{(\Omega/2) - 1 - n}{(\Omega/2) - 1} \sum_{m \neq j, \tilde{j}} (m|q|m). \quad (12.22)$$

Вследствие обращения следа в нуль сумма в (12.22) равна  $-(j|q|j) - (\tilde{j}|q|\tilde{j})$ . Наконец,

$$Q = (j|q|j) - \frac{n}{(\Omega/2) - 1} [(j|q|j) + (\tilde{j}|q|\tilde{j})]. \quad (12.23)$$

Первый член — это нормальный одночастичный результат. Добавочный вклад, пропорциональный числу пар  $n$ , отражает искажение из-за присутствия неспаренной частицы.

Окончательный результат зависит от характера мультипольного оператора. Для операторов, чётных относительно обращения времени, их средние значения по  $\mathcal{T}$ -сопряжённым состояниям равны, и  $(\Omega = 2j + 1)$

$$Q = (j|q|j) \left( 1 - \frac{2n}{j - (1/2)} \right). \quad (12.24)$$

В начале оболочки ( $n = 0$ ) и в её конце ( $n = j - (1/2)$ ) уравнение (12.24) совпадает с простым результатом для одночастичного ( $Q = (j|q|j)$ ) и однодырочного ( $Q = -(j|q|j)$ ) состояний. Предсказывается, что чётные по времени мультипольные моменты как функции  $n$  интерполируют между этими пределами. Их абсолютные величины меньше, чем на краях, и они меняют знак вблизи наполовину заполненной оболочки.

Для операторов, нечётных по времени,  $\mathcal{T}$ -сопряжённые орбиты имеют противоположные средние значения, и результат (12.23) совпадает с чисто одночастичным значением  $(j|q|j)$ . Это означает, например, что на магнитный момент ядра не влияет наличие пар, и для состояний со старшинством  $s = 1$  он должен быть равен значению Шмидта, задача II.8.5. Конечно, все эти результаты основаны на многочастичной волновой функции, построенной только из пар и одной неспаренной частицы; другие динамические корреляции делают реальную ситуацию более сложной.

## 12.4 Вырожденная модель и квазиспин

Здесь мы рассмотрим точно решаемую модель, которую, по-видимому, впервые изучил Рака. Она является первой разумной микроскопической моделью сверхпроводимости, хотя это не было понято в то время.

Предположим, что вблизи  $\Sigma_F$  частицы взаимодействуют посредством сил притяжения спаривающего типа. Сила взаимодействия мала по сравнению с  $\varepsilon_F$  и даже с расстоянием между основными оболочками. Но она может быть порядка расщеплений между  $j$ -подоболочками. В грубом приближении мы считаем все одночастичные уровни в некотором интервале около поверхности Ферми вырожденными (имеющими энергию  $\varepsilon$ ). Полное число орбит в этом слое равно  $\Omega$ .

Спаривающее взаимодействие  $U_P$  ведёт к процессам рассеяния частиц на  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбитах  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ . В результате частицы либо остаются на той же паре орбит, либо переходят на другую пару  $(\lambda', \tilde{\lambda}')$ . Состояния с разорванными парами не дают достаточного перекрытия волновых функций, и мы просто предполагаем, что взаимодействие выключается, если орбиты частиц не являются  $\mathcal{T}$ -сопряжёнными друг другу.

Матричные элементы рассеяния, вызванные спаривающим взаимодействием,

$$U_{\lambda'\lambda}^P \equiv (\lambda', \tilde{\lambda}' | U_P | \lambda, \tilde{\lambda}), \quad (12.25)$$

мы заменяем на их среднее постоянное значение ( $G > 0$ ),

$$\overline{U_{\lambda'\lambda}^P} = -G. \quad (12.26)$$

Из-а малости радиуса взаимодействия отдельные матричные элементы (12.25) малы — обратно пропорциональны объёму ядра. В самом деле, одночастичные волновые функции в подынтегральном выражении нормированы на полный объём, тогда как силы отличны от нуля только при маленьких расстояниях между частицами. Используя наш опыт с двухчастичными операторами во вторично-квантованном виде (17.71), мы постулируем, что гамильтониан вырожденной модели спаривания имеет вид

$$\hat{H} = \varepsilon \hat{N} - G \hat{P}^\dagger \hat{P}. \quad (12.27)$$

Произведение операторов рождения и уничтожения пар (12.3) содержит все вышеотмеченные процессы перехода пар.

Диагонализация гамильтониана (12.27) может быть произведена элегантным операторным методом. Без вычислений ясно, что операторы  $P$  и  $P^\dagger$  образуют лестничную структуру (§I.11.7), оператор  $\hat{N}$  меняется на  $\pm 2$  на каждом шаге по лестнице,

$$[\hat{P}, \hat{N}] = 2\hat{P}, \quad [\hat{P}^\dagger, \hat{N}] = -2\hat{P}^\dagger. \quad (12.28)$$

Алгебра замыкается коммутатором (12.9). Три оператора,

$$\hat{\mathcal{L}}_- = \hat{P}, \quad \hat{\mathcal{L}}_+ = \hat{P}^\dagger, \quad \hat{\mathcal{L}}_z = \frac{1}{2} \left( \hat{N} - \frac{\Omega}{2} \right), \quad (12.29)$$

образуют алгебру  $SU(2)$ , изоморфную алгебре момента импульса (I.16.25,26). “Момент”  $\vec{\mathcal{L}}$  можно назвать *квазиспином*.

Проекция квазиспина  $\mathcal{L}_z$  определяется числом частиц и объёмом доступного одночастичного пространства. Поэтому  $\mathcal{L}_z$  — точный интеграл движения, принимающий одно и то же значение для всех состояний с данным  $N$ . По мере заполнения оболочки  $\mathcal{L}_z$  меняется от  $-(\Omega/4)$  для пустой оболочки ( $N = 0$ ) до  $+(\Omega/4)$  для полностью заполненной ( $N = \Omega$ );  $\mathcal{L}_z = 0$  для оболочки, заполненной наполовину ( $N = (\Omega/2)$ ). Другой интеграл движения — квадрат квазиспина,

$$(\hat{\mathcal{L}})^2 = \hat{\mathcal{L}}_z^2 - \hat{\mathcal{L}}_z + \hat{P}^\dagger \hat{P}. \quad (12.30)$$

Он принимает значения  $\mathcal{L}(\mathcal{L} + 1)$ , где  $\mathcal{L}$  целое или полуцелое в зависимости от значения  $\mathcal{L}_z$ . При данном  $N$  различные состояния имеют различные значения  $\mathcal{L}$ , которые могут меняться от  $\mathcal{L}_{\min} = |\mathcal{L}_z|$  до максимального значения  $\mathcal{L}_{\max} = (\mathcal{L}_z)_{\max} = \Omega/4$ ,

$$\frac{1}{2} \left| N - \frac{\Omega}{2} \right| \leq \mathcal{L} \leq \frac{\Omega}{4}. \quad (12.31)$$

Таким образом, каждое  $N$ -частичное состояние характеризуется квазиспиновыми квантовыми числами  $\mathcal{L}$  и  $\mathcal{L}_z$ . Среднее значение гамильтониана (12.27) определяет, в соответствии с (12.30), энергию состояния,

$$E(\mathcal{L}, N) = \varepsilon N + \frac{G}{4} \left( N - \frac{\Omega}{2} - 2 \right) - G\mathcal{L}(\mathcal{L} + 1). \quad (12.32)$$

Предположим, например, что  $\Omega/4$  целое и число частиц  $N$  чётно. Тогда  $\mathcal{L}_z$  и  $\mathcal{L}$  целые, и основное состояние имеет максимальный квазиспин  $\mathcal{L} = \Omega/4$ .

Квантовое число старшинство  $s$ , введённое в классификации состояний в §46.2 — это удвоенное отклонение квазиспина  $\mathcal{L}$  от своего максимального значения,

$$s = 2 \left( \frac{\Omega}{4} - \mathcal{L} \right). \quad (12.33)$$

Как следует из (12.31),  $s$  может меняться от 0 в основном состоянии до полного числа частиц  $N$  в случае оболочки, заполненной меньше, чем на



половину ( $N < \Omega/2$ ), или до числа дырок,  $\Omega - N$ , если  $N > \Omega/2$ . При чётных  $N$  старшинство тоже чётное. Энергетический спектр (12.32) как функция старшинства имеет вид

$$E_s(N) = \varepsilon N + \frac{G}{4}(N - s)(N + s - \Omega - 2). \quad (12.34)$$

Из (12.34) видно, что квантовое число старшинство описывает сокращение фазового пространства, доступного для взаимодействующих пар вследствие блокировки  $s$  орбит  $s$  частицами (при  $N < \Omega/2$ ), не участвующими в парных корреляциях. По сравнению с основным состоянием с  $s = 0$  ненулевое значение  $s$  в (12.34) приводит к заменам  $N \rightarrow N - s$ ,  $\Omega \rightarrow \Omega - 2s$ , которые уменьшают число состояний, доступных для пар, и эффективно подавляют притяжение.

Энергия возбуждения состояний с фиксированным  $N$ , но ненулевым старшинством, равна

$$E_s(N) - E_0(N) = \frac{G}{4}s(\Omega - s + 2). \quad (12.35)$$

Пока  $s \ll \Omega$ , энергия возбуждения (12.35) растёт как  $G\Omega s/4$ , т.е. пропорционально числу разорванных пар. Потеря связи для первого разрыва пары,  $s = 2$ ,

$$2\Delta = G\frac{\Omega}{2} \quad (12.36)$$

есть энергия связи пары. Она определяет *энергетическую щель* в спектре возбуждения пар, тесно связанную со сверхпроводящими свойствами. Эффект пропорционален объёму фазового пространства  $\Omega$  (потеря доступного пространства для всех пар). Коллективная природа связи обусловлена когерентной комбинацией всех доступных состояний в волновой функции пары, уравнения (12.3) и (12.8).

Добавим нечётную частицу к чётной системе,  $N \rightarrow N + 1$ . Для нового (нечётного) числа частиц квазиспин  $\mathcal{L}$  полуцелый, и  $s$  нечётно. Максимально возможное значение квазиспина равно  $\mathcal{L}_{\max} = (\Omega/4) - (1/2)$ , что соответствует  $s = 1$ , т.е. одной неспаренной частице, блокирующей одно состояние пары. Энергия основного состояния  $E_{s=1}(N + 1)$  нечётной системы следует из (12.34) при  $N \rightarrow N + 1$  и  $s = 1$ . Она может быть выражена через энергию основного состояния исходной чётной системы как

$$E_1(N + 1) = E_0(N) + \varepsilon + \frac{GN}{2}. \quad (12.37)$$

Потеря энергии опять имеет коллективный характер, будучи пропорциональна числу пар  $N/2$ ; каждая из пар потеряла одно состояние для возможного рассеяния.

Сравнение энергий основных состояний  $E_0(N)$  и  $E_0(N+2)$  двух соседних чётных систем показывает, что

$$E_0(N+2) - E_0(N) = 2\varepsilon + GN - G\frac{\Omega}{2}. \quad (12.38)$$

Это значит, что, вследствие спаривания, основное состояние нечётной системы сдвинуто вверх от средней энергии основных состояний её чётных соседей на половину величины щели (12.36),

$$E_1(N) = E_0(N) + \frac{E_0(N+2) - E_0(N)}{2} + G\frac{\Omega}{4} = \frac{E_0(N) + E_0(N+2)}{2} + \Delta. \quad (12.39)$$

Это объясняет чётно–нечётный эффект в формуле ядерных масс [Boh1998] как потерю энергии спаривания из-за блокировки Паули для нечётной системы.

## 12.5 Каноническое преобразование

Присутствие парных корреляций влияет на вероятности всех процессов в системе. Простейший пример — *передача пары*. В реакции между двумя ядрами пара нуклонов может передаваться от одного ядра к другому с сохранением корреляции между составляющими. Этот процесс, аналогичный эффекту Джозефсона в сверхпроводниках (§I.14.5), микроскопически может быть описан парой операторов  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$ . Добавляя или удаляя конденсатную пару, они не меняют старшинства.

Алгебра квазиспина (12.29) позволяет использовать матричные элементы (I.16.49) момента импульса для амплитуды передачи одного и того же старшинства,

$$\begin{aligned} \langle N+2; s | \hat{P}^\dagger | N; s \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(\Omega - N - s)(N - s + 2)}, \\ \langle N-2; s | \hat{P} | N; s \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(\Omega - N - s + 2)(N - s)}. \end{aligned} \quad (12.40)$$

При малых  $s \sim 1$  и далеко от краёв оболочки,  $N \sim \Omega - N \sim \Omega \gg 1$ , эти матричные элементы равны друг другу, и их общее значение есть

$$\langle N+2; s | \hat{P}^\dagger | N; s \rangle \approx \langle N-2; s | \hat{P} | N; s \rangle \approx \frac{1}{2} \sqrt{N(\Omega - N)}. \quad (12.41)$$

Мы получили когерентный эффект усиления для передачи конденсатной пары вследствие бозонного стимулированного излучения или поглощения пар, подобно тому, что мы видели в сверхизлучении, §2.9.

Теперь мы можем перейти к одночастичным процессам в присутствии конденсата. Гамильтониан спаривания (12.27) даёт уравнения движения для фермионных операторов рождения и уничтожения,

$$[\hat{a}_\lambda, \hat{H}] = \varepsilon \hat{a}_\lambda + G \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{P}, \quad [\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{H}] = -\varepsilon \hat{a}_\lambda^\dagger + G \hat{P} \hat{a}_\lambda, \quad (12.42)$$

где использовались фермионные правила коммутации (17.14). Мы можем взять матричный элемент  $\langle N; 0 | \cdots | N+1; 1_\lambda \rangle$  в первом из этих операторных уравнений и  $\langle N; 0 | \cdots | N-1; 1_\lambda \rangle$  во втором. В обоих случаях  $1_\lambda$  означает состояние с одной неспаренной частицей на орбите  $\lambda$ , но конденсат содержит  $N$  частиц в первом случае и  $N-2$  во втором. Действие  $\hat{P}$  в первом случае переводит  $N+1 \rightarrow N-1$  с тем же  $s=1$ , а последующее действие  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  создаёт  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра для неспаренной частицы  $\lambda$ , так что мы приходим к конденсату из  $N$  частиц. Во втором случае можно рассуждать подобным образом. Матричные элементы  $\hat{P}$  и  $\hat{P}^\dagger$  были вычислены выше. Матричный элемент коммутатора эквивалентен матричному элементу  $\hat{a}$  или  $\hat{a}^\dagger$ , умноженному на разность энергий, известную из (12.34). Таким образом мы приходим к системе линейных уравнений для матричных элементов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ . Эти матричные элементы можно найти с точностью до нормировочного множителя, который можно определить из антикоммутатора (17.14).

В том же приближении, что и в (12.41), мы получаем

$$\langle N; 0 | \hat{a}_\lambda | N+1; 1_\lambda \rangle = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}}, \quad \langle N; 0 | \hat{a}_\lambda^\dagger | N-1; 1_\lambda \rangle = \sqrt{\frac{N}{\Omega}}. \quad (12.43)$$

Одночастичные амплитуды не равны 1 или 0, как это было бы в модели независимых частиц. В присутствии конденсата амплитуды — числа между 0 и 1 (так называемые *факторы когерентности*).

При выводе уравнений (12.43) мы на самом деле пренебрегли разницей между конденсатами, содержащими  $N$  или  $N \pm 2$  частиц. Зависимость от  $N$  плавная, и это приближение оправдано при  $N \gg 1$ ; для второй половины оболочки опять нужно использовать число дырок  $\Omega - N$  вместо  $N$  в этой оценке. Мы можем упростить анализ, введя приближённое описание, не использующее состояния с точным числом частиц. Вместо этого в теории используется среднее число частиц для нескольких соседних систем. Это не проблема в макроскопических сверхпроводниках. В случае ядер этот подход описывает *средние свойства соседних ядер* и может быть недостаточно точным для индивидуальных свойств ядер.

“Среднее” основное состояние  $|0\rangle$  — это то, что мы называли макроскопическим когерентным состоянием в главе 14 — суперпозиция основных состояний нескольких чётных систем  $|N; 0\rangle$  в некотором интервале  $\Delta N$  вокруг  $\bar{N}$  таком, что  $1 \ll \Delta N \ll N$ . Одночастичное возбуждение  $|s = 1_\lambda\rangle$  с квантовыми числами  $\lambda$  может быть получено из основного состояния  $|0\rangle$  с чётным  $N$  действием специального оператора  $\hat{b}_\lambda^\dagger$ ,

$$\hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle = |s = 1_\lambda\rangle. \quad (12.44)$$

Обратите внимание, что амплитуда равна 1. Объект, рождаемый оператором  $\hat{b}_\lambda^\dagger$  или уничтожаемый оператором  $\hat{b}_\lambda$ , приближённо представляет элементарное возбуждение системы. Обычно его называют *Боголюбовской квазичастицей*.

В соответствии с уравнением (12.43), амплитуды рождения *настоящей* частицы из конденсата или дырки на сопряжённой орбите равны

$$\hat{a}_\lambda^\dagger |N; 0\rangle = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}} |N + 1; 1_\lambda\rangle, \quad \hat{a}_{\bar{\lambda}} |N; 0\rangle = \sqrt{\frac{N}{\Omega}} |N - 1; 1_\lambda\rangle. \quad (12.45)$$

Пренебрегая разницей чисел конденсатных частиц в двух случаях в (12.45), мы можем скомбинировать эти выражения и получить оператор квазичастицы (12.44)

$$\hat{b}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger + v_\lambda \hat{a}_{\bar{\lambda}}, \quad (12.46)$$

где параметры  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  на самом деле не зависят от  $\lambda$  в нашей вырожденной модели,

$$u_\lambda = \sqrt{\frac{\Omega - N}{\Omega}}, \quad v_\lambda = \sqrt{\frac{N}{\Omega}}. \quad (12.47)$$

Эрмитово сопряжённый оператор равен

$$\hat{b}_\lambda = u_\lambda^* \hat{a}_\lambda + v_\lambda^* \hat{a}_{\bar{\lambda}}^\dagger. \quad (12.48)$$

Преобразование от частиц  $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$  к квазичастицам  $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ , изобретённое *Н.Н. Боголюбовым, 1958*, является мощным инструментом в квантовой теории многих тел. В присутствии конденсата есть два пути создать одночастичное возбуждение с квантовыми числами  $\lambda$ : непосредственно создать частицу с такими квантовыми числами (первый член в (12.46)) или уничтожить  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра в конденсатной паре (второй член в (12.46)),

сравните с рассмотрением бозонов в §45.6. Элементарное возбуждение даётся правильной линейной комбинацией этих амплитуд. Оно нормировано естественным образом,

$$|u_\lambda|^2 + |v_\lambda|^2 = 1. \quad (12.49)$$

В системе, инвариантной относительно обращения времени, амплитуды  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  могут быть выбраны действительными и совпадающими для  $\lambda$  и  $\bar{\lambda}$ . Однако нужно быть осторожным с относительным знаком амплитуд, поскольку, вследствие правила (12.4) обращения времени, операторы обращённых квазичастиц (в  $\mathcal{T}$ -инвариантной системе) равны

$$\hat{b}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger - v_\lambda \hat{a}_\lambda, \quad \hat{b}_{\bar{\lambda}} = u_\lambda \hat{a}_{\bar{\lambda}} - v_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger. \quad (12.50)$$

Ситуация более сложна при отсутствии  $\mathcal{T}$ -инвариантности, например, во внешнем магнитном поле. Тогда амплитуды преобразования становятся в общем случае комплексными.

Квазичастицы опять являются *фермионами*; запрещено повторять создание квазичастицы дважды. Вследствие нормировки (12.49) антикоммутатор сохраняется,

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}^\dagger]_+ = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (12.51)$$

Остальные антикоммутаторы (17.14) тоже сохраняются. Например,

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}]_+ = u_\lambda^* v_{\lambda'}^* \delta_{\lambda\bar{\lambda}'} + v_\lambda^* u_{\lambda'}^* \delta_{\bar{\lambda}\lambda'}. \quad (12.52)$$

Здесь  $\delta$ -символы отличаются знаком от (12.6), так что

$$[\hat{b}_\lambda, \hat{b}_{\lambda'}]_+ = \delta_{\bar{\lambda}\lambda'} (v_\lambda u_{\bar{\lambda}} - u_\lambda v_{\bar{\lambda}})^*. \quad (12.53)$$

Результат равен нулю при правильном выборе фаз  $\mathcal{T}$ -сопряжённых орбит, разность фаз между  $u_{\bar{\lambda}}$  и  $u_\lambda$  должна быть равна разности фаз между аналогичными множителями  $v$  (это автоматически выполняется в  $\mathcal{T}$ -инвариантном случае). Поэтому преобразование Боголюбова является *каноническим*.

Тогда как оператор (12.46) создаёт элементарное фермиевское возбуждение, его сопряжённый оператор (12.48), действуя на основное состояние, даёт нуль,

$$\hat{b}_\lambda |0\rangle = 0, \quad (12.54)$$

как видно из (12.47,12.48) и (12.45) с учётом правил  $\hat{a}_\lambda = -\hat{a}_{\bar{\lambda}}$  и при отождествлении конденсатов в обоих членах (12.45). Поэтому основное состояние конденсата является вакуумным состоянием для квазичастиц.

Легко найти обратное преобразование к (12.46) и (12.48),

$$\hat{a}_\lambda = u_\lambda \hat{b}_\lambda - v_\lambda \hat{b}_{\bar{\lambda}}^\dagger, \quad \hat{a}_\lambda^\dagger = u_\lambda \hat{b}_\lambda^\dagger - v_\lambda \hat{b}_{\bar{\lambda}}. \quad (12.55)$$

С учётом (12.54) среднее значение оператора числа фермионов (41.16) в основном состоянии  $|0\rangle$  оказывается равным

$$n_\lambda = \langle 0 | \hat{n}_\lambda | 0 \rangle = v_\lambda^2 \langle 0 | \hat{b}_{\bar{\lambda}} \hat{b}_\lambda^\dagger | 0 \rangle = v_\lambda^2. \quad (12.56)$$

В вырожденной модели (12.47) средние числа заполнения однородны во всём пространстве,

$$n_\lambda = \frac{N}{\Omega}. \quad (12.57)$$

Таким образом, амплитуды  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$  характеризуют распределение частиц в основном состоянии,

$$v_\lambda = \sqrt{n_\lambda}, \quad u_\lambda = \sqrt{1 - n_\lambda}. \quad (12.58)$$

За исключением амплитуд (12.47), которые в этом специфическом случае не зависят от одночастичных квантовых чисел, существенные результаты для произвольной *невыврожденной* схемы одночастичных уровней очень похожи. Любой оператор для исходной фермионной системы может быть переведён на язык квазичастиц с помощью канонического преобразования, что позволяет вычислять все матричные элементы физических величин. Цена, которую необходимо заплатить за это упрощение — несохранение числа частиц.

## 12.6 Теория БКШ. Пробная волновая функция.

Вооружившись точными результатами в вырожденной модели, мы можем разработать более общий подход, применимый в реалистических ситуациях. Это было впервые сделано в статье [BCS1957] о микроскопической теории сверхпроводимости. Хотя этот метод является приближённым, можно показать, что он даёт точные результаты в пределе больших макроскопических систем. В конечных системах, таких, как ядра, как мы уже упоминали, в некоторых случаях точность этого подхода недостаточна.

Рассмотрим общий гамильтониан спаривания для Ферми-системы. Он состоит из независимых частиц с энергиями  $\varepsilon_\lambda$  и спаривательного взаимодействия с матричными элементами, даваемыми уравнением (12.25). Схема одночастичных уровней  $\varepsilon_\lambda$  произвольна, но сила спаривания предполагается малой по сравнению с энергией Ферми  $\varepsilon_F$  (это может быть неверно для высокотемпературных сверхпроводников). Спаривание существенно в некотором слое около поверхности Ферми  $\Sigma_F$ . Плотность одночастичных уровней  $\nu_F$  на  $\Sigma_F$  (§19.1) играет важную роль в результатах.

Одночастичные орбиты подразделяются на Крамерсовские дублеты  $(\lambda, \tilde{\lambda})$ , вырожденные в силу предполагаемой  $\mathcal{T}$ -инвариантности. Мы применим *вариационный метод*. Построим пробную волновую функцию основного состояния, учитывающую существование конденсата пар, и найдём её параметры путём минимизации энергии основного состояния  $E_0$ .

Спаривательное взаимодействие рассеивает пару из одного дублета состояний в другой. Для разорванной пары взаимодействие гораздо слабее, и мы пренебрежём им, как мы делали раньше. Неспаренная частица вредна для всех пар из-за эффекта блокировки. Поэтому мы предположим, что в основном состоянии для чётного числа частиц нет дублета состояний, занятого только одной частицей. В этом приближении пары всегда движутся по доступному пространству как единое целое. Волновая функция основного состояния — это суперпозиция компонент с разными числами заполнения дублетов состояний. Мы возьмём средние числа заполнения в качестве вариационных параметров. Соответствующие амплитуды — это параметры  $v_\lambda$  и  $u_\lambda$ , уравнение (12.58). В соответствии с  $\mathcal{T}$ -инвариантностью, числа заполнения обоих компонент дублета одинаковы. Для каждого дублета  $v_\lambda = v_{\tilde{\lambda}}$  даёт амплитуду вероятности найти обе компоненты дублета занятыми, тогда как  $u_\lambda = u_{\tilde{\lambda}}$  даёт амплитуду вероятности того, что оба этих состояния пусты. Сумма вероятностей равна 1, уравнение (12.49), поскольку мы пренебрегли вероятностями частичного заполнения только одного из дублетных состояний.

Приближённая волновая функция может быть записана как произведение по всем дублетам состояний,

$$|0\rangle = \prod_{\lambda} \left\{ u_{\lambda} - v_{\lambda} \hat{P}_{\lambda}^{\dagger} \right\} |\text{vac}\rangle. \quad (12.59)$$

Здесь оператор

$$\hat{P}_{\lambda}^{\dagger} = \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\tilde{\lambda}}^{\dagger} \quad (12.60)$$

аналогичен (12.3) для данного дублета и, в отличие от (12.3), каждый дублет представлен только одним множителем в бесконечном произведении (12.60), где  $|\text{vac}\rangle$  означает абсолютный вакуум, вообще без частиц.

Очевидный недостаток изящно выглядящей волновой функции (12.60) — она не сохраняет число частиц. В бесконечном произведении (12.59) есть даже ненулевая амплитуда, происходящая от перемножения всех множителей  $u$ , соответствующая пустому состоянию  $|\text{vac}\rangle$ ; произведение всех множителей  $v$  даёт бесконечно много частиц; присутствуют также все промежуточные случаи. Однако это обычная ситуация в статистической механике макроскопических систем, где невозможно гарантировать точное сохранение гигантского числа частиц.

Соответствующий рецепт статистической механики рекомендует использовать *большой канонический ансамбль*, где система считается открытой и число частиц флуктуирует вокруг среднего значения  $\bar{N}$ . Нужное среднее значение обеспечивается введением *химического потенциала*  $\mu$ , как мы это делали для бозонов в присутствии конденсата в §21.2: гамильтониан заменяется на

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}. \quad (12.61)$$

Все собственные состояния зависят от  $\mu$ , которое потом выбирается таким образом, что среднее значение  $\hat{N}$  по основному состоянию равно нужному среднему числу частиц,

$$\langle \hat{N} \rangle_\mu = \bar{N}. \quad (12.62)$$

Это уравнение задаёт необходимое значение  $\mu$ .

В равновесной макроскопической системе флуктуации числа частиц растут как  $\Delta N \sim \sqrt{\bar{N}}$ , и их *относительная* роль мала,  $\Delta N / \bar{N} \sim 1/\sqrt{\bar{N}}$ . Это то же самое, что и раньше, когда мы пренебрегали различием конденсатов. В ядерных задачах может быть желательно улучшить приближение, убрав фиктивные флуктуации числа частиц. Здесь мы будем действовать, как в статистической механике, вводя химический потенциал (12.61).

Гамильтониан, обобщающий (12.27), может быть записан через одночастичные энергии  $\varepsilon_\lambda$  и матричные элементы (12.25) как

$$\hat{H}' = \sum_{\lambda} 2\varepsilon'_\lambda \hat{n}_\lambda + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \hat{P}_\lambda^\dagger \hat{P}_{\lambda'}, \quad (12.63)$$

где суммы теперь берутся по дублетам. Здесь одночастичные энергии сдвинуты на химический потенциал,  $\varepsilon'_\lambda = \varepsilon_\lambda - \mu$ . Практически спаривание



сконцентрировано вблизи  $\Sigma_F$ , так что химический потенциал совпадает со своим невозмущённым значением  $\varepsilon_F$ , уравнение (19.9). Наша пробная волновая функция предполагает ненулевое заполнение ( $v_\lambda$ ) выше  $\Sigma_F$  и присутствие дырок ( $u_\lambda$ ) ниже  $\Sigma_F$ . Это бы дало более высокую энергию для невзаимодействующих частиц. Но этот проигрыш будет более чем скомпенсирован выигрышем в энергии взаимодействия.

## 12.7 Минимизация энергии

Вычислим среднее значение

$$E_0 = \langle 0 | H' | 0 \rangle \quad (12.64)$$

сдвинутого гамильтониана (12.63) по пробному состоянию (12.59). Истинная энергия системы в этом приближении отличается от этого значения на  $\mu \langle N \rangle$ .

В члене независимых частиц оператор  $\hat{n}_\lambda$  просто заменяется на своё среднее значение  $v_\lambda^2$ . В члене взаимодействия рассмотрим элемент с переходом  $\lambda' \rightarrow \lambda$  для  $\lambda \neq \lambda'$ . Он даёт ненулевой вклад в (12.64) если в начальном состоянии (правая часть матричного элемента (12.64)) дублет  $\lambda'$  заполнен (амплитуда  $v_{\lambda'}$ ), а дублет  $\lambda$  пуст (амплитуда  $u_\lambda$ ). С другой стороны, в конечном состоянии (левая сторона матричного элемента) дублет  $\lambda'$  должен быть пуст (амплитуда  $u_{\lambda'}$ ), тогда как дублет  $\lambda$  заполнен рассеянной парой (амплитуда  $v_\lambda$ ). Множители произведения (12.59), не участвующие в рассматриваемом процессе, проносятся без изменений и дают 1 в силу нормировки (12.49).

Мы приходим к полной энергии в виде суммы энергий независимых частиц и вкладов всех возможных процессов рассеяния пар,

$$E_0 = \sum_{\lambda} 2\varepsilon'_\lambda v_\lambda^2 + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_\lambda v_\lambda u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (12.65)$$

Диагональные члены взаимодействия с  $\lambda' = \lambda$  дают  $\sum_{\lambda} U_{\lambda\lambda}^P v_\lambda^4$  — однократную сумму вместо двойной суммы в (12.65). Поэтому их вклад меньше на множитель  $\sim \Omega$ , и может быть опущен.

Чтобы произвести минимизацию по  $u_\lambda$  и  $v_\lambda$ , связанным условием нормировки (12.49), мы выражаем их через числа заполнения, как в (12.58),

$$E_0 = \sum_{\lambda} 2\varepsilon'_\lambda n_\lambda + \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_\lambda(1-n_\lambda)n_{\lambda'}(1-n_{\lambda'})}. \quad (12.66)$$

Все  $n_\lambda$  независимы, поскольку о сохранении числа частиц (в среднем) заботится химический потенциал.

Варьирование энергии (12.66) даёт систему уравнений

$$\frac{\partial E_0}{\partial n_\lambda} = 0 \quad (12.67)$$

для каждого  $\lambda$ . Индексы  $\lambda$  и  $\lambda'$  в (12.66) эквивалентны, и каждый из них может совпадать с внешним  $\lambda$  в (12.67). Мы оставляем только один вклад и умножаем результат на 2. Дифференцирование приводит к

$$2\varepsilon'_\lambda + 2 \frac{1 - 2n_\lambda}{2\sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)}} \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_{\lambda'}(1 - n_{\lambda'})} = 0. \quad (12.68)$$

Введём обозначение

$$\Delta_\lambda = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \sqrt{n_{\lambda'}(1 - n_{\lambda'})} = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (12.69)$$

Знак минус выбран потому, что нас интересует случай притяжения, когда матричные элементы в основном отрицательны. Условия минимума (12.68) принимают вид

$$2\varepsilon'_\lambda \sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)} = \Delta_\lambda(1 - 2n_\lambda). \quad (12.70)$$

Стоит ввести ещё одно обозначение

$$E_\lambda = +\sqrt{\varepsilon_\lambda'^2 + \Delta^2}. \quad (12.71)$$

Тогда после простой алгебры мы получаем решение квадратного уравнения (12.70) для чисел заполнения,

$$n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right). \quad (12.72)$$

Величина  $\Delta_\lambda$ , уравнение (12.69), аккумулирует эффекты спаривания. Без спаривающего взаимодействия  $E_\lambda \rightarrow |\varepsilon'_\lambda|$ , так что

$$n_\lambda \rightarrow n_\lambda^\circ = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\varepsilon'_\lambda}{|\varepsilon'_\lambda|} \right). \quad (12.73)$$

Одночастичные энергии  $\varepsilon'_\lambda$  положительны выше  $\mu$  и отрицательны ниже  $\mu$ . Поэтому мы должны выбрать знак минус в (12.73), чтобы гарантировать

правильные числа заполнения, равные 1 ниже  $\mu$  и 0 выше  $\mu$ . Конечно, это просто определение энергии Ферми,  $\mu = \varepsilon_F$ .

В присутствии сил спаривания величина  $E_\lambda$  отлична от  $|\varepsilon'_\lambda|$  в слое  $\delta\varepsilon \sim \Delta$  около  $\Sigma_F$ , где  $\Delta \ll \varepsilon_F$  — среднее значение  $\Delta_\lambda$ . Вне этого слоя можно пренебречь  $\Delta_\lambda$  и вернуться к невозмущённым числам заполнения (12.73). Поэтому мы опять должны выбрать нижний знак в (12.72). Следовательно, решение задачи минимизации — это

$$v_\lambda^2 = n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right), \quad u_\lambda^2 = 1 - n_\lambda = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right). \quad (12.74)$$

Однако это всего лишь формальное решение, поскольку величина  $\Delta_\lambda$ , входящая в  $E_\lambda$ , зависит от чисел заполнения по определению (12.69).

## 12.8 Энергетическая щель

Неизвестную величину  $\Delta_\lambda$  обычно называют *энергетической щелью*, потому что, как мы увидим, её величина определяет минимальную энергию возбуждения вблизи  $\Sigma_F$ , где невозмущённая энергия  $\varepsilon' = \varepsilon - \mu$  мала. Чтобы найти  $\Delta_\lambda$ , мы должны подставить параметры (12.74) в (12.69), что приводит к нелинейному уравнению для  $\Delta_\lambda$ .

Комбинация, входящая в уравнение (12.69) — это

$$u_\lambda v_\lambda = \sqrt{n_\lambda(1 - n_\lambda)} = \frac{\Delta_\lambda}{2E_\lambda}. \quad (12.75)$$

Она исчезает в нормальном пределе (без спаривания), когда все числа заполнения равны 1 или 0. Уравнения (12.75) и (12.69) приводят к интегральному уравнению для  $\Delta_\lambda$ ,

$$\Delta_\lambda = - \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}}. \quad (12.76)$$

Это уравнение играет фундаментальную роль в теории сверхпроводимости БКШ. Тривиальное решение  $\Delta_\lambda = 0$  (нормальный Ферми-газ) всегда возможно. Чтобы найти *нетривиальное* решение — если оно существует — мы примем некоторые свойства потенциала спаривания, которые определяют существование и симметрию  $\Delta_\lambda$ .

В однородной макроскопической системе пары характеризуются полным импульсом  $\mathbf{P}$ , сохраняющимся в процессах рассеяния, и относительным импульсом  $\mathbf{p}$ . Полный импульс каждой пары должен быть равен нулю в

основном состоянии без тока. Абсолютные величины  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  близки к  $p_F$ , и рассеяние описывается углом между начальным относительным импульсом  $\mathbf{p}'$  и конечным  $\mathbf{p}$ . Матричный элемент  $U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^P$  как функцию угла можно разложить по полиномам Лежандра. Конденсат формируется парами в состоянии относительного движения (парциальной волне), соответствующем максимальному притяжению. Обычно это происходит в  $s$ -волне, и потому в синглетном по спину состоянии. В сверхтекучем  $^3\text{He}$  спаривание происходит в триплетном по спину  $p$ -состоянии, есть несколько термодинамических фаз, отличающихся связью между спином и орбитальным моментом [10].

Для  $s$ -волнового спаривания матричные элементы взаимодействия не зависят от угла рассеяния, и их можно заменить на эффективную константу. Ситуация в ядрах качественно похожа, хотя матричные элементы различны для разных комбинаций  $\lambda$  и  $\lambda'$ . Однако приближение (12.26) эффективной константой в некотором слое около  $\Sigma_F$  (и нулём вне этого слоя) может дать разумную оценку,

$$U_{\lambda\lambda'}^P \approx -G\theta_\lambda\theta_{\lambda'}, \quad (12.77)$$

где обрезавшие множители  $\theta_{\lambda'}$  ограничивают пространство спаривания внутренностью энергетического слоя  $-\xi \leq \varepsilon'_\lambda \leq +\xi$  вблизи  $\Sigma_F$ . В этом приближении

$$\Delta_\lambda = G\theta_\lambda \sum_{\lambda'} \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}} \theta_{\lambda'}, \quad (12.78)$$

так что  $\Delta_\lambda$  — константа внутри слоя,

$$\Delta_\lambda = \theta_\lambda \Delta. \quad (12.79)$$

Нетривиальное значение  $\Delta$  удовлетворяет уравнению

$$1 = G \sum_{\lambda} \frac{1}{2E_{\lambda}} \theta_{\lambda} \quad (12.80)$$

где  $\Delta$  входит в знаменатель через  $E_{\lambda}$ , уравнение (12.71).

Чтобы решить уравнение (12.80), мы заменяем суммирование по слою интегрированием по одночастичным энергиям с плотностью уровней  $\nu'(\varepsilon) \approx \nu'_F$  на  $\Sigma_F$ . Эта плотность уровней считает вырожденные дублеты, и потому отличается от  $\nu_F$  (43.11) множителем  $1/2$ . Тонкость этой замены состоит в том, что в *дискретном спектре* уравнение (12.80) может не иметь решений, что означало бы  $\Delta = 0$ . Взаимодействие должно быть достаточно сильным,

чтобы обеспечить образование конденсата процессами рассеяния пар, преодолевая интервалы между уровнями дискретного спектра. Действительно, минимальное значение знаменателя в (12.80) — это  $|\varepsilon'_\lambda|$ . Тогда *критическая сила спаривания*  $G_c$  определяется соотношением [12]

$$1 = G_c \sum_\lambda \frac{\theta_\lambda}{2|\varepsilon'_\lambda|}. \quad (12.81)$$

Нетривиальное решение отсутствует при  $G < G_c$ . Если перейти к *непрерывному спектру*, то интеграл в (12.81) имеет логарифмическую особенность на  $\Sigma_F$ , где  $\varepsilon' \rightarrow 0$ . Тогда  $G_c \rightarrow 0$ , и конденсат появляется при *сколь угодно слабом* взаимодействии. Это значит, что в *макроскопической* Ферми-системе нормальное состояние *нестабильно* по отношению к силам притяжения, вызывающим образование конденсата пар (*эффект Купера*).

В *конечной* системе замена суммы интегралом оправдана только тогда, когда сила спаривания *сверхкритична*, в противном случае нет никаких корреляций спаривания. С сильным спариванием в непрерывном приближении интегрирование сводится к

$$1 = G \int_{-\xi}^{+\xi} d\varepsilon' \frac{\nu'(\varepsilon')}{2\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \approx G\nu'_F \int_0^\xi d\varepsilon' \frac{1}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \quad (12.82)$$

и может быть легко произведено,

$$1 = G\nu'_F \ln \frac{\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\Delta} \approx G\nu'_F \ln \frac{2\xi}{\Delta}, \quad (12.83)$$

где мы предположили, что  $\Delta \ll \xi$ . Наконец, модель даёт решение для параметра щели,

$$\Delta \approx 2\xi \exp\left(-\frac{1}{G\nu'_F}\right). \quad (12.84)$$

Результат является *неаналитической* функцией силы  $G$  при  $G \rightarrow 0$  (существенная особенность не позволяет разлагать в ряд Тэйлора), и он не может быть выведен в теории возмущений даже при малом  $G$  (ещё одно свидетельство неустойчивости нормального моря Ферми относительно притягивающих взаимодействий). Однако нужно помнить, что это заключение справедливо только для макроскопических систем, тогда как для конечных систем весь метод не работает в случае слабого взаимодействия.

Возвращаясь к параметрам (12.74) волновой функции, мы получаем простую картину одночастичных чисел заполнения для постоянной (или

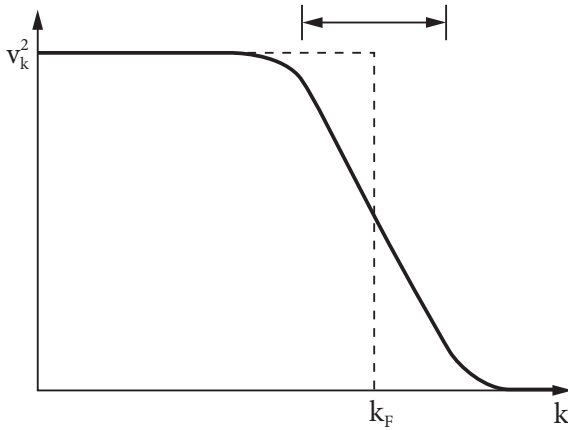


Рис. 12.1. Средние числа заполнения для нормального Ферми-газа (пунктирная линия) и для нетривиального решения БКШ (сплошная линия).

медленно меняющейся как функция  $\lambda$ ) энергетической щели  $\Delta$ . Числа заполнения, вместо резкого разрыва в нормальном Ферми-газе, плавно уменьшаются от 1 существенно ниже  $\Sigma_F$  до 0 существенно выше  $\Sigma_F$ . Ширина переходной области энергий порядка  $\Delta$ , т.е. меньше ширины слоя взаимодействия  $\sim 2\xi$  (эта ширина  $\sim k_F(2\Delta/\varepsilon_F)$  в импульсной шкале рис. 22.1).

### Задача 12.6

Покажите, что результаты вариационного подхода можно получить с помощью метода канонического преобразования, предполагая, что квази-частичные операторы даются (12.46) и (12.48). Выразите гамильтониан через новые операторы  $\hat{b}$  и  $\hat{b}^\dagger$ , используя обратное преобразование (12.55). С помощью коммутационных соотношений приведите преобразованный гамильтониан к нормальной форме по отношению к  $\hat{b}$  и  $\hat{b}^\dagger$ . Член взаимодействия, билинейный по операторам, имеет два типа структур,  $\hat{b}^\dagger \hat{b}$  и  $(\hat{b} \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger)$ . Второй тип соответствует “опасным диаграммам” создания или уничтожения двух квазичастиц. Их присутствие сделало бы систему нестабильной. Выбор параметров  $u$ ,  $v$  канонического преобразования, обращающий в нуль опасные члены, определяет стабильное основное состояние (сравните с §I.12.7). Покажите, что для гамильтониана спаривания получившиеся параметры совпадают с теми, которые были найдены вариационным методом.

Мы можем непосредственно проверить, что квазичастичные операторы, найденные в вырожденной модели, имеют точно такие же свойства в реалистическом случае, если они определены с соответствующими амплитудами  $u$ ,  $v$ . Действительно, подействуем оператором рождения квазичастицы  $\hat{b}_\lambda^\dagger$ , уравнение (12.46), на основное состояние (12.59). Член  $u_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger$  помещает частицу в пустую орбиталь  $|\lambda\rangle$ , которая имела амплитуду  $u_\lambda$ . Член  $v_\lambda \hat{a}_{\bar{\lambda}}$  уничтожает  $\mathcal{T}$ -сопряжённого партнёра из конденсатной пары, которая присутствовала с амплитудой  $v_\lambda$ . Суперпозиция этих двух амплитуд даёт, в согласии с (12.44),

$$\hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle = \hat{a}_\lambda^\dagger \prod_{\lambda' \neq \lambda} \left\{ u_{\lambda'} - v_{\lambda'} \hat{P}_{\lambda'}^\dagger \right\} |\text{vac}\rangle, \quad (12.85)$$

что есть в точности состояние (12.44) с  $s = 1$ .

### Задача 12.7

Проверьте, что основное состояние (12.59) удовлетворяет вакуумному условию для квазичастиц (12.54).

## 12.9 Спектр возбуждений

Величина  $E_\lambda$ , введённая в процессе решения, уравнение (12.71), имеет важный физический смысл, оправдывающий это обозначение. Эта энергия связана с дополнительной валентной частицей, которая блокирует уровни пар и уменьшает общий выигрыш энергии при образовании конденсата.

Добавим частицу на орбите  $\lambda$  к спаренной чётной системе и вычислим энергию  $W_\lambda$  получившегося состояния. При этом добавляется энергия занятой орбиты относительно энергии Ферми ( $\varepsilon'_\lambda$ ) и вычитается член удалённой пары  $2\varepsilon'_\lambda v_\lambda^2$  в (12.65). Но вблизи  $\Sigma_F$  одночастичная энергия  $\varepsilon'_\lambda$  мала, добавочная частица попадает почти на поверхность Ферми. Однако есть другой эффект, связанный с блокировкой состояния пары, ставшего недоступным для рассеяния других пар. Этот вклад оказывается конечным на  $\Sigma_F$  из-за суммирования по многим состояниям пар. Этот эффект происходит от второго члена в (12.65), где мы должны теперь вычеркнуть вклады заблокированной орбиты из обеих сумм, по  $\lambda$  и по  $\lambda'$ , что даёт равные вклады. В результате, полная энергия, связанная с добавочной частицей, равна

$$W_\lambda = \varepsilon'_\lambda (1 - 2v_\lambda^2) - 2u_\lambda v_\lambda \sum_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P u_{\lambda'} v_{\lambda'}. \quad (12.86)$$

Сумма в (12.86) равна  $-\Delta_\lambda$ , уравнение (12.69). Используя значения параметров (12.71, 12.74) и (12.75), мы приходим к

$$W_\lambda = \varepsilon'_\lambda \left( 1 - 1 + \frac{\varepsilon'_\lambda}{E_\lambda} \right) - 2 \frac{\Delta_\lambda}{2E_\lambda} (-\Delta_\lambda) = \frac{(\varepsilon'_\lambda)^2 + \Delta_\lambda^2}{E_\lambda} = E_\lambda. \quad (12.87)$$

Таким образом, величину  $E_\lambda$  можно назвать *энергией квазичастицы*. Именно эта энергия добавляется к системе при возбуждении, производимом оператором рождения квазичастицы (12.44). Теперь смысл термина *энергетическая щель* становится яснее. На  $\Sigma_F$  собственная энергия добавляемой частицы стремится к нулю, но минимальная энергия возбуждения конечна и равна  $\Delta$ . Она происходит исключительно от блокирующего влияния добавочной частицы на все другие пары.

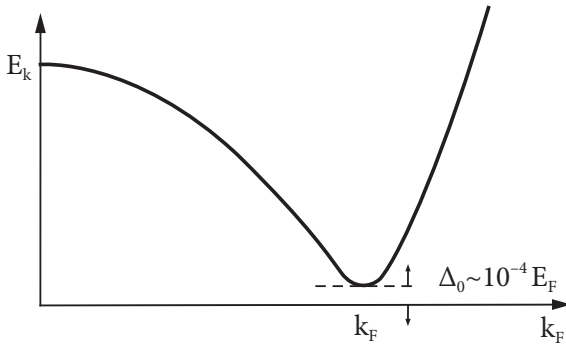


Рис. 12.2. Спектр одночастичных возбуждений вблизи поверхности Ферми в системе со спариванием.

В нормальной макроскопической системе спектр одночастичных возбуждений вблизи  $\Sigma_F$  является линейной функцией импульса,

$$W_p = \varepsilon(p) - \varepsilon_F \approx v_F(p - p_F), \quad p > p_F. \quad (12.88)$$

То же верно для дырочных возбуждений,

$$W_p = \varepsilon_F - \varepsilon(p) \approx v_F(p_F - p), \quad p < p_F; \quad (12.89)$$

в обоих случаях  $v_F$  — скорость на поверхности Ферми. Этот спектр имеет две ветви, для частиц и дырок, которые соединяются на  $\Sigma_F$ , где энергия возбуждения обращается в нуль, рис. 12.2. В системе со спариванием мы имеем плавное поведение со щелью  $\Delta$  на  $\Sigma_F$ . Подобно уравнению



Дирака, щель (12.71) играет роль массы в спектре возбуждений, в её отсутствие одночастичный спектр был бы линейным по импульсу (12.88, 12.89), как для безмассовой частицы. Возбуждения теперь имеют смешанную частично-дырочную природу, что отражено в квазичастичном каноническом преобразовании (12.50).

Чтобы возбудить *чётную* систему, мы должны разорвать одну из пар. Если после этого партнёры занимают одночастичные орбиты  $\lambda$  и  $\lambda'$ , то энергия возбуждения равна

$$W_{\lambda\lambda'} = E_{\lambda} + E_{\lambda'}. \quad (12.90)$$

Очевидно, такие возбуждения начинаются с более высокого порога, равного  $(W_{\lambda\lambda'})_{\min} = 2\Delta$ , что соответствует появлению двух квазичастиц. Такое поведение необходимо для *сверхтекучести* в макроскопической системе. Действительно, критерий сверхтекучести Ландау (21.43) определяет конечную критическую скорость

$$u_c = \frac{W_{\min}}{P_{\max}} = \frac{2\Delta}{2p_F} = \frac{\Delta}{p_F}. \quad (12.91)$$

В заряженной Ферми-жидкости незатухающий ток означает *сверхпроводимость*. В этих лекциях мы не будем подробно изучать электродинамику сверхпроводников [?, 13].

В главе I.14 мы описывали основные черты сверхпроводящего состояния с помощью макроскопической когерентной волновой функции. В микроскопическом подходе эту роль по существу играет щель  $\Delta$ , которая в состоянии с током приобретает фазу, зависящую от координат, а ток пропорционален градиенту этой фазы. Пространственная протяжённость макроскопической волновой функции определяет так называемую *длину когерентности*  $l_c$ . Величина щели  $\Delta$  указывает энергетический слой вокруг  $\Sigma_F$ , где есть скоррелированные конденсатные пары; в соответствии с уравнением (12.75), это область сглаживания поверхности Ферми. Неопределённость импульса этого волнового пакета можно оценить как  $\delta p \sim \Delta/v_F$ , и пространственная длина когерентности  $l_c \sim \hbar/\delta p \sim \hbar v_F/\Delta$ . Эта длина обычно превосходит расстояние между частицами на 2–3 порядка. В ядрах формально вычисленная длина когерентности больше размера ядра. Пары слабо связаны и сильно перекрываются. При сильном притяжении образовались бы тесно связанные молекулы, что сильно отличается от картины БКШ. Переход между двумя режимами, от слабо связанного собрания куперовских пар к конденсату бозонных молекул, может наблюдаться в атомных ловушках с переменной эффективной силой взаимодействия [Reg2004].

Резюмируя основные черты спектра возбуждений системы со спариванием, мы можем использовать схему старшинства, развитую исходно для вырожденной модели. Классификация состояний по числу  $s$  неспаренных частиц особенно полезна в ядрах и других конечных системах. Энергетическая щель в этой модели даётся уравнением (12.42). Теперь мы можем распространить это описание на реалистический случай. Основное состояние имеет  $s = 0$ , первые возбуждённые состояния чётной системы соответствуют  $s = 2$ , тогда как основное состояние ядра с нечётным  $A$  имеет  $s = 1$ . Спектр возбуждений чётной системы имеет щель  $2\Delta$ ; спектр возбуждений нечётной системы не имеет щели, поскольку неспаренную частицу можно возбудить на другую орбиту без сильного искажения конденсата. В нечётной системе при энергиях  $\sim 2\Delta$  находятся состояния с тремя квазичастицами,  $s = 3$ . Эта конструкция легко может быть продолжена.

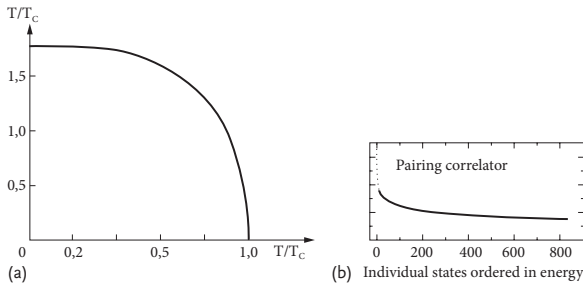


Рис. 12.3. Типичная зависимость (а) макроскопической щели от температуры, и (б) корреляционной энергии спаривания в мезоскопической системе от энергии возбуждения.

Состояния с большим старшинством становятся всё менее и менее скоррелированными. Каждый раз нужно решать уравнение для щели, подобное (12.76), но с новыми числами заполнения, включая эффект блокировки. Если вероятность найти неспаренную частицу на орбите  $\lambda$  равна  $f_\lambda$  (не спутайте эту функцию с парным числом заполнения  $n_\lambda$ , присутствующим уже в основном состоянии (12.59)), то вероятность найти дублет состояний  $(\lambda, \bar{\lambda})$  пустым и доступным для рассеяния пар равна

$$p_\lambda = 1 - f_\lambda - f_{\bar{\lambda}}. \quad (12.92)$$

Тогда вместо главного уравнения (12.76) мы получим

$$\Delta_\lambda = \sum_{\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^P \frac{\Delta_{\lambda'}}{2E_{\lambda'}} p_{\lambda'}. \quad (12.93)$$

Это происходит, когда энергия возбуждения (которую можно обсуждать также на языке *температуры*  $T$ ) растёт, увеличивая вероятности  $f_\lambda(T)$  термального возбуждения квазичастиц. Нетривиальное решение  $\Delta \neq 0$  уменьшается с температурой и обращается в нуль при критической температуре  $T_c$ , которую можно найти из (12.93) с  $\Delta = 0$ . В макроскопической системе это наблюдается как фазовый переход из сверхпроводящего состояния в нормальное, рис. 22.3а. В конечных системах, таких, как ядра, нет резкого фазового перехода, но  $\Delta$  постепенно уменьшается. Когда она становится меньше среднего интервала между энергиями орбит в нормальной системе, уже не имеет смысла говорить о щели в спектре. Рис. 22.3b [Hor2007] показывает коррелятор  $\langle P^\dagger P \rangle$ , аналог энергии спаривания в уравнениях (12.27 и (12.101)), для всех состояний со спином  $J = 0$  и изоспином  $T = 0$  в оболочечной модели ядра  $^{28}\text{Si}$ , ограниченных  $1s$  и  $0d$  орбиталями, близкими к поверхности Ферми. Только низшие состояния показывают развитое (изоспиново-инвариантное) спаривание; число валентных частиц слишком мало: 6 протонов и 6 нейтронов.

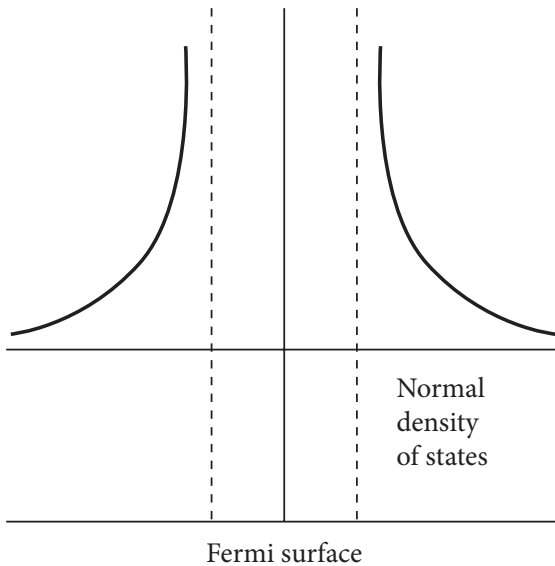


Рис. 12.4. Плотность квазичастичных (квазидырочных) уровней в сверхпроводящей системе.

Квазичастичные возбуждения в чётной системе, вытолкнутые выше порога  $2\Delta$ , увеличивают *плотность уровней* в этом районе. Новая плотность

уровней  $\nu_{q-p}(E)$  неспаренных частиц с энергией  $E = \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}$  (уравнение (12.81)) равна, как обычно, числу уровней  $dn/dE$  на единичный интервал энергии. Мы получаем в терминах невозмущённой плотности уровней  $\nu(\varepsilon)$

$$\nu_{q-p}(E) = \frac{dn}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dE} = \nu \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}, \quad E > \Delta. \quad (12.94)$$

В макроскопической системе эта функция имеет (интегрируемую) особенность на пороге из-за скопления квазичастичных состояний, вытолкнутых из щели, рис. 12.4.

### 12.10 Энергия конденсации

Теперь мы можем обосновать, что сверхпроводящее состояние с нетривиальным решением  $\Delta$  энергетически выгодно по сравнению с нормальным состоянием с  $\Delta = 0$ .

В модели с постоянными матричными элементами (12.76) энергия основного состояния  $E_0$  (с несущественным сдвигом на  $\mu\langle N \rangle$ ) равна

$$E_0 = 2 \sum_{\lambda} \varepsilon'_{\lambda} v_{\lambda}^2 - G \left( \sum_{\lambda} u_{\lambda} v_{\lambda} \theta_{\lambda} \right)^2. \quad (12.95)$$

Здесь достаточно рассмотреть только энергетический слой толщины  $\xi$  вокруг  $\Sigma_F$ , где распределение частиц отлично от случая нормальной Ферми-системы. Вклад первого члена в (12.95) может быть выражен через интеграл, как в (12.82),

$$E_0^{(1)} \approx \nu'_F \int_{-\xi}^{\xi} d\varepsilon' \varepsilon' \left( 1 - \frac{\varepsilon'}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \right). \quad (12.96)$$

Второй член в (12.95) равен, как видно из (12.78),  $\Delta^2/2G$ . Используя уравнение (12.82), мы опять переписываем его в интегральном виде,

$$E_0^{(2)} = -\frac{\Delta^2}{2G} \approx -\frac{1}{2} \Delta^2 \nu'_F \int_{-\xi}^{\xi} \frac{d\varepsilon'}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}}. \quad (12.97)$$

Чтобы найти энергию конденсации  $E_{\text{cond}}$ , нам нужно вычислить разность между энергиями основных состояний спаренной и нормальной системы, последняя равна сумме всех одночастичных орбит ниже  $\Sigma_F$ ,

$$E_{\text{norm}} \approx 2\nu'_F \int_{-\xi}^0 d\varepsilon' \varepsilon'. \quad (12.98)$$

**Задача 12.8**

Вычислите энергию конденсации

$$E_{\text{cond}} = E_0^{(1)} + E_0^{(2)} - E_{\text{norm}}. \quad (12.99)$$

**Решение** Собирая все члены и производя интегрирование, мы получаем

$$E_{\text{cond}} = \nu'_F \left( \xi^2 - \xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right). \quad (12.100)$$

Эта энергия отрицательна при любом ненулевом значении параметра щели. Таким образом, нетривиальное решение *энергетически предпочтительно*. В приближении  $\xi \gg \Delta$ , которое использовалось в (12.83),

$$E_{\text{cond}} = -\frac{1}{2} \Delta^2 \nu'_F. \quad (12.101)$$

Этот результат имеет простой физический смысл: спаривание существенно меняет одночастичный энергетический спектр в интервале порядка  $\Delta$ . Этот интервал содержит  $\nu'_F \Delta$  состояний. Каждое из них приобретает добавочную энергию связи порядка  $\Delta$ .

В макроскопических сверхпроводниках энергия конденсации в единице объёма (полная плотность уровней пропорциональна объёму) равна плотности энергии магнитного поля  $\mathcal{B}_c^2/8\pi$ , которое нужно, чтобы разрушить сверхпроводимость. Поэтому уравнение (12.101) прямо определяет критическое магнитное поле  $\mathcal{B}_c$ .

**12.11 Амплитуды переходов**

Как мы обсуждали в связи с процессом передачи (12.41), факторы когерентности, определяемые свойствами конденсата, сильно влияют на вероятности переходов. Посмотрим на матричные элементы одночастичных операторов, которые определяют мультипольные моменты и радиационные переходы в ядрах и процессы типа спиновой релаксации и поглощения света в макроскопических сверхпроводниках.

Общий одночастичный оператор, не меняющий число частиц, может быть записан как (7.37),

$$\hat{Q} = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'}, \quad (12.102)$$

где сумма берётся по всем одночастичным орбитам. Чтобы найти его действие на спаренную систему, мы производим каноническое преобразование (12.55) к квазичастицам. Результирующий оператор содержит члены  $Q_{\Delta s}$  с разными правилами отбора по старшинству  $\Delta s$ .

Сначала рассмотрим вклады  $\sim \hat{b}^\dagger \hat{b}$ , сохраняющие число квазичастиц,  $\Delta s = 0$ . Имеется два члена этого типа,

$$Q_0 = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \left( u_\lambda u_{\lambda'} \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_{\lambda'} + v_\lambda v_{\lambda'} \hat{b}_{\bar{\lambda}}^\dagger \hat{b}_{\bar{\lambda}'} \right). \quad (12.103)$$

Второй член в (12.103) можно привести к нормальной форме,

$$\hat{b}_{\bar{\lambda}}^\dagger \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^\dagger = \delta_{\lambda\lambda'} - \hat{b}_{\bar{\lambda}'}^\dagger \hat{b}_{\bar{\lambda}}. \quad (12.104)$$

Таким образом мы извлекаем неоператорный член (диагональное среднее значение)

$$\bar{Q} = \sum_{\lambda} q_{\lambda\lambda} n_{\lambda} \quad (12.105)$$

который определяется числами заполнения  $n_{\lambda} = v_{\lambda}^2$ . Два операторных члена с  $\Delta s = 0$  комбинируются в оператор, ответственный за процесс рассеяния квазичастицы полем  $Q$ ,

$$\hat{Q}_0 = \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} \left( u_\lambda u_{\lambda'} \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_{\lambda'} - v_\lambda v_{\lambda'} \hat{b}_{\bar{\lambda}}^\dagger \hat{b}_{\bar{\lambda}'} \right). \quad (12.106)$$

Во втором члене (12.106) мы можем сделать замену переменных суммирования,  $\bar{\lambda} \rightarrow \lambda'$ ,  $\bar{\lambda}' \rightarrow \lambda$ , сделав операторы такими же, как и в первом члене. В  $\mathcal{T}$ -инвариантной системе амплитуды  $u$ ,  $v$  не меняются при обращении времени. Окончательный ответ зависит от свойств поля  $Q$  по отношению к обращению времени.

Для  $\mathcal{T}$ -чётного поля,  $q_{\lambda\lambda'} = q_{\bar{\lambda}'\bar{\lambda}}$ , матричный элемент  $M_{\lambda\lambda'}$  рассеяния квазичастиц  $\hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_{\lambda'}$  равен

$$M_{\lambda\lambda'}^{(+)} = q_{\lambda\lambda'} (u_\lambda u_{\lambda'} - v_\lambda v_{\lambda'}). \quad (12.107)$$

В  $\mathcal{T}$ -нечётном случае,  $q_{\lambda\lambda'} = -q_{\bar{\lambda}'\bar{\lambda}}$ , матричный элемент содержит другой фактор когерентности

$$M_{\lambda\lambda'}^{(-)} = q_{\lambda\lambda'} (u_\lambda u_{\lambda'} + v_\lambda v_{\lambda'}). \quad (12.108)$$

На диагональный матричный элемент  $\mathcal{T}$ -нечётного мультипольного момента спаривание не влияет,

$$M_{\lambda\lambda}^{(-)} = q_{\lambda\lambda}(u_{\lambda}^2 + v_{\lambda}^2) = q_{\lambda\lambda}. \quad (12.109)$$

Например, магнитный момент квазичастицы на данной ядерной орбите сохраняет Шмидтовское значение, как мы видели в схеме старшинства (12.23).

Амплитуда рождения двух квазичастиц тем же полем (разрыв пары) даётся членом  $\Delta s = 2$ ,

$$Q_2 = - \sum_{\lambda\lambda'} q_{\lambda\lambda'} u_{\lambda} v_{\lambda'} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda'}^{\dagger}. \quad (12.110)$$

Есть две возможности произвести две квазичастицы  $\hat{b}_{\mu'}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger}$ :  $\lambda = \mu, \lambda' = \mu'$  и  $\lambda = \tilde{\mu}', \lambda' = \mu$ . Опять для  $\mathcal{T}$ -чётного поля  $Q$  мы получаем матричный элемент

$$P_{\lambda\lambda'}^{(+)} = q_{\lambda\lambda'}(u_{\lambda} v_{\lambda'} + u_{\lambda'} v_{\lambda}). \quad (12.111)$$

В  $\mathcal{T}$ -нечётном случае амплитуда равна

$$P_{\lambda\lambda'}^{(-)} = q_{\lambda\lambda'}(u_{\lambda} v_{\lambda'} - u_{\lambda'} v_{\lambda}). \quad (12.112)$$

Теперь рождение диагональной пары  $\lambda = \lambda'$  запрещено,  $P_{\lambda\lambda}^{(-)} = 0$ . Это пара с квантовыми числами конденсата, и поэтому она  $\mathcal{T}$ -чётна, а поле  $\mathcal{T}$ -нечётно. Эти результаты незаменимы при вычислении отклика спаренной системы на любые внешние поля.





Оказывается, для наших целей гораздо больше подходит не волновая функция, а нечто иное, называемое матрицей плотности. Так что при небольшом возрастании сложности уравнений (не при сильном возрастании) я использую матрицу плотности.

Р.Ф. Фейнман, *International Journal of Theoretical Physics*, т. 21 (1982), с. 467-488

## Глава 13

### Матрица плотности

#### 13.1 Смешанные состояния и матрица плотности

До настоящего времени мы работали, главным образом, с *чистыми квантовыми состояниями*, описываемыми вектором состояния  $|\Psi\rangle$ . Это обозначение соответствует специально подготовленной, например, в качестве собственного состояния определенного оператора Гамильтона, изолированной квантовой системе, когда можно пренебречь ей взаимодействием с окружением. Последнее возникает только в качестве измерительной аппаратуры. Однако, это лишь идеализация реальной ситуации. Например, мы несколько раз упоминали системы с тепловым возбуждением. В этом случае, предполагается, что системы находятся в тепловом равновесии с нагревателем, *термостатом*, который поддерживает определенный уровень возбуждения системы. Другим важным обстоятельством является конечная точность аппаратуры, создающей начальное состояние.

Действительно, описание системы как части большого механизма является более общим, чем то, что подразумевается под чистым квантовым состоянием. Такое описание становится обязательным во всех случаях, когда мы имеем дело с частью динамических переменных и усредняем по наблюдаемым степеням свободы. Тогда, вместо чистого состояния, мы должны иметь дело с *смешанными квантовыми состояниями*, описываемыми *матрицей плотности*  $\hat{\rho}$ , а не с волновой функцией. Представим задание, состоящее из двух частей, чистая система и ее окружение. Вторая часть, в частности, может быть лишь набором переменных той же самой системы, который нам не интересен или просто не может быть проверен

экспериментально, как это обычно имеет место в задаче многих тел. Предполагая, что большая система, как целое, может считаться замкнутой и описываться волновой функцией  $|\Psi\rangle$ , мы вводим полный набор функций  $|k; \nu\rangle$ , где чистые состояния  $|k\rangle$  относятся к нашей системе, в то время как  $|\nu\rangle$  характеризуют возможные состояния окружения.

Таким образом, произвольное состояние полной системы может быть представлено суперпозицией основных состояний,

$$|\Psi\rangle = \sum_{k\nu} C_{k;\nu} |k; \nu\rangle. \quad (13.1)$$

Амплитуды  $C_{k;\nu}$  могут зависеть от времени; они нормированы в соответствии с

$$\sum_{k\nu} |C_{k;\nu}|^2 = 1. \quad (13.2)$$

Пусть  $\hat{A}$  произвольный оператор, действующий только на переменные нашей подсистемы. Результаты наших измерений описываются ожидаемыми значениями  $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ . Матрица элементов  $\hat{A}$  диагональная в квантовых числах окружения,

$$\langle k'; \nu' | \hat{A} | k; \nu \rangle = \delta_{\nu'\nu} A_{k'k}. \quad (13.3)$$

Следовательно, наблюдаемое значение  $\hat{A}$  принимает вид

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{k'\nu' k\nu} C_{k';\nu'}^* C_{k;\nu} \langle k'; \nu' | \hat{A} | k; \nu \rangle = \sum_{k'k} A_{k'k} \sum_{\nu} C_{k;\nu} C_{k';\nu}^*. \quad (13.4)$$

Мы определяем *матрицу плотности*  $\rho_{kk'}$ , действующую в гильбертовом пространстве исследуемой системы как результат *отслеживания* переменных окружения,

$$\rho_{kk'} = \sum_{\nu} C_{k;\nu} C_{k';\nu}^* \equiv \overline{C_k C_{k'}}, \quad (13.5)$$

где подчеркивание сверху означает “усреднение” по состояниям окружения. Матрица  $\hat{\rho}$  с элементами (13.5) определяет ожидаемые значения всех наблюдаемых величин:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{k'k} A_{k'k} \rho_{kk'} = \sum_{k'} (A\rho)_{k'k'} \equiv \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}). \quad (13.6)$$

След  $\text{Tr}$  здесь и ниже относится только к состояниям нашей подсистемы. Следуя нормировке (13.2), матрица плотности нормируется в соответствии с

$$\text{Tr } \hat{\rho} = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (13.7)$$

Функция распределения  $w(a)$  различных значений  $a$  оператора  $\hat{A}$  выражается как

$$w(a) = \text{Tr} \{ \delta(\hat{A} - a) \hat{\rho} \}. \quad (13.8)$$

Таким образом, матрица плотности представляет вероятности всех экспериментальных результатов при условии неполноты информации, когда система находится в смешанном состоянии, и ее переменные *запутаны* с окружением.

## 13.2 Свойства матрицы плотности

. Для *чистого* состояния (нет связи со средой), знание матрицы плотности эквивалентно знанию волновой функции. Если система находится в чистом состоянии  $|\alpha\rangle$  и мы используем произвольный базис  $|k\rangle$  в разложении (13.1) с коэффициентами  $C_k^\alpha$ , матрица плотности (13.5) этого состояния,  $\rho^{(\alpha)}$ , равна

$$\rho_{kk'}^{(\alpha)} = C_k^\alpha C_{k'}^{\alpha*} = \langle k | \alpha \rangle \langle \alpha | k' \rangle. \quad (13.9)$$

Это просто *проекционный оператор*, который проецирует компоненту произвольного состояния  $|\Psi\rangle$  вдоль заданного вектора  $|\alpha\rangle$ :

$$\langle k | \hat{\rho}^{(\alpha)} | \Psi \rangle = \sum_{k'} \rho_{kk'}^{(\alpha)} \langle k' | \Psi \rangle = \langle k | \alpha \rangle \sum_{k'} \langle \alpha | k' \rangle \langle k' | \Psi \rangle = \langle k | \alpha \rangle \langle \alpha | \Psi \rangle, \quad (13.10)$$

Таким образом, для чистого состояния  $|\alpha\rangle$ , оператор плотности это *проектор*

$$\hat{\rho}^{(\alpha)} = |\alpha\rangle \langle \alpha|. \quad (13.11)$$

Его матрица может быть представлена как простое произведение (13.9).

### Задача 13.1

Доказать, что матрица плотности чистого состояния, уравнение (13.9), удовлетворяет определению (6.126) проекционного оператора,

$$(\hat{\rho}^{(\alpha)})^2 = \hat{\rho}^{(\alpha)}. \quad (13.12)$$

Это означает, что собственные значения оператора плотности чистого состояния равны 1 и 0 для вектора этого состояния и для любого ортогонального вектора, соответственно.

В общем случае смешанного состояния, оператор плотности эрмитов,

$$\rho_{jk}^* = \sum_{\nu} C_{j;\nu}^* C_{k;\nu} = \rho_{kj} \quad \rightsquigarrow \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}. \quad (13.13)$$

Следовательно, собственные значения  $\hat{\rho}$  вещественны. Диагональный матричный элемент  $\hat{\rho}$  в любом базисе неотрицателен,

$$\rho_{kk} = \sum_{\nu} |C_{k;\nu}|^2 \geq 0. \quad (13.14)$$

Поскольку, следуя (13.7) и след инвариантен,

$$\sum_k \rho_{kk} = 1, \quad (13.15)$$

числа  $\rho_{kk}$  располагаются между 0 и 1, достигая крайних значений для чистого состояния; в противоположность чистому состоянию (13.12), в общем случае  $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$ .

Явное представление матрицы плотности (13.5) зависит от выбора базиса. Матрицу плотности можно *диагонализировать*. В её собственном базисе

$$\rho_{pp'} = \rho_p \delta_{pp'}, \quad 0 \leq \rho_p \leq 1, \quad \sum_p \rho_p = 1. \quad (13.16)$$

В этом базисе оператор плотности является суммой проекционных операторов для базисных векторов  $|p\rangle$ ,

$$\hat{\rho} = \sum_p \rho_p |p\rangle \langle p|. \quad (13.17)$$

Используя этот базис, мы можем широко интерпретировать собственные значения  $\rho_p$  как *вероятности* собственных состояний  $|p\rangle$  в ансамбле, образованном окружением. Эта интерпретация поддерживается вычислением ожидаемого значения любой величины:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} (\hat{A} \hat{\rho}) = \sum_p \rho_p \langle p | \hat{A} | p \rangle. \quad (13.18)$$

Здесь мы имеем *двойное усреднение*, первое по чистому квантовому состоянию  $|p\rangle$  из собственного базиса, а второе по статистическому ансамблю населённому в соответствии с вероятностями  $\rho_p$ .

В качестве примера мы можем взять *одночастичную* матрицу плотности. В координатном представлении,  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , нижние индексы  $kk'$  определения (13.5) становятся непрерывными координатами, и ожидаемое значение оператора  $\hat{A}$  дается выражением

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \int d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \hat{A} | \mathbf{r} \rangle. \quad (13.19)$$

Для оператора  $\hat{A}(\mathbf{r})$ , который является функцией координат, его координатные матричные элементы  $A(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , и уравнение (13.19) содержит только диагональную часть  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  матрицы плотности, которая играет роль плотности вероятности  $w(\mathbf{r})$ ,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) A(\mathbf{r}). \quad (13.20)$$

В чистом состоянии  $\psi(\mathbf{r})$  мы имеем  $w(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ .

### Задача 13.2

Найти соотношение между одночастичной матрицей плотности в импульсном и координатном представлениях и плотностью вероятности для импульсно-независимых операторов  $\hat{B}(\mathbf{p})$ .

**Решение** Используя преобразование (I.6.37), мы находим

$$\langle \mathbf{p} | \hat{\rho} | \mathbf{p}' \rangle \equiv \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \int d^3r d^3r' e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (13.21)$$

Обратное преобразование

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi\hbar)^6} e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}'). \quad (13.22)$$

Для импульсно-независимого оператора  $\hat{B}(\mathbf{p})$ ,

$$\langle \mathbf{p} | \hat{B}(\hat{\mathbf{p}}) | \mathbf{p}' \rangle = B(\mathbf{p})(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (13.23)$$

и ожидаемая величина равна

$$\langle \hat{B} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) B(\mathbf{p}), \quad (13.24)$$

т.е. плотность вероятности импульса равна

$$w(\mathbf{p}) = \rho(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \int d^3r d^3r' e^{(i/\hbar)\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} w(\mathbf{p}) = 1.$$

$$(13.25)$$

### Задача 13.3

Доказать, что в любом базисе матричные элементы  $\hat{\rho}$  удовлетворяют неравенству,

$$\rho_{kk}\rho_{ll} \geq |\rho_{kl}|^2, \quad (13.26)$$

т.е. все миноры матрицы плотности положительно определены.

**Решение** Доказательство, которой можно найти в справочниках по алгебре, проводится следующим образом. при  $k = l$  и 2, равенство очевидно. Возьмем  $k \neq l$  и размерность пространства  $\geq 3$ . Для любого эрмитова оператора  $\hat{Q}$  и любой матрицы плотности, среднее значение  $\langle \hat{Q}^2 \rangle > 0$  Следовательно,

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{Q}^2) = \sum_{ijn} \rho_{ij} Q_{jn} Q_{ni} = \sum_{ijn} \rho_{ij} Q_{jn} Q_{in}^* \geq 0. \quad (13.27)$$

Здесь  $\hat{Q}$  произвольна, и мы можем выбрать оператор, который имеет в качестве ненулевых матричных элементов только  $Q_{kn} = Q_{nk}^* \equiv x$  и  $Q_{ln} = Q_{nl}^* \equiv y$  для перехода от  $|k\rangle$  и  $|l\rangle$  к определенному состоянию  $|n\rangle$ , где  $n \neq k, l$ . Соберем все ненулевые вклады в сумме (13.27):

$$\rho_{kk}|x|^2 + \rho_{ll}|y|^2 + \rho_{kl}xy^* + \rho_{lk}x^*y + \rho_{nn}(|x|^2 + |y|^2) \geq 0. \quad (13.28)$$

Поскольку это должно удовлетворяться для любых  $x, y$  и  $\rho_{nn}$ , сумма первых четырех членов в (13.28) должна быть  $\geq 0$ , т.е. билинейная форма элементов  $\rho$  в  $kl$ -подпространстве неотрицательна, и ее детерминант  $\geq 0$ , в соответствии с (13.26).

Недиагональные элементы матрицы плотности относятся к явлению *интерференции*. Давайте повторять измерение величины  $\hat{A}$  в смешанном состоянии, описываемом матрицей плотности  $\rho_{kk'}$ . Каждое измерение порождает одно из собственных состояний  $|a\rangle$  этого оператора. В результате, мы получим распределение вероятностей  $w(a)$ , уравнение (13.8), поэтому конечная матрица плотности диагональна в базисе собственных функций  $\hat{A}$ ,

$$\hat{\rho}' = \sum_a w(a) |a\rangle \langle a|. \quad (13.29)$$

В терминах исходного базиса найденное распределение может быть записано как

$$w(a) = \langle a | \hat{\rho} | a \rangle = \sum_{kk'} \langle a | k \rangle \rho_{kk'} \langle k' | a \rangle, \quad (13.30)$$

которое содержит некогерентную сумму и интерференционные члены,

$$w(a) = \sum_k \rho_{kk} |\langle a | k \rangle|^2 + \sum_{kk' (k \neq k')} \rho_{kk'} \langle a | k \rangle \langle a | k' \rangle^*. \quad (13.31)$$

Исходные недиагональные элементы  $\rho_{kk'}$ ,  $k \neq k'$ , ответственны за потенциальную возможность когерентной интерференции различных компонент начального состояния. степень когерентности, или *контраст* интерференционного рисунка, можно вычислить с помощью спектральной величины

$$D_{kk'} = \frac{\rho_{kk'}}{\sqrt{\rho_{kk} \rho_{k'k'}}}. \quad (13.32)$$

В соответствии с результатом (13.26) *Задачи 23.3*,  $|D_{kk'}| \leq 1$ , и *максимальная когерентность*,  $D_{kk'} = 1$ , достигается для чистых состояний, как видно из (13.9).

### 13.3 Тепловое равновесие

Как показано в статистической механике, тепловое равновесие с термостатом при температуре  $T$  создает *каноническую* матрицу плотности системы, даваемую выражением

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/T}, \quad Z = \text{Tr} \left( e^{-\hat{H}/T} \right), \quad (13.33)$$

где  $\hat{H}$  – гамильтониан системы, контактирующей с обширным тепловым источником, а температура выражена в энергетических единицах. Очевидно, базис стрелки здесь совпадает с базисом стационарных состояний гамильтониана.

При тепловом равновесии описываемого ансамбля (13.33), вероятность заполнения определенного стационарного состояния  $|n\rangle$  зависит только от энергии  $E_n$ , безотносительно всех других характеристик этого ансамбля. Все микроскопические состояния в узком энергетическом окне могут быть подсчитаны с равными вероятностями. Это возможно только, если все эти состояния имеют практически идентичные макроскопические свойства.

Лежащий в основе механизм равновесия обеспечивается смешанными квантовыми состояниями в области высоких уровней плотности вследствие взаимодействия с термостатом (или между разными частями системы). Это перемешивание приводит к *квантовому хаосу*, наблюдаемому в флуктуациях и корреляциях, раздел 24.

*Статистическая сумма,*

$$Z(T) = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}), \quad \beta = \frac{1}{T}, \quad (13.34)$$

которая формально входит в качестве нормирующего множителя для матрицы плотности, играет важную двойственную роль. Во-первых, она перекрывает зазор между внутренней структурой системы, воплощенной в ее энергетическом спектре  $E_n$ , и макроскопическими наблюдаемыми термодинамическими величинами, выражаемыми для удобства в терминах *свободной энергии*,

$$F(T) = -T \ln Z, \quad \hat{\rho} = e^{\beta(F - \hat{H})}. \quad (13.35)$$

Система в термодинамическом равновесии не имеет определенной энергии; ее распределение дается  $\rho_n = (1/Z) \exp(-\beta E_n)$ ; усредненная энергия может быть найдена как

$$\langle E \rangle = \text{Tr}(\hat{H} \hat{\rho}) = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}. \quad (13.36)$$

С другой стороны, знание функции разделения (13.34) как функции температуры позволяет извлечь *плотность уровней* системы. В самом деле, статистическая сумма это *преобразование Лапласа* плотности уровня:

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left\{ \int dE e^{-\beta E} \delta(E - \hat{H}) \right\} = \int dE e^{-\beta E} \nu_{\text{level}}(E). \quad (13.37)$$

Плотность уровня, в свою очередь, можно найти обратным преобразованием Лапласа функции разделения, если последняя известна в широком диапазоне температур.

#### Задача 13.4

Найти среднюю энергию гармонического осциллятора при температуре  $T$ .



**Решение** С известным энергетическим спектром  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , мы суммируем геометрические ряды и находим

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{2}{\sinh(\beta\hbar\omega)}. \quad (13.38)$$

Средняя энергия дается выражением (13.36),

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) = \hbar\omega \coth \left( \frac{\hbar\omega}{2T} \right). \quad (13.39)$$

Это *распределение Планка*, которое служит первым зернышком квантовой механики, раздел I.1. Мы интерпретируем этот ответ как результат комбинирования *квантовых флуктуаций* (энергия нулевого уровня  $\hbar\omega/2$ ) с *тепловыми флуктуациями*, которые создаются при усреднении числа  $\langle n \rangle$  квантов теплового возбуждения,

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \langle n \rangle \right), \quad \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \quad (13.40)$$

Поскольку ожидаемые величины кинетической и потенциальной энергий гармонического осциллятора равны в каждом стационарном состоянии, этот аналог классического *равнораспределения* также справедлив для равновесного ансамбля. Следовательно, среднеквадратичное смещение от равновесного положения может быть найдено как

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{m\omega^2} \langle E \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \coth \left( \frac{\hbar\omega}{2T} \right). \quad (13.41)$$

### Задача 13.5

Найти матрицу плотности в координатном представлении,  $\rho(x, x')$ , для гармонического осциллятора при температуре  $T$ .

**Решение** Матрица плотности  $\rho(x, x')$  дается выражением

$$\langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \langle n | x' \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\beta E_n}. \quad (13.42)$$

Здесь сумма совпадает с пропагатором  $G(x, x'; t - t')$ , уравнение (I.3.37), продолжено в *комплексные времена*,

$$t - t' \Rightarrow -i\hbar\beta. \quad (13.43)$$

Пропагатор при вещественном времени для гармонического осциллятора был найден в (I.11.65). Подстановка (13.43) вместе с нормировкой (13.38) приводит к

$$\rho(x, x') = \sqrt{\frac{m\omega y}{\pi\hbar}} e^{-(m\omega/4\hbar)[(x+x')^2 y + (x-x')^2/y]}, \quad y = \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right). \quad (13.44)$$

Диагональные элементы матрицы плотности,  $x' = x$ , могут интерпретироваться как функция распределения  $w(x)$ , уравнение (13.20), координаты осциллятора, взаимодействующего с источником тепла,

$$w(x) = \rho(x, x) = \sqrt{\frac{m\omega y}{\pi\hbar}} e^{-(m\omega/\hbar)y x^2}, \quad \int dx w(x) = 1. \quad (13.45)$$

Это распределение Гаусса с дисперсией  $\langle x^2 \rangle$  найдено в (13.41). Отметим, что разность между классическим случаем, когда  $y = \tanh \alpha \rightarrow \alpha$ , постоянная Планка не входит в ответ, и мы получаем результат Больцмановской статистики,

$$w(x) \Rightarrow \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi T}} e^{-m\omega^2 x^2/2T}, \quad \alpha \equiv \frac{\hbar\omega}{2T} \ll 1, \quad (13.46)$$

и квантовым пределом  $\alpha \gg 1$ , when  $y \rightarrow 1$ , и мы восстанавливаем неопределённость координаты в основном состоянии осциллятора, уравнение (I.11.16),

$$P(x) = |\psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-m\omega x^2/\hbar}. \quad (13.47)$$

Равновесие канонического ансамбля (13.33) может быть обобщено для случаев, когда другие макроскопические величины, кроме энергии, даются их средними значениями, хотя их микроскопические значения флуктуируют вследствие взаимодействия с источником тепла. Чтобы зафиксировать наблюдаемые средние значения, вводят, подобно температуре, которая определяет среднюю энергию, аналогичные величины *интенсивности* (локальные, не увеличивающиеся пропорционально объёму или числу частиц). Мы используем *химический потенциал*  $\mu$ , когда полное число частиц  $N$  флуктуирует вокруг его среднего значения,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(\mu, T)} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}, \quad Z(\mu, T) = \text{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}\right), \quad (13.48)$$

где след берется по всем собственным состояниям с разным числом частиц. Если нам нужно зафиксировать угловой момент системы,  $\mathbf{J}$ , при усреднении мы вводим *угловую скорость*  $\vec{\Omega}$ ,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z(\vec{\Omega}, T)} e^{-\beta[\hat{H} - (\vec{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{J}})]}, \quad Z(\vec{\Omega}, T) = \text{Tr} \left( e^{-\beta[\hat{H} - (\vec{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{J}})]} \right); \quad (13.49)$$

в случае полного импульса  $\mathbf{P}$ , мы добавляем в экспоненте  $-(\mathbf{V} \cdot \mathbf{P})$ , где  $\mathbf{V}$  играет роль скорости системы как целого.

### 13.4 Поляризационная матрица плотности

Состояние спина системы часто дается в терминах матрицы плотности. Будучи либо сформированной, например, комбинацией магнитных полей, или полученной в результате химической или ядерной реакции, она может быть некогерентной смесью различных возможностей.

Рассмотрим систему, “частица со спином (ей полный угловой момент)  $j$ , который сформирован в состоянии, характеризуемом матрицей плотности  $\rho_{mm'}$ , где  $m$  и  $m'$  возможные проекции  $j_z$  на оси квантования. Для чистого состояния с фиксированной проекцией  $j_z = m_0$ , эта матрица плотности может быть

$$\rho_{mm'} = \delta_{mm_0} \delta_{m'm_0}. \quad (13.50)$$

В противном случае *неполяризованной* частицы все проекции равновероятны,

$$\rho_{mm'} = \frac{\delta_{mm'}}{2j+1}. \quad (13.51)$$

Соответственно, поляризация частицы задается в этих крайних случаях вектором

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \text{Tr} (\hat{\mathbf{j}} \hat{\rho}) = \begin{cases} \mathbf{e}_z m_0, & , \\ 0, & . \end{cases} \quad (13.52)$$

#### Задача 13.6

Определить матрицу плотности спина для частицы 2 со спином  $j_2$ , смешанной с ненаблюдаемой частицей 1 со спином  $j_1$  в состоянии  $|JM\rangle$

с фиксированными квантовыми числами полного углового момента и его проекции.

**Решение** Смешанная (связанная) волновая функция полной системы

$$|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (13.53)$$

По-определению (13.5) мы находим

$$\rho_{m_2 m'_2}^{(JM)} = \sum_{m_1} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{JM} C_{j_1 m_1 j_2 m'_2}^{JM} = \delta_{m_2 m'_2} (C_{j_1 M-m_2 j_2 m_2}^{JM})^2. \quad (13.54)$$

Матрица плотности диагональна вследствие сохранения проекции углового момента, но диагональные матричные элементы зависят от  $m_2$ . Только для  $J = M = 0$  матрица плотности неполяризована,

$$\rho_{m_1 m_2}^{(00)} = \frac{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}}{2j_2 + 1}. \quad (13.55)$$

Если мы интересуемся нахождением спина, ориентированного вдоль оси, которая не совпадает с исходной осью, использованной для определения матрицы плотности, то нам нужно сделать вращательную комбинацию этих осей. Если мы вращаем *обе* оси, исходная используется для подготовки системы, а другая ось для измерения или вторичного эксперимента, на один и тот же угол, результат не должен меняться. Следовательно, преобразование матрицы плотности,  $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}'$ , должно быть обратным по отношению к преобразованию операторов,  $\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1}$ ,

$$\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}') \equiv \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1}) = \text{Tr}(\hat{U}^{-1} \hat{\rho} \hat{U} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{\rho}' \hat{A}). \quad (13.56)$$

Мы использовали здесь циклическую инвариантность оператора следа, которая показывает, что переход  $|jm\rangle \rightarrow |jm'\rangle$  оператором под знаком следа сопровождается обратным переходом  $|jm'\rangle \rightarrow |jm\rangle$  для оператора  $\hat{\rho}$ .

Полный набор операторов, действующих в пространстве  $|jm\rangle$  охвачен тензорными операторами  $T_{\lambda\mu}$ , которые могут связывать отдельные состояния в этом пространстве. Такой набор ограничен правилами векторной связи, разделы 21 и 22,  $0 \leq \lambda \leq 2j$ , в то время как проекции  $m, m'$  и  $\mu$  должны удовлетворять обычному алгебраическому закону сохранения,  $m' + \mu = m$ . Следовательно, поляризационная матрица плотности всегда может быть представлена суперпозицией матричных элементов разрешенных

тензорных операторов,

$$\rho_{mm'} = \sum_{\lambda\mu} (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{\lambda\mu} T_{\lambda\mu}, \quad (13.57)$$

где коэффициенты Клебша-Гордана (ККГ) гарантируют правила корректного выбора (некоторые авторы используют в этом определении  $3j$ -символы). *поляризационные моменты*, или *спин-тензоры*,  $T_{\lambda\mu}$ , полностью характеризуют матрицу плотности. Фаза в (13.57) соответствует правилу обращения времени, обсуждавшемуся в разделе II.7.6, поскольку проекция  $m'$  уничтожена.

### Задача 13.7

Определить поляризационные моменты для неполяризованного состояния.

**Решение** В силу ортогональности ККГ, мы можем решить уравнение (13.57) для поляризационных моментов:

$$T_{\lambda\mu} = \sum_{mm'} (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{\lambda\mu} \rho_{mm'}. \quad (13.58)$$

Матрица плотности неполяризованного состояния дается уравнением (13.51), поэтому

$$T_{\lambda\mu} = \frac{1}{2j+1} \sum_m (-)^{j-m} C_{j-m \ jm}^{\lambda\mu}. \quad (13.59)$$

Как следует из Задачи I.22.5,

$$C_{j-m \ jm}^{00} = \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}. \quad (13.60)$$

снова используя свойство ортогональности, мы находим

$$T_{\lambda\mu} = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m C_{j-m \ jm}^{00} C_{j-m \ jm}^{\lambda\mu} = \frac{\delta_{\lambda 0} \delta_{\mu 0}}{\sqrt{2j+1}}, \quad (13.61)$$

только скалярный момент  $T_{00}$  описывает неполяризованное состояние.

Вообще говоря, поляризованное состояние объекта со спином  $j$  характеризуется либо  $(2j+1)^2$  элементами эрмитовой матрицы плотности  $[(2j+1)$  с вещественными диагональными элементами и  $(2j+1)2j$  параметрами, приходящими из совместного комплексного сопряжения недиагональных

элементов], или, эквивалентно,  $(2j + 1)^2$  спин-тензорами  $T_{\lambda\mu}$ , ограниченными правилами треугольника.

### Задача 13.8

Построить спин-тензоры для частицы со спином  $1/2$  и отнести их к наблюдаемым значениям компонент спина.

**Решение**  $(2s + 1)^2 = 4$  разрешенных спин-тензоров содержат скаляр,  $T_{00}$ , и три компоненты вектора  $T_{1\mu}$ . В соответствии с теоремой Вигнера-Эккарта, раздел I.12.7, векторная часть пропорциональна матричным элементам оператора углового момента, в этом случае спина  $\mathbf{s}$ , или матрицам Паули  $\vec{\sigma}$ . В самом деле, мы знаем, что  $1$  и  $\vec{\sigma}$  образует полный набор матриц  $2 \times 2$ . Разложение (13.57) принимает вид

$$\hat{\rho} = A + (\mathbf{B} \cdot \vec{\sigma}), \quad (13.62)$$

а коэффициенты находятся из Задачи I.20.5,

$$A = \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\rho} = \frac{1}{2}, \quad \mathbf{B} = \frac{1}{2} \text{tr}(\vec{\sigma} \hat{\rho}) = \frac{1}{2} \langle \vec{\sigma} \rangle. \quad (13.63)$$

В результате, общая матрица плотности спина  $1/2$  может быть записана как

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( 1 + (\langle \vec{\sigma} \rangle \cdot \vec{\sigma}) \right). \quad (13.64)$$

Скалярная часть  $A$  соответствует отсутствию поляризации, уравнение (13.61),

$$T_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (13.65)$$

в то время как векторная часть определяет *вектор поляризации* (8.86),

$$\mathbf{P} = \text{tr}(\hat{\rho} \vec{\sigma}) \equiv \langle \vec{\sigma} \rangle, \quad (13.66)$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( 1 + (\mathbf{P} \cdot \vec{\sigma}) \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (13.67)$$

Вектор поляризационного момента  $T_{1\mu}$  пропорционален ожидаемому значению соответствующей сферической компоненты ожидаемого значения спина,

$$T_{1\mu} = \alpha \langle \sigma_\mu \rangle = \alpha P_\mu. \quad (13.68)$$

Коэффициент  $\alpha$  может быть найден, например, из  $z$ -проекции,  $\mu = 0$ , поскольку мы знаем соответствующие ККГ из (I.22.20):

$$T_{10} = \alpha P_z = \sum_{m=\pm 1/2} C_{1/2-m \ 1/2m}^{10} (-)^{1/2-m} \frac{1}{2} (\sigma_z)_{mm} \langle \sigma_z \rangle \rightsquigarrow \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (13.69)$$

### Задача 13.9

Определить векторный спин-тензор  $T_{1\mu}$  для частицы с произвольным спином  $j$  в терминах ожидаемых значений компонент  $\mathbf{j}$ .

**Решение** Спин-тензор определяется как

$$T_{1\mu} = \sum_{mm'} (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{1\mu} \rho_{mm'}. \quad (13.70)$$

По теореме Вигнера-Эккарта, матричные элементы углового момента могут быть выражены через те же ККГ,

$$\langle m' | \hat{j}_\mu | m \rangle = (-)^{j-m'} C_{j-m' \ jm}^{1\mu} X_j, \quad (13.71)$$

где  $X_j$  относится к приведенному матричному элементу. Следовательно,

$$T_{1\mu} = \frac{1}{X_j} \sum_{mm'} (j_\mu)_{m'm'} \rho_{mm'} = \frac{1}{X_j} \langle \hat{j}_\mu \rangle. \quad (13.72)$$

Остается определить коэффициент  $X_j$ . Это может быть сделано вычислением  $\langle \hat{\mathbf{j}}^2 \rangle = j(j+1)$ . Используя (13.71) и ортонормированность ККГ, мы получим

$$X_j^2 = \frac{1}{3} j(j+1)(2j+1), \quad (13.73)$$

и наконец,

$$T_{1\mu} = \sqrt{\frac{3}{j(j+1)(2j+1)}} \langle \hat{j}_\mu \rangle. \quad (13.74)$$

Для спина  $1/2$  этот результат совпадает с (13.69), если вспомнить, что  $\mathbf{s} = (1/2)\vec{\sigma}$ .

### 13.5 Применение к рассеянию

На практике, состояние пучка частиц *смешанное*, а не чистое. Формализм матрицы плотности полезен для описания как начального состояния, так и продуктов взаимодействия. Мы обсуждали рассеяние частично поляризованного пучка частиц со спином  $1/2$  в разделе 8.10. Здесь мы опишем вкратце более общий подход.

Рассмотрим процесс рассеяния с сечением, определенным квадратом амплитуды  $f$ . Вообще говоря, амплитуда является оператором (зависящим от углов рассеяния), который преобразует начальные внутренние переменные, включая спиновые, к их конечным значениям. Пусть начальное состояние описывается матрицей плотности (например, по отношению к спиновым переменным)  $\rho_{kk'}$ . Каждое чистое начальное состояние будет преобразовываться оператором рассеяния в суперпозицию конечных состояний. Начальная амплитуда  $C_k$  чистого состояния  $|k\rangle$  дает рост суперпозиции конечных состояний  $|m\rangle$ , и амплитуда вероятности нахождения в состоянии  $|m\rangle$  дается матричным элементом оператора рассеяния,  $C'_m = \sum_k f_{mk} C_k$ .

Пройдя по всем чистым состояниям к ансамблю экспериментов с неполной информацией, мы получим преобразование матрицы плотности (черта сверху означает усреднение по ансамблю):

$$\rho'_{mm'} = \overline{C'_m C'^{*'}_{m'}} = \overline{\sum_k f_{mk} C_k \left( \sum_{k'} f_{m'k'} C_{k'} \right)^*} = \sum_{kk'} f_{mk} \rho_{kk'} f_{m'k'}^* = (\hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger)_{mm'}, \quad (13.75)$$

или, в операторной форме,

$$\hat{\rho}' = \hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger. \quad (13.76)$$

Дифференциальное сечение процесса с регистрацией всех внутренних состояний дается выражением (сравни с разделом 8.10)

$$\frac{d\sigma}{do} = \sum_m |C'_m|^2 = \text{Tr } \hat{\rho}' = \text{Tr}(\hat{f} \hat{\rho} \hat{f}^\dagger). \quad (13.77)$$

Здесь мы предполагаем, что начальная матрица плотности нормирована как в уравнениях (13.7) и (13.15). Для неполяризованных частиц спина  $s$ , начальная матрица плотности (13.51) определяет

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{1}{2s+1} \text{Tr}(\hat{f} \hat{f}^\dagger), \quad (13.78)$$



т.е. простое усреднение по состояниям спина.

среднее значение  $Q' \equiv \langle Q \rangle'$  любого наблюдаемого  $\hat{Q}$  после процесса рассеяния вычисляется с помощью конечной матрицы плотности (13.76). Поскольку  $\hat{f}$  не является унитарным оператором,  $\hat{\rho}'$  нормализован к дифференциальному сечению (13.77). Следовательно, наблюдаемые значения выражаются как

$$Q' = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}\hat{\rho}')}{d\sigma/d\Omega} = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}{d\sigma/d\Omega}. \quad (13.79)$$

В частности, поляризация  $\mathbf{P}'$  рассеянных частиц определяется как

$$\mathbf{P}' = \frac{\text{Tr}(\hat{\mathbf{s}}\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{f}\hat{\rho}\hat{f}^\dagger)}. \quad (13.80)$$

### Задача 13.10

Частица со спином  $s$  рассеивается на ядре со спином  $J$ . Предполагая, что исходная мишень не поляризована, в то время как исходный пучок поляризован  $\mathbf{P}$  (и нет высших поляризационных моментов), выразить дифференциальное сечение и конечную поляризацию частиц в упругом рассеянии, управляемом амплитудой  $\hat{F}(\theta)$ .

**Решение** Начальная матрица плотности  $\rho^{(p)}$  налетающего пучка содержит только  $T_{00}$  и  $T_{1\mu}$  моменты спина,

$$T_{00} = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} \quad (13.81)$$

(нормируем) и, см. уравнение (13.74),

$$\mathbf{T} = \sqrt{\frac{3}{s(s+1)(2s+1)}} \mathbf{P}. \quad (13.82)$$

Это определяет начальную матрицу плотности (13.57),

$$\rho_{mm'}^{(p)} = \frac{\delta_{mm'}}{2s+1} + \sqrt{\frac{3}{s(s+1)(2s+1)}} \sum_{\mu} (-)^{s-m'} C_{s-m' \, sm}^{1\mu} P_{\mu}, \quad (13.83)$$

или, в силу (13.71) и (13.73),

$$\rho_{mm'}^{(p)} = \frac{1}{2s+1} \left\{ \delta_{mm'} + \frac{3}{s(s+1)} (\mathbf{s}_{mm'} \cdot \mathbf{P}) \right\}. \quad (13.84)$$

Это выражение не предполагает какой-либо особой геометрии; вектор поляризации имеет произвольное направление, безотносительно к оси квантования. Для спина  $1/2$  мы приходим к результату (13.64), использованному в разделе 8.10,

$$\rho_{mm'}^{(s=1/2)} = \frac{1}{2} \delta_{mm'} + (\vec{\sigma}_{mm'} \cdot \mathbf{P}), \quad (13.85)$$

в то время как высшие компоненты матрицы плотности не существуют.

Принимая во внимание также неполяризованную матрицу плотности мишени,

$$\rho_{MM'}^{(t)} = \frac{\delta_{MM'}}{2J+1}, \quad (13.86)$$

и вводя оператор рассеяния  $\hat{F}$ , который в отличие от  $\hat{f}$ , действует также на переменные мишени, мы получим дифференциальное сечение, усредненное по состояниям мишени,

$$\frac{d\sigma}{do} = \text{Tr}(\hat{F} \hat{\rho} \hat{F}^\dagger) = \frac{1}{(2s+1)(2J+1)} \left\{ \text{Tr}(\hat{F} \hat{F}^\dagger) + \frac{3}{s(s+1)} \left( \text{Tr}(\hat{F} \hat{\mathbf{s}} \hat{F}^\dagger) \cdot \mathbf{P} \right) \right\}. \quad (13.87)$$

В терминах неполяризованного сечения,

$$\left( \frac{d\sigma}{do} \right)_0 = \frac{1}{(2s+1)(2J+1)} \text{Tr}(\hat{F} \hat{F}^\dagger), \quad (13.88)$$

мы получим

$$\frac{d\sigma}{do} = \left( \frac{d\sigma}{do} \right)_0 \left\{ 1 + \frac{3}{s(s+1)} \mathbf{P} \cdot \frac{\text{Tr}(\hat{F} \hat{\mathbf{s}} \hat{F}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{F} \hat{F}^\dagger)} \right\}. \quad (13.89)$$

Для конечной поляризации находим,

$$P'_i = \frac{\text{Tr}(\hat{s}_i \hat{F} \hat{F}^\dagger) + [3/(s(s+1))] \mathbf{P} \cdot \text{Tr}(\hat{s}_i \hat{F} \hat{F}^\dagger)}{\text{Tr}(\hat{F} \hat{F}^\dagger) + [3/(s(s+1))] \mathbf{P} \cdot \text{Tr}(\hat{F} \hat{\mathbf{s}} \hat{F}^\dagger)}. \quad (13.90)$$

Поляризация исходно неполяризованного пучка может быть использована для вторичного рассеяния и приводит к азимутальной симметрии вторично рассеянных частиц по отношению к их волновому вектору  $\mathbf{k}'$ , полученному после первичного рассеяния.

### 13.6 Энтропия ансамбля

Квантовый ансамбль, определенный матрицей плотности  $\hat{\rho}$  может характеризоваться *энтропией ансамбля*

$$S[\rho] = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (13.91)$$

В противоположность к информационной энтропии, раздел 24.5, энтропия (13.91) дается следом, т.е. она инвариантна при унитарных преобразованиях базиса. В собственном базисе (13.17) мы можем вычислить энтропию как

$$S = -\sum_p \rho_p \ln \rho_p. \quad (13.92)$$

Это показывает, что энтропия чистого состояния,  $\rho_p = \delta_{pp_0}$ , равна нулю. Любое смешанное состояние имеет большую энтропию — это несет *меньшую информацию*.

Определение энтропии может быть применено к тепловому равновесию ансамбля. Взяв производную по свободной энергии (13.35), мы находим

$$\langle E \rangle = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} = -T \frac{\partial F}{\partial T} + F \equiv F + TS, \quad (13.93)$$

где *термодинамическая энтропия* определяется как

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \quad (13.94)$$

с явным видом (13.33) канонической матрицы плотности, мы непосредственно видим, что термодинамическая энтропия (13.94) совпадает с общим выражением для энтропии ансамбля (13.92),

$$S = -\sum_n \rho_n \ln \rho_n, \quad \rho_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n/T}. \quad (13.95)$$

#### Задача 13.11

Найти энтропию ансамбля со спином 1/2, определенную вектором поляризации  $\mathbf{P}$ .

**Решение** Собственные значения поляризационной матрицы плотности (13.64),

$$\rho_{\pm} = \frac{1 \pm P}{2}, \quad P = |\mathbf{P}|, \quad (13.96)$$

имеют простое значение вероятностей нахождения частицы со спинами вверх или вниз относительно направлению поляризации  $\mathbf{P}$ . Для энтропии ансамбля мы находим

$$S = -\frac{1+P}{2} \ln \frac{1+P}{2} - \frac{1-P}{2} \ln \frac{1-P}{2}. \quad (13.97)$$

Чистое состояние характеризуется волновой функцией; тогда поляризация  $\mathbf{P}$  является единичным вектором,  $P = 1$ , и энтропия исчезает.

### Задача 13.12

*Энтропия смешивания*, Рис. 23.1. Два равных объема  $V$  наполнены газом из  $N$  тождественных частиц со спином  $1/2$  в каждом объеме; Температура и давление одинаковы в обеих частях. Частицы в двух частях находятся в чистых состояниях  $\psi_1$  и  $\psi_2$  (вообще говоря, не ортогональных). Найти энтропию равновесного состояния после того, как перегородка между объемами была убрана, и газы перемешались из-за диффузии.

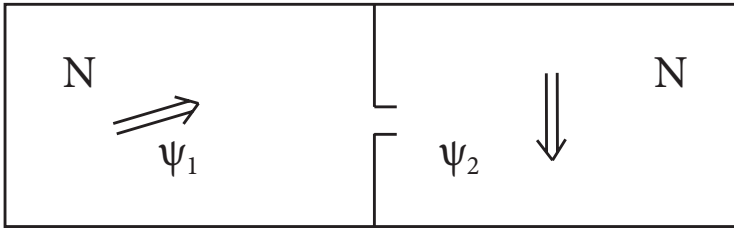


Рис. 13.1. Начальное состояние двух газов в *Задаче 13.12*.

**Решение** Любое состояние частицы со спином  $1/2$  поляризовано, поэтому начальная поляризация газов была задана единичными векторами  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$ . Вначале части системы описываются матрицей плотности (??),

$$\hat{\rho}_{1,2} = \frac{1 + (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{1,2})}{2}. \quad (13.98)$$

Конечная поляризация равна

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2} (\mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2). \quad (13.99)$$

Это состояние характеризуется матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \frac{1 + (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{P})}{2} = \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2}. \quad (13.100)$$

Энтропия чистого состояния равна нулю, а изменение энтропии равно ее конечному значению

$$S = -2N \operatorname{Tr} \left\{ \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2} \ln \frac{\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2}{2} \right\}. \quad (13.101)$$

Результат может быть без труда представлен в терминах перекрытия исходных волновых функций (I.20.35). он равен

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} [1 + (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)] = \frac{1 + \cos \gamma}{2} = \cos^2(\gamma/2), \quad (13.102)$$

где  $\gamma$  – угол между направлениями поляризаций:

$$P^2 = \cos^2 \left( \frac{\gamma}{2} \right) = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2). \quad (13.103)$$

тогда уравнение (13.101) показывает, что энтропия растет после перемешивания на величину

$$S = -2N \left\{ \frac{1 + \cos(\gamma/2)}{2} \ln \frac{1 + \cos(\gamma/2)}{2} + \frac{1 - \cos(\gamma/2)}{2} \ln \frac{1 - \cos(\gamma/2)}{2} \right\}. \quad (13.104)$$

Для ортогональных спиновых состояний,  $\gamma = \pi$ ,  $\cos(\gamma/2) = 0$ , и

$$S = 2N \ln 2, \quad (13.105)$$

в то время как для идентичных поляризаций,  $\gamma = 0$ ,

$$S = 0. \quad (13.106)$$

Для классических газов, мы имеем только эти два крайних результата, приводящих к *парадоксу Гиббса*: Нарушение непрерывности энтропии смешивания, когда мы идем от *разных* газов, и соответствующая энтропия прыгает на  $\ln 2$  на частицу, как результат удвоения доступного объема, к *идентичным* газам без изменения энтропии. В квантовом случае мы не можем изменить дискретности квантовых чисел, таких как заряды, которые различают типы частиц. Но мы можем непрерывно изменять направление поляризации, и таким путем рассматривать все гильбертово пространство. Это восстанавливает непрерывность, и энтропия перемешивания может принимать любое промежуточное (всегда неотрицательное) значение. Такое же заключение справедливо для любой пары начальных волновых функций  $\psi_1, \psi_2$ , которые отличаются непрерывным изменением внутреннего параметра [?].

### 13.7 Эволюция матрицы плотности

Эволюция во времени чистого состояния управляется гамильтонианом системы через уравнение Шрёдингера. Динамика смешанных состояний должна описываться в терминах матрицы плотности. Уравнение движения для матрицы плотности замкнутой системы также определяется ее гамильтонианом  $\hat{H}$ .

Используя полный ортонормированный набор  $|k\rangle$  не зависящих от времени состояний замкнутой системы мы представим любое чистое состояние (13.1) как суперпозицию

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t)|k\rangle. \quad (13.107)$$

Здесь, в противоположность Главе 1, состояния  $|k\rangle$ , вообще говоря, не являются собственными состояниями энергии. состояние (13.107) развивается во времени в соответствии с

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = i\hbar \sum_k \dot{C}_k |k\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle = \sum_{kl} C_k H_{lk} |l\rangle. \quad (13.108)$$

Это эквивалентно системе уравнений для амплитуд  $C_k$  и их комплексно-сопряженных,

$$i\hbar \dot{C}_l = \sum_k C_k H_{lk}, \quad -i\hbar \dot{C}_n^* = \sum_k C_k^* H_{nk}^*. \quad (13.109)$$

Откуда, матрица плотности системы,

$$\rho_{ln} = C_l C_n^*, \quad (13.110)$$

должна быть решением уравнения

$$i\hbar \dot{\rho}_{ln} = \sum_k (H_{lk} \rho_{kn} - \rho_{lk} H_{nk}^*). \quad (13.111)$$

Вследствие эрмитовости гамильтониана,  $H_{nk}^* = H_{kn}$ , уравнение (13.111) может быть написано в операторной форме,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (13.112)$$

(уравнение фон Неймана, как квантовый аналог уравнения Лиувилля в классической механике).

С гамильтонианом не зависящим от времени формальное решение уравнения (13.112) есть

$$\hat{\rho}(t) = e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}\hat{\rho}(0)e^{(i/\hbar)\hat{H}t}. \quad (13.113)$$

Уравнения (13.112) и (13.113) отличаются знаком времени от соответствующих выражений в картине Гейзенберга, раздел I.7.5. Но это должно быть так, потому что только таким образом различные картины эквивалентны [сравни схожие аргументы, относящиеся к вращению, уравнение (13.56)]. В самом деле, ожидаемое значение не зависящего от времени оператора  $\hat{A}$  с матрицей плотности эволюционирующей согласно уравнению (13.112) дается выражением

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \text{Tr} \left( \hat{A} \hat{\rho}(t) \right) = \text{Tr} \left( \hat{A} e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{\rho}(0) e^{(i/\hbar)\hat{H}t} \right). \quad (13.114)$$

Используя циклическую инвариантность следа, мы видим, что уравнение (13.114) совпадает с тем, что мы ожидали для *зависящего от времени* оператора Гейзенберга  $\hat{A}(t)$  и *стационарной* матрицы плотности,

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \text{Tr} \left( e^{(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{A} e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} \hat{\rho}(0) \right) = \text{Tr} \left( \hat{A}(t) \hat{\rho}(0) \right). \quad (13.115)$$

Матрица плотности становится *стационарной*, уравнение (13.112), если она коммутирует с полным гамильтонианом. Тогда она может быть диагонализирована одновременно с гамильтонианом, и базис уравнений (13.16-13.17), совпадает с базисом стационарных состояний. Стационарная матрица плотности является функцией констант движения, прежде всего, энергии. Это то, что мы должны видеть в описании теплового равновесия, раздел 13.3. Будучи смещена от равновесия возмущением, система будет подвергнута *релаксации* к равновесию. Сигнатура релаксации дается недиагональными матричными элементами матрицы плотности в представлении энергии, они должны уменьшаться до нуля. Небольшая часть макроскопической системы может быть (приблизительно, но с высокой степенью точности) рассмотрена в рамках той же эволюции как результат усреднения по многим актам слабого взаимодействия с окружением. Это является стандартной чертой развития в статистической физике равновесных систем.

### 13.8 Ещё о линейном отклике

В терминах матрицы плотности можно описать отклик квантово-механической системы на возмущение, зависящее от времени. Это может быть, в частности, слабое взаимодействие с окружением. Этот пример иллюстрирует, как

теория возмущений может формулироваться на языке матрицы плотности. Мы уже имели дело с теорией линейного отклика в разделах 6.2-6.5.

Пусть возмущение, зависящее от времени  $\hat{H}'(t)$  действует на систему, описываемую стационарной матрицей плотности  $\hat{\rho}^\circ$ . Эволюционное уравнение (13.112)

$$i\hbar\dot{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] + [\hat{H}'(t), \hat{\rho}]. \quad (13.116)$$

Равновесная матрица плотности  $\hat{\rho}^\circ$  удовлетворяет уравнению

$$[\hat{H}, \hat{\rho}^\circ] = 0. \quad (13.117)$$

Для достаточно слабого возмущения, мы можем искать решение для матрицы плотности как слабо-неравновесную часть, наложенную на стационарное решение,

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}^\circ + \hat{\rho}'(t), \quad (13.118)$$

где мы предполагаем, что зависящая от времени часть пропорциональна возмущению (*линейное приближение*). Эта аппроксимация справедлива, если система *стабильна*, и слабое возмущение не приводит к изменению ее структуры. Часть линейного отклика,  $\hat{\rho}'(t)$ , удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\dot{\rho}' = [\hat{H}, \hat{\rho}'] + [\hat{H}'(t), \hat{\rho}^\circ], \quad (13.119)$$

где мы пренебрегли членом второго порядка  $[\hat{H}'(t), \hat{\rho}'(t)]$ .

### Задача 13.13

Показать, что операторное решение уравнения (13.112) для возмущения, которое началось в отдаленном прошлом,  $t \rightarrow -\infty$ , может быть записано как

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)} [\hat{H}'(t'), \hat{\rho}^\circ] e^{-(i/\hbar)\hat{H}(t'-t)}. \quad (13.120)$$

**Решение** Проверяем прямым дифференцированием. Первый член (13.116) исключен использованием картины Гейзенберга по отношению к невозмущенному гамильтониану  $\hat{H}$ , eq. (13.113).

Коммутатор  $[\hat{H}'(t'), \hat{\rho}^\circ]$  может быть сведен к коммутатору с невозмущенным гамильтонианом для случая теплового равновесия, когда матрица



плотности  $\hat{\rho}^\circ$  имеет канонический экспоненциальный вид (13.33). В самом деле, для любого оператора  $\hat{A}$ , предполагая, что

$$[\hat{A}, e^{-\beta\hat{H}}] = e^{-\beta\hat{H}} \hat{X}(\beta), \quad (13.121)$$

поэтому  $\hat{X}(0) = 0$ , мы придем к производной

$$\frac{d\hat{X}}{d\beta} = e^{\beta\hat{H}} [\hat{H}, \hat{A}] e^{-\beta\hat{H}}. \quad (13.122)$$

Беря теперь интеграл  $\int_0^\beta$  по частям, мы находим  $X(\beta)$  и

$$[\hat{A}, e^{-\beta\hat{H}}] = e^{-\beta\hat{H}} \int_0^\beta d\beta' e^{\beta'\hat{H}} [\hat{H}, \hat{A}] e^{-\beta'\hat{H}}. \quad (13.123)$$

Мы будем использовать это тождество для вывода **формулы Кубо**. Поскольку все функции  $\hat{H}$  коммутируют, решение (13.120) можно записать теперь как

$$\hat{\rho}'(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{\rho}^\circ \int_{-\infty}^t dt' \int_0^\beta d\beta' e^{[(i/\hbar)(t'-t)+\beta']\hat{H}} [\hat{H}, \hat{H}'(t')] e^{-[(i/\hbar)(t'-t)+\beta']\hat{H}}. \quad (13.124)$$

## 13.9 Электропроводность

Мы применим разработанный формализм к системе с подвижными электронами в однородном, достаточно слабом электрическом поле  $\vec{\mathcal{E}}$ , когда возмущение имеет вид

$$\hat{H}'(t) = -\sum_a e_a (\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}_a) = -\int d^3r (\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \mathbf{r}) \sum_a e_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a). \quad (13.125)$$

При тепловом равновесии (матрица плотности  $\hat{\rho}^\circ$ ), электрические токи отсутствуют, но они появляются в присутствии электрического поля, которое может быть либо внешнего происхождения, либо результатом тепловых флуктуаций. В линейном приближении, появившийся ток  $\mathbf{j}$  пропорционален полю, как это выражено *законом Ома*

$$j_i(t) = \int_{-\infty}^t dt' \sigma_{ik}(t-t') \mathcal{E}_k(t'). \quad (13.126)$$

Отклик является *причинным*, раздел 6, ток реагирует только на поле, действовавшее в более ранние моменты. Пропорциональность реализуется с помощью *тензора проводимости*  $\sigma_{ik}(\tau)$ , который зависит от времени задержки  $\tau$  между возмущением и откликом. В кристаллах отклик часто *анизотропен*, поэтому нам нужен тензор, а не скалярная константа.

Запаздывающая временная зависимость определяет *частотную дисперсию* отклика. Вводя  $\tau = t - t'$ , мы перепишем (13.126) как

$$j_i(t) = \int_0^\infty d\tau \sigma_{ik}(\tau) \mathcal{E}_k(t - \tau). \quad (13.127)$$

Эта свертка может быть записана как прямая пропорциональность между Фурье-компонентами тока и полем,

$$j_{i;\omega} = \int_0^\infty d\tau \sigma_{ik}(\tau) e^{i\omega\tau} \mathcal{E}_{k;\omega} \equiv \sigma_{ik;\omega} \mathcal{E}_{k;\omega}. \quad (13.128)$$

В более общей ситуации, нужен также *нелокальный в пространстве* отклик, когда поле в одной точке наводит ток в других местах, поэтому  $\sigma$  зависит от координат (*пространственная дисперсия*) или, в Фурье-представлении, от волнового вектора, который мы не рассматриваем здесь.

Ожидаемое значение тока исчезает в равновесии,

$$\text{Tr}(\hat{\mathbf{j}}\hat{\rho}^0) = 0, \quad (13.129)$$

и только возмущение  $\hat{\rho}'$  матрицы плотности дает вклад в ожидаемое значение тока,

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}' \right\}. \quad (13.130)$$

Оператор  $\hat{\rho}'$  должен быть найден из (13.124) для возмущения (13.125). Коммутатор  $[\hat{H}', \hat{H}]$  для  $\hat{H}'$  как функция координат, определяется только кинетической энергией,

$$[\hat{H}, \hat{H}'(t)] = [\hat{K}, \hat{H}'(t)] = - \int d^3r (\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \mathbf{r}) \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a^2, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]. \quad (13.131)$$

Коммутатор под интегралом приводит к

$$\sum_a \frac{e_a}{2m_a} \left[ \hat{\mathbf{p}}_a, (-i\hbar \nabla_a) \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) \right]_+ = i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]_+. \quad (13.132)$$

Сумма в (13.132) является локальным оператором плотности электрического тока, который отличается от вероятностного тока (1.7.50) присутствием электрических зарядов  $e_a$ ,

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \sum_a \frac{e_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a, \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a)]_+. \quad (13.133)$$

Окончательно, интегрируя по частям, мы переносим градиент вектору  $\mathbf{r}$  и получаем

$$[\hat{H}, \hat{H}'(t)] = i\hbar \int d^3r \left( \vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right). \quad (13.134)$$

Это выражение имеет ясное значение мощности, выделяемой электрическим полем, которое производит работу над движущимися частицами в объеме системы.

Таким образом, мы вычисляем возмущение (13.124) матрицы плотности слабым электрическим полем,

$$\hat{\rho}'(t) = \hat{\rho}^\circ \int_{-\infty}^t dt' \int_0^\beta d\beta' e^{[(i/\hbar)(t-t')+\beta']\hat{H}} \int d^3r \left( \vec{\mathcal{E}}(t') \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right) e^{-[\beta' + (i/\hbar)(t'-t)]\hat{H}}. \quad (13.135)$$

Собирая все результаты в (13.127), мы приходим к тензору проводимости (13.126),

$$\sigma_{ik}(\tau) = \int_0^\beta d\beta' \left\langle \hat{j}_i e^{[(i/\hbar)\tau + \beta']\hat{H}} \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}) e^{[-(i/\hbar)\tau - \beta']\hat{H}} \right\rangle. \quad (13.136)$$

Здесь усреднение означает след с невозмущенной матрицей плотности  $\hat{\rho}^\circ$ .

Результат включает оператор тока, взятый в картине Гейзенберга в *комплексное время*,

$$e^{[(i/\hbar)\tau + \beta]\hat{H}} \hat{j}_k e^{[(i/\hbar)\tau + \beta]\hat{H}} \equiv j_k(\tau - i\hbar\beta). \quad (13.137)$$

Окончательная формула Кубо теперь может быть написана как корреляционная функция двух операторов тока,

$$\sigma_{ik}(\tau) = \int_0^\beta d\beta' \left\langle \hat{j}_i(0) \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}, \tau - i\hbar\beta') \right\rangle, \quad (13.138)$$

где первый оператор тока берется в произвольной точке, например, в начале координат (система предполагается пространственно однородной).

Формула Кубо упрощается при высокой температуре,  $\beta \rightarrow 0$ . Характерная разность времен  $\tau$ , отвечающая существенной амплитуде отклика является временем корреляции  $\tau_r$ ; токи, разделенные временным интервалом  $\Delta t \geq \tau_r$ , не коррелируют, и ожидаемое значение их корреляции исчезает. Физически это может быть время между столкновениями частиц. При высокой температуре,  $\hbar\beta = \hbar/T$  оно становится много меньше, чем  $\tau_r$ . Отбрасывая  $\beta'$  в экспоненте, интеграл дает  $\beta = 1/T$ , и результат

$$\sigma_{ik}(\tau) = \frac{1}{T} \left\langle \hat{j}_i(0) \int d^3r \hat{j}_k(\mathbf{r}, \tau) \right\rangle. \quad (13.139)$$

Формула Кубо (13.138, 13.139) является типичным примером вывода кинетических коэффициентов для слабых отклонений от статистического равновесия. В левой части, тензор проводимости, относится к сопротивлению и омическим потерям в среде. Правая часть это корреляционная функция токов, относящаяся к флуктуациям, которые распадаются, когда система релаксирует к равновесию. Таким образом, мы имеем здесь конкретную форму *флуктуационно-диссипативной теоремы* [1]. Флуктуационные и диссипативные явления должны быть отнесены к равновесию, поскольку любая флуктуация, безотносительно, внешнего (наведенного внешним полем) или внутреннего происхождения должна распадаться (с диссипацией энергии) таким образом, чтобы гарантировать реальность термодинамического равновесия.

Наука — это попытка привести хаотическое многообразие нашего чувственного опыта в соответствие с логически последовательной системой мышления.

А. Эйнштейн, *Физика и реальность*

## Глава 14

### Квантовый хаос

#### 14.1 Классический и квантовый хаос

. С недавних пор стало известно, что проявление хаотической динамики в классических системах является скорее правилом, чем исключением [14]. Хаос возникает из-за высокой чувствительности детерминистических уравнений движения к малым вариациям начальных условий. Решения стабильны лишь в простейших случаях — таких, как гармонический осциллятор или задача Кеплера. Неизбежные возмущения могут изменить характер движения от регулярного к хаотическому.

*Интегрируемое* движение в системах с  $n$  степенями свободы характеризуется существованием  $n$  *интегралов движения*  $F_i$ , являющихся однозначными функциями переменных (координат  $\{q_a\}$  и импульсов  $\{p_a\}$ ,  $a = 1, \dots, n$ ) в *инволюции*. Последнее означает, что они сохраняются одновременно, т.е. для них скобки Пуассона (I.7.93) обращаются в нуль:  $\{F_i, F_j\} = 0$ . Это дает возможность [15] перейти с помощью канонического преобразования к переменным *действие-углы*, к  $n$  парам сохраняющихся импульсов  $I_i$  и сопряженных им циклических координат (углов)  $\vartheta_i$  таких, что преобразованный гамильтониан оказывается от этих углов независимым:  $H = H(I)$ . Уравнения движения Гамильтона (7.91) в этих новых переменных приобретают вид:

$$\dot{I}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vartheta_i} = 0, \quad \dot{\vartheta}_i = \frac{\partial H}{\partial I_i} \equiv \omega_i(I). \quad (14.1)$$

Движение для каждой из разделяющихся переменных в конечной системе оказывается периодическим, и последнее уравнение определяет соответствующие частоты:

$$\vartheta_i(t) = \vartheta_i(0) + \omega_i t. \quad (14.2)$$

При несоизмеримом (иррациональном) отношении частот движение *квазипериодично*. Для траекторий со слегка различающимися частотами накапливающаяся разница фаз (14.2) растет во времени линейно.

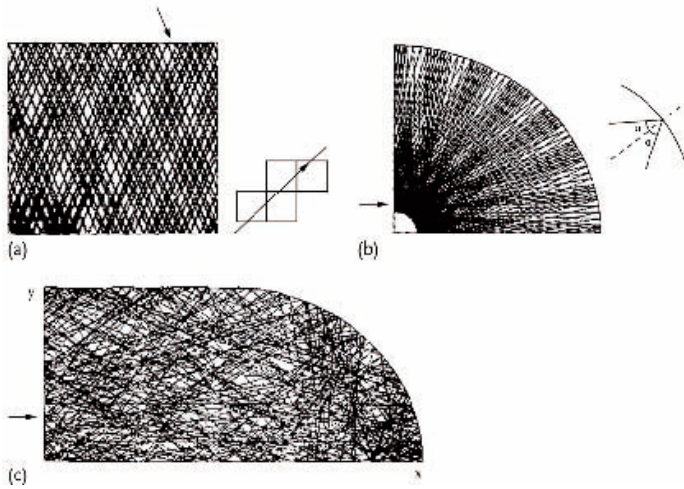


Рис. 14.1. Регулярное движение в прямоугольном (a) и круглом (b) бильярдах, и хаотическое движение (300 отражений) в бильярде-стадионе (c) (Предоставлено С. Lewenkopf'ом).

Обычно существование интегралов движения связано с наличием симметрии в системе. Если симметрии разрушены, система становится неинтегрируемой, и единственной характеристикой траектории остаются ее начальные условия. Однако из-за высокой чувствительности к малым изменениям начальных условий близкие в фазовом пространстве траектории расходятся со временем экспоненциально — расстояние между ними растет как  $\sim \exp(\Lambda t)$ , где  $\Lambda$  — так называемый *показатель Ляпунова*. В этой ситуации даже небольшие ошибки округления в определении начальных условий приводят спустя некоторое время к совершенно различным траекториям. Несмотря на полное знание описывающих движение простых динамических законов предсказуемость движения оказывается утраченной. В прямоугольном бильярде Рис.14.1a с зеркальным отражением от стенок

импульс сохраняется по абсолютной величине; добавление со всех сторон идентичных копий бильярда позволяет “распутать” траекторию так, что она превращается в прямую линию. В круглом бильярде, 14.1*b*, сохраняется угловой момент. В случае же бильярда в форме стадиона (*c*) граничные условия несовместимы с сохранением и линейного, и углового импульса. В результате одиночная траектория покрывает все *фазовое пространство* и в пределе больших времен остается возможным лишь статистическое описание.

Точного аналога подобного классического хаоса в квантовой механике нет, поскольку само квантовое описание является вероятностным изначально. Задание с произвольной точностью начальных условий в фазовом пространстве также невозможно из-за соотношения неопределенностей. Волновой пакет, отвечающий начальной волновой функции, подвержен квантовому расплыванию, которое спустя некоторое время  $t$  скроет классическое разбегание траекторий. Это объясняет причину, по которой многие авторы предпочитают говорить лишь о *квантовых проявлениях классического хаоса* [16], т.е. об особенностях поведения квантовых систем, отражающих наличие хаоса в динамике их классических аналогов.

Можно показать, что динамика, порождаемая уравнением Шредингера для замкнутой системы с не зависящим от времени гамильтонианом  $\hat{H}$  интегрируема, по крайней мере в области дискретного спектра, в частности — для частицы в бильярде, независимо от формы его границ. Амплитуды  $C_k(t)$  волновой функции  $|\Psi(t)\rangle = \sum_k C_k(t)|k\rangle$  в произвольном полном ортонормированном базисе состояний  $|k\rangle$  удовлетворяют системе связанных линейных уравнений

$$i\hbar\dot{C}_k = \sum_l H_{kl}C_l. \quad (14.3)$$

Амплитуды  $C_k$  и матричные элементы  $H_{kl}$  в общем случае комплексны, и в них можно выделить действительную и мнимую часть

$$C_k = Q_k + iP_k, \quad H_{kl} = H'_{kl} + iH''_{kl}, \quad (14.4)$$

где  $Q_k$ ,  $P_k$ ,  $H'_{kl}$  and  $H''_{kl}$  действительны, причем для эрмитового гамильтониана

$$H'_{kl} = H'_{lk}, \quad H''_{kl} = -H''_{lk}. \quad (14.5)$$

В результате шредингеровская динамика (14.3) приобретает классическую гамильтонову форму

$$\dot{Q}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_k}, \quad \dot{P}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_k}, \quad (14.6)$$

где эффективный классический гамильтониан

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\hbar} \sum_{kl} \left[ H'_{kl}(Q_k Q_l + P_k P_l) + H''_{kl}(P_k Q_l - Q_k P_l) \right]. \quad (14.7)$$

описывает динамику связанных классических осцилляторов. В базисе стационарных состояний квантового гамильтониана  $H_{kl} \rightarrow E_k \delta_{kl}$ , антисимметричная часть  $H''$  исчезает, и эффективный гамильтониан (14.7) оказывается очевидно интегрируемым

$$\mathcal{H} \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_k E_k (Q_k^2 + P_k^2), \quad (14.8)$$

описывая набор *независимых* осцилляторов. Классически, движение такой системы регулярно и квазипериодично.

На проблему квантового хаоса возможен взгляд и с другой стороны: от классической квантовая эволюция отклоняется лишь на временах  $t > t^*$ . Математически это может быть сформулировано, как существование двух различных предельных переходов. С одной стороны, сначала полагая  $\hbar \rightarrow 0$ , мы через квазиклассическую область попадаем в область классической механики. Там мы можем долго  $t \gg t^*$  двигаться вдоль классических траекторий. С другой стороны, точная квантовая эволюция вплоть до  $t \gg t^*$ , с последующим переходом в конце к классическому пределу приведет к другому результату — т.е. эти два предельных перехода *не коммутируют*. Отсюда ясно, что классический хаос оказывается лишь (кратко)временным этапом эволюции квантовой системы. Конечно, в реальности время  $t^*$  может оказаться и астрономически большим. Наше доказательство регулярности шредингеровской динамики уязвимо при применении к очень большим системам, в пределе базиса бесконечной размерности: в этом случае квазипериодическое движение огромного числа мод с несоизмеримыми частотами может оказаться неотличимым от хаотического из-за все более растущей примеси удаленных состояний с сильно осциллирующими волновыми функциями в процессе долговременной эволюции. В этом случае хаос проявится скорее в гильбертовом, чем обычном фазовом пространстве.

## 14.2 Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона

. Простейшие проявления квантового хаоса видны в корреляциях и флуктуациях энергетических уровней. В соответствии с гипотезой [17], квантовые



## 14.2 Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона 337

спектры систем, хаотических в классическом пределе, имеют универсальные статистические свойства (впоследствии эта гипотеза получила строгое доказательство).

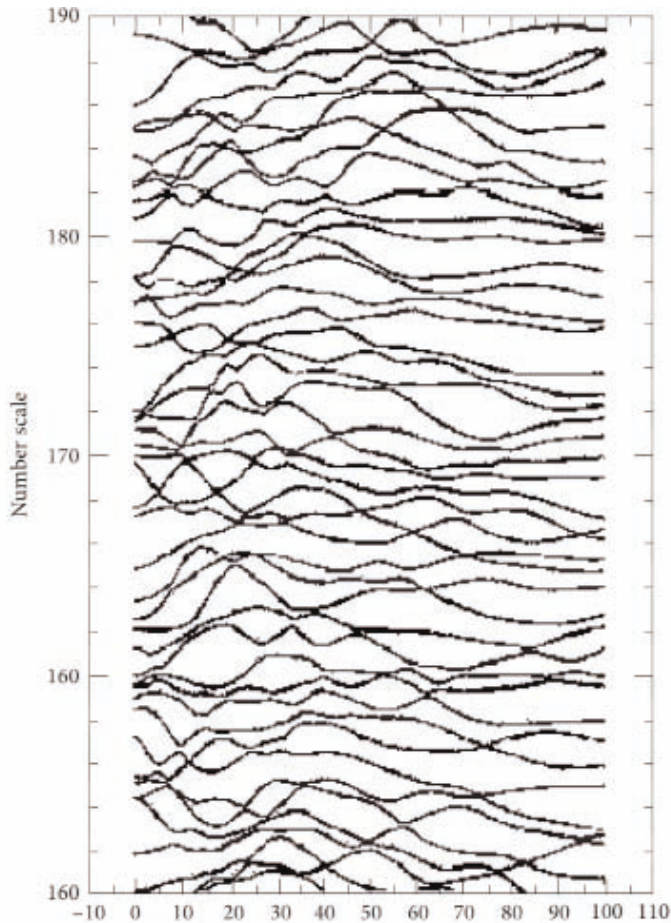


Рис. 14.2. Динамика уровней в зависимости от интенсивности взаимодействия (0 соответствует невзаимодействующим частицам, 100 — реалистичной интенсивности взаимодействий) в оболочечной модели ядра [18].

Как уже обсуждалось в разд. I.10.5, энергетические термы *одинаковой симметрии* отталкиваются друг от друга в процессе параметрической эволюции как функции плавно меняющихся параметров ядра. При малых расстояниях с типичным оказывается линейное расталкивание  $\propto s$  (I.10.45).

Состояния *разной симметрии* не смешиваются, если гамильтониан данным видом симметрии обладает — соответственно, в процессе параметрической эволюции такие состояния пересечься могут. Возникновение хаоса является следствием разрушения в системе симметрий, в результате которого становится возможным смешивание уровней различных семейств, предотвращающее их пересечения. В одночастичном движении (типа бильярда) за смешивание уровней ответственны граничные условия. В многочастичной системе эти эффекты порождаются *взаимодействиями*, смешивающими конфигурации невзаимодействующих частиц. Парадоксально, но это означает, что в хаотических системах структура уровней выглядит более упорядоченной — “турбулентный” поток становится “ламинарным”, см. Рис.14.2. Здесь фрагмент спектра (все состояния имеют одни и те же квантовые числа  $J = T = 0$ ) показан для расчетов в рамках оболочечной модели [18] для ядра  $^{24}\text{Mg}$ , в зависимости от интенсивности взаимодействий. Все пересечения уровней подавлены.

В качестве первого примера рассмотрим регулярную квантовую систему. В ней мы имеем независимые последовательности (семейства) уровней с различными точными квантовыми числами. Пусть  $j$ -я последовательность имеет среднее расстояние между соседними уровнями  $D_j$ , отвечающее парциальной плотности уровней  $\rho_j = 1/D_j$ , а полная плотность уровней  $\rho = \sum_j \rho_j$ . Для каждой последовательности можно определить распределение расстояний между ближайшими уровнями, вероятность  $P_j(s)$  обнаружения пары смежных уровней на расстоянии  $s$ . Мы собираемся найти полное распределение  $P(s)$  для всех пар соседних уровней, не ограничиваясь их принадлежностью к одному и тому же семейству. Для удобства введем вероятность

$$W(s) = \int_s^\infty dx P(x) \quad (14.9)$$

найти следующий уровень на расстоянии больше чем  $s$  от уровня, расположенного в нулевой точке отсчета энергии.

Для простоты рассмотрим два семейства, с соответствующими парциальными распределениями  $P_1(s)$  и  $P_2(s)$ . Так же, как и в (14.9) введем функции  $W_{1,2}(s)$ , подставляя в подинтегральное выражение  $P_{1,2}(x)$  вместо  $P(x)$ . Следующий (за исходным) уровень может принадлежать любому из семейств, с относительной вероятностью  $\rho_{1,2}/\rho$ . Если он принадлежит семейству 1 и расположен на расстоянии  $> s$ , то уровни семейства 2 в интервале  $[0, s]$  отсутствуют. Обозначим плотность вероятности такого от-

## 14.2 Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона 339

существования  $Q_2(s)$ . Аналогичным образом можно определить и  $Q_1(s)$ . Тогда функция (14.9) удовлетворяет следующему логическому тождеству

$$W(s) = \frac{\rho_1}{\rho} \int_s^\infty dx P_1(x) Q_2(s) + \frac{\rho_2}{\rho} \int_s^\infty dx P_2(x) Q_1(s). \quad (14.10)$$

Введем условную плотность вероятности  $R_2(s)$  обнаружения ближайшего уровня 2 в интервале  $[s, s + ds]$  при условии, что уровень 1 расположен в нулевой точке отсчета энергии. Тогда предшествующий уровень семейства 2 может находиться лишь в области до нулевой точки, и расстояние между этими последовательными уровнями семейства 2 больше, чем  $s$ . Поэтому  $R_2(s)$  пропорционально  $W_2(s)$ ,

$$R_2(s) = \text{const } W_2(s) = \text{const} \int_s^\infty dx P_2(x). \quad (14.11)$$

Константа определена условием нормировки

$$\int_0^\infty ds R_2(s) = 1 \quad (14.12)$$

(Предыдущий уровень может находиться где угодно слева нулевой точки). Меняя порядок интегрирования аналогично тому, как это делалось при выводе хронологического произведения в eq. (25.28), получим

$$\int_0^\infty ds \int_s^\infty dx P_2(x) = \int_0^\infty dx \int_0^x ds P_2(x) = \int_0^\infty dx x P_2(x) = D_2, \quad (14.13)$$

среднее межуровневое расстояние в семестве 2. В результате

$$R_2(s) = \rho_2 \int_s^\infty dx P_2(x). \quad (14.14)$$

Таким образом уравнение (14.10) приобретает вид ( $D = 1/\rho$  — среднее межуровневое расстояние в объединенной последовательности уровней двух семейств)

$$W(s) = D \left[ R_1(s) Q_2(s) + R_2(s) Q_1(s) \right]. \quad (14.15)$$

Функции  $Q_j(s)$  и  $R_j(s)$  связаны очевидным соотношением

$$Q_j(s) = \int_s^\infty dx R_j(s). \quad (14.16)$$

(если ближайшие уровни находятся на расстоянии  $> s$ , они отсутствуют в интервале  $[0, s]$ ). Поэтому

$$R_j(s) = -\frac{dQ_j}{ds}, \quad (14.17)$$

и из (14.15) следует

$$W(s) = -D \left( \frac{dQ_1}{ds} Q_2 + \frac{dQ_2}{ds} Q_1 \right) = -D \frac{d}{ds} (Q_1 Q_2). \quad (14.18)$$

Для большего числа семейств те же соображения позволяют получить

$$W(s) = -D \frac{dQ}{ds}, \quad Q \equiv \prod_{j=1}^n Q_j. \quad (14.19)$$

Из смысла  $W(s)$ , определенной в (9), имеем

$$P(s) = D \frac{d^2 Q}{ds^2}. \quad (14.20)$$

С другой стороны, из уравнений (14.16) и (14.14) следует

$$D_j Q_j(s) = \int_s^\infty dy \int_y^\infty dx P_j(x) = \int_s^\infty dx \int_s^x dy P_j(x) = \int_s^\infty dx (x-s) P_j(x). \quad (14.21)$$

Для малых расстояний  $s < D_j$ , с учетом определения для среднего межуровневого интервала  $D_j$  и нормировки  $P_j$ , это дает

$$Q_j(s) \approx 1 - \frac{s}{D_j} \rightsquigarrow Q \approx \prod_j \left( 1 - \frac{s}{D_j} \right). \quad (14.22)$$

Если все  $D_j$  одного порядка,  $D_j \sim nD$ , то для большого числа накладывающихся друг на друга семейств  $n \gg 1$ , приходим к экспоненциальному поведению

$$Q \sim \left( 1 - \frac{s}{nD} \right)_{n \gg 1}^n \sim e^{-s/D}. \quad (14.23)$$

Следовательно, распределение по расстояниям между ближайшими соседними уровнями (14.20) ведет себя как

$$P(s) \approx \frac{1}{D} e^{-s/D}. \quad (14.24)$$

## 14.2 Локальная спектральная статистика: распределение Пуассона 341

Хотя наш вывод не позволяет предсказать предельное поведение  $P(s)$  при  $s \gg D$ , при больших  $s$  функция  $P(s)$  заведомо быстро стремится к нулю. Выражение (14.24) применительно ко всем  $s$  называют **распределением Пуассона**. Оно хорошо согласуется с численным моделированием суперпозиций нескольких независимых семейств уровней тогда, когда для данного уровня наиболее вероятный ближайший сосед принадлежит другим семействам. В этом случае отталкивания между смежными уровнями нет, распределение межуровневых интервалов максимально для малых интервалов, а большие отвечают гигантским флуктуациям. Распределение Пуассона известно также как распределение, описывающее во времени случайные события радиоактивного распада. В нашем случае распределение Пуассона для соседних уровней может рассматриваться как признак *регулярной динамики*, см. Рис.14.3.

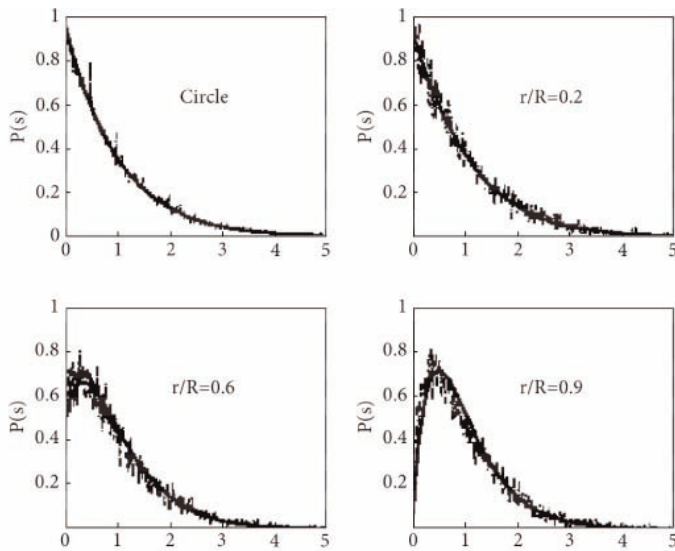


Рис. 14.3. Распределение интервалов между ближайшими уровнями для круглого бильярда радиуса  $R$  (распределение Пуассона) и его эволюция при помещении внутри бильярда на радиусе  $r$  точечного  $\delta$ -рассеивателя [19].

Предыдущее рассмотрение неявно базировалось на предположении, что существует единая функция  $P(s)$ , которая не зависит от абсолютного по-

ложения изучаемых уровней. Это свойство *спектральной эргодичности* имеет место лишь тогда, когда средние характеристики спектров — такие, как парциальные плотности  $\rho_j$ , фиксированы. В реальных системах плотность уровней быстро растет с энергией. Поэтому, применительно к спектральной статистике мы подчеркиваем слово “локальная”. *Глобальные*, или *секулярные* свойства спектров не универсальны. Универсальность может быть восстановлена посредством масштабирования спектров [20] путем измерения межуровневых интервалов  $s$  в единицах локального среднего межуровневого расстояния  $D$ . Это позволяет сравнивать между собой различные участки спектров, принадлежащие даже разным системам. Часто этим пользуются для того, чтобы увеличить объем данных и улучшить статистическую надежность результатов.

### 14.3 Гауссовый ортогональный ансамбль.

Теперь мы попытаемся описать *хаотическую квантовую систему*. Рассмотрим набор квантовых состояний, возникающих в результате процесса перемешивания, превращающего волновые функции в очень сложные комбинации исходных “простых” базисных состояний. Предположим, что все состояния принадлежат к одному и тому же классу по отношению к имеющимся точным симметриям — т.е. они могут смешиваться.

Ключевым является вопрос, о такой формулировке критерия *предельного хаоса*, которую можно было бы взять в качестве отправной точки. Огромная матрица гамильтониана в исходном “простом” базисе весьма сложна. Однако предположение об эргодичности открывает возможность рассматривать различные подматрицы  $H$  как новые копии некоторого ансамбля матриц. Выясним, каким должно быть распределение вероятности  $P(H)$  матриц  $H$  для случая предельного хаоса. Поскольку после перемешивания связь с первоначальным базисом теряется, его в определенном смысле можно считать случайным — любой другой базис будет столь же хорош. Тем самым, мы приходим к формулировке основного требования предельного хаоса: вероятность  $P(H)$  по отношению к преобразованиям базиса должна быть инвариантна. Матричные элементы гамильтониана в произвольном случайном базисе предполагаются независимыми и некоординированными, и искомая вероятность  $P(H)$  сводится к произведению вероятностей  $P_{ij}(H_{ij})$  отдельных матричных элементов. Сформулированные условия вполне достаточны для определения явного вида функции  $P(H)$ . Ниже мы последуем способу, предложенному в [21].

Прежде всего, определимся с классом описываемых систем. Мы рассмотрим ансамбль систем, инвариантных по отношению к обращению времени. Как мы знаем из Разд. 8.1, в этом случае для волновых функций всегда можно выбрать вещественный базис, а гамильтониан должен быть эрмитовым. Каждый элемент такого ансамбля представляет собой вещественную симметричную матрицу,  $H_{ij} = H_{ji}$ , а набор допустимых преобразований дается ансамблем ортогональных матриц. Предположение об отсутствии корреляций приводит к анзацу:

$$P(H) = \prod_{ij(i \leq j)} P_{ij}(H_{ij}), \quad (14.25)$$

а инвариантность по отношению к ортогональным преобразованиям требует, чтобы распределение вероятности  $P(H)$  для матричных элементов  $H_{i'j'}$  было во всех других базисах одним и тем же.

Нам достаточно рассмотреть блок матрицы размером  $2 \times 2$  с вещественными элементами  $H_{11}$ ,  $H_{22}$  и  $H_{12} = H_{21}$ . Совместная вероятность наличия трех заданных значений матричных элементов в выбранном базисе равна

$$P(H) = P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22}). \quad (14.26)$$

Ортогональное преобразование базиса в данном случае — параметризованный углом  $\theta$  обычный поворот, и вектора нового базиса

$$|1'\rangle = \cos \theta |1\rangle - \sin \theta |2\rangle, \quad |2'\rangle = \sin \theta |1\rangle + \cos \theta |2\rangle. \quad (14.27)$$

Матричные элементы в новом базисе

$$\begin{aligned} H_{1'1'} &= \cos^2 \theta H_{11} + \sin^2 \theta H_{22} - 2 \sin \theta \cos \theta H_{12}, \\ H_{2'2'} &= \sin^2 \theta H_{11} + \cos^2 \theta H_{22} + 2 \sin \theta \cos \theta H_{12}, \end{aligned} \quad (14.28)$$

и

$$H_{1'2'} = \sin \theta \cos \theta (H_{11} - H_{22}) + (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) H_{12}. \quad (14.29)$$

#### Задача 14.1

Выпишите условия инвариантности для бесконечно малого поворота, удерживая лишь линейные по  $\theta$  члены, получите дифференциальные уравнения для вероятностей  $P_{ij}$  и найдите их решения.

**Решение** Условие инвариантности имеет вид

$$P_{11}(H_{11})P_{12}(H_{12})P_{22}(H_{22})$$

$$= \left[ P_{11}(H_{11}) - 2\theta H_{12} \frac{dP_{11}}{dH_{11}} \right] \left[ P_{12}(H_{12}) + \theta(H_{11} - H_{22}) \frac{dP_{12}}{dH_{12}} \right] \left[ P_{22}(H_{22}) + 2\theta H_{12} \frac{dP_{22}}{dH_{22}} \right]. \quad (14.30)$$

В линейном приближении

$$H_{12} \left( \frac{1}{P_{22}} \frac{dP_{22}}{dH_{22}} - \frac{1}{P_{11}} \frac{dP_{11}}{dH_{11}} \right) + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) \frac{1}{P_{12}} \frac{dP_{12}}{dH_{12}} = 0. \quad (14.31)$$

Стандартное процедура разделения переменных порождает две константы,  $C$  и  $E_0$ , а результатом, после соответствующей нормировки, является произведение трех гауссовых распределений,

$$P_{11} = \sqrt{\frac{C}{4\pi}} e^{-C(H_{11}-E_0)^2/4}, \quad P_{22} = \sqrt{\frac{C}{4\pi}} e^{-C(H_{22}-E_0)^2/4}, \quad P_{12} = \sqrt{\frac{C}{2\pi}} e^{-CH_{12}^2/2}. \quad (14.32)$$

Отметим, что полная вероятность (48.19) может быть записана, как

$$\begin{aligned} P(H) &= \text{const } e^{-(C/4)[(H_{11}-E_0)^2+(H_{22}-E_0)^2+H_{12}^2+H_{21}^2]} \\ &= \text{const } e^{-(C/4)\text{Tr}[(\hat{H}-E_0\hat{1})^2]}, \end{aligned} \quad (14.33)$$

т.е. выражена явно через очевидно инвариантный след оператора  $\hat{H} - E_0\hat{1}$ .

Выбор центроида спектра  $E_0$  значения не имеет и он может быть положен равным нулю. Таким образом, предельный хаос соответствует гауссовому распределению с нулевым средним значением и одной и той же дисперсией для всех диагональных элементов, тогда как для всех недиагональных элементов дисперсия оказывается вдвое меньшей:

$$\overline{H_{\text{diag}}^2} = \frac{2}{C}, \quad \overline{H_{\text{off-diag}}^2} = \frac{1}{C}. \quad (14.34)$$

Отсутствие корреляций между различными элементами позволяет представить этот результат в виде

$$\overline{H_{ij}H_{kl}} = (\delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}) \frac{a^2}{4N}, \quad (14.35)$$

где использовано новое обозначение  $C = 4N/a^2$  и учтена размерная инвариантность (скейлинг) матричных элементов, обратно пропорциональных



квадратному корню из размера матрицы  $N$ . Явное выделение скейлинга необходимым не является, но удобно при сравнении результатов для разных размеров матриц, т.к. среднее значение

$$\overline{(\text{Tr } H)^2} = \sum_{ij} \overline{H_{ii} H_{jj}} = \sum_{ij} 2\delta_{ij} \frac{a^2}{4N} = \frac{a^2}{2} \quad (14.36)$$

не зависит от  $N$ , и мы можем рассматривать предел  $N \rightarrow \infty$ .

#### 14.4 Распределение межуровневых интервалов.

Непосредственное обобщение двумерного результата (14.33) на произвольные размерности приводит к гауссовому ортогональному ансамблю (ГОА) случайных вещественных матриц, определяемому нормированной [ср. с (14.32)] функцией распределения

$$P(H) = \left( \sqrt{\frac{C}{2\pi}} \right)^{N(N-1)/2} \left( \sqrt{\frac{C}{4\pi}} \right)^N e^{-N\text{Tr}(\hat{H}^2)/a^2} \quad (14.37)$$

или эквивалентным ему выражением (14.35).

Вероятность (14.37) зависит лишь от  $N$  собственных значений  $E_\alpha$ ,

$$\text{Tr}(\hat{H}^2) = \sum_{\alpha=1}^N E_\alpha^2, \quad (14.38)$$

а не от  $N(N-1)/2$  углов  $\theta_i$ , определяющих “ориентацию” данного базиса по отношению к собственному базису [в примере  $N=2$  (14.27) у нас был только один угол]. Мерой  $d\mu$  в пространстве случайных матриц  $H$  при вычислении наблюдаемых вероятностей является “декартово” произведение дифференциалов независимых матричных элементов  $dH_{11} dH_{12} dH_{22}, \dots$ , т.е. среднее по ансамблю должно вычисляться в соответствии с

$$\overline{F(H)} = \int d\mu P(H) F(H) = \int \prod_{ij(i < j)} dH_{ij} F(H) P(H). \quad (14.39)$$

Для получения распределения собственных значений нам нужно сделать преобразование к переменным  $\{E_\alpha, \theta_i\}$  и проинтегрировать  $P(H)$  по несущественным углам. Результат опять может быть понят на примере случая  $N=2$ .

**Задача 14.2**

Вычислите якобиан  $J$  для преобразования от исходного базиса  $(H_{11}, H_{22}, H_{12})$  к набору переменных  $(E_1, E_2, \theta)$ .

**Решение** Из уравнений (14.28) и (14.29) (28) и (29) следует, что данное преобразование имеет вид

$$H_{11} = E_1 \cos^2 \theta + E_2 \sin^2 \theta, \quad H_{22} = E_1 \sin^2 \theta + E_2 \cos^2 \theta, \quad H_{12} = (E_1 - E_2) \sin \theta \cos \theta. \quad (14.40)$$

откуда

$$J = \frac{\partial(H_{11}, H_{22}, H_{12})}{\partial(E_1, E_2, \theta)} = E_1 - E_2. \quad (14.41)$$

Якобиан (14.41) при пересечении уровней обращается в нуль. Это вполне ожидаемо из того, что преобразование к собственным значениям и углам оказывается в этом случае сингулярным (обратное преобразование при пересечении уровней не определено, т.к. может быть взята любая суперпозиция вырожденных уровней). Результирующее распределение для матриц  $2 \times 2$  оказывается однородным по  $\theta$ ,

$$P(E_1, E_2, \theta) = \text{const} |E_1 - E_2| e^{-2(E_1^2 + E_2^2)/a^2}. \quad (14.42)$$

Несмотря на отсутствие корреляций между матричными элементами, положения уровней оказываются скоррелированными из-за расталкивания уровней, см. разд. I.10.5. В согласии с нашим прежним выводом в случае обратимой во времени динамики расталкивание уровней линейно.

**Задача 14.3**

Найдите распределение  $P(s)$  по межуровневому интервалу  $s$  — расстоянию между  $E_1$  и  $E_2$ , и вычислите средний интервал  $D$  для двумерного случая.

**Решение** Нормируя вероятность (14.42) и интегрируя, найдем распределение

$$P(s) = \int dE_+ dE_- d\theta P(E_+, E_-, \theta) \delta(s - E_+ + E_-) = \frac{2s}{a^2} e^{-s^2/a^2} \quad (14.43)$$

с характерным расталкиванием уровней на малых расстояниях и с гауссовым хвостом на больших. Средний интервал

$$D = \int_0^\infty ds s P(s) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} a. \quad (14.44)$$

В безразмерных переменных  $x = s/D$  получим распределение Вигнера [ [?], стр.199],

$$P(x) dx = \frac{\pi x}{2} e^{-(\pi/4)x^2} dx. \quad (14.45)$$

Максимум этой функции, см. Рис.14.4, отвечает  $x = 2/\pi$ , а общее расположение уровней оказывается гораздо более упорядоченным в отличие от неупорядоченного распределения Пуассона в случае регулярной динамики.

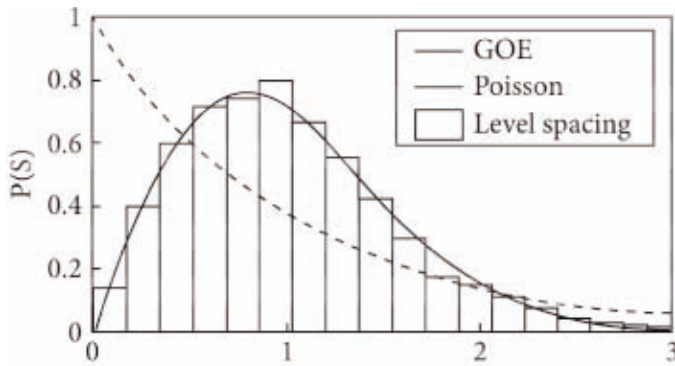


Рис. 14.4. Распределение Вигнера для межуровневых интервалов  $P(x)$ , в сравнении с распределением интервалов в хаотическом бильярде-стадионе. [22].

#### Задача 14.4

Найти распределение межуровневых интервалов  $P(s)$  для ансамбля эрмитовых случайных вещественных матриц  $2 \times 2$  с гауссовым распределением матричных элементов, с нулевым средним значением и разными дисперсиями,  $\sigma$  для диагональных матричных элементов  $H_{11}$  и  $H_{22}$  и  $\tau$  для недиагональных  $H_{12} = H_{21}$  [23].

**Решение** Нормированная совместная функция распределения собственных значений  $\theta$ , формула (14.27), имеет вид

$$P(E_+, E_-, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{s}{\sigma^2 \tau} e^{-(E_+ + E_-)^2 / 4\sigma^2 - s^2 [\cos^2 \theta / \sigma^2 + \sin^2 \theta / 2\tau^2] / 4}, \quad (14.46)$$

где  $s = E_+ - E_-$ . Как и следовало ожидать, функция распределения для следа матрицы  $s = E_+ + E_-$ , инвариантного по отношению к ортогональным

преобразованиям, не зависит от  $\tau$ . Функция распределения межуровневых интервалов вычисляется как

$$P(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dE_+ \int_{-\infty}^{E_+} dE_- \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta P(E_+, E_-, \theta) \delta(s - E_+ + E_-) \\ = \frac{s}{2\sqrt{2}\sigma\tau} e^{-s^2(\sigma^2 + 2\tau^2)/16\sigma^2\tau^2} I_0\left(\frac{s^2(\sigma^2 - 2\tau^2)}{16\sigma^2\tau^2}\right), \quad (14.47)$$

где  $I_0$  — модифицированная функция Бесселя первого рода,  $I_0(0) = 1$ . Линейное расталкивание на малых  $s$  выступает в качестве универсального свойства динамики уровней, Разд. 10.5. Параметр  $\tau$  оказывает основное влияние на гауссово распределение при больших  $s$ ; распределение Вигнера отвечает  $\tau^2 = \sigma^2/2$ .

Для произвольной размерности  $N$  вместо (14.42) мы получим однородное распределение по углам  $\theta_i$  и попарно линейное расталкивание между всеми уровнями

$$P_{\text{ГОЕ}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{ij(i < j)} |E_i - E_j| e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (14.48)$$

Хотя распределение по расстояниям между ближайшими уровнями не удастся записать в виде аналитической формулы, но численно показано, что  $P(s)$  очень близко к формуле Вигнера (14.45). Вычисления уровней для множества хаотических в классическом пределе систем, таких как бильярды асимметричной формы, подтверждают справедливость этого распределения, Рис.14.4.

Примечательно, что справедливо оно и для систем, у которых не существует явного классического аналога — таких, как сложные атомы [24] и ядра [18]. В таких случаях распределение исходных матричных элементов не зависит от базиса и, обычно взятое в базисе невзаимодействующих частиц, оказывается далеким от гауссового. Тем не менее, для локальных спектральных характеристик предсказания (ГОА) остаются справедливыми в области высокой плотности уровней, где простые невозмущенные волновые функции атомных или ядерных конфигураций полностью перемешаны. Тем самым, область применимости локальных характеристик ГОА оказывается значительно шире, чем это могло бы казаться из их формального определения.

## 14.5 ГОА и информация.

Различные разделы физики используют понятие энтропия в довольно различных контекстах. Как сказано в книге “*Quantum Entropy*” [25], энтропия не есть какая-то определенная величина, а скорее представляет собой целое *семейство* концепций. Общим чертой представителей этого семейства является то, что они выражают меру неупорядоченности или *негативной* информации. Тепловая энтропия достигает максимума равновесном состоянии, определяемом требованием равновероятности всех микроскопических состояний, совместных с весьма общими макроскопическими условиями, например — заданной средней энергией, определяемой в терминах температуры. В этом случае наблюдатель имеет минимум информации о фактической микроскопической ситуации — вспомним *Задачи I.6.15 и 23.12*.

Используя то же самый подход, можно определить информационную энтропию гамильтонова ансамбля, характеризуемую функцией распределения матричных элементов  $P(H)$ ,

$$S = - \int dH P(H) \ln P(H). \quad (14.49)$$

Найдем функцию  $P(H)$ , которая максимизирует энтропию с учетом условия нормировки,

$$I_0 \equiv \int dH P(H) = 1, \quad (14.50)$$

среди всех распределений с одним и тем же центроидом  $E_0$  и той же самой дисперсией,

$$I_2 \equiv \int dH P(H) \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\} = \text{const} \quad (14.51)$$

(иначе и нет возможности сравнивать разные распределения).

Максимум энтропии при дополнительных условиях находится с помощью множителей Лагранжа  $\lambda$  and  $\mu$ , поиском безусловного максимума выражения

$$\tilde{S} = S - \lambda I_0 - \mu I_2, \quad (14.52)$$

и последующего определения значений values of  $\lambda$  and  $\mu$  из требования, чтобы уравнения (14.50) и (14.51) были удовлетворены. Формальная вариация функционала  $\tilde{S}$  по функции распределения  $P(H)$  дает

$$-\ln P - 1 - \lambda - \mu \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\} = 0. \quad (14.53)$$

Это определяет

$$P(H) = Ae^{-\mu \text{Tr}\{(\hat{H} - E_0 \hat{1})^2\}}, \quad (14.54)$$

что эквивалентно распределению ГОА (14.37), с соответствующим выбором  $A = \exp(-1 - \lambda)$  и  $\mu = N/a^2$ . В самом деле, ГОА дает равновесное распределение матричных элементов с минимумом доступной информации. Выбор  $a$  фиксирует локальный разброс по энергии  $I_2$  для данного фрагмента спектра.

## 14.6 Классы универсальности.

ГОА отражает общие свойства систем с инвариантностью к обращению времени: для них возможен выбор вещественного базиса и использование вещественного симметричного гамильтониана. Соответствующая функция распределения инвариантна по отношению к группе ортогональных преобразований  $\hat{\mathcal{O}}$  для базиса,

$$\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{O}}^T = 1. \quad (14.55)$$

Задав определенный начальный базис, мы пробегаем по всем возможным представлениям, применяя всевозможные преобразования  $\hat{\mathcal{O}}$ . Как мы знаем, произвольная матрица  $N \times N$  этого типа имеет  $N + N(N-1)/2 = N(N+1)/2$  параметров. В ГОА зависимость от  $N(N-1)/2$  “угловых” параметров преобразования однородна и отделяется от нетривиальной зависимости (14.48) от  $N$  собственных значений. Если инвариантность к обращению времени нарушена, например из-за наличия магнитного поля, вещественным базисом волновых функций мы обойтись уже не сможем. Фаза волновой функции всегда связана с движением, однако в  $\mathcal{T}$ -инвариантной ситуации столь же возможно и обращенное по времени движение, и мы можем образовывать вещественные  $\mathcal{T}$ -инвариантные комбинации — такие, как стоячие волны. В отсутствии  $\mathcal{T}$ -инвариантности такой возможности нет, и в общем виде гамильтониан [рассмотренный в (14.4) и (14.5)] содержит и вещественную симметричную  $\hat{H}'$ , и мнимую антисимметричную  $\hat{H}''$ , части. Соответствующая матрица имеет  $N(N+1)/2$  параметров для действительной части и  $N(N-1)/2$  (недиагональных) параметров для мнимой, всего  $N^2$  параметров. В этой ситуации группой допустимых преобразований является группа  $\mathcal{U}(N)$  унитарных матриц  $\hat{\mathcal{U}}$ ,

$$\hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger = 1. \quad (14.56)$$

Если потребовать инвариантности распределения  $P(H)$  по отношению к унитарным преобразованиям, то для воспроизведения выкладок подобных (14.27), нужно (для случая  $N = 2$ ) четыре независимых параметра — два вещественных диагональных элемента и комплексный элемент смешивания. В результате мы придем формально к тому же самому распределению (14.33), но с другой нормировкой — из-за другого числа параметров в евклидовой мере (14.39). Это определит гауссов *унитарный ансамбль*, ГУА. При преобразовании к  $N$  собственным значениям  $E_k$  и  $N^2 - N$  угловым переменным,  $N^2 \times N^2$ -мерный якобиан  $J$ , аналогично (14.41), будет иметь  $N$  безразмерных столбцов (при дифференцировании по собственным значениям) а остальные  $N(N - 1)$  столбцов будут иметь размерность энергии. Следовательно,  $J$  является полиномом по  $E_k$  степени  $N(N - 1)$ . Этот полином очевидно симметричен по отношению к перестановке всех собственных значений. Как и раньше, якобиан обращается в нуль в точках вырождения, в которых по меньшей мере хотя бы два собственных значения совпадают  $E_i = E_j$ , и обратное преобразование не определено. Поскольку число пар уровней равно  $N(N - 1)/2$ , якобиан степени  $N(N - 1)$  должен содержать *квадраты* относительных расстояний  $E_i - E_j$ . Подобные рассуждения в случае ГОА (14.48) дают линейный закон расталкивания, здесь же мы приходим к *квадратичному*:

$$P_{\text{GUE}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{i,j,i < j} |E_i - E_j|^2 e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (14.57)$$

Результаты для ГОА и ГУА подтверждают простые выводы, ранее сформулированные нами при обсуждении пересечения уровней в Разд. 10.5.

### Задача 14.5

Для случая  $N = 2$  получить ГУА распределение для расстояний между ближайшими уровнями.

**Решение** Интегрирование способом, аналогичным примененному в *Задаче 12.3*, дает

$$P(x) = 32 \frac{x^2}{\pi^2} e^{-(4/\pi)x^2}. \quad (14.58)$$

Наконец, упомянем используемый не столь часто *гауссов симплектический ансамбль*, ГСА. Он возникает в особом случае, когда имеется симметрия по отношению к обращению времени  $\mathcal{T}$ , но  $\mathcal{T}^2 = -1$ , и *полный угловой момент* может принимать только полуцелые значения (нечетное

число фермионов). Из разделов (I.20.5) и (I.20.6) мы знаем, что энергии сопряженных по обращению времени орбит вырождены, но в отсутствии вращательной симметрии они принадлежат одному и тому же классу, в отличие от вращательно инвариантных систем, где партнеры характеризуются *различными* значениями  $\pm M$  точного интеграла движения  $J_z$  и должны относиться к разным классам. Тем самым, у нас возникают матрицы, которые в любом допустимом базисе содержат вырожденные дублеты сопряженных по обращению времени состояний. Преобразования, сохраняющие эту структуру, образуют *симплектическую* группу и могут быть представлены с помощью *кватернионов* (мы здесь делать этого не будем). Такая ситуация может быть реализована в жидкостях в присутствии электрического поля (магнитное поле нарушило бы  $\mathcal{T}$ -инвариантность). Другой пример можно найти в деформированных ядрах с нечетным числом нуклонов и отсутствием аксиальной симметрии, в результате чего проекции углового момента на любую связанную с ядром ось не сохраняются.

В случае ГСА мы имеем дело с дублетами вырожденных состояний. Взаимодействие между дублетами может смешивать их без нарушения вращательной инвариантности. Например, матричные элементы для взаимодействия между дублетом  $(1, \tilde{1})$  и дублетом  $(2, \tilde{2})$  должны удовлетворять соотношениям

$$H_{12} = H_{2\tilde{1}} = H_{1\tilde{2}}^*, \quad H_{1\tilde{2}} = H_{2\tilde{1}} = H_{12}^*. \quad (14.59)$$

Для каждой пары дублетов мы поэтому имеем две пары комплексно сопряженных матричных элементов или четыре вещественных параметра; полное число параметров для  $N$  дублетов, включая  $N$  двукратно вырожденных энергий, равно  $N + 4N(N - 1)/2 = 2N^2 - N$ . Размерность якобиана равна числу столбцов  $2N(N - 1)$ , отвечающих производным по “угловым” параметрам, так что каждая пара разностей энергий входит в четвертой степени, и совместное распределение собственных значений принимает вид:

$$P_{\text{GSE}}(E_1, \dots, E_N) = \text{const}_N \prod_{ij(i < j)} |E_i - E_j|^4 e^{-(N/a^2) \sum_k E_k^2}. \quad (14.60)$$

Для всех *канонических гауссовых ансамблей* - ГОА, ГУА и ГСА мы можем записать результат сходным образом с законом расталкивания  $|E_i - E_j|^\beta$ , где  $\beta = 1, 2$  и  $4$ , соответственно (нормировочная константа зависит от  $N$  и  $\beta$ ).

Мы пришли к выводу, что глобальная симметрия определяет классы *универсальности*. Ожидается, что в реальных системах при достаточно



высокой плотности уровней *локальная* спектральная статистика будет соответствовать одному из таких классов. При небольших возмущениях система может постепенно трансформироваться из одного класса в другой: включая магнитное поле, мы можем плавно перейти от ГОА к ГУА. Мы определили классы, исходя из симметрии гамильтониана. Можно построить классы, обсуждая и другие физические величины. Важным примером является *матрица рассеяния* [26]. Ввиду унитарности  $S$ -матрицы ее собственные значения — комплексные числа на окружности единичного радиуса. Статистика таких спектров определяется *циркулярными ансамблями*. Для систем с гамильтоновой динамикой есть прямая связь этих результатов с гауссовыми каноническими ансамблями. Однако  $S$ -матрицы можно обсуждать и в теориях, где гамильтониан даже и не определен явным образом.

## 14.7 Полукруговой закон

. Для того, чтобы пояснить основную идею более сложных приемов, используемых в теории случайных матриц, рассмотрим теперь задачу о средней плотности уровней для ГОА большой размерности,  $N \rightarrow \infty$ . Сама по себе задача чистого ГОА имеет лишь академический интерес, поскольку глобальное поведение уровней в реальных системах отличается от ожидаемого в ансамблях случайных матриц (см. следующий раздел), но мы используем эту возможность для демонстрации принципов простейших диаграммных методов.

Рассмотрим ансамбль систем, описываемых гамильтонианами

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (14.61)$$

где  $\hat{H}_0$  и  $\hat{V}$  — большие  $N \times N$  эрмитовы матрицы,  $\hat{H}_0$  — постоянный оператор с определенными собственными значениями  $\varepsilon_k$ , в то время как  $\hat{V}$  содержит случайные параметры. Физические результаты получаются усреднением по ансамблю этих параметров. Для определенности, мы предполагаем здесь, что  $\hat{V}$  принадлежит ГОА, и его вещественные некоррелированные матричные элементы  $V_{12}$  с нулевым средним значением распределены по нормальному закону и удовлетворяют (14.35) при подстановке  $H \rightarrow V$ . Из этого определения следует

$$\overline{(V^2)_{12}} = \frac{a^2}{4} \left( 1 + \frac{1}{N} \right) \delta_{12}, \quad \overline{\text{Tr } V^2} = \frac{a^2}{4} (N + 1). \quad (14.62)$$

В пределе  $N \rightarrow \infty$ , усредненный след в (14.62) пропорционален  $N$  [сравните с квадратом следа в (14.36)]. Практически те же результаты получаются для

ГУА, корреляционная функция двух матричных элементов для которого

$$\overline{V_{12}V_{34}} = \overline{V_{12}V_{43}^*} = \frac{a^2}{4N} \delta_{14}\delta_{23}, \quad (14.63)$$

и, вместо (14.62), имеем

$$\overline{(V^2)_{12}} = \frac{a^2}{4} \delta_{12}, \quad \overline{\text{Tr } V^2} = \frac{a^2}{4} N, \quad (14.64)$$

так что в пределе больших  $N$  эти величины совпадают.

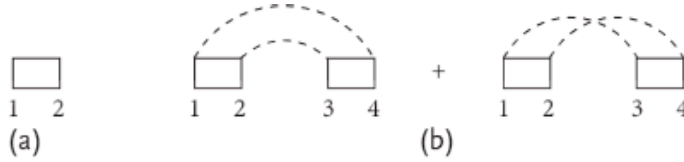


Рис. 14.5. Диаграммное представление: (а) матричный элемент  $V_{12}$ ; (б) корреляционная функция двух матричных элементов  $V$ .

Для представления усреднения более сложных выражений мы используем простые диаграммы, Рис.14.5. Пусть толстый прямоугольный блок, Рис.14.5а, соответствует матричному элементу  $V_{12} = V_{21}^*$ . Свертки (14.62) или (14.63) показаны штриховыми линиями Рис.14.5б, связывающими вершины, которые, в соответствии с дельта-символами Кронеккера должны совпадать; второй (скрещенный) граф для ГУА отсутствует.

Оператор Грина  $\hat{G}(z)$  определяется, как решение уравнения

$$\hat{G}(z)(z - \hat{H}) = \hat{1}. \quad (14.65)$$

Возьмем в качестве численного параметра  $z$  (с размерностью энергии) комплексное число; тогда решение уравнения (14.65),

$$\hat{G}(z) = \frac{1}{z - \hat{H}}, \quad (14.66)$$

является хорошо определенным для эрмитового гамильтониана  $\hat{H}$  имеющего спектр только вещественных значений, так что выражение (14.66) сингулярностей не имеет. Когда комплексная точка  $z$  приближается к оси вещественных энергий, скажем, сверху:  $z \rightarrow E + i0$ , из тождества (6.26) следует

$$\hat{G}(E + i0) = \text{P.v.} \frac{1}{E - \hat{H}} - i\pi\delta(E - \hat{H}). \quad (14.67)$$

Мы строим диаграммную технику для вычисления усредненных по ансамблю матричных элементов функции Грина  $\overline{G_{12}(z)}$ .

Общая в таких случаях процедура начинается с нулевого приближения для функции Грина,

$$\hat{G}^\circ(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}, \quad (14.68)$$

так что

$$\hat{G}^{-1}(z) = \hat{G}^{\circ-1}(z) - \hat{V}. \quad (14.69)$$

Выбирая точку  $z$  вне вещественного спектра, где  $\hat{G}$  имеет полюса, мы можем произвести формальное разложение по степеням  $\hat{V}$

$$\hat{G} = \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ + \dots \quad (14.70)$$

и усреднить его почленно. Это усреднение устранил все члены нечетных степеней  $\hat{V}$ , оставив лишь четные  $\overline{\hat{G}^{(2n)}}$

$$\overline{\hat{G}} = \hat{G}^\circ + \overline{\hat{G}^{(2)}} + \overline{\hat{G}^{(4)}} + \dots \quad (14.71)$$

Для понимания механизма усреднения рассмотрим член второго порядка:

$$\overline{\hat{G}^{(2)}} = \overline{\hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ \hat{V} \hat{G}^\circ}. \quad (14.72)$$

Среднее для матричного элемента (14.72), в соответствии с законом распределения для ГОА (14.35) принимает вид

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \sum_{3456} G_{13}^\circ G_{45}^\circ G_{62}^\circ \overline{V_{34} V_{56}} = \frac{a^2}{4N} \sum_{3456} G_{13}^\circ G_{45}^\circ G_{62}^\circ (\delta_{36} \delta_{45} + \delta_{35} \delta_{46}). \quad (14.73)$$

Суммирование (по 4 и 5) в первом члене приводит к следу  $\hat{G}^\circ$ , так что

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4N} \sum_3 G_{13}^\circ \left[ (\text{Tr} \hat{G}^\circ) G_{32}^\circ + \sum_4 G_{43}^\circ G_{42}^\circ \right], \quad (14.74)$$

или, через произведения операторов,

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4N} [(\text{Tr} \hat{G}^\circ)(\hat{G}^\circ \hat{G}^\circ)_{12} + (\hat{G}^\circ \hat{G}^{\circ T} \hat{G}^\circ)_{12}]. \quad (14.75)$$

Здесь метка  $T$  означает матричное транспонирование.

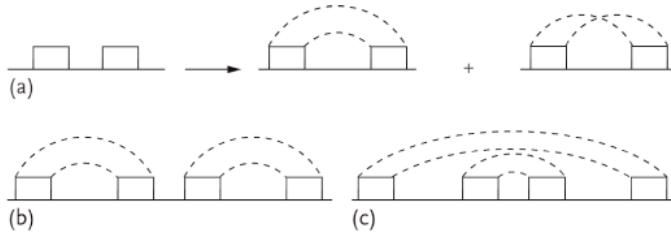


Рис. 14.6. Усреднение второго (a) и четвертого (b,c) порядков.

Глядя на возникающие диаграммы, Рис.14.6a (тонкой линией обозначены матричные элементы невозмущенной функции Грина), мы видим, что второй граф соответствует одной непрерывной линии  $1-3(=5)-4(=6)-2$  составленной из чередующихся тонких и штриховых участков. В отличие от него, первый граф содержит, помимо линии от входа до выхода  $1-3(=6)-2$ , отдельную часть  $4-5$  из тонкой линии, замкнутой штриховой линией, что означает совпадение концов и взятие следа. Вдали от сингулярностей след содержит  $N$  членов одного порядка величины. Мы предположим, что в пределе  $N \rightarrow \infty$ ,

$$g^{\circ}(z) \equiv \frac{1}{N} \text{Tr} \hat{G}^{\circ}(z) \quad (14.76)$$

имеет асимптотически значение не зависящее от  $N$ . Второй член в (14.75) имеет порядок  $1/N$  и в асимптотике им можно пренебречь. Тем самым в обсуждаемом пределе мы получаем вклад не зависящий от  $N$ :

$$\overline{G_{12}^{(2)}} = \frac{a^2}{4} g^{\circ}(G^{\circ} G^{\circ})_{12}. \quad (14.77)$$

Для ГУА этот результат является точным, поскольку член с перекрестными свертками в этом случае отсутствует.

Теперь становится понятным, что в пределе  $N \rightarrow \infty$  в разложении (14.67) мы должны удерживать все члены, которые содержат число независимых следов, компенсирующее обратные степени  $N$ , возникающие из элементарных свертков. В порядке  $2n$ , мы имеем  $n$  свертков, дающих множитель  $(a^2/4N)^n$ ; откуда видно, что для его компенсации нам нужно произведение  $n$  следов произведений функций Грина. Если, из-за перекрестных свертков, число следов меньше требуемого, получающимся вкладом в асимптотическом пределе можно пренебречь.

**Задача 14.6**

Рассмотрите член четвертого порядка и найдите вклад, который выживает в пределе  $N \rightarrow \infty$ .

**Решение** Нам надо усреднить

$$\overline{G_{12}^{(4)}} = G_{13}^{\circ} G_{45}^{\circ} G_{67}^{\circ} G_{89}^{\circ} G_{10,2}^{\circ} \overline{V_{34} V_{56} V_{78} V_{9,10}}, \quad (14.78)$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Двенадцать членов отвечает шести различным способам спаривания матричных элементов  $V$ , в результате которых выживают только два, Рис. 12.6b, c. Аналитически, оба для ГОА и ГУА

$$\overline{G_{12}^{(4)}} = \left(\frac{a^2}{4}\right)^2 \left\{ (G^{\circ} G^{\circ} G^{\circ})_{12} (g^{\circ})^2 + (G^{\circ} G^{\circ})_{12} g^{\circ} \frac{1}{N} \text{Tr}(\hat{G}^{\circ} \hat{G}^{\circ}) \right\}. \quad (14.79)$$

Граф  $b$  на Рис.14.6 является итерацией вклада второго порядка  $a$ , тогда как граф  $c$  представляет вставку диаграммы второго порядка в самого себя.

При ближайшем рассмотрении становится ясно, что асимптотике выживают лишь блоки-“радуга”, содержащие концентрические штриховые линии без пересечений. Для суммирования всех соответствующих вкладов мы введем *усредненный массовый оператор*  $M$ , который в каждом порядке пропорционален следу функции Грина,

$$M_{12}^{(n)} = \frac{a^2}{4N} \text{Tr}(\hat{G}^{(n)}) \delta_{12}. \quad (14.80)$$

Тогда наши результаты для второго и четвертого порядков записываются как

$$\overline{\hat{G}^{(2)}} = \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{\circ} \hat{G}^{\circ}, \quad (14.81)$$

$$\overline{\hat{G}^{(4)}} = \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{\circ} \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{\circ} \hat{G}^{\circ} + \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{(2)} \hat{G}^{\circ} = \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{\circ} \overline{\hat{G}^{(2)}} + \hat{G}^{\circ} \hat{M}^{(2)} \hat{G}^{\circ}. \quad (14.82)$$

Обозначим полную усредненную функцию Грина толстой линией, Рис.14.7. Любой граф (посмотрим, например, слева направо) начинается с тонкой линии  $\hat{G}^{\circ}$ . После этого идет неприводимая часть, охватываемая следом. Неприводимость в данном случае означает, что эту часть нельзя разорвать, разрезав лишь одну функцию Грина, т.к. она замкнута следом. После этого имеется полный набор графов, которые составляют ту же  $\hat{G}$ , как видно из первого члена в (14.82). Второй член в (14.82) дает следующее приближение

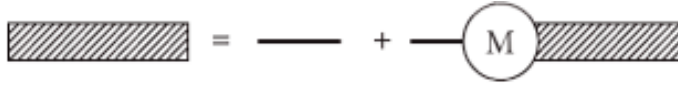


Рис. 14.7. Уравнение Дайсона для средней функции Грина и среднего массового оператора.

для массового оператора, вставленного после левого  $\hat{G}^\circ$ . Это логическое тождество называется *уравнением Дайсона*,

$$\overline{\hat{G}} = \hat{G}^\circ + \hat{G}^\circ \hat{M} \overline{\hat{G}}. \quad (14.83)$$

Такие уравнения всегда могут быть написаны для оператора типа *резольвенты* (14.66) в виде разложения (14.61). Отсюда непосредственно видно, что разложение (14.70) может быть представлено в виде (14.83) с  $\hat{M} \rightarrow \hat{V}$ . Но это не то, что мы подразумевали здесь — наше уравнение (14.83) записано для *средних* величин, и массовый оператор (14.80) здесь представляет собой единичный оператор с коэффициентом, являющимся функционалом от усредненного оператора Грина. Собирая все порядки вместе, получим

$$\hat{M}(z) = \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \overline{\hat{G}(z)}. \quad (14.84)$$

Формальное решение уравнения Дайсона может быть записано как

$$\overline{\hat{G}} = \left[ \hat{G}^\circ \quad 1 \quad \hat{M} \right]^{-1}, \quad (14.85)$$

или, в нашем случае

$$\overline{\hat{G}} = \left[ \hat{G}^\circ \quad 1 \quad \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \overline{\hat{G}} \right]^{-1}. \quad (14.86)$$

Усредненный по гауссовому ансамблю оператор Грина в базисе регулярной части гамильтониана  $\hat{H}_0$  *диагонален*.

В результате получаем нелинейное уравнение для числовой функции (14.84),

$$M(z) = \frac{a^2}{4N} \text{Tr} \left[ \hat{G}^\circ \quad 1(z) \quad M(z) \right]^{-1}, \quad (14.87)$$

Если невозмущенная функция Грина  $\hat{G}^\circ(z)$  известна (в терминах собственных значений  $\hat{H}_0$ ), массовый оператор может быть получен из этой функции

соответствующим сдвигом  $z \rightarrow z - M(z)$  значения ее аргумента, посредством функционального уравнения *Пастура*:

$$M(z) = \frac{a^2}{4N} \operatorname{Tr} \left[ \hat{G}^\circ \left( z - M(z) \right) \right]. \quad (14.88)$$

Особый случай *вырождения*  $\hat{H}_0$  при энергии  $E_0$  приводит к квадратичному уравнению

$$M(z) = \frac{a^2}{4} \frac{1}{z - E_0 - M(z)}, \quad (14.89)$$

с решением

$$M(z) = \frac{1}{2} \left[ z - E_0 \pm \sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \right]. \quad (14.90)$$

Это отвечает ГОА или ГУА с центроидом спектра (33) в  $E = E_0$ . Для следа оператора Грина аналогично (14.76), получим

$$g(z) \equiv \frac{1}{N} \operatorname{Tr} \overline{\hat{G}(z)} = \frac{4}{a^2} M(z), \quad (14.91)$$

и, следовательно, знаменитую формулу *Вигнера-Пастура*:

$$g(z) = \frac{2}{a^2} \left[ z - E_0 - \sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \right], \quad (14.92)$$

где нами выбран знак минус в (90), для обеспечения правильного поведения  $g(z) \propto 1/z$  при  $|z| \rightarrow \infty$ , следующего из определения (14.76) для систем с конечной спектральной областью.

Полученный с помощью разложения (14.70) результат можно продолжить аналитически из асимптотической области  $z$  на вещественную ось. Таким образом тождество (14.67) свяжет след (14.92) с плотностью уровней

$$\rho(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) = \operatorname{Tr} \delta(E - \hat{H}). \quad (14.93)$$

Плотность уровней описывается мнимой частью следа  $g(z)$  в пределе  $z$  стремящейся к вещественной оси

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} \hat{G}(E + i0). \quad (14.94)$$

Плотность уровней, усредненная по ансамблю дается следом усредненного оператора Грина (14.91),

$$\overline{\rho(E)} = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } \widehat{G}(E + i0) = -\frac{N}{\pi} \text{Im } g(E + i0). \quad (14.95)$$

Для ГОА или ГУА, в уравнении (14.92) мнимая часть появляется при извлечении квадратного корня, когда  $|E - E_0| < a$ :

$$\sqrt{(z - E_0)^2 - a^2} \Rightarrow i\sqrt{a^2 - (E - E_0)^2}. \quad (14.96)$$

В итоге мы приходим к *полукруговому закону* (см. Wigner, в [27], стр. 145):

$$\overline{\rho(E)} = N \frac{2}{\pi a^2} \sqrt{a^2 - E^2} \theta(a^2 - E^2), \quad (14.97)$$

где начало отсчета энергии выбрано при  $E_0 = 0$ , и ступенчатая функция  $\theta$  отражает появление резких границ усредненного энергетического спектра при  $N \rightarrow \infty$ . Величина  $a$ , введенная при определении корреляционных функций (14.35) или (14.64) есть радиус полукруга. Отметим, что  $a$  несколько различающимся образом связана с дисперсией исходных матричных элементов в ГОА и ГУА: имеем  $H_{kl}^2 = (a^2/4N)(1 + \delta_{kl})$  для ГОА и  $|H_{kl}|^2 = a^2/4N$  для ГУА: для последнего нет разницы между диагональными и недиагональными элементами.

Интересные физические результаты могут быть получены из двухточечных корреляторов, таких как, например,  $\overline{\rho(E)\rho(E')}$ . Здесь, в принципе, снова можно было бы воспользоваться методом  $1/N$ -разложения. Однако этот метод работает лишь при условии, что  $N|E' - E| \gg 1$ . На очень малых расстояниях между интересующими энергиями, при  $\Delta E \sim 1/N$  (т.е. порядка среднего межуровневого расстояния) разложение отказывает, и необходимо развитие более мощных и, очевидно, более сложных математических методов [28]. Стоит, однако, заметить, что в практических случаях при высокой плотности уровней столь малые межуровневые расстояния редко представляют интерес. Исключительным является случай низкоэнергетических *нейтронных* резонансов в тяжелых ядрах (долгоживущие состояния в возбуждаемые при захвате медленных нейтронов в сложных ядрах), которые в свою очередь индивидуально наблюдаемы как квазистационарные состояния компаунд-ядер.

## 14.8 Хаотические собственные функции

. Уравнение (14.42) отражает однородность ГОА распределения для двумерных случайных матриц по отношению к углу  $\theta$ : вероятность не



зависит от ориентации базиса в параметрическом пространстве. Стартовав с произвольного базиса и меняя угол, можно тем самым перебрать все ортогональные базисы.

В случае матриц  $2 \times 2$  ориентация параметризована одним углом, и единственное ограничение, налагаемое на амплитуды  $C_k^\alpha$  собственных векторов  $|\alpha\rangle$ ,  $\alpha = 1', 2'$  в базисе  $|k\rangle$ ,  $k = 1, 2$

$$C_1^{1'} = \cos \vartheta, \quad C_2^{1'} = -\sin \vartheta; \quad C_1^{2'} = \sin \vartheta, \quad C_2^{2'} = \cos \vartheta, \quad (14.98)$$

остается их нормировка

$$\sum_k (C_k^\alpha)^2 = 1. \quad (14.99)$$

В этом случае совместная вероятность полного набора вещественных амплитуд  $C_k^\alpha$  для любого собственного вектора  $|\alpha\rangle$  определяется уравнением

$$P(\{C_k^\alpha\}) = A \delta(1 - (C_1^\alpha)^2 - (C_2^\alpha)^2), \quad (14.100)$$

где  $A$  — нормировочная константа.

Для нахождения вероятности определенной компоненты, например  $C_1^\alpha$ , нужно совместное распределение проинтегрировать по остальным компонентам  $C_2^\alpha$ ,

$$P_1(C_1^\alpha) = \int_{-1}^1 dC_2^\alpha P(C_1^\alpha, C_2^\alpha) = 2A \int_0^1 dC_2^\alpha \delta(1 - (C_1^\alpha)^2 - (C_2^\alpha)^2). \quad (14.101)$$

Используя правила для интегралов с  $\delta$ -функциями, Разд. I.3.3, получаем выражение (здесь  $\theta$  — опять ступенчатая функция)

$$P_1(C) = \frac{A}{\sqrt{1 - C^2}} \theta(1 - C^2), \quad (14.102)$$

справедливое для каждой из амплитуд  $C_k^\alpha$ . Наконец, последнее интегрирование определит константу  $A = 1/\pi$ . Получившееся распределение имеет интегрируемые особенности в точках  $C = \pm 1$ . Среднее значение каждого из весовых множителей  $C^2$  равно

$$\overline{C^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 dC \frac{C^2}{\sqrt{1 - C^2}} = \frac{1}{2}, \quad (14.103)$$

что следует из нормировки (14.99) и равной вероятности для каждой из двух амплитуд. В более общем  $N$ -мерном случае мы ожидаем, что подобным

образом среднее значение весов  $(C_k^\alpha)^2$  is  $1/N$ . Амплитуды  $C_k$  для каждого собственного вектора  $|\alpha\rangle$  распределены равномерно по сфере единичного радиуса в  $N$ -мерном евклидовом пространстве,

$$P_N(C_1, \dots, C_N) = A_N \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (14.104)$$

Для нормировки этого распределения нам нужно вычислить  $N$ -мерный интеграл в правой части уравнения (14.104). Элемент объема в этом пространстве может быть разложен на произведение элемента телесного угла  $do_N$  и радиальной части,

$$d^N C = do_N R^{N-1} dR, \quad R^2 = \sum_{k=1}^N C_k^2. \quad (14.105)$$

Интегрирование по углам дает полный телесный угол в  $N$  измерениях, или площадь поверхности единичной сферы,

$$S_N = \int do_N = \int dC_1 \cdots dC_N \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (14.106)$$

В радиальном интеграле возникает множитель  $1/2$ , т.к. вклад дает лишь положительный корень в дельта-функции или, если действовать формально ( $\xi = R^2$ )

$$\int_0^\infty dR F(R) \delta(1 - R^2) = \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\sqrt{\xi}} F(\sqrt{\xi}) \delta(1 - \xi) = \frac{F(1)}{2}. \quad (14.107)$$

В итоге  $A_N = 2/S_N$ .

Таким образом, для компонент отдельной волновой функции распределение ГОА имеет вид

$$P_N(C_1, \dots, C_N) = \frac{2}{S_N} \delta\left(1 - \sum_{k=1}^N C_k^2\right). \quad (14.108)$$

### Задача 14.7

Вычислите площадь  $S_N$  поверхности единичной сферы в  $N$ -мерном евклидовом пространстве.

**Решение** Простейший способ вычисления этой геометрической величины состоит в использовании дополнительного гауссова интеграла,

$$I_N = S_N \int_0^\infty dR e^{-R^2} R^{N-1}, \quad (14.109)$$

Выражая через  $\Gamma$ -функцию, имеем

$$I_N = S_N \frac{1}{2} \Gamma(N/2). \quad (14.110)$$

С другой стороны, использование декартовых координат в  $C$ -пространстве и тождества (14.105), дает

$$I_N = \int d\mathbf{o}_N \int_0^\infty dR e^{-R^2} R^{N-1} = \int d^N C \exp\left[-\sum_{k=1}^N C_k^2\right]. \quad (14.111)$$

Здесь интеграл в действительности есть произведение  $N$  идентичных гауссовых одномерных интегралов,

$$I_N = \left( \int_{-\infty}^\infty dC e^{-C^2} \right)^N = \pi^{N/2}. \quad (14.112)$$

Сравнивая (14.110) и (14.112), получаем

$$S_N = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2)} = \frac{N\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2 + 1)}. \quad (14.113)$$

Откуда объем сферы

$$V_N = S_N \frac{R^N}{N} = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2 + 1)} R^N. \quad (14.114)$$

Отсюда следуют известные результаты:  $V_1 = 2R$  (расстояние между концами линейного отрезка),  $V_2 = \pi R^2$  (площадь круга),  $V_3 = (4/3)\pi R^3$  и т.д. Интересно, что при фиксированном радиусе  $R$  объем сначала растет с  $N$ , достигает максимума при  $N = 4$ , а затем быстро падает. Максимум площади сферы (14.113) отвечает  $N = 7$ . Можно понять, почему так получается: представьте себе  $N$ -мерный куб с ребром  $2R$  и вписанной внутрь сферой; каждая координата  $C$  при больших  $N$  в среднем равна  $R/\sqrt{N} \ll R$ , т.е. куб в действительности оказывается почти пустым.

**Задача 14.8**

Найдите функцию распределения для отдельной компоненты  $N$ -мерной волновой функции в ГОА.

**Решение** Все компоненты равновероятны. Интегрируя (14.108) по  $C_2, \dots, C_N$ , мы получаем функцию распределения для  $C_1 \equiv C$ ,

$$P_1(C) = \frac{2}{S_N} \int dC_2 \cdots dC_N \delta\left(1 - C^2 - \sum_{k=2}^N C_k^2\right). \quad (14.115)$$

Как и в предыдущей задаче мы интегрируем по углам и радиусу в  $(N-1)$ -мерном пространстве,

$$P_1(C) = \frac{2}{S_N} \int d\Omega_{N-1} \int_0^\infty dR R^{N-2} \delta(1 - C^2 - R^2) = \frac{S_{N-1}}{S_N} (1 - C^2)^{(N-3)/2}. \quad (14.116)$$

Эволюция этой функции распределения показана на Рис. 14.8

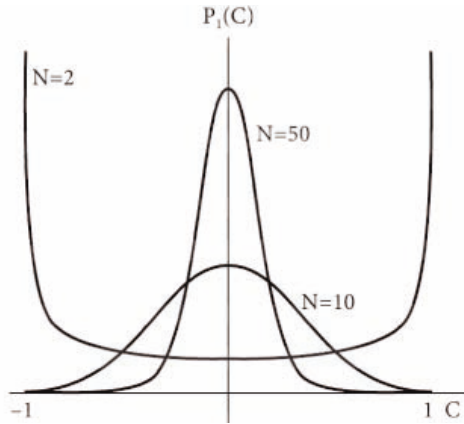


Рис. 14.8. Распределение (14.116) для различных значений  $N$ .

На практике часто представляет интерес предел очень больших  $N$ . В нейтронных резонансах тяжелых ядер типичным является  $N \approx 10^{5 \div 6}$ . В этом пределе общее выражение ГОА (14.116) упрощается. Поскольку  $C^2$  в среднем  $\propto 1/N$ , мы можем положить  $C^2 = x/N \ll 1$  и перейти в (14.116) к пределу  $N \rightarrow \infty$ :

$$(1 - C^2)^{(N-3)/2} = \left(1 - \frac{x}{N}\right)^{(N-3)/2} = \sqrt{\left(1 - \frac{x}{N}\right)^N} \left(1 - \frac{x}{N}\right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow e^{-x/2} = e^{-NC^2/2}. \quad (14.117)$$

Нормируя, мы получаем гауссово распределение

$$P_1(C) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-NC^2/2}, \quad (14.118)$$

с вполне ожидаемой дисперсией  $\overline{C^2} = 1/N$ . Нормировка может быть также получена непосредственно из (14.116) и (14.113), если воспользоваться для  $\Gamma$ -функции приближенной формулой Стирлинга.

## 14.9 Сложность и информационная энтропия

. Степень сложности индивидуальной волновой функции  $|\alpha\rangle$  в конкретной системе может быть охарактеризована **информационной энтропией Шеннона**:

$$I_\alpha = - \sum_k \left(C_k^\alpha\right)^2 \ln \left(C_k^\alpha\right)^2. \quad (14.119)$$

Эта величина *не инвариантна* по отношению к ортогональным преобразованиям базиса  $|k\rangle$  — скорее, она выражает *относительную сложность* собственных состояний  $|\alpha\rangle$  по отношению к данному референтному базису. В задачах типа бильярда таким естественным референтным базисом является координатное представление, так что соответствующая информационная энтропия собственной волновой функции  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  определяется как

$$I_\alpha = - \int d^N r |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 \ln |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2. \quad (14.120)$$

В многочастичных системах обычно выбирается базис независимых частиц в среднем (самосогласованном) поле, исходя из того, что самосогласованное поле по своему построению (Разд.11) включает в себя усредненные характеристики регулярного движения, отделяя их от хаотических флуктуаций, поэтому оно обеспечивает удобную меру сложности. Информационную энтропию индивидуального состояния не следует путать с энтропией ансамбля (14.49). Для самих базисных состояний  $I_\alpha = 0$  (тот же результат отсутствия сложности мы бы получили в базисе собственных состояний, где каждое собственное состояние имеет лишь одну компоненту). В противоположном случае, когда собственное состояние равномерно размазано по всему базису, со всеми компонентами в точности равными  $1/\sqrt{N}$ , информационная энтропия достигает своего максимума  $\ln N$ . Величина

$$l_\alpha = e^{I_\alpha} \quad (14.121)$$

играет роль *длины локализации*, которая показывает распределенность волновой функции по референтному базису. Начальные состояния полностью локализованы, тогда как равномерно размазанное состояние имеет  $N$  равно-великих компонент где  $N$  — полная размерность гильбертова пространства. Между ними имеются различные состояния  $|\alpha\rangle$  с  $N_\alpha < N$  главных (по значимости) компонент и  $I_\alpha \sim \ln N_\alpha$ .

### Задача 14.9

Вычислите среднее значение информационной энтропии в ГОА при больших  $N$ .

**Решение** Аппроксимируем сумму интегралом, распространив в нем интегрирование до бесконечности,

$$\overline{\sum_k F(C_k^\alpha)} \Rightarrow N \int_{-\infty}^{\infty} dC P_1(C) F(C), \quad (14.122)$$

делая замену переменной  $C$  to  $x = C\sqrt{N/2}$ , и используя распределение (14.118, получаем

$$\overline{I_\alpha} = -2N \sqrt{\frac{2N}{\pi}} \int_0^{\infty} dC C^2 \ln C e^{-NC^2/2} = \ln(\xi N), \quad (14.123)$$

где параметр локализации  $\xi$  определяется численным интегралом

$$\xi = \frac{1}{2} \exp \left( -\frac{8}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^2 \ln x e^{-x^2} \right) = 2e^{c-2} = 0.482, \quad (14.124)$$

здесь  $c = 0.577$  — так называемая константа Эйлера. Таким образом, типичная локализационная длина  $\xi N \approx N/2$ . Меньшая величина, по сравнению с максимально возможным ее значением равным  $N$ , объясняется тем, что невозможно сконструировать все состояния с амплитудами  $\pm 1$  хотя бы потому, что все состояния должны быть взаимно ортогональными.

Другой полезной мерой сложности индивидуальной функции  $|\alpha\rangle$  является так называемое *inverse participation ratio*,

$$\Lambda_\alpha = \left[ \sum_k |C_k^\alpha|^4 \right]^{-1}. \quad (14.125)$$

Сумма здесь дает средневзвешенный квадрат амплитуды  $C^2$  с весовой функцией, определяемой разложением состояния (вероятности даются теми же  $C^2$ ). Поскольку в хаотическом пределе  $C^2 = 1/N$ , величина (14.125

порядка  $N$ . В общем, эту величину можно интерпретировать как число главных компонент данной волновой функции  $|\alpha\rangle$ , снова по отношению к исходному базису  $|k\rangle$ . Для типичных хаотических функций гауссово распределение амплитуд предсказывает

$$\bar{\Lambda} = \frac{N}{3}, \quad (14.126)$$

Во всяком случае, число главных (т.е. больших) компонент состояния  $|\alpha\rangle$  можно оценить, как  $N_\alpha = 3\Lambda_\alpha$ . Обе меры, информационная энтропия  $I_\alpha$  и inverse participation ratio  $\Lambda_\alpha$ , характеризуют более или менее одну и ту же физику, но  $I_\alpha$  более чувствительна к малым компонентам, тогда как  $\Lambda_\alpha$  — к основным компонентам. В пределе ГОА, как следует из (14.123, 14.124) и (14.126), отношение этих независимых мер сводится для общих хаотических функций к универсальному числу,

$$\frac{\exp(I_\alpha)}{\Lambda_\alpha} \Rightarrow 1.446, \quad (14.127)$$

и зависимость от размерности  $N$  исчезает.

Практический пример вычисления информационной энтропии всех 3276 состояний с определенными квантовыми числами  $J^\pi T = 2^+0$  в ядре  $^{28}\text{Si}$  показаны на Рис.14.9. Состояния получены полной диагонализацией реалистической гамильтоновой матрицы в  $sd$  оболочечной модели (гильбертово пространство для 6 протонов и 6 нейтронов в  $0d_{5/2}$ ,  $0d_{3/2}$  и  $1s_{1/2}$  орбиталях). Начальный базис  $|k\rangle$  отвечает приближению среднего поля, заданного тремя эмпирическими одночастичными энергиями. Конечный размер пространства определяет симметричную картину, наиболее сложные состояния находятся в середине спектра при наибольшей плотности уровней. Две особенности заслуживают упоминания: (i) даже в максимуме информационная энтропия не достигает значения ГОА; (ii) зависимость  $I_\alpha$  оказывается гладкой функцией энергии возбуждения, что указывает на сильное смешивание, из-за чего смежные состояния изначально различной природы приобретают похожую структуру, или “выглядят одинаковыми” [29]. В этом заключается микроскопическое обоснование термодинамики: квантовый хаос делает макроскопические характеристики соседних состояний идентичными. Также показано, что в середине спектра отношение (14.127) близко к 1.44.

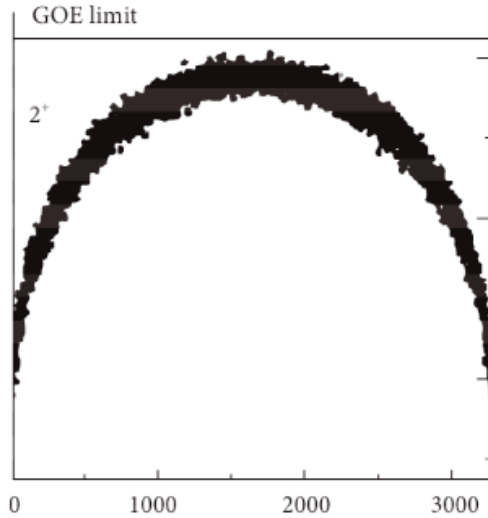


Рис. 14.9. Длина локализации (14.123), вычисленная в ядерной оболочечной модели [18] для класса состояний с угловым моментом  $J = 2$ , положительной четностью и изоспином  $T = 0$  в ядре  $^{28}\text{Si}$ ; состояния упорядочены по возрастанию энергии.

#### 14.10 Распределение Портера-Томаса и связанные с ним распределения

. Веса индивидуальных компонент,

$$w_k^\alpha = (C_k^\alpha)^2, \quad (14.128)$$

могут быть извлечены из эксперимента, предназначенного для анализа сложного состояния. Например, вероятность захвата медленного нейтрона тяжелым ядром в компаунд состояние  $|\alpha\rangle$  пропорциональна перекрытию сложной волновой функции компаунд состояния с начальным простым состоянием  $|k\rangle$ , которое в данном случае представляет собой нейтрон в континууме (в  $s$ -волне при очень низкой энергии  $E$ ) плюс ядро в основном состоянии. Это перекрытие определяет нейтронную ширину  $\gamma_n^\alpha$ , которая входит в сечение образования компаунд-ядра, см. Разд. 10.11. Для  $s$ -волны ширина пропорциональна  $E$ , см. Разд. 34.4. Приведенная ширина  $\gamma_\alpha = \gamma_n^\alpha / \sqrt{E}$  определяется весом (14.128) для конкретного компаунд состояния  $|\alpha\rangle$ . Поэтому мы ожидаем, что распределение приведенных нейтронных ширин совпадет с распределением  $P_w(w)$  типичных весов одиночных компонент в хаотической волновой функции нейтронного резонанса.



## 14.10 Распределение Портера-Томаса и связанные с ним распределения 369

Распределение  $P_w(w)$  получается непосредственно из  $P(C)$  заменой переменных (кем-то было сказано, что теория вероятности является на самом деле наукой о замене переменных),

$$P_w(w) = 2P(C) \frac{dC}{dw}, \quad (14.129)$$

где множитель 2 возникает из-за того, что одно и то же  $w$  соответствует положительным и отрицательным амплитудам  $C$ . Вводя среднее значение  $\bar{w} = 1/N$ , мы приходим к распределению Портера-Томаса (ПТ),

$$P_{PT}(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{w}}} e^{-w/2\bar{w}}. \quad (14.130)$$

Оно очень хорошо описывает распределение приведенных нейтронных ширин нейтронных резонансов [21].

**ЗАДАЧА 24.10.** Найдите совместное распределение двух компонент,  $C_1^\alpha$  and  $C_2^\alpha$ , в (одной и той же) хаотической волновой функции. Используя этот результат в пределе  $N \rightarrow \infty$ , получите функцию распределения для средней ширины  $\Gamma = (w_1^2 + w_2^2)/2$ ,  $w_{1,2} = (C_{1,2}^\alpha)^2$ .

**РЕШЕНИЕ.** Тем же способом, что и раньше мы найдем

$$P(C_1, C_2) = \frac{S_{N-2}}{S_N} \left(1 - C_1^2 - C_2^2\right)^{N/2-2}. \quad (14.131)$$

В пределе больших  $N$ , это сводится к произведению двух независимых гауссовых распределений (14.118). Переходя к новым переменным  $\Gamma$  и  $\xi = w_1 - w_2$ , получим

$$P(\Gamma, \xi) d\Gamma d\xi = \frac{1}{2\pi\bar{w}} e^{-\Gamma/\bar{w}} \frac{d\xi}{\sqrt{\Gamma^2 - \xi^2/4}} d\Gamma, \quad (14.132)$$

где, как и раньше,  $\bar{w} = 1/N$ . Интегрируя по  $\xi$  в пределах  $\pm 2\Gamma$ , приходим к чисто экспоненциальному распределению,

$$P_\Gamma(\Gamma) = \frac{1}{\bar{w}} e^{-\Gamma/\bar{w}}. \quad (14.133)$$



Технические достижения последних лет дали нам возможность ставить эксперименты, которые раньше мы могли проводить только в уме. Реализация на практике мысленных экспериментов подтверждает корректность законов квантовой механики. Эти новые эксперименты так или иначе связаны с существованием квантовой запутанности...

С. Газиорович *Квантовая физика, 3-е изд.*

## Глава 15

### Квантовые запутанные состояния

#### 15.1 Квантовая запутанность

Понятие квантовой запутанности столь же старо, как и сама квантовая механика. Однако, лишь сравнительно недавно эта концепция снова попала в центр внимания. Основная причина — задача по созданию квантового компьютера. Здесь мы рассмотрим лишь несколько общих идей, относящихся к этой безудержно развивающейся области.

Мы уже не раз имели дело с запутанными состояниями во многих частях этого курса. Точнее, надо говорить о *запутанных подсистемах* квантовых систем в заданном состоянии. В действительности, формализм сложения угловых моментов, см. Разд. I.7, весь построен на запутанных состояниях — собственные состояния полного спина в случае двух связанных подсистем обычно оказываются именно такими запутанными состояниями. Соответствующий пример можно найти в *Задаче I.7.2*; рассматриваемые там состояния и являются так называемыми *запутанными состояниями Белла*. Важно понимать, что понятие запутанности обычно относится к конкретным *наблюдаемым*, или к конкретным постановкам эксперимента.

Для простоты рассмотрим случай *двух подсистем*, где мы допускаем возможность измерения переменных, принадлежащих *одной из подсистем*. В случае двух спинов мы в принципе можем измерять спин либо первой, либо второй подсистемы, либо обеих сразу. Соответствующие процедуры представлены эрмитовыми операторами  $\hat{s}_i^{(1)}$ ,  $\hat{s}_k^{(2)}$  или их произведениями. В качестве других примеров можно рассмотреть распад заряженного пиона

$\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm + \nu$ , фотодиссоциацию дейтрона  $d + \gamma \rightarrow p + n$ , рождение электрон-позитронной пары двумя фотонами, или внутреннюю конверсию гамма-излучения из возбужденного состояния ядра в электрон-позитронную пару. Аналогично, можно рассматривать двухфотонный переход в атоме с регистрацией поляризации одного или обоих фотонов. Для избежания ненужных усложнений мы начнем с примеров двух *различаемых* компонент пары, когда не возникает сомнений, чей же спин измеряется.

С независимыми (не запутанными) компонентами пары и конечное спиновое состояние перед измерением есть простое *не связанное* произведение спиноров  $\chi_1^{(A)} \chi_2^{(B)}$ , где верхние индексы  $(A, B)$  помечают принадлежность к подсистеме, а нижние индексы  $(1, 2)$  характеризуют конкретное одночастичное спиновое состояние. Однако в случаях распада, упомянутых выше, конечное состояние может отражать ограничения, налагаемые законами сохранения. Тогда состояния продуктов распада могут оказаться *взаимосвязанными* даже при отсутствии явного взаимодействия между ними, например, в смысле сложения угловых моментов. Если партнеры должны находиться в синглетном спиновом состоянии, конечная волновая функция должна иметь вид

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi_+^{(A)} \chi_-^{(B)} - \chi_-^{(A)} \chi_+^{(B)} \right). \quad (15.1)$$

Здесь одночастичные спиновые состояния заданы осью квантования  $z$ , хотя для синглетного спинового состояния волновая функция инвариантна к поворотам и поэтому при любом другом выборе оси квантования она будет иметь тот же вид.

Для спинового триплета такой инвариантности нет, но волновая функция  $\chi_{10}$  для полного спина  $S = 1$  и его  $z$ -проекции  $S_z = 0$  имеет, в  $z$ -представлении вид, подобный (15.1), хотя и с противоположным знаком в суперпозиции.

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi_+^{(A)} \chi_-^{(B)} + \chi_-^{(A)} \chi_+^{(B)} \right). \quad (15.2)$$

Для триплетного спинового состояния  $\chi_{11}$  запутывания нет, поскольку волновая функция является произведением  $\chi_+^{(A)} \chi_+^{(B)}$ . Формулировка понятия запутанности в широком смысле включает в себя как взаимообусловленность комбинированных состояний измеряемых подсистем, так и постановку соответствующих экспериментов. Состояние называется запутанным, если в результате определенного типа экспериментов, производимых над подсистемами, его нельзя представить как произведение волновых функций

соответствующих подсистем. Измерение проекции спина первой подсистемы в случае (15.2) неизбежно воздействует на систему, непосредственно не измерявшуюся, (собственно это и называется *свойством запутывания*). Ниже, после рассмотрения свойств запутывания на примере квантовой телепортации мы перейдем в Разд. 15.3 к его строгому математическому определению.

## 15.2 Телепортация

Концепция запутанности проявляется в алгоритме, предложенном в [30] для передачи данного квантового состояния между двумя наблюдателями, так называемой *квантовой телепортацией*.

Рассмотрим начальное запутанное квантовое состояние, доступное для обоих наблюдателей  $A$  and  $B$ , традиционно называемых в литературе по квантовой информации *Элис (Alice)* и *Боб (Bob)* (тем самым, мы продолжим использовать наши обозначения, введенные выше). Для простейших подсистем с двумя квантовыми состояниями, кубитов (qubits), предположим, что состояние пары кубитов имеет, например, вид

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_A; \downarrow_B\rangle + |\uparrow_A; \uparrow_B\rangle \right). \quad (15.3)$$

Задача заключается в передаче неизвестного квантового состояния, *сообщения*

$$|\psi\rangle = \alpha |\downarrow\rangle + \beta |\uparrow\rangle \quad (15.4)$$

от  $A$  к  $B$ . Измерение наблюдателем  $A$  свойств состояния  $|\psi\rangle$  разрушило бы когерентную комбинацию (15.4). Вместо этого  $A$  следует воспользоваться квантовой запутанностью с  $B$  в качестве средства коммуникации.

Полное состояние  $|\Psi\rangle$  включая наблюдателей содержит три кубита и может быть записано в виде

$$|\Psi\rangle = |\psi; \psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \alpha |\downarrow_m \downarrow_A \downarrow_B\rangle + \alpha |\downarrow_m \uparrow_A \uparrow_B\rangle + \beta |\uparrow_m \downarrow_A \downarrow_B\rangle + \beta |\uparrow_m \uparrow_A \uparrow_B\rangle \right). \quad (15.5)$$

В обозначениях для всех компонент спины упорядочены как *"сообщение"* spin,  $A, B$ ). Далее, удобно разложить подсистему  $A$  + "сообщение" по полному базису запутанных состояний Белла для данной подсистемы,

$$|\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_m \downarrow_A\rangle \pm |\uparrow_m \uparrow_A\rangle \right), \quad (15.6)$$

$$|\zeta_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\downarrow_m \uparrow_A\rangle \pm |\uparrow_m \downarrow_A\rangle \right). \quad (15.7)$$

Из уравнений (15.5-15.7) находим

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \frac{1}{2} \left[ |\chi_+\rangle \left( \alpha |\downarrow_B\rangle + \beta |\uparrow_B\rangle \right) + |\chi_-\rangle \left( \alpha |\downarrow_B\rangle - \beta |\uparrow_B\rangle \right) \right. \\ & \left. + |\zeta_+\rangle \left( \alpha |\uparrow_B\rangle + \beta |\downarrow_B\rangle \right) + |\zeta_-\rangle \left( \alpha |\uparrow_B\rangle - \beta |\downarrow_B\rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (15.8)$$

На данном этапе  $A$  производит измерение в представлении состояний Белла (15.6,15.7) и получает, с равной вероятностью, одно из этих состояний, которое отвечает выбору соответствующей линейной комбинации для состояний кубита  $B$ , с теми же (с точностью до знака) коэффициентами, как и в неизвестном состоянии сообщения. Для каждого из четырех состояний  $|\chi_{\pm}\rangle$  и  $|\zeta_{\pm}\rangle$ , результат измерения произведенного наблюдателем  $A$  и переданный наблюдателю  $B$  посредством любого классического канала коммуникации позволяет определить операцию, которую  $B$  должен применить к состоянию своего кубита, чтобы состояние сообщения. (15.4)

### Задача 15.1

Установите протокол унитарных операций, предписанных наблюдателю  $B$  для восстановления неизвестного состояния в каждом из четырех возможных исходов эксперимента, произведенного наблюдателем  $A$ .

**Решение** Способ (записанный с помощью матриц Паули, который должен быть применен к кубиту, находящемуся в распоряжении  $B$ ) не зависит от неизвестного состояния и может быть обговорен заранее, для обеспечения успешной телепортации:

$$|\zeta_+\rangle \Rightarrow \sigma_x, \quad |\chi_-\rangle \Rightarrow \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y, \quad |\chi_+\rangle \Rightarrow 1, \quad |\zeta_-\rangle \Rightarrow \sigma_z. \quad (15.9)$$

По завершению процесса начальное состояние в месте нахождения  $A$  разрушено, но оно полностью восстановлено в месте нахождения  $B$ . Поэтому *теорема о запрете клонирования*, Разд. I.5, не нарушена. Исходная запутанность квантовых состояний  $A$  и  $B$  более не существует по завершению процедуры. Конечно, мы не можем передать физическую реализацию состояния  $|\psi\rangle$ , а можем лишь реконструировать идентичное состояние на другом кубите.

### 15.3 Математика запутывания

. Для того, чтобы ввести строгое определение собственно запутанности, рассмотрим снова две подсистемы,  $A$  и  $B$ , общей квантовой системы. Предположим, что размерность гильбертова пространства подсистем соответственно равна  $n_A$  и  $n_B$  и, для определенности,  $n_A \leq n_B$ .

Пусть  $|j_A\rangle$  и  $|k_B\rangle$  — произвольные полные ортогональные наборы состояний индивидуальных подсистем. Любое нормированное состояние составной системы может быть представлено в виде разложения

$$|\Psi\rangle = \sum_{jk} C_{jk} |j_A\rangle |k_B\rangle, \quad \sum_{jk} |C_{jk}|^2 = 1. \quad (15.10)$$

При наличии запутанности не существует базиса, в котором состояние  $|\Psi\rangle$  могло бы быть представлено в виде простого произведения  $|j_A\rangle |k_B\rangle$ . В общем случае, не более чем  $n_A$  векторов *большой* подсистемы,

$$|\psi_{j;B}\rangle = \sum_k C_{jk} |k_B\rangle, \quad (15.11)$$

могут быть включены в это разложение. Набор состояний (15.11) может быть ортогонализирован и нормирован стандартными процедурами линейной алгебры, Разд. I.6. Эффективно, в этом новом базисе процедура сведется к диагонализации матрицы  $C_{jk}$ , чья размерность не более, чем  $n_A \times n_A$ . Тогда исходное состояние представляется, как

$$|\Psi\rangle = \sum_j C_j |j_A\rangle |j_B\rangle, \quad (15.12)$$

Где каждое состояние первой подсистемы имеет лишь одного партнера во второй, обозначаемого тем же символом  $|j\rangle$ . Поскольку фазы новых базисных состояний произвольны и партнеры принадлежат различным подсистемам, мы всегда можем подбором этих фаз ненулевые числа  $C_j$  сделать вещественными и положительными;  $\sum_j C_j^2 = 1$ . Обычно это удобно для упорядочивания ненулевых чисел в убывающем порядке,  $C_1 \geq C_2 \geq \dots \geq C_r$ , где  $r \leq n_A$  — *ранг* (иногда называемый *рангом Шмидта*) запутанности. Оставшиеся числа  $C_j$  равны нулю. Запутанность имеет место лишь при  $r > 1$ .

Известным является пример векторной связи угловых моментов двух подсистем. Для определенных квантовых чисел  $J, M$  of системы в целом имеется взаимное соответствие между состояниями  $j_A$  с определенными

значениями  $J_1, M_1$  и состояниями  $j_B$  второй подсистемы с квантовыми числами  $J_2, M_2$ . Здесь механизм запутывания подчиняется требованию инвариантности по отношению к *общим* поворотам подсистем, безотносительно к их индивидуальным размерностям. Фазы коэффициентов Клебша-Гордана можно включить в определение соответствующих состояний, оставляя лишь их абсолютные значения так же, как это сделано в (15.12) для коэффициентов разложения  $C_j \geq 0$ . Этот результат основан на *сингулярном разложении* (*singular value decomposition*). Любая (не обязательно эрмитовая и не обязательно квадратная) матрица  $\hat{C}$  с  $n_A$  строками и  $n_B$  столбцами, и, в общем случае, комплексными матричными элементами, всегда может быть представлена в виде произведения трех матриц,

$$\hat{C} = \hat{U}_A \hat{D} \hat{U}_B^\dagger, \quad (15.13)$$

где  $n_A \times n_A$  матрица  $\hat{U}_A$  и  $n_B \times n_B$  матрица  $\hat{U}_B$  унитарны, тогда как  $\hat{D}$  — диагональная матрица с  $r$  упорядоченными положительными элементами,  $r \leq n_A \leq n_B$ , и нулевыми оставшимися. Ненулевые диагональные элементы  $C_j$  матрицы  $\hat{D}$  называются *сингулярными значениями*. Сингулярные значения  $C_j$  определены единственным образом, хотя и имеется свобода выбора преобразований  $\hat{U}_A$  и  $\hat{U}_B$ . Разложение (15.13) является обобщением приведения эрмитовой матрицы к диагональному виду; однако в случае диагонализации пространства  $A$  и  $B$  совпадают, так что унитарные преобразования базиса должны быть одни и те же для  $A$  и  $B$ ,  $\hat{U}_A = \hat{U}_B$ , ранг  $r$  равен размерности,  $r = n_A = n_B$ , и знак вещественных собственных значений  $C_j$  определяется исходной матрицей.

Для формального доказательства (15.13) мы можем рассмотреть *эрмитову*  $n_B \times n_B$  матрицу  $\hat{C}^\dagger \hat{C}$  имеющую  $n_B$  действительных неотрицательных собственных значений. Мы можем диагонализировать эту матрицу унитарным преобразованием  $\hat{T}$ ,

$$\hat{T}^\dagger (\hat{C}^\dagger \hat{C}) \hat{T} = \hat{X}_{\text{diag}}, \quad (15.14)$$

где  $\hat{X}_{\text{diag}}$  диагональна и мы упорядочили сначала неотрицательные матричные элементы в убывающем порядке, затем — нулевые значения. Неотрицательный (левый верхний) угол матрицы  $\hat{X}_{\text{diag}}$  есть  $\hat{D}^2$ . Соответствующее разложение матрицы преобразования  $\hat{T}$  в верхней,  $\hat{T}_u$ , и в нижней,  $\hat{T}_l$ , частях, приводит к

$$\hat{T}_u^\dagger \hat{C}^\dagger \hat{C} \hat{T}_u = \hat{D}^2, \quad \hat{C} \hat{T}_l = 0 = \hat{T}_l^\dagger \hat{C}^\dagger. \quad (15.15)$$



Матрица  $\hat{D}^2$  имеет хорошо определенный квадратный корень  $\hat{D}$ , и обратную матрицу,  $\hat{D}^{-1}$ . Тогда мы можем ввести  $\hat{U}_A = \hat{C}\hat{T}_u\hat{D}^{-1}$ , таким образом, что

$$\hat{U}_A\hat{D}\hat{T}_u^\dagger = \hat{C}. \quad (15.16)$$

Отождествляя  $\hat{T}_u$  с  $\hat{U}_B$  мы удовлетворим (15.15) и всем последующим (строго говоря, эти матрицы должны быть дополнены нулевыми строками и столбцами для обеспечения их унитарности в полном гильбертовом пространстве).

Если же мы интересуемся лишь одной из запутанных подсистем, мы построим сначала полную матрицу плотности  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  и затем *редуцированную матрицу плотности*, см. Разд. 13.1, беря след по переменным партнера, например,

$$\rho_A = \text{Tr}_B (|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_j C_j^2 |j_A\rangle\langle j_A|. \quad (15.17)$$

Редуцированная матрица плотности  $\rho_B$  для второй подсистемы получается таким же образом и содержит те же числа  $C_j^2$ . Можно сказать, что базис разложения Шмидта есть *собственный базис* для обеих сокращённых матриц плотности  $\rho_A$  и  $\rho_B$ . Это напоминает ситуацию с симметрией частица-дырка, см. Разд. 8.8, в конфигурациях оболочечной модели, которая справедлива независимо от размерностей взаимодополняющих пространств для частицы и дырки.

Замечательным свойством этого разложения является то, что энтропия Шеннона состояния, см. Разд. 14.9,

$$I[\psi] = -\sum_j C_j^2 \ln(C_j^2) = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \ln \rho_B), \quad (15.18)$$

здесь совпадает с энтропией (фон Неймана) для ансамбля (Разд. 13.6) редуцированных матриц плотности. Поэтому эта величина может быть использована как мера степени запутанности. В случае двух подсистем с равными спинами  $j_A = j_B \equiv j$ , сложенными в полный спин  $J = 0$ , индекс суммирования в (15.18) есть проекция  $m$ , размерности равны,  $n_A = n_B = 2j + 1$ , и все сингулярные значения равны  $C_m = 1/\sqrt{2j+1}$ . Это соответствует максимальной энтропии,

$$I[\psi(J=0)] = \ln(2j+1) = \ln n_A = \ln n_B, \quad (15.19)$$

которая сигнализирует о максимальной запутанности.

**Задача 15.2**

Рассмотрите бозе газ  $N$  двухуровневых атомов при нулевой температуре. Газ взаимодействует с резонансным лазерным полем, которое вызывает в атомах переходы между двумя внутренними состояниями. Постройте редуцированную матрицу плотности и найдите энтропию запутанности между двумя атомными бозе конденсатами.

**Решение** Здесь удобно представление Швингера для угловых моментов (см. *Задачу II.5.2*). Полный набор состояний всей системы, состоящей из  $N = N_A + N_B$  атомов может быть охарактеризован либо распределением  $(N_A, N_B)$  по атомным состояниям  $A$  и  $B$ , либо квантовыми числами углового момента  $N_A = J + M$ ,  $N_B = J - M$ ,

$$|N_A, N_B\rangle \equiv |JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+M)!(J-M)!}} (a^\dagger)^{J+M} (b^\dagger)^{J-M} |0\rangle, \quad (15.20)$$

где  $a^\dagger$  и  $b^\dagger$  — операторы рождения для атомов сорта  $A$  и  $B$ , соответственно. Эти состояния являются произведениями ортонормированных функций для парциальных конденсатов. Произвольная волновая функция двухкомпонентного конденсата (для фиксированного числа частиц  $N$  и потому  $J = N/2$ ) имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_M C_M |JM\rangle. \quad (15.21)$$

Редуцированная матрица плотности дается выражением

$$\rho_A = \sum_{M=-N/2}^{N/2} |C_M|^2 |N_A\rangle \langle N_A|, \quad (15.22)$$

энтропия запутанности  $I[\psi]$  может быть записана, как в (15.18); ее максимум равен  $\ln(2J+1) = \ln(N+1)$ , как уже было упомянуто в (15.19). Максимум соответствует состоянию с однородным распределением атомных амплитуд по всем возможным заполнениям,  $N_A = 0, 1, \dots, N$ .

**15.4 Квантовые неравенства Белла**

. Запутанная система двух спинов  $1/2$  может служить хорошим примером для иллюстрации существования *корреляций* между результатами измерений, выполненных двумя партнерами по запутыванию. Эти корреляции

принимают форму особых неравенств. Мы рассмотрим простейшую форму такого неравенства.

Предположим, что наша аппаратура способна измерять переменные  $\hat{F}_\alpha^{(j)}$  для подсистем  $j = 1, 2$  (результаты могут быть обобщены на большее число подсистем). Мы можем считать, что эти операторы представляют компоненты спинов для определенной оси квантования, помеченной символом  $\alpha$ . Операторы, соответствующие различным подсистемам,  $j \neq j'$ , коммутируют. Для простоты, предположим, что собственные значения всех операторов равны  $\pm 1$ , как это имеет место для матриц Паули  $\sigma_\alpha$ ; это означает, что

$$\left(\hat{F}_\alpha^{(j)}\right)^2 = 1. \quad (15.23)$$

Также можно предположить, что наблюдаемые  $\langle F_\alpha^{(j)} \rangle$  всех этих величин в обсуждаемом состоянии принимают произвольные значения (всегда лежащие между -1 и +1 и отличные от нуля).

Выберем для двух подсистем независимо две пары операторов  $\alpha = 1, 2$  и построим специальным образом [31] четыре корреляционных функции (наблюдаемые в данном состоянии полной системы)

$$C_{\alpha\beta} = \langle \hat{F}_\alpha^{(1)} \hat{F}_\beta^{(2)} \rangle, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (15.24)$$

Производя эксперименты над системой мы можем определить наблюдаемые

$$R = C_{11} + C_{12} + C_{21} - C_{22}. \quad (15.25)$$

Неравенство

$$|R| \leq 2\sqrt{2} \quad (15.26)$$

следует алгебраически из определения (15.25) и нормировки (15.23). Действительно, из (15.23) следует, что

$$S \equiv \sum_{j=1,2} \sum_{\alpha=1,2} (\hat{F}_\alpha^{(j)})^2 = 4. \quad (15.27)$$

Простые алгебраические выкладки, с учетом коммутативности переменных, относящихся к разным подсистемам, дают

$$S - R\sqrt{2} = \left\langle \left( F_1^{(1)} - \frac{1}{\sqrt{2}} [F_1^{(2)} + F_2^{(2)}] \right)^2 + \left( F_2^{(1)} - \frac{1}{\sqrt{2}} [F_1^{(2)} - F_2^{(2)}] \right)^2 \right\rangle.$$

$$(15.28)$$

Поскольку выражение (15.28) неотрицательно, из (15.27) непосредственно следует доказательство неравенства (15.26). Теперь можно показать, что верхняя граница этого неравенства,  $|R| = 2\sqrt{2}$ , может быть достигнута в корреляционных экспериментах со спином.

### Задача 15.3

Рассмотрим систему со спином 0, распадающуюся на две частицы со спином  $1/2$ . (15.1). Эксперименты 1 и 2, совершаемые над первой частицей, измеряют соответственно проекции ее спина на оси, направленные под углами  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  по отношению к оси  $z$ . В то же самое время, эксперименты над второй частицей измеряют ее проекции спина на оси, направленные под углами  $\beta_1$  и  $\beta_2$ . Вычислите величину  $R$ , (15.25), и покажите, что предельное значение (15.26) достигается для некоторых выборов углов  $\alpha$  и  $\beta$ .

**Решение** Каждое измерение дает наблюдаемое значение  $\pm 1$  оператора  $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})$  для данной частицы и заданного направления анализатора  $\mathbf{n}$ . Соответствующие вероятности в измерениях над обоими партнерами определяют величины  $C$ , (15.24). Амплитуда вероятности прохождения через фильтр анализатора с углом  $\alpha$  для частицы, поляризованной вдоль оси  $z$  равна  $\cos(\alpha/2)$  (Разд. I.20.3). Для прохождения двух частиц находим

$$\langle \alpha(1)\beta(2) | \chi_{00} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \cos \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\pi - \beta}{2} - \cos \frac{\pi - \alpha}{2} \cos \frac{\beta}{2} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\beta - \alpha}{2}. \quad (15.29)$$

Таким образом, вероятность измерения обоих спинов вдоль соответствующих направлений равна

$$P(\alpha \uparrow, \beta \uparrow) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2}. \quad (15.30)$$

Таким же образом мы получим то же значение для

$$P(\alpha \downarrow, \beta \downarrow) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2} \quad (15.31)$$

и

$$P(\alpha \uparrow, \beta \downarrow) = P(\alpha \downarrow, \beta \uparrow) = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\alpha - \beta}{2}, \quad (15.32)$$

так что сумма четырех возможных исходов складывается в единицу. Поскольку произведения двух измеряемых результатов, нормированных условием (15.23), равны для четырех возможных случаев  $+1, +1, -1, -1$ , корреляционная функция (15.24) принимает вид

$$\begin{aligned} C(\alpha, \beta) &= P(\alpha \uparrow, \beta \uparrow) + P(\alpha \downarrow, \beta \downarrow) - P(\alpha \uparrow, \beta \downarrow) - P(\alpha \downarrow, \beta \uparrow) \\ &= \sin^2 \frac{\alpha - \beta}{2} - \cos^2 \frac{\alpha - \beta}{2} = -\cos(\alpha - \beta). \end{aligned} \quad (15.33)$$

Беря различные комбинации углов, находим величину (15.25):

$$R = -\cos(\alpha_1 - \beta_1) - \cos(\alpha_1 - \beta_2) - \cos(\alpha_2 - \beta_1) + \cos(\alpha_2 - \beta_2). \quad (15.34)$$

Выбирая, например, значения углов в эксперименте

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \frac{\pi}{2}, \quad \beta_1 = \frac{\pi}{4}, \quad \beta_2 = -\frac{\pi}{4}, \quad (15.35)$$

Получим предельное значение

$$R = -3 \cos \frac{\pi}{4} + \cos \frac{3\pi}{4} = -2\sqrt{2}. \quad (15.36)$$

## 15.5 Парадокс ЭПР(Б) и скрытые переменные

. Квантовые неравенства Белла демонстрируют замечательную особенность квантовой механики, а именно — невозможность введения *локальных скрытых переменных*, которые "исправили" бы вероятностный характер квантовомеханических утверждений и придали бы этой теории классически детерминистическое содержание.

Кажущаяся парадоксальность природы квантовой механики была подчеркнута в известной статье *Эйнштейна, Подольского и Розена* [32]. Парадокс был впоследствии облечен в более прозрачную форму в терминах запутанных спиновых состояний в работе *Бома* [33] и получил новый акроним (ЭПРБ). Проблема связана с неизбежностью корреляций между событиями, разделенными пространственно таким образом, который исключал возможность связи между ними посредством обмена каким-либо физическим сигналом.<sup>1</sup> Возвращаясь снова к эксперименту, рассматривавшемуся в *Задаче 15.3*, мы можем установить независимо направления

<sup>1</sup>В специальной теории относительности (СТО) интервал между такими событиями называется пространственно-подобным. Согласно СТО такие события не могут быть связаны причинно-следственными отношениями.

$\alpha$  и  $\beta$  в измерительной аппаратуре на краях установки, которые мы можем выбрать сколь угодно далеко друг от друга. Запутанность спинов эволюционирует во времени согласно уравнению Шрёдингера. Если на левом краю зарегистрированный спин направлен вверх, и оси в анализаторах выбраны одинаковым образом на обоих краях, можно утверждать с определенностью, даже до любого измерения, что второй спин будет направлен вниз. Само по себе это утверждение означает лишь сохранение полного спина, равного нулю. Однако, ориентация оси левого анализатора может быть установлена лишь в самый последний момент — тем не менее, при получении положительного результата можно немедленно предсказать результат измерения в правом анализаторе.

Это выглядит, как невидимая связь, информирующая удаленный спин о выбранном эксперименте с бесконечной скоростью. Более того, поскольку вторая частица "не знает какой тип эксперимента будет произведен, кажется, что она заранее имеет определенные значения проекции спина на различные оси, "некий элемент физической реальности по терминологии ЭПР. Но это находилось бы в очевидном противоречии с квантовой механикой, поскольку соответствующие операторы не коммутируют. Квантовомеханический результат не согласуется с какой-либо *локальной причинностью*, исходящей из предположения, что оба спина после распада начального состояния приобретают определенные направления, и в эксперименте остается лишь измерить их предопределенные значения. Он ближе "*копенгагенской интерпретации Бора*, согласно которой измеренные значения динамических переменных не существуют до момента измерения а, скорее, являются результатом взаимодействия с измеряющим прибором. Локальность могла бы остаться, если бы квантовое состояние в действительности определялось бы посредством некоторых *скрытых переменных*, которые определяли бы реально существующую ориентацию обоих спинов в каждом конкретном измерении. Тогда квантовая механика стала бы статистической теорией соответствующей вероятностному усреднению по лежащим в основе процессов скрытым переменным. К счастью, данный вопрос может быть разрешен с помощью конкретных экспериментов. Такие эксперименты действительно были выполнены, и их результаты полностью подтвердили наличие квантовых нелокальных корреляций.

Следуя *Беллу* [34], можно показать, что определенные наблюдаемые корреляции между измеряемыми результатами в квантовой механике оказываются другими при сравнении с ожидаемыми в любой *локальной* теории, основанной на существовании скрытых переменных, что обеспечивает надлежащие исходы измерений во взаимно удаленных точках. Предпо-

жение о неких скрытых переменных  $\lambda$  означает, что вероятности, подобные (15.30-15.32) задаются на скрытом уровне распределением  $f(\lambda)$ , которое определяет локально результаты экспериментов на обоих противоположных концах  $i$  и  $j$ ,

$$P^{(ij)}(\alpha a, \beta b) = \int d\lambda f(\lambda) P^{(i)}(\alpha a; \lambda) P^{(j)}(\beta b; \lambda), \quad (15.37)$$

где  $P^{(i)}(\alpha a; \lambda)$  — вероятность результата  $a$  ( $\uparrow$  или  $\downarrow$  в случае спина) эксперимента, произведенного в точке  $i$  анализатором, ориентированным вдоль направления  $\alpha$  под локальным контролем переменных  $\lambda$ . Здесь мы предположим, что функция распределения  $f(\lambda)$  нормирована стандартным образом,

$$\int d\lambda f(\lambda) = 1. \quad (15.38)$$

Теперь становится возможным показать формально, что предположение о скрытых переменных (15.37) противоречит квантовым неравенствам Белла. Вместо (15.33) мы теперь имеем

$$\begin{aligned} C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) & \left[ P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) + P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) \right. \\ & \left. - P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) \right], \end{aligned} \quad (15.39)$$

или

$$C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) \left[ P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda) \right] \left[ P^{(2)}(\beta \uparrow; \lambda) - P^{(2)}(\beta \downarrow; \lambda) \right]. \quad (15.40)$$

Эта величина определена усреднением по скрытым переменным произведений наблюдаемых, измеренных на противоположных концах, таких как

$$X^{(1)}(\alpha; \lambda) = P^{(1)}(\alpha \uparrow; \lambda) - P^{(1)}(\alpha \downarrow; \lambda), \quad (15.41)$$

откуда

$$C(\alpha, \beta) = \int d\lambda f(\lambda) X^{(1)}(\alpha; \lambda) X^{(2)}(\beta; \lambda). \quad (15.42)$$

Поскольку исходы  $\uparrow$  и  $\downarrow$  являются взаимоисключающими и сумма их вероятностей равна единице, величины  $X$  ограничены  $\pm 1$ ,

$$|X^{(i)}(\alpha; \lambda)| \leq 1. \quad (15.43)$$

Теперь мы собираемся вычислить комбинацию  $R$ , (15.25). Первая половина этой комбинации

$$C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2) = \int d\lambda f(\lambda) X^{(1)}(\alpha_1; \lambda) [X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)]. \quad (15.44)$$

Переходя к абсолютным значениям и вспоминая неравенство (15.43), мы вместо (15.44) получим

$$|C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2)| \leq \int d\lambda f(\lambda) |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)|. \quad (15.45)$$

Тем же самым образом

$$|C(\alpha_2, \beta_1) - C(\alpha_2, \beta_2)| \leq \int d\lambda f(\lambda) |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) - X^{(2)}(\beta_2; \lambda)|. \quad (15.46)$$

Поскольку все  $|X| \leq 1$ ,

$$|X^{(2)}(\beta_1; \lambda) + X^{(2)}(\beta_2; \lambda)| + |X^{(2)}(\beta_1; \lambda) - X^{(2)}(\beta_2; \lambda)| \leq 2 \quad (15.47)$$

(если одно абсолютное значение достигает 2, другое обращается в нуль). Уравнения (15.45–15.47) вместе с нормировкой (15.38) приводят к

$$|C(\alpha_1, \beta_1) + C(\alpha_1, \beta_2)| + |C(\alpha_2, \beta_1) - C(\alpha_2, \beta_2)| \leq 2, \quad (15.48)$$

и потому функция корреляции (15.25) удовлетворяет

$$|R| \leq 2, \quad (15.49)$$

в явном противоречии квантовому примеру (15.36). Насколько можно проследить происхождение разногласия, оно возникает с предположением факторизации вероятности (15.37) в произведение локальных вероятностей при одном и том же значении скрытых переменных. Квантовая механика подобной факторизации не допускает.



## 15.6 Экспериментальные тесты

. Таким образом, введение скрытых переменных приводит к разногласию с правилами обычной квантовой механики. Разница между (15.37) и ограничением (15.49) *конечна* и может быть проверена экспериментально, если экспериментальная погрешность может быть сделана меньше, чем эта разница.

Наиболее убедительные эксперименты [35, 36] были выполнены А. Аспектом с коллабораторами, которые использовали схему Рис. 15.1*a*. Вместо частиц со спином  $1/2$  в экспериментах изучался двухфотонный переход возбужденного  $^1S_0$  состояния атома кальция с конфигурацией валентного электрона  $4p^2$ , Рис. 15.1*b*. Прямой однофотонный переход в основное состояние с теми же квантовыми числами  $^1S_0$  в конфигурации  $4s^2$  невозможен ( $J = 0 \rightarrow J = 0$  однофотонные переходы запрещены, Разд. 5.7). Радиационный переход идет через два дипольных перехода в видимой области спектра через промежуточное состояние  $^1P_1$  с конфигурацией  $4s4p$ . Поскольку полный угловой момент, уносимый фотонами должен быть равен нулю, их поляризации комплементарны (параллельны или перпендикулярны оси поляризатора), и мы имеем ситуацию аналогичную парадоксу ЭПР(Б). Результаты оказываются в отличном согласии с квантовомеханическими предсказаниями, предсказывающими сильное нарушение неравенства(15.49).

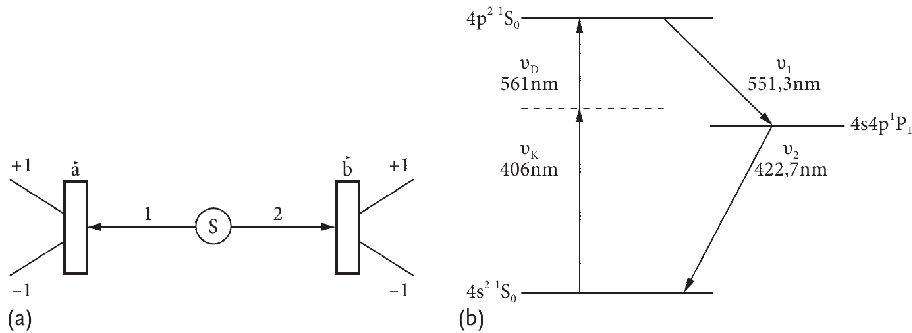


Рис. 15.1. Схематический вид эксперимента Аспекта (a), фотонная поляризация измеряется вдоль направлений **a** и **b**; соответствующие уровни атома кальция (b) [?]

Последние три эксперимента этой группы [36] исключили возражения, связанные с возможным влиянием измерений на противоположных концах,

которое могло бы устанавливаться из-за предварительной фиксации направлений измеряемой поляризации (углов  $\alpha$  и  $\beta$ ). В них экспериментаторы использовали переключатель, менявший эти направления за времена *более короткие*, чем время распространения фотона до места регистрации. Тем самым нормальная (*субсветовая* — более медленная, чем скорость света) передача сигнала была исключена. Еще более сильные выводы в том же направлении были получены в менее давних экспериментах с использованием массивных частиц и фотонов, см. например, [37, 38].

### 15.7 Декогерентность и парадокс измерения

. В обычной копенгагенской парадигме акт измерения приводит к *коллапсу* волновой функции в новую, являющуюся собственной функцией измеряемой переменной, с собственным значением, устанавливаемым исходом измерения. Тем самым акт получения физической информации о реальном состоянии системы лежит в некотором смысле вне квантовомеханического формализма.

Классический экспериментальный прибор определяет, какую величину предполагается измерить. В этом смысле набор возможных исходов и соответствующих собственных состояний задан. Волновая функция изучаемого состояния является суперпозицией разных функций базиса. Эксперимент проектирует исходную комбинацию на одну из функций этого набора и коэффициент суперпозиции проявляет себя (точнее, квадрат его абсолютного значения) как частота различных результатов в серии идентичных экспериментов. В этой формулировке не обсуждается "механизм" коллапса. В сущности, она отказывается от включения структуры *классического* прибора в формализм. В то же самое время законы квантовой механики, включая соотношение неопределённостей, могут быть справедливы лишь при условии, что классический прибор сам подчиняется этим соотношениям (вспомним эксперимент с двумя щелями из Разд. I.1). Такая ситуация выглядит логически неудовлетворительной, особенно на современном уровне экспериментального искусства.

Мы уже знаем (Разд. I.14), что при определенных условиях вполне *макроскопические* объекты могут вести себя так, как будто они находятся в одном квантовом состоянии. Сверхтекучесть и сверхпроводимость являются наиболее известными примерами такой макроскопической когерентности. С использованием современной квантовой оптики стало возможным наблюдение типичных квантовых явлений в атомных пучках на макроскопическом масштабе. Поэтому макроскопический размер системы не является доста-

точной причиной для объявления ее поведения классическим (что, кстати, вполне могло бы породить проблемы на раннем этапе становления квантовой механики). С другой стороны, если измеряющий прибор так же полностью квантовый, весь процесс измерения должен описываться уравнением Шрёдингера, и никакого "коллапса" волновой функции быть не может. Квантовая суперпозиция будет эволюционировать далее в соответствии с гамильтонианом, что с неизбежностью включает взаимодействие системы с измеряющей аппаратурой.

Здесь мы подошли к *парадоксу измерения* [?]. В какой-то момент эксперимент должен закончиться с определенным значением измеряемой физической величины. Это означает, что сделан выбор среди многих допустимых исходов. Но волновая функция описывает потенциальную возможность сразу всех допустимых результатов. Каким-то образом все кроме одного должны быть отброшены, а проявиться, с определенной вероятностью, лишь один выбранный, как реальное значение без какой-либо интерференции с другими частями волновой функции. Если мы продолжим дальнейшую эволюцию волновой функции, результат процесса измерения останется навсегда.

Поскольку разнообразные экспериментальные тесты квантовой механики неизменно подтверждают ее справедливость, нам нужно попытаться разрешить этот парадокс непротиворечивым рассмотрением процесса взаимодействия изучаемой системы с прибором и, в более широком смысле — с *внешней средой*. Мы не станем обсуждать здесь более эзотерические версии — как, например, интерпретацию квантовой механики, основанную на так называемой *множественности историй/миров* [39]; в соответствии с этим способом рассуждений квантовая суперпозиция выживает во всех актах измерений, и все альтернативы воплощаются во множестве параллельных историй, но мы можем наблюдать одну лишь связанную с нашим миром; каждый акт измерения расщепляет волновую функцию, порождая все новые и новые параллельные вселенные. Как сказал Ричард Фейнман, "это возможно, но я не очень счастлив бы был от этого" [40].

Хотя эта проблема не может рассматриваться как полностью решенная, похоже физическое прояснение этого парадокса весьма возможно. Проследим это на простом эксперименте, являющемся прототипом общей ситуации [?]. Рассмотрим *дихотомическую* квантовую переменную (имеющую лишь два собственных значения,  $\pm 1$ ) — такую, как спин частицы. Мы начнем с уравнения Шрёдингера, порождающего, как результат пред-

шествующей эволюции, суперпозицию

$$|\psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle. \quad (15.50)$$

Затем эта частица взаимодействует с детектором — например, прибором типа Штерна-Герлаха. Учитывая это взаимодействие, мы приходим к *общей* волновой функции частицы и детектора; последний, также являясь квантовой системой, описывается набором волновых функций  $|D\rangle$ . В их объединенном фазовом пространстве мы до взаимодействия имеем *некоррелированную* полную волновую функцию

$$|\Psi\rangle = |\psi; D\rangle. \quad (15.51)$$

В ответ на взаимодействие, правильно себя ведущий детектор послушно совершает переход в состояния *скоррелированные* со спином частицы,  $|D^{(+)}\rangle$  для состояния спина  $|+\rangle$ , и  $|D^{(-)}\rangle$  для состояния спина  $|-\rangle$ . Классически, указатель на приборе выбрал бы правое или левое отклонение от нулевого положения. На этом этапе, еще описываемом стандартной квантовой механикой, мы имеем *запутанное* состояние, присущее системе и измерительной аппаратуре,

$$|\Psi'\rangle = a_+|+; D^{(+)}\rangle + a_-|-; D^{(-)}\rangle. \quad (15.52)$$

Состояние (15.52) содержит в полной мере эффекты квантовой интерференции. Расщепленные части волновой функции могут быть снова сведены в исходное состояние, ничего *необратимого* не произошло. Если, например, состояние (15.50) отвечает комбинации  $\chi_{00}$  (15.1), она вращательно инвариантна и может быть записана таким же образом и по отношению к оси квантования  $x$ . Соответственно (15.52) показало бы детектор в состояниях

$$|D^{(\pm x)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|D^{(+)}\rangle \pm |D^{(-)}\rangle); \quad (15.53)$$

"детектор даже не определил бы набор альтернатив!" [?].

Это как раз то место, где мы должны вспомнить, что (а) детектор является макроскопическим телом с огромным числом степеней свободы и (б) он никогда полностью не изолирован от окружающей среды. Если мы исключим случаи идеальной макроскопической когерентности, данное положение указателя не определяет однозначно внутреннее состояние детектора. Имеются миллиарды микроскопических состояний детектора и окружающей среды,  $|D^{(\pm)}; i\rangle$ , которые *совместимы* с конкретным показанием  $D^{(\pm)}$

указателя и позволяют нам однозначное получение того же результата измерения. Это именно то, что мы можем принять в качестве определения *классического прибора*, предполагаемого в копенгагенской интерпретации Бора. Тем самым, (15.52) было бы лучше записать в виде чрезвычайно огромной

$$|\Psi'\rangle = a_+ \sum_i C_i^{(+)} |+\rangle; D^{(+)}; i(+)\rangle + a_- \sum_i C_i^{(-)} |-\rangle; D^{(-)}; i(-)\rangle, \quad \sum_i |C_i^{(\pm)}|^2 = 1. \quad (15.54)$$

Поскольку в конце мы фиксируем лишь положение указателя и усредняем по ненаблюдаемым переменным внутренней структуры и окружающей среды, мы переходим к описанию в терминах *матрицы плотности*. Рассматривая результат эволюции и динамического взаимодействия все еще как чистое квантовое состояние, мы имеем

$$\hat{\rho} = |\Psi'\rangle\langle\Psi'|. \quad (15.55)$$

Если мы введем четыре матрицы плотности для аппаратуры + окружающей среды,

$$\rho_{ij}^{\alpha\beta} = C_i^{(\alpha)} C_j^{(\beta)*}, \quad \alpha, \beta = \pm, \quad (15.56)$$

полная матрица плотности (15.55) подразумевает вид

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha\beta; ij} a_\alpha a_\beta^* \rho_{ij}^{\alpha\beta} |\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)\rangle\langle\beta; D^{(\beta)}; i(\beta)|. \quad (15.57)$$

Пусть теперь это сложнейшее чистое состояние начнет эволюционировать. Спустя очень короткое *время декогерентности* фазы огромного числа коэффициентов  $C_i^{(\alpha)}$  приведут к полной потере памяти о начальном состоянии. Единственными величинами, выжившими после усреднения, останутся

$$\overline{\rho_{ij}^{\alpha\beta}} = |C_i^{(\alpha)}|^2 \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta}. \quad (15.58)$$

Фактически мы приходим к *редуцированной* матрице плотности

$$\hat{\rho}_{\text{red}} = \sum_{\alpha; i} |a_\alpha|^2 |C_i^{(\alpha)}|^2 |\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)\rangle\langle\alpha; D^{(\alpha)}; i(\alpha)|, \quad (15.59)$$

где недиагональные по отношению к внутренним переменным матричные элементы отсутствуют. Окончательно, нашим результатом измерения является только показания указателя, независимо от всех других переменных. Это можно выразить взятием следа по переменным  $i(\alpha)$ ,

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\text{pointer}} &= \text{Tr}_{i(\alpha)} \hat{\rho}_{\text{red}} = \sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2 |D^{(\alpha)}\rangle \langle D^{(\alpha)}| \\ &= |a_+|^2 |D^{(+)}\rangle \langle D^{(+)}| + |a_-|^2 |D^{(-)}\rangle \langle D^{(-)}|. \end{aligned} \quad (15.60)$$

Декогерентность, неизбежная при работе с классическими приборами, разрушает суперпозицию и оставляет нам лишь классические вероятности взаимоисключающих результатов. Эти вероятности, однако, полностью определены исходным квантовым состоянием. Тем самым данный механизм разрешает парадокс измерения.

Нужно подчеркнуть аналогию подобных аргументов с тем, что традиционно заложено в основу статистической механики. Декогерентность необратима, после потери памяти о фазах в суперпозиции полное состояние (15.54) восстановить невозможно. Хорошо известное возражение Лшмидта, что рост энтропии в процессе стремления к статистическому равновесию должен быть обратим ввиду симметрии к обращению времени микроскопической динамики было парировано в свое время Л. Больцманом предложением обратить все микроскопические импульсы в макроскопической системе. В нашем сценарии энтропия также возрастает при переходе от чистого состояния к статистической смеси, но процесс обратить нельзя. Даже бесконечно малая ошибка в фазе суперпозиции разрушит обратимость.

## Литература

- [1] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Statistical Physics, Part 1. — 3 edition. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. — Vol. 5.
- [2] Pitaevskii L., Stringari S. Bose-Einstein Condensation. — Oxford : Clarendon Press, 2003.
- [3] Bogoliubov N. // J. Phys. USSR. — 1947. — Vol. 11. — P. 23.
- [4] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Fluid Mechanics. — 2 edition. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. — Vol. 6.
- [5] Anderson M. // Science. — 1995. — Vol. 269. — P. 198.
- [6] Pitaevskii L. // Sov. Phys. JETP. — 1961. — Vol. 13. — P. 451.
- [7] Gross E. // J. Math. Phys. — 1963. — Vol. 4. — P. 195.
- [8] E.H. Lieb R. S., Yngvason J. // Phys. Rev. A. — 2000. — Vol. 61. — P. 043602.
- [9] Geltman S. // EPL. — 2009. — Vol. 87. — P. 13001.
- [10] Leggett A. // Rev. Mod. Phys. — 1975. — Vol. 47. — P. 331.
- [11] Racah G. // Physica. — 1952. — Vol. 18. — P. 1097.
- [12] Belyaev S. // Kgl. Dansk. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. — 1959. — Vol. 31, no. 11.
- [13] Schriffer J. Theory of Superconductivity. — N.Y. : Westview Press, 1999.

- [14] Schuster H., Just W. Deterministic Chaos. — Weinheim : Wiley, 2005.
- [15] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Mechanics. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2003. — Vol. 1.
- [16] Haake F. Quantum Signatures of Chaos. — Berlin : Springer, 2004.
- [17] O. Bohigas M.-J. G., Schmit C. // Phys. Rev. Lett. — 1984. — Vol. 52. — P. 1.
- [18] V. Zelevinsky B.A. Brown M. H., Frazier N. // Phys. Rep. — 1996. — Vol. 276. — P. 85.
- [19] S. Rahav O. R., Fishman S. // J. Phys. A. — 2003. — Vol. 36. — P. L529.
- [20] T.A. Brody J. Flores J. F. P. M. A. P., Wong S. // Rev. Mod. Phys. — 1981. — Vol. 53. — P. 385.
- [21] Bohr A., Mottelson B. Nuclear Structure. — Singapore : World Scientific, 1998. — Vol. 1 and 2.
- [22] J.F. Laprise A. Hosseinizadeh J. L.-P. R. Z. J. K., Kröger H. // Phys. Lett. A. — 2010. — Vol. 374. — P. 2000.
- [23] P. Chau Huu-Tai N. S., Isacker P. V. // J. Phys. A. — 2002. — Vol. 35. — P. L199.
- [24] V.V. Flambaum A.A. Gribakina G. G., Kozlov M. // Phys. Rev. A. — 1994. — Vol. 50. — P. 267.
- [25] Ohya M., Petz D. Quantum Entropy and Its Use. — Berlin : Springer, 1993.
- [26] Dyson F. // J. Math. Phys. — 1962. — Vol. 3. — P. 140, 157, 166, 1199.
- [27] Statistical Theories of Spectra: Fluctuations / Ed. by C.E. Porter. — N.Y. : Academic Press, 1965.
- [28] T. Guhr A. M.-G., Weidenmüller H. // Phys. Rep. — 1998. — Vol. 299. — P. 299.
- [29] Percival I. // J. Phys. B. — 1973. — Vol. 6. — P. L229.
- [30] C.H. Bennett G. Brassard C. C.-R. J. A. P., Wootters W. // Phys. Rev. Lett. — 1993. — Vol. 70. — P. 1895.



- [31] J. Clauser M. Horne A. S., Holt R. // Phys. Rev. Lett. — 1969. — Vol. 23. — P. 880.
- [32] A. Einstein B. P., Rosen N. // Phys. Rev. — 1935. — Vol. 47. — P. 777.
- [33] Bohm D., Bub J. // Rev. Mod. Phys. — 1966. — Vol. 38. — P. 453.
- [34] Bell J. Speakable and unspeakable in quantum mechanics. — Cambridge University Press, 1993.
- [35] A. Aspect P. G., Roger G. // Phys. Rev. Lett. — 1981; 1982. — Vol. 47; 49. — P. 460; 91.
- [36] A. Aspect J. D., Roger G. // Phys. Rev. Lett. — 1982. — Vol. 49. — P. 1804.
- [37] M.A. Rowe D. Kielpinski V. M.-C. S. W. I. C. M. a. D. W. // Nature. — 2001. — Vol. 409. — P. 791.
- [38] S. Gröblacher T. Paterek R. K.-C. B. M. Z. M. A., Zeilinger A. // Nature. — 2007. — Vol. 446, 449. — P. 871, 252.
- [39] The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics / Ed. by B.S. DeWitt, N. Graham. — Princeton University Pres, 1973.
- [40] Feynman R. // Int. J. Theor. Phys. — 1982. — Vol. 21. — P. 467.

[illegible]