

Семинары по квантовой механике

Антоненко Даниил, Побойко Игорь, Степанов Николай

14 сентября 2020 г.

Оглавление

I	Теоретический минимум	5
1	Введение в квантовую механику	6
1.1	Формализм	6
1.1.1	Гильбертово пространство. Бра- и кет-вектора	6
1.1.2	Операторы и наблюдаемые	7
1.2	Измерение	8
1.2.1	О случайности	8
1.2.2	О редукции фон-Неймана	9
1.3	Эволюция	9
1.3.1	Энергетическое представление	10
1.4	Пример: молекула аммиака NH_3	11
1.5	Гильбертово пространство объединения подсистем	12
1.6	Пример: мысленный эксперимент Greenberger – Horne – Zeilinger – Mermin	12
2	Матрица плотности	14
2.1	Квантовые статистические распределения	14
2.1.1	Чистое состояние	14
2.1.2	Примеры	15
2.1.3	Термодинамика	15
2.2	Классическая vs. квантовая статистика	15
2.3	Измерения и редукция фон-Неймана	16
2.4	Матрица плотности подсистемы	17
2.4.1	Частичный след	17
2.4.2	Примеры	18
2.5	Динамика	19
3	Одномерное движение	20
3.1	Базовые свойства непрерывных степеней свободы	20
3.2	Координаты, трансляции и импульс	20
3.3	Общие свойства связанных состояний одномерного уравнения Шрёдингера	22
3.4	Задача о мелкой яме	23
3.4.1	Масштабы	23
3.4.2	Импульсное представление	24
3.4.3	Координатное представление и сшивка асимптотик (*)	26
3.5	Асимптотический вид состояний непрерывного спектра	27
3.6	Поток вероятности и унитарность рассеяния	27
3.6.1	Симметрия по отношению к обращению времени	29
3.7	Аналитические свойства амплитуд рассеяния	30
3.8	Пример: дельта-яма	30
3.9	Нормировка состояний непрерывного спектра	30
3.10	Нестационарная задача рассеяния и задержка волнового пакета (*)	32

4	Математические дополнения	35
4.1	Функции Бесселя $J_m(z)$, $Y_m(z)$, $H_m^{(1,2)}(z)$, $I_m(z)$, $K_m(z)$	35
4.2	Гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a, b; c; z)$	38
4.3	Вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1(a; b; z)$	41
4.4	Лестничная алгебра	42
4.5	Функция Эйри	45
4.6	Метод Лапласа	46
4.7	Функция Эйри и комплексный метод перевала	47
4.7.1	Метод перевала	48
4.8	Пример: задача Ландау – Зенера	50
5	Теория возмущений	53
5.1	Стационарная теория возмущений	53
5.1.1	Невырожденный случай	53
5.1.2	Пример: сжатие сферической ямы	55
5.1.3	Пример: поляризуемость дельта-ямы	56
5.1.4	Случай вырождения	57
5.1.5	Пример: вырожденная теория возмущений	58
5.2	Нестационарная теория возмущений	59
5.2.1	Постановка задачи	59
5.2.2	Возмущения, действующие в течении конечного времени	59
5.2.3	Пример: возбуждение осциллятора	59
5.2.4	Золотое правило Ферми	60
5.2.5	Пример: ионизация мелкой ямы	62
6	Адиабатическое приближение	64
6.1	Нестационарное адиабатическое приближение. Фаза Берри	64
6.1.1	Постановка задачи	64
6.1.2	Адиабатический анзац	64
6.1.3	Переходы на другие состояния	65
6.1.4	Пример: Задача Ландау – Зенера	65
6.1.5	Эволюция исходного состояния. Фаза Берри	68
6.1.6	Пример: спин в магнитном поле	68
6.2	Стационарное адиабатическое приближение. Приближение Борна – Опенгеймера	70
6.2.1	Постановка задачи	70
6.2.2	«Быстрые» и «медленные» подсистемы	70
6.2.3	Адиабатическое разделение переменных	71
6.2.4	Пример: адиабатический квантовый транспорт	73
6.2.5	Пример: свободная частица в эллипсе	74
6.2.6	Пример: конус в поле тяжести (*)	74
7	Квазиклассическое приближение	76
7.1	Квазиклассические волновые функции	76
7.2	Задача шивки	77
7.3	Пример: правило квантования Бора – Зоммерфельда	78
7.4	Пример: вероятность квазиклассического туннелирования	80
7.5	Пример: двухъямный потенциал	81
7.6	Пример: распад метастабильного состояния	82
7.7	Метод WKБ в комплексной плоскости	84
7.7.1	Структура решений WKБ	84
7.7.2	Функция Эйри	85
7.8	Пример: квадратичный потенциал	87

8	Теория рассеяния	90
8.1	Постановка задачи рассеяния	90
8.2	Функция Грина и теория возмущений	91
8.2.1	Резольвента (функция Грина)	91
8.2.2	Функция Грина свободной частицы	92
8.2.3	Теория возмущений и T -матрица	93
8.2.4	Связь T -матрицы и амплитуды рассеяния	93
8.3	Оптическая теорема и соотношение унитарности	94
8.4	Борновское приближение	94
8.4.1	Применимость	95
8.4.2	Рассеяние быстрых и медленных частиц	96
8.4.3	Золотое правило Ферми	96
8.4.4	Пример	96
8.5	Сферическая симметрия и базис сферических волн	97
8.5.1	Свободное движение	97
8.5.2	Несвободное движение	97
8.5.3	Разложение плоской волны	98
8.6	Основные результаты фазовой теории рассеяния	98
8.7	Квазиклассика	99
8.8	Примеры решения задач	100
II	Теоретический максимум	101
9	Открытые системы	102
9.1	Спин-бозонная модель	102
9.1.1	Представление взаимодействия	102
9.1.2	Приближение Борна – Маркова	103
9.1.3	Корреляционные функции среды	105
9.1.4	Уравнения Блоха	105
9.1.5	О спектральной плотности	107
9.2	Подавление туннелирования в двухуровневой системе	108
9.2.1	Пертурбативное рассмотрение	108
9.2.2	Адиабатическое рассмотрение	108
9.3	Модель Калдейры – Леггетта	109
9.3.1	Приближение Борна – Маркова	109
9.3.2	Операторный формализм	110
9.3.3	Спектральный вес и омическая баня	111
10	Топологические явления	112
10.1	Симметрии в квантовой механике	112
10.1.1	Симметрия по отношению к обращению времени	112
10.1.2	Киральная симметрия	113
10.2	Цепочка Su – Schrieffer – Heeger	114
10.2.1	Свойства «объёма»	114
10.2.2	Топологические фазы объемной задачи в термодинамическом пределе	115
10.2.3	Краевые моды	117
10.2.4	Граница между двумя топологическими фазами (состояния Jackiw – Rebbi)	118
11	Функциональный интеграл	119
11.1	Запаздывающая функция Грина	119
11.1.1	Временная дискретизация и оператор эволюции	119
11.1.2	Функциональный интеграл	120
11.2	Пример: квантовый гармонический осциллятор	121
11.2.1	Спектр	123
11.3	Эквивалентность интеграла по траекториям и уравнения Шрёдингера	123
11.4	Инстантоны: расщепление в двухъямном потенциале	124

11.4.1	Постановка задачи	124
11.4.2	Виковский поворот и Евклидово действие	124
11.4.3	Метод перевала	125
11.4.4	Логика	125
11.4.5	Седло	125
11.4.6	Квадратичное разложение	126
11.4.7	Спектр оператора	126
11.4.8	Нормировка функционального интеграла	128
11.4.9	Спектр оператора (знаменатель)	129
11.4.10	Вычисление гауссового интеграла	129
11.4.11	Одноинстантонный ответ	131
11.4.12	Разреженный инстантонный газ	131
11.5	Формализм Гельфанда – Яглома	132
11.5.1	Дискретная формулировка и доказательство	132
11.5.2	Пример: осциллятор	133
11.5.3	Пример: флуктуации вблизи инстантона	134
11.6	Инстантоны: распад метастабильного состояния	136
11.6.1	Функциональный интеграл	136
11.6.2	Обсуждение вопросов	138
12	Локализация Андерсона	142
12.1	Одномерная локализация, метод трансфер-матрицы ¹	142
	Список литературы	146

¹Этот раздел представляет собой обработанную лекцию Дениса Баско <http://nanotechnology.itp.ac.ru/teaching/Basko042015/lecture2.pdf>

Часть I

Теоретический минимум

Глава 1

Введение в квантовую механику

1.1 Формализм

Изучение квантовой механики мы начнём достаточно формально — а именно, мы постулируем основные аспекты этой теории, и будем изучать физические выводы, следующие из них. Математическую её основу составляет аппарат линейной алгебры; мы предполагаем, что читателю он известен, поэтому основные положения теории будут сформулированы кратко и тезисно.

1.1.1 Гильбертово пространство. Бра- и кет-вектора

- Состояние *замкнутой* системы полностью описывается **волновой функцией** (**вектор состояния, кет-вектор**). Волновая функция представляет собой вектор — элемент **гильбертового пространства** $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Волновые функции, отличающиеся на произвольный комплексный множитель, отвечают одной и той же физической системе. Структура гильбертового пространства \mathcal{H} (базис, размерность, и т.п.) определяется исключительно физической постановкой задачи — точно так же, как в классической физике определяется конфигурационное (фазовое) пространство.

Гильбертово пространство — это обобщение евклидова пространства на бесконечномерный случай; для простоты, мы будем рассматривать конечномерные пространства. Напомним, что евклидово пространство — это линейное пространство (над комплексными числами \mathbb{C}) с определённым на нём скалярным произведением.

Скалярное произведение волновых функций $|\chi\rangle$ и $|\psi\rangle$ представляет собой комплексное число $\langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$, и обладает следующими свойствами:

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*, \quad \langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0 \quad (1.1)$$

Величина $\langle\psi|\psi\rangle$ представляет собой квадрат **нормы** вектора $|\psi\rangle$; часто мы будем работать с векторами, нормированными условием $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Пусть в пространстве \mathcal{H} выбран какой-то **ортонормированный базис** $\{|e_n\rangle\}$. Произвольный вектор может быть разложен по нему, и будет представлять собой вектор-столбец; и отдельные элементы этого столбца представляют собой проекции вектора $|\psi\rangle$ на $|e_n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |e_n\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi_n = \langle e_n|\psi\rangle \quad (1.2)$$

Вектор $\langle\psi|$ носит название **бра-вектор**; он представляет собой **эрмитово сопряжение** — транспонирование и комплексное сопряжение — $\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger = (|\psi\rangle^T)^*$. Его можно представить в следующем виде:

$$\langle\psi| = \sum_i \langle e_i| \psi_i^* = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \dots) \quad (1.3)$$

Приведенная выше система обозначений оказывается очень удобной. В частности, видно, что $\langle\chi|\psi\rangle = \sum_i \chi_i^* \psi_i$ действительно представляет собой скалярное произведение.

1.1.2 Операторы и наблюдаемые

- Произвольной физической величине O (такие величины в квантовой механике называются **наблюдаемыми** (англ. observable); примерами может служить энергия, импульс, координата, и т.п.) соответствует линейный оператор \hat{O} , действующий на этом гильбертовом пространстве. Этот оператор должен быть эрмитовым и самосопряжённым¹: $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$. Как именно строится это соответствие, зависит от классического смысла величины O — примеры обсудим ниже.

Оператор \hat{O}^\dagger называется **эрмитово сопряжённым** к \hat{O} , если

$$\forall |\psi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto \langle \chi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}^\dagger | \chi \rangle^* \equiv \langle \hat{O}^\dagger \chi | \psi \rangle \Leftrightarrow \hat{O}^\dagger = (\hat{O}^T)^* \quad (1.4)$$

В случае конечномерного пространства, эрмитово сопряжение представляет собой транспонирование и комплексное сопряжение соответствующей матрицы: $\hat{O}^\dagger \equiv (\hat{O}^T)^*$. Объекты вида $\langle \chi | \hat{O} | \psi \rangle$ называются **матричными элементами** оператора \hat{O} .

Эрмитовы операторы обладают несколькими замечательными свойствами, которые будут играть ключевую роль в квантовой механике:

- Эрмитовы операторы диагонализуются. Это означает, что всегда существует какой-то базис из собственных векторов $\{|o_n\rangle\}$, в котором оператор имеет диагональный вид² $\hat{O} = \text{diag}(\{o_n\})$. Собственные числа эрмитового оператора всегда вещественны³:

$$\hat{O} |o_n\rangle = o_n |o_n\rangle, \quad o_n \in \mathbb{R} \quad (1.5)$$

Набор из собственных векторов и собственных значений $\{|o_n\rangle, o_n\}$ представляет собой **спектр** оператора \hat{O} . Для простоты, мы пока опустим случай **вырождения** (когда одному собственному числу соответствует один собственный вектор).

- Собственные вектора, соответствующие различным собственным числам, ортогональны. Эти собственные вектора можно выбрать ортонормированными, и они образуют **полный набор** — то есть базис. Два последних утверждения выражаются в соотношениях ортогональности и полноты, соответственно:

$$\langle o_n | o_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |o_n\rangle \langle o_n| \equiv \hat{\mathbb{I}} \quad (1.6)$$

Заметим, что $\hat{\mathbb{P}}(o_n) = |o_n\rangle \langle o_n|$ представляет собой проектор на собственный вектор $|o_n\rangle$, и он тоже представляет собой эрмитов оператор — то есть тоже наблюдаемую величину.

- Произвольную волновую функцию можно разложить по этому базису (используя соотношение полноты — мнемонически это называется «вставить единицу» — т.е. разложение тождественного оператора по какому-то базису):

$$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n |o_n\rangle \langle o_n|}_{\equiv \hat{\mathbb{I}}} |\psi\rangle \equiv \sum_n c_n |o_n\rangle, \quad c_n = \langle o_n | \psi \rangle \quad (1.7)$$

В таком случае набор величин $\{c_n\}$ представляет собой волновую функцию $|\psi\rangle$ в **O -представлении** (в частности, говорят о координатном, импульсном, энергетическом и т.п. представлениях). Выбор конкретного представления, в котором предстоит работать, должно диктоваться исключительно вопросами удобства решения той или иной задачи.

¹Понятия *эрмитовости* и *самосопряжённости* часто совпадают, но иногда могут различаться; и иногда это проявляется при решении конкретных задач. На самом деле, достаточно существование *самосопряжённого расширения*. Подробнее можно прочитать в [Гал01, задача 1.29].

²Обратите внимание, тут приведён удобный и часто применяемый способ обозначать собственные вектора соответствующими им собственными числами. Действительно, если из контекста понятно, о какой наблюдаемой мы сейчас говорим, то (если отсутствует вырождение) задав собственное число, мы можем однозначно понять, и о каком векторе мы говорим. Скажем, если у матрицы \hat{O} есть собственное число 5, то соответствующий этому числу собственный вектор мы будем обозначать просто $|5\rangle$.

³Это свойство соответствует тому, что физические величины — энергия, координата, импульс — тоже вещественны

1.2 Измерение

Одно из ключевых понятий в квантовой механике — это процесс **измерения**. Дальше в курсе мы будем более подробно обсуждать, что на самом деле физически представляет собой этот процесс. Сейчас же нам достаточно будет знать только несколько его свойств:

- Измерение можно считать мгновенным процессом.
- Измерение является **случайным** процессом. Результатом измерения величины \hat{O} может оказаться только какое-то из её собственных значений o_n . Однако, для собственных состояний оператора \hat{O} , результат измерения фиксирован.

Естественно ожидать, что если в результате измерения какой-то величины было получено значение o_n , то результат повторных измерений, проведённых сразу же за первым, будет точно таким же — говорят, что соответствующая физическая величина после измерения стала определена. Это рассуждение приводит нас к принципу **редукции фон Неймана**:

- Измерение модифицирует волновую функцию. Если в результате измерения было получено собственное значение o_n , то волновая функция системы мгновенно изменяется на $|o_n\rangle$.

В физике нет смысла говорить о случайности, если нет **ансамбля** — подразумеваемого большого количества одинаковых систем и экспериментов. По этой причине важно понимать, что в квантовой механике мы всегда работаем с ансамблями. Утверждение о том, что данная конкретная система описывается конкретной волновой функцией $|\psi\rangle$, в общем-то, не несёт смысла.

- В результате усреднения измерений по такому ансамблю (имея в виду приготовление большого количества одинаковых систем и проведения над ними измерения), мы получим **среднее значение** наблюдаемой \hat{O} :

$$\langle O \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (1.8)$$

Предположим теперь, что мы интересуемся не только средним значением, но и всей функцией распределения — скажем, хотим узнать, с какой вероятностью мы можем получить данное конкретное собственное число o_n ? Для этого мы можем придумать специальную наблюдаемую, которая равна единице для состояния $|o_n\rangle$, и нулю для всех остальных векторов. С такой наблюдаемой мы уже сталкивались выше — это проектор $\hat{\mathbb{P}}(o_n) = |o_n\rangle \langle o_n|$. Таким образом, вероятность того или иного исхода даётся:

$$P(O = o_n) = \langle \psi | \hat{\mathbb{P}}_n | \psi \rangle = |\langle o_n | \psi \rangle|^2 \quad (1.9)$$

Вероятность тем самым даётся квадратом модуля компоненты волновой функции в O -представлении (см. (1.7)). В связи с этим величины c_n носят название **амплитуд вероятности**. Это утверждение часто выносится в качестве отдельного постулата.

1.2.1 О случайности

Случайность является одним из ключевых и фундаментальных свойств квантовой механики⁴. В классической физике случайность возникает, как правило, для описания нашего *незнания* каких-то свойств системы — к примеру, при описании систем с очень большим количеством степеней свободы; при этом *потенциально* это незнание можно устранить (скажем, улучшив экспериментальные методики), и в таком случае говорят о *детерминизме* классической физики.

Пытаться объяснить природу квантовой случайности, используя интуицию, основанную на классической физике, бессмысленно — точно по той же причине, почему бессмысленно пытаться описать электромагнитное излучение, используя лишь механистические представления.

Единственное, что мы можем сделать — сказать, чем эта случайность *не является*, а также пытаться выработать новую интуицию, основанную на новых представлениях. В частности, экспериментальные проверки неравенства Белла и подобные опыты демонстрируют, что эта случайность — *не классическая*, но фундаментальное свойство природы. Обладая *полным* знанием о системе — знанием её волновой функции, в квантовой механике — невозможно предсказать достоверно результат измерения. Более того, сам факт существования каких-то свойств системы, которые определяли бы этот результат достоверно, противоречит квантовой механике. Возможно лишь предсказать вероятностное распределение различных исходов измерений (в этом смысле, детерминизм теории не исчезает, он лишь проявляется иначе — детерминировано вероятностное распределение).

⁴Достаточно подробное обсуждение этих вопросов можно найти в книге [Ban19]

1.2.2 О редукции фон-Неймана

Попытки думать о волновой функции как о некоем существующем в пространстве «поле» неизменно вызывают трудности, связанные с редукцией фон-Неймана и причинностью. В частности, редукция фон-Неймана утверждает, что волновая функция изменяется *мгновенно и во всём пространстве*; в частности, и в тех областях пространства, которые не связаны причинной связью с точкой пространства-времени, где проводилось измерение (т.е. находятся вне светового конуса). Это очевидным образом входит в противоречие с теорией относительности.

На самом деле, никакого парадокса тут нет. В самой редукции даже нет ничего квантового, это явление с точно таким же успехом присутствует и в классической физике. Выше мы обсуждали, что квантовая случайность не является результатом нашего незнания о системе; но сама редукция фон-Неймана всё-таки является результатом получения нового знания, и не более того.

Продemonстрируем это на следующей аналогии. Предположим, что мы описываем сложное движение какой-то классической частицы — например, в результате диффузии. В таком случае для описания состояния частицы мы применяем классическую функцию распределения, $P(x, t)$. Предположим теперь, что в какой-то момент t_0 мы пронаблюдали нашу частицу в какой-то конкретной точке пространства, x_0 . Очевидно, что для дальнейшего описания движения нашей частицы нам необходимо модифицировать функцию распределения, чтобы она учитывала это новое знание — $P(x, t_0) = \delta(x - x_0)$. Хотя модификация эта происходит мгновенно, никакого парадокса тут нет — ведь функция распределения не является объективной сущностью, а отражает лишь степень нашего **знания** о системе (в этом смысле, она существует лишь «у нас в голове»).

Можно было бы учесть знание о том, что частица была обнаружена в точке x_0 вовсе не модифицируя функции распределения. Несколько даже более привычный способ — это использовать понятие **условной вероятности**. Для описания движения частицы при $t > t_0$ нужно задавать не просто вопрос «какая вероятность, что частица будет обнаружена в точке x в момент времени t » (величина $P(x, t)$), но добавлять также «при условии, что в момент времени t_0 она была обнаружена в точке x_0 » (величина $P(x, t | x_0, t_0)$). В таком случае, «редукция» функции распределения можно полностью избежать. Минус этого подхода заключается в том, что в результате описание получается несколько более громоздким, если количество таких измерений, и, соответственно, условий, растёт. Квантовая механика точно так же допускает подобное описание, в которой нет необходимости вводить понятия редукции.

В каком же смысле тогда квантовая вероятность устроена иначе? Дело лишь в том, что сами вероятности в квантовой механике не подчиняются интуитивным и привычным нам законам. К примеру, если A и B — взаимоисключающие исходы случайного квантового процесса, то $P(A \vee B) \neq P(A) + P(B)$.

Наконец, отметим, что корректный способ описания процесса измерения, а также полноценной квантовой статистики (которая включает в себя в том числе и описание нашего частичного знания о системе) — это аппарат **матриц плотности**, который будет обсуждаться на следующем семинаре. Там же мы и продолжим обсуждение вопросов, связанных с измерением.

1.3 Эволюция

Обсудим теперь временную динамику волновой функции.

- Эволюция в квантовой механике **унитарна**: если в момент времени t_0 волновая функция была $|\psi(t_0)\rangle$, то в последующий момент времени он выражается как

$$|\psi(t)\rangle \equiv \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad t > t_0 \quad (1.10)$$

Оператор $\hat{U}(t, t_0)$ носит название **оператора эволюции** от момента времени t_0 до момента времени t . Оператор эволюции — линейный оператор, что выражает собой **принцип суперпозиции**. Дополнительно требуется, чтобы эволюция сохраняла нормировку волновой функции $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \text{const}$, что означает, что оператор \hat{U} — унитарный:

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger \equiv \hat{\mathbb{I}} \quad (1.11)$$

Кроме того, он обладает тривиальным свойством⁵:

$$\hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \equiv \hat{U}(t, t_0), \quad t > t_1 > t_0 \quad (1.12)$$

Для того, чтобы вышенаписанное свойство имело смысл для произвольных времён (t, t_1, t_0) , удобно доопределить оператор эволюции «назад во времени»:

$$\hat{U}(t_0, t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0) \quad (1.13)$$

⁵Именно из-за этого свойства оказывается удобным указывать временные аргументы оператора эволюции в обратном порядке

- Рассмотрим инфинитезимальную эволюцию $|\psi(t+dt)\rangle = \hat{U}(t+dt, t) |\psi(t)\rangle$. В общем случае, разложение оператора эволюции имеет вид $\hat{U}(t+dt, t) \approx \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt$, что приводит нас к **нестационарному уравнению Шрёдингера**:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle} \quad (1.14)$$

Оператор \hat{H} называется **гамильтонианом**. Из унитарности эволюции следует, что оператор \hat{H} — эрмитов, а значит — соответствует какой-то наблюдаемой величине. Константный множитель \hbar был вынесен тут для того, чтобы зафиксировать размерность оператора \hat{H} — он имеет размерность **энергии**; далее мы увидим, что \hat{H} действительно соответствует энергии.

Как мы видим, оператор эволюции и гамильтониан находятся во взаимно-однозначном соответствии. В частности, если гамильтониан от времени не зависит, то оператор эволюции имеет вид матричной экспоненты⁶ (положим для простоты $t_0 \equiv 0$):

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t) \Rightarrow \hat{U}(t) \equiv \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \quad (1.15)$$

Функцию от оператора можно понимать следующим образом:

- Для аналитических функций $f(\hat{O})$, применение функции к оператору можно воспринимать как ряд Тейлора:

$$f(\hat{O}) = f(0)\hat{\mathbb{I}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{O}^n \quad (1.16)$$

- Для эрмитовых операторов \hat{O} , мы можем перейти в базис из его собственных функций (1.5), и определить функцию от оператора следующим образом:

$$f(\hat{O}) |o_n\rangle \equiv f(o_n) |o_n\rangle \quad (1.17)$$

Несложно видеть, что эти определения во всяком случае не противоречат друг другу в случае, если функция f — аналитична, а \hat{O} — эрмитов оператор.

Наконец, можно заметить, что редукция фон-Неймана не является унитарной операцией. На первый взгляд это кажется странным — ведь мы только что постулировали, что любая эволюция в квантовой механике унитарна; а акт измерения сам по себе тоже можно рассматривать в рамках квантовой механики. В действительности же, акт измерения — это акт взаимодействия квантовой системы и классического измерительного прибора; в этом смысле наша система перестаёт быть замкнутой, что и приводит к кажущейся неунитарности эволюции.

1.3.1 Энергетическое представление

В случае, если гамильтониан не зависит от времени, особое значение для решения задач квантовой механики имеет базис его собственных функций — функций, которые удовлетворяют **стационарному уравнению Шрёдингера**:

$$\boxed{\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle} \quad (1.18)$$

Временная эволюция собственных состояний гамильтониана тривиальна, сводится к «накручиванию фазы»:

$$|\psi_E(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_E\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi_E\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi_E\rangle \quad (1.19)$$

Это, в свою очередь, означает, что система, будучи приготовленной в таком физическом состоянии, в нём и останется — ведь системы, отличающиеся на множитель, физически неотличимы. Поэтому такие состояния называют **стационарными состояниями**.

Если мы умеем находить все стационарные состояния — а их набор образует базис! — то мы, в действительности, умеем решать УШ. Действительно, пусть мы решаем УШ с начальным условием $|\psi(0)\rangle = |\psi\rangle$. Разложим вектор состояния по базису стационарных состояний (следуя терминологии, изложенной выше — перейдём в *энергетическое представление*) $|n\rangle$ ($\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$) :

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle. \quad (1.20)$$

⁶В случае наличия явной зависимости гамильтониана от времени $\hat{H} = \hat{H}(t)$ решение можно записать в виде так называемой Т-упорядоченной экспоненты $\hat{U}(t, t_0) = \hat{T} \left\{ \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau \right) \right\}$. Она получается разбиением интервала времени на бесконечно маленькие кусочки и взятием произведением обычных матричных экспонент на каждом таком кусочке.

Линейность уравнения Шрёдингера позволяет записать результат эволюции во времени как линейную комбинацию проэволюционированных компонент с теми же коэффициентами:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi\rangle = \sum_n \psi_n \hat{U}(t) |n\rangle = \sum_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle. \quad (1.21)$$

Таким образом, мы научились полностью решать нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n|\psi\rangle \quad (1.22)$$

1.4 Пример: молекула аммиака NH_3

Будем рассматривать молекулу аммиака⁷ (представляющую собой неправильный тетраэдр с тремя молекулами водорода H в основании, и молекулой азота N в вершине) забыв на время о её поступательном или вращательном движении. Эта молекула допускает два различных состояния, которые получаются друг из друга операцией зеркального отражения молекулы относительно плоскости атомов водорода; мы будем их называть $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, и они будут образовывать базис нашего гильбертова пространства для данной задачи.

Из симметрии задачи естественно, что энергии этих состояний одинакова: $E_0 = \langle \uparrow | \hat{H} | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \hat{H} | \downarrow \rangle$; в силу эрмитовости гамильтониана, общий его вид — следующий:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta^* & E_0 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

(для удобства тут и ниже мы будем считать $\Delta \in \mathbb{R}$ и $\Delta > 0$, этого всегда можно добиться, переобозначив⁸ $|\uparrow\rangle \rightarrow e^{i\varphi} |\uparrow\rangle$). Собственные числа дают спектр возможных значений энергии:

$$E_1 = E_0 - \Delta \Rightarrow |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (1.24)$$

$$E_2 = E_0 + \Delta \Rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (1.25)$$

Будем решать следующую задачу. В начальный момент времени система была приготовлена в состоянии $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Мы интересуемся вероятностью обнаружить её через время t в каждом из состояний $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Следуя логике из абзаца «энергетическое представление», нам нужно разложить начальное условие по стационарным состояниям:

$$|\psi(0)\rangle = |1\rangle \cdot \langle 1|\psi(0)\rangle + |2\rangle \cdot \langle 2|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle). \quad (1.26)$$

Значит, дальнейшая эволюция следующая:

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(t) |1\rangle + \psi_2(t) |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_1 t/\hbar} |1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle). \quad (1.27)$$

Наконец, чтобы найти искомые вероятности, нам необходимо вернуться к базису $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} (e^{-iE_1 t/\hbar} + e^{-iE_2 t/\hbar}) |\uparrow\rangle + \frac{1}{2} (e^{-iE_1 t/\hbar} - e^{-iE_2 t/\hbar}) |\downarrow\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} \cdot (\cos(\Delta t/\hbar) |\uparrow\rangle + i \sin(\Delta t/\hbar) |\downarrow\rangle) \quad (1.28)$$

что даёт нам искомые вероятности:

$$P_{\uparrow}(t) = \cos^2(\Delta t/\hbar), \quad P_{\downarrow}(t) = \sin^2(\Delta t/\hbar) \quad (1.29)$$

Таким образом, за счёт существования оффдиагонального матричного элемента Δ , «перемешивающего» состояния $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, возникает **туннелирование** между этими двумя состояниями в виде когерентных осцилляций (величина Δ в этой связи носит название **туннельного матричного элемента**). Это явление носит название **осцилляций Раби**.

⁷Эта классическая задача обсуждается в не менее классической книге [ФЛС66, глава 7 «Аммиачный мазер»].

⁸На самом деле, это связано не только с удобством. В подобных двухуровневых системах основное состояние является чётной функцией по отношению к инверсии — это связано с *осцилляционной теоремой* и утверждением о том, что основное состояние не содержит нулей.

Если базис выбран так, что оператор инверсии имеет вид $\hat{I}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$ и $\hat{I}|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$, то волновая функция (1.24) действительно является чётной и соответствует основному состоянию.

Матрицы Паули

Двухуровневая система – это простейшая система с нетривиальным гильбертовым пространством и гамильтонианом. Поэтому они постоянно возникают в теоретической физике во множестве разных контекстов, зачастую в виде приближений каких-то более сложных систем. Имеется стандартный базис в пространстве эрмитовых матриц, состоящий из единичной матрицы и **матриц Паули**

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Легко видеть, что любой гамильтониан 2×2 раскладывается по единичной матрице и матрицам Паули:

$$\hat{H} = c \cdot \hat{\mathbb{I}} + b_x \sigma^x + b_y \sigma^y + b_z \sigma^z = c + (\mathbf{b}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}), \quad (1.31)$$

где в последнем выражении под c подразумевается $c \cdot \hat{\mathbb{I}}$.

Простейший пример двухуровневой системы — спин $1/2$ в нерелятивистской квантовой механике. В этом случае \mathbf{b} имеет смысл магнитного поля (с точностью до множителя).

1.5 Гильбертово пространство объединения подсистем

Если имеется две подсистемы с гильбертовыми пространствами \mathcal{H}_1 и \mathcal{H}_2 , то вся система описывается гильбертовым пространством \mathcal{H} , которое является тензорным произведением \mathcal{H}_1 и \mathcal{H}_2 :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \quad (1.32)$$

Эти слова означают, что если имеются базисы $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots\}$ в \mathcal{H}_1 и $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots\}$ в \mathcal{H}_2 , то базис в \mathcal{H} можно задать, как множество попарных произведений $\{|\psi_1\rangle|\varphi_1\rangle, |\psi_1\rangle|\varphi_2\rangle, |\psi_2\rangle|\varphi_1\rangle, |\psi_2\rangle|\varphi_2\rangle, \dots\}$, размерности пространств при этом перемножаются. Тензорное произведение операторов $\hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2$ (где каждый действует в своём подпространстве) определяется действием на базисные элементы: $\hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2 (|\psi_1\rangle|\varphi_1\rangle) = \hat{\mathcal{O}}_1 |\psi_1\rangle \hat{\mathcal{O}}_2 |\varphi_1\rangle$.

Элементы полного гильбертова пространства \mathcal{H} , которые представимы в виде $|\psi\rangle|\varphi\rangle$ (где $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ не обязательно элементы базиса) называют **разложимыми**. Остальные являются квантомеханически **запутанными**.

Пример Рассмотрим два спина $1/2$ в состоянии $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2)$. Оператор $\sigma_{x1} \sigma_{z2}$ действует на $|\psi\rangle$ так

$$\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^z |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\sigma}_1^x |\uparrow\rangle_1 \hat{\sigma}_2^z |\uparrow\rangle_2 + \hat{\sigma}_1^x |\downarrow\rangle_1 \hat{\sigma}_2^z |\downarrow\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 - |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2). \quad (1.33)$$

Видно, что очень удобно работать в обозначениях матриц Паули, не выписывая явно матрицу 4×4 (или больше). Но иногда (например, для расчетов в Wolfram Mathematica) бывает нужно это все же сделать. Если базис для одного спина был таким $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, то теперь рассмотрим базис $\{|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2\}$. Чтобы построить матрицу отвечающую разложимому оператору $\hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2$ нужно элементы $\hat{\mathcal{O}}_1$ сделать блоками 2×2 , домноженными на $\hat{\mathcal{O}}_2$. Это утверждение легче понять на примерах:

$$\hat{\sigma}_1^x \equiv \hat{\sigma}_1^x \hat{\mathbb{I}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2^z \equiv \hat{\mathbb{I}}_1 \hat{\sigma}_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

1.6 Пример: мысленный эксперимент Greenberger – Horne – Zeilinger – Mermin

Данный мысленный эксперимент был предложен как улучшение эксперимента Белла по опровержению *локального реализма* — различных альтернативных теорий, включая теории скрытых параметров, утверждающих, что квантовая механика неверна, а заложенная в ней случайность является результатом незнания (возможно — принципиального) каких-то скрытых свойств системы. Другими словами ни одна сколь угодно сложная классическая теория не способна дать предсказание для эксперимента GHZM, совпадающее с предсказанием квантовой механики. В отличие от эксперимента Белла, который носит вероятностный характер, этот эксперимент однозначно опровергает локальный реализм.

Рассмотрим трехспиновое состояние

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_3). \quad (1.35)$$

и эрмитовы операторы \hat{O}_1 — \hat{O}_4 следующего вида:

$$\hat{O}_1 = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y \hat{\sigma}_3^y \Rightarrow \hat{O}_1 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (1.36)$$

$$\hat{O}_2 = \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^y \Rightarrow \hat{O}_2 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (1.37)$$

$$\hat{O}_3 = \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y \hat{\sigma}_3^x \Rightarrow \hat{O}_3 |\psi\rangle = +1 |\psi\rangle, \quad (1.38)$$

$$\hat{O}_4 = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_3^x \Rightarrow \hat{O}_4 |\psi\rangle = -1 |\psi\rangle. \quad (1.39)$$

Как видно, $|\psi\rangle$ является собственным вектором для всех операторов и при измерении \hat{O}_1 — \hat{O}_3 всегда будет получаться «+1», а при измерении \hat{O}_4 «−1».

Представим, как бы выглядел этот эксперимент с точки зрения классической физики. Пусть у нас имеется лаборатория, которая приготавливает *неизвестно что*. Эта лаборатория одновременно отправляет три части *неизвестно чего* трём различным экспериментаторам (назовём их в целях конспирации 1, 2, 3), которые расположены на достаточно большом расстоянии друг от друга (так что их эксперименты не могут быть связаны причинной связью). У экспериментаторов имеются *чёрные ящики*, на которых имеется дополнительный переключатель, с помощью которого они имеют возможность выбрать одну из двух величин (назовём их X и Y), которые они измеряют. Экспериментаторы выбирают положение этого переключателя случайным образом (с помощью броска монеты), а затем проводят *акт измерения*, в результате которого каждый ящик выдаёт им одно из двух чисел — +1 или -1.

Проводится миллион таких экспериментов, и их результаты отправляются обратно в лабораторию, где все данные приводятся в некоторую сводную таблицу для дальнейшего анализа.

Таблица 1.1: Пример результата эксперимента

№	Величина 1	Результат 1	Величина 2	Результат 2	Величина 3	Результат 3
1	X	+1	Y	-1	Y	-1
2	X	-1	X	-1	X	-1
3	Y	-1	Y	+1	Y	+1
4	X	+1	Y	-1	X	+1
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Поскольку выбор величины был случаен, то примерно в 1/8 строк набор величин будет (X, Y, Y) , и примерно столько же — (Y, X, Y) , (Y, Y, X) . Неожиданно для себя, в лаборатории обнаруживают, что если в таких строках все три таких результата перемножить, то *всегда* получается значение $X_1 Y_2 Y_3 = Y_1 X_2 Y_3 = Y_1 Y_2 X_3 = +1$.

Что об этом думает классическая механика? Предположение локального реализма заключается в том, что приготовленное *неизвестно чего* в лаборатории в n -той строчке задало нам какое-то (возможно, случайное; возможно, скоррелированное — неважно!) внутреннее состояние системы, которое мы назовём буквой ξ_n — и результаты измерений является какой-то функцией этих переменных $X_i^{(n)} \equiv X_i(\xi_n)$ и $Y_i^{(n)} = Y_i(\xi_n)$, и только их (поскольку лаборатории не связаны причинной связью); причём функции бинарные, принимающие значения ± 1 . Таким образом, экспериментально установленный факт — в ξ были заложены такие специальные корреляции, что эти произведения принимают фиксированное значение, равное +1.

Дальше достаточно заметить, что:

$$[X_1(\xi_n) Y_2(\xi_n) Y_3(\xi_n)] \cdot [Y_1(\xi_n) X_2(\xi_n) Y_3(\xi_n)] \cdot [Y_1(\xi_n) Y_2(\xi_n) X_3(\xi_n)] \equiv X_1(\xi_n) X_2(\xi_n) X_3(\xi_n) \quad (1.40)$$

(поскольку $Y_i = \pm 1 \Rightarrow Y_i^2 \equiv 1$). Поэтому классическая механика предсказывает, что во всех строчках, где стоит набор (X, X, X) должно стоять +1. Каково же их удивление, когда они во всех таких строках действительно видят совпадающие значения, но не «+1», а «-1»!

Глава 2

Матрица плотности

2.1 Квантовые статистические распределения

Попробуем рассмотреть различия между «квантовой» и «классической» случайностью на примере конкретной задачи. Пусть есть двухуровневая система, которая может быть приготовлена в одном из двух состояниях, которые мы назовём $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Пусть экспериментатор, перед тем, как приготовить систему, бросает монетку, и приготавливает её в одном из этих двух состояний, в зависимости от исхода броска. Полученный ансамбль — классический; в частности, результат усреднения произвольной наблюдаемой \hat{O} по такому ансамблю, очевидно, будет даваться следующим выражением:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{2} \langle \uparrow | \hat{O} | \uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow | \hat{O} | \downarrow \rangle \quad (2.1)$$

Такой ансамбль может быть описан в рамках квантовой механики с использованием **матрицы плотности**. Для её определения рассмотрим более общий случай: пусть с вероятностью p_α система может быть приготовлена в состоянии $|\alpha\rangle$. Тогда для такого усреднения мы можем записать:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle = \text{Tr}(|\alpha\rangle p_{\alpha} \langle \alpha | \hat{O}) \equiv \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}), \quad \hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (2.2)$$

Давайте сразу изучим свойства полученного объекта:

1. Матрица плотности — эрмитов оператор, $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$, действующий на том-же гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Она несёт всю необходимую информацию о нашем ансамбле — с её помощью можно вычислить статистические распределения любой интересующей нас наблюдаемой.
2. Матрица плотности нормирована условием $\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1$.
3. Матрица плотности неотрицательно определена: $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 \geq 0$.
4. Матрица плотности содержит куда больше информации, чем волновая функция ($n^2 - 1$ вещественных параметров вместо¹ $2n - 2$, где n — размерность пространства). Это связано с тем, что она может описывать более широкий спектр ансамблей.

2.1.1 Чистое состояние

Чисто квантовая система, описываемая какой-то волновой функцией $|\psi\rangle$ (с вероятностью $p = 1$), представляет собой тривиальный частный случай, который также можно описать на языке матрицы плотности $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$. Состояние, описываемое такой матрицей плотности, носит название **чистого**. В противном случае состояние называется **смешанным**. Обсудим базовые свойства чистых состояний (которые можно использовать как критерии²):

- Ровно одно из собственных чисел такой матрицы плотности равно 1; остальные равны нулю.
- Матрица плотности чистого состояния удовлетворяет условию $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. В частности, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = 1$. В случае общего положения, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$

¹С учётом условия нормировки волновой функции, а также свободы выбора общей фазы волновой функции

²В общем случае, глядя на матрицу плотности, записанную в произвольном базисе, довольно тяжело определить, описывает ли она чистое или смешанное состояние

Различные часто используемые количественные характеристики чистоты состояния включают в себя:

- Энтропия фон-Неймана: $S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_n p_n \ln p_n \geq 0$. При этом $S = 0$ только для чистых состояний.
- Энтропия Реньи: $S_n = \frac{1}{1-n} \ln \text{Tr} \hat{\rho}^n \geq 0$; аналогично $S_n = 0$ только для чистого состояния. Часто используется для численных расчётов, или аналитических расчётов с помощью метода реплик. Несложно видеть, что $\lim_{n \rightarrow 1} S_n = S$.

2.1.2 Примеры

Описанный выше классический ансамбль соответствует матрице плотности (в базисе $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$):

$$\hat{\rho}_{\text{cl}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

С другой стороны, мы могли бы рассмотреть, волновую функцию $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$, которая даёт точно такие же вероятности обнаружить систему в каждом из двух состояний:

$$\hat{\rho}_{\text{q}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Поскольку матрицы плотности различны, то это — разные ансамбли. В частности, можно придумать наблюдаемую, которая отличит один ансамбль от другого. В данном конкретном случае это

$$\hat{O} = \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \hat{O} \rangle_{\text{cl}} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = 0, \quad \langle \hat{O} \rangle_{\text{q}} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = 1 \quad (2.5)$$

Различные методы приготовления могут давать одинаковые матрицы плотности; и в этом смысле, их принципиально невозможно отличить друг от друга. Например, приготовление с вероятностью $p_1 = 1/2$ волновой функции $|\psi_1\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ и с вероятностью $p_2 = 1/2$ волновой функции $|\psi_2\rangle = (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ даст нам матрицу плотности:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\rho}_{\text{cl}} \quad (2.6)$$

2.1.3 Термодинамика

Одно из важнейших применений матриц плотности — это описание термодинамики квантовых систем. В случае, когда система находится в термодинамическом равновесии с большим термостатом температуры T , как мы знаем из статистической физики и термодинамики, система описывается **Гиббсовским (каноническим)** ансамблем. Это — классический ансамбль, в котором вероятности различных собственных состояний гамильтониана $|n\rangle$ пропорциональна $p_n \propto e^{-\beta E_n}$. Такой ансамбль достаточно легко записывается на языке матриц плотности:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (2.7)$$

(Z — **статсумма**, обеспечивающая нормировку $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$; $\beta = 1/T$; постоянная Больцмана k_B выбрана равной единице)

2.2 Классическая vs. квантовая статистика

В принципе, даже если бы мы не знали ничего про квантовую статистику, мы могли бы применять описание классических систем на языке матриц плотности. Действительно, пусть есть классическая система, которая может находиться в одном из n состояний. С классической точки зрения, для описания функции распределения, нам было бы достаточно задать вероятности p_1, \dots, p_n системы находится в каждом из этих состояний; что, в рамках развитого формализма, эквивалентно диагональной матрице плотности:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Пусть в каждом из этих состояний какая-то наблюдаемая принимают значения o_1, \dots, o_n . Опять-таки, формально это соответствует наблюдаемой:

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} o_1 & 0 & 0 \\ 0 & o_2 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

и средние равны $\bar{O} = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \sum_k p_k o_k$ — полностью классическая формула. Для классических систем такой способ описания несколько избыточен, но тем не менее, абсолютно допустим.

Если бы всё исчерпывалось диагональными (в каком-то базисе!) операторами и матрицами плотности, то квантовая механика не дала бы ничего нового. Различие возникает в первую очередь тогда, когда возникают **некоммутирующие величины** — те, которые нельзя совместно диагонализировать ни в каком из базисов.

Отличие проявляется в возникновении так называемых интерференционных членов. В самом общем случае для усреднения произвольной наблюдаемой мы можем записать:

$$\langle O \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \underbrace{\sum_n \rho_{nn} \langle O \rangle_n}_{\text{classical statistics}} + \underbrace{\sum_{m \neq n} \rho_{nm} \langle m | \hat{O} | n \rangle}_{\text{quantum interference terms}} \quad (2.10)$$

Несложно видеть, что

$$P_n \equiv \langle \hat{\mathbb{P}}_n \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathbb{P}}_n) = \rho_{nn} \quad (2.11)$$

представляет собой вероятность обнаружить систему в состоянии $|n\rangle$, а $\langle O \rangle_n = \langle n | \hat{O} | n \rangle$ — среднее значение наблюдаемой в этом состоянии. Первое слагаемое таким образом допускает чисто классическую интерпретацию, а второе имеет чисто квантовую природу.

2.3 Измерения и редукция фон-Неймана

Теперь мы можем перейти к обсуждению вопроса измерения на языке матриц плотности. Итак, пусть есть матрица плотности общего вида, записанная в базисе наблюдаемой \hat{O} , измерение которой мы проводим. Согласно общим принципам, вероятность получения исхода $P(O = o_n) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathbb{P}}_n) = \rho_{nn}$, где $\hat{\mathbb{P}}_n = |o_n\rangle \langle o_n|$. Именно с такой вероятностью система, после измерения, будет описываться волновой функцией $|o_n\rangle$. Мы уже умеем описывать такой ансамбль; он описывается следующей матрицей плотности:

$$\hat{\rho} \xrightarrow{\text{measurement}} \sum_n \hat{\mathbb{P}}_n \hat{\rho} \hat{\mathbb{P}}_n \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \dots & \rho_{1n} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \dots & \rho_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1} & \rho_{n2} & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

Такое изменение матрицы плотности является *объективным* результатом взаимодействия системы с измеряющим прибором. Во-первых, мы ничего не говорили о результате измерений, узнали ли мы его или нет. Во-вторых, оно затронет результаты последующих измерений любой другой наблюдаемой, в базисе которой матрица плотности не диагональна (т.е. которая не коммутирует с \hat{O}), поэтому это — наблюдаемый эффект. Наконец, на некоторых конкретных моделях можно аккуратно проследить, как такая диагонализация происходит в результате унитарной эволюции — взаимодействия с окружающей средой. «Вымирание» оффдиагональных элементов матрицы плотности в результате взаимодействия с окружающей средой носит название **дефазировки** или **декогеренции**. Важно также отметить, что эти процессы подчиняются уравнению Шрёдингера, описывающему систему «измеритель+система», и они — локальны (в смысле, не нарушают причинность — разумеется, возмущение, вызванное взаимодействием с измерителем, не выходит за пределы светового конуса). Наконец, как мы установили выше, оффдиагональные элементы матрицы плотности в каком-то смысле характеризуют степень «квантовости» нашей системы; поэтому мы выяснили, что в результате взаимодействия с окружающей средой, система как бы становится «классической».

Пусть теперь мы всё-таки узнали результат измерения — выяснили, что система находится в конкретном состоянии $|o_k\rangle$. Матрица плотности уже диагональна, и для дальнейшего описания мы уже можем пользоваться классической интуицией. Тогда, как и в классической статистике, мы можем учесть это знание (говоря на языке теории вероятностей, вычислять

условные вероятности, или провести **селективное измерение**), модифицировав соответствующим матрицу плотности:

$$\hat{\rho} \xrightarrow{\text{measurement}} \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{selective measurement}} \frac{\hat{\mathbb{P}}_k \hat{\rho} \hat{\mathbb{P}}_k}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mathbb{P}}_k)} = |k\rangle \langle k| \quad (2.13)$$

В результате, как мы видим, получается матрица плотности, описывающая чистое состояние $|k\rangle$. Редукция фон-Неймана таким образом является следствием следующей цепочки событий:

1. Мы имели дело с чистым состоянием $|\psi\rangle$ (эквивалентно матрице плотности $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$)
2. В результате взаимодействия с измеряющим прибором, происходит запутывание и дефазировка; система переходит в смешанное состояние, матрица плотности диагонализуется: $\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|$.
3. Если измерение — селективное, то учёт знания о результате измерения приводит к изменению матрицы плотности на $\hat{\rho} = |k\rangle \langle k|$.
4. Таким образом, в результате мы возвращаемся к чистому состоянию $|k\rangle$.

Кажущаяся нелокальность редукции фон-Неймана возникает на третьем шаге — и она **субъективна** (она отражает получение нами нового знания, а не объективные изменения состояния системы).

2.4 Матрица плотности подсистемы

Матрица плотности естественным образом возникают при рассмотрении квантовой механики так называемых **открытых систем** — в противовес замкнутым, это системы, которые взаимодействуют с окружающей средой, или являются подсистемами какой-то большой квантомеханической системы. В случае наличия запутанности между подсистемой и окружающей средой, описание первой на языке волновых функций затруднено (даже если вся большая система описывается на этом языке).

Итак, пусть имеется система, которая состоит из двух подсистем, A и B (математически это означает, что гильбертово пространство представимо в виде тензорного произведения $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$), описываемая какой-то волновой функцией $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}$. При этом пусть все интересующие нас физические наблюдаемые относятся именно к подсистеме A (например, подсистема B описывает термостат или окружающую среду). Пусть $\{|\alpha\rangle\} \in \mathcal{H}_A$ и $\{|\beta\rangle\} \in \mathcal{H}_B$ образуют базисы соответствующих подсистем. В таком случае, для произвольной наблюдаемой \hat{O}_A , относящейся к подсистеме A , мы можем записать:

$$\langle \psi_{AB} | \hat{O}_A | \psi_{AB} \rangle = \sum_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} \underbrace{\langle \psi_{AB} | \alpha'_A, \beta'_B \rangle}_{\equiv \psi_{\alpha'\beta'}^*} \underbrace{\langle \alpha'_A, \beta'_B | \hat{O}_A | \alpha_A, \beta_B \rangle}_{\equiv (\hat{O}_A)_{\alpha'\alpha} \cdot \delta_{\beta'\beta}} \underbrace{\langle \alpha_A, \beta_B | \psi_{AB} \rangle}_{\equiv \psi_{\alpha\beta}} = \sum_{\alpha\alpha'} \underbrace{\left(\sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta} \psi_{\alpha'\beta}^* \right)}_{\equiv (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'}} (\hat{O}_A)_{\alpha'\alpha} \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}_A \hat{O}_A) \quad (2.14)$$

Таким образом естественным образом возникает **редуцированная матрица плотности** $\hat{\rho}_A$. Несложно убедиться, что она удовлетворяет всем перечисленным выше свойствам матрицы плотности, и полностью описывает поведение подсистемы A .

- Если полученная система описывает **чистое состояние**, то между подсистемами A и B отсутствовала запутанность. Это означает, что волновая функция имела вид тензорного произведения $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$, и между подсистемами не было никаких корреляций — они абсолютно независимы.
- Энтропия, вычисленная по редуцированной матрице плотности, носит название **энтропии запутанности**. Она количественно характеризует степень запутанности двух подсистем.

2.4.1 Частичный след

Наконец, отметим, что исходное предположение о том, что вся система AB описывается волновой функцией (является чистым состоянием), на самом деле не нужно. Действительно, если система AB находится в смешанном состоянии, описываемом какой-то матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$, то для получения матрицы плотности подсистемы A необходимо взять так

называемый **частичный след** (или «след по степеням свободы подсистемы B »)

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} \Leftrightarrow (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'} = \sum_{\beta} (\hat{\rho}_{AB})_{\alpha\beta, \alpha'\beta}. \quad (2.15)$$

(несложно видеть, что эта операция ассоциативна: если есть система ABC , и сначала взять след по C , а затем по B , то мы получим ровно ту же матрицу плотности, какая была бы если бы мы сразу взяли след по BC).

Смысл этой операции можно понять следующим образом. Для упрощения обозначений предположим, что системы A и B — двухуровневые, и их базисы имеют вид $\{|1\rangle, |2\rangle\}_{A,B}$. Тогда стандартный выбор базиса всей системы имеет вид:

$$\{|11\rangle, |12\rangle, |21\rangle, |22\rangle\}_{AB} \quad (2.16)$$

и в таком базисе о произвольной матрице плотности системы можно думать как имеющую блочную структуру:

$$\hat{\rho}_{AB} = \left(\begin{array}{cc|cc} \rho_{11,11} & \rho_{11,12} & \rho_{11,21} & \rho_{11,22} \\ \rho_{12,11} & \rho_{12,12} & \rho_{12,21} & \rho_{12,22} \\ \hline \rho_{21,11} & \rho_{21,12} & \rho_{21,21} & \rho_{21,22} \\ \rho_{22,11} & \rho_{22,12} & \rho_{22,21} & \rho_{22,22} \end{array} \right) \quad (2.17)$$

В таком случае, взятие частичного следа отвечает попросту взятию следа в каждом блоке:

$$\text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \left(\begin{array}{c} \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{11,11} & \rho_{11,12} \\ \rho_{12,11} & \rho_{12,12} \end{pmatrix} \\ \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{21,11} & \rho_{21,12} \\ \rho_{22,11} & \rho_{22,12} \end{pmatrix} \end{array} \right) \quad (2.18)$$

2.4.2 Примеры

Пример 1. «ЭПР»

Давайте теперь рассмотрим два спина-1/2 (или любые другие двухуровневые системы), A и B , которые «приготовлены» в «ЭПР»-состоянии:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_A \downarrow_B\rangle + |\downarrow_A \uparrow_B\rangle). \quad (2.19)$$

Пусть при этом судьба спина B нам неизвестна (и мало интересует) — пусть мы можем проводить измерения только над спином A . Матрица плотности всей системы AB имеет в базисе $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ следующий вид:

$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Теперь возьмём след по степеням свободы спина B , представив матрицу в виде блочной матрицы 2×2 и взяв следы в каждом блоке:

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{I}} \quad (2.21)$$

Пример 2. «Носки»

Предположим, что наша двухуровневая система — это носок, который может быть либо левым ($|\uparrow\rangle$), либо правым ($|\downarrow\rangle$). Пусть мы с закрытыми глазами достаём пару носков из комода; первый оставляем в руках, а второй отправляем в качестве сувенира нашему другу, который живёт, скажем, где-то в районе α -Центавра. Такая система описывается следующей матрицей плотности:

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbb{P}}_{\uparrow\downarrow} + \hat{\mathbb{P}}_{\downarrow\uparrow}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

В противовес ЭПР, эта система сугубо классическая. И тот факт, что её матрица плотности отличается от предыдущей, это подтверждает — значит, существуют наблюдаемые, которые могут отличить один эксперимент от другого. Но может ли отличить классический носок от квантового наш друг? На этот вопрос можно ответить, взглянув на его редуцированную матрицу плотности:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{I}} \quad (2.23)$$

Матрица плотности (а значит, и все наблюдаемые) тождественно совпадает с матрицей плотности для ЭПР! Значит, ни я, ни мой друг, принципиально не смогут ответить, с квантовой системой они работают, или классической.

Но если мы оба отправим свои результаты третьему наблюдателю (что эквивалентно измерению какой-то наблюдаемой, которая относится к обеим системам сразу) — то он уже сможет отличить одно от другого.

2.5 Динамика

С течением времени матрица плотности как-то эволюционирует $\hat{\rho} = \hat{\rho}(t)$. Эту эволюцию можно записать в форме уравнения Гейзенберга³:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) = \sum_{mn} |n(t)\rangle \rho_{nm} \langle m(t)| &\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \sum_{mn} \left[i\hbar \frac{\partial |n(t)\rangle}{\partial t} \rho_{nm} \langle m(t)| + i\hbar |n(t)\rangle \rho_{nm} \frac{\partial \langle m(t)|}{\partial t} \right] = \\ &= \sum_{mn} \left[\hat{H} |n(t)\rangle \rho_{nm} \langle m(t)| - |n(t)\rangle \rho_{nm} \langle m(t)| \hat{H} \right] = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \Rightarrow \boxed{\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{H}]} \quad (2.24) \end{aligned}$$

Полезно отметить связь этого уравнения с термодинамикой. Очевидно, что термодинамическая матрица плотности $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ является стационарным решением этого уравнения. Более того, таковым является произвольная матрица плотности вида $\hat{\rho} = f(\hat{H})$. Наконец, можно пойти дальше и отметить, что стационарным будет также произвольное решение вида $\hat{\rho} = f(\hat{H}, \hat{O}_1, \dots, \hat{O}_k)$, где $\{\hat{O}_i\}$ — набор сохраняющихся величин.

³Обратите внимание: в представлении Гейзенберга, эволюция обыкновенных операторов происходит согласно уравнению с противоположным знаком: $\frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}(t)]$!

Глава 3

Одномерное движение

3.1 Базовые свойства непрерывных степеней свободы

До сих пор мы обсуждали системы с дискретными степенями свободы (спины, кубиты). Теперь мы перейдём к описанию систем с непрерывными степенями свободы — к примеру, координаты или импульсы частиц. В таком случае соотношения, написанные ранее для дискретного спектра, необходимо модифицировать.

Пусть есть произвольная наблюдаемая \hat{f} , спектр которой $\hat{f}|f_0\rangle = f_0|f_0\rangle$ непрерывен. Состояния, соответствующие различным собственным числам, по-прежнему ортогональны; но отличие с дискретным спектром состоит в том, что сами состояния — ненормируемы, то есть интеграл $\langle f_0|f_0\rangle = \infty$. Соотношение ортогональности корректно записывается с использованием непрерывного аналога символа Кронекера — дельта-функции:

$$\langle f|f'\rangle = c(f)\delta(f - f') \quad (3.1)$$

Выбором константного множителя для векторов $|f\rangle$ мы можем сделать величину $c(f)$ произвольной (это соответствует **различным нормировкам**). В отличие от дискретного спектра, когда нормировка «на единицу» $\langle f|f\rangle = 1$ является общепринятой и удобной, в случае с континуумом в различных приложениях удобны различные выборы величины $c(f)$. Такое соотношение ортогональности приводит к модификации соотношения полноты. Несложно убедиться, что корректное разложение единицы при произвольной нормировке имеет следующий вид¹:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int \frac{df}{c(f)} |f\rangle \langle f| \quad (3.2)$$

Вероятности различных исходов измерения, как и в дискретном случае, тоже даются усреднением проекционных операторов. Так, проектор на подпространство, соответствующее значениям $f \in [f_1, f_2]$, даётся следующим выражением:

$$\hat{\mathbb{P}}(f_1 \leq f \leq f_2) = \int_{f_1}^{f_2} \frac{df}{c(f)} |f\rangle \langle f| \quad (3.3)$$

Усредняя это выражение по произвольной волновой функции $|\psi\rangle$, определяя **волновую функцию в f -представлении** как $\langle f|\psi\rangle \equiv \psi(f)$, а также беря отрезок $[f_1, f_2]$ инфинитезимальным, мы заключаем, что величина

$$\rho(f) = \langle \psi|f\rangle \langle f|\psi\rangle / c(f) = |\psi(f)|^2 / c(f) \quad (3.4)$$

даёт плотность вероятности обнаружить величину \hat{f} в окрестности значения f . Обратите внимание, если мы перейдём к другой нормировке (другой функции $c(f)$), то нам необходимо будет также заменить и величину $\psi(f) = \langle f|\psi\rangle$ — так что величина $\rho(f)$ останется инвариантной. Что и следовало ожидать, поскольку она наблюдаема.

3.2 Координаты, трансляции и импульс

Дальше мы будем в основном обсуждать квантовую механику одномерных частиц, и будем работать с координатным представлением. Это означает, что в качестве оператора \hat{f} мы будем брать оператор координаты \hat{x} . Стандартная нормировка его собственных состояний — следующая:

¹Для этого предлагается расписать следующий матричный элемент: $\langle f|\hat{\mathbb{I}}|f'\rangle$, и воспользоваться соотношениями ортогональности

$$\langle x|x' \rangle = \delta(x - x') \quad (3.5)$$

В соответствие с вышесказанным, это означает, что волновую функцию мы будем обозначать за $\psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle$, а величина $|\psi(x)|^2$ будет давать плотность вероятности обнаружить частицу в точке x .

Для того, чтобы определить оператор импульса, полезно сперва обсудить **оператор конечных трансляций** (переносов, сдвижек). Он определяется следующим образом:

$$\hat{T}_a |x\rangle \stackrel{\text{def.}}{=} |x - a\rangle \quad (3.6)$$

Несложно видеть, что он обладает групповым свойством²:

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \hat{T}_{a+b}, \quad \hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a} = \hat{T}_a^\dagger \quad (3.7)$$

Определим также, как он действует на волновые функции в координатном представлении:

$$\hat{T}_a \psi(x) \stackrel{\text{def.}}{=} \langle x|\hat{T}_a|\psi\rangle = \langle \hat{T}_a^\dagger x|\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle = \psi(x+a) \quad (3.8)$$

Используя разложение в ряд Тейлора, мы можем также предоставить явный вид этого оператора:

$$\hat{T}_a \psi(x) \equiv \psi(x+a) = \psi(x) + a \cdot \psi'(x) + \frac{1}{2} a^2 \psi''(x) + \dots = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(a \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \right] \psi(x) = e^{a \frac{\partial}{\partial x}} \psi(x) \Rightarrow \boxed{\hat{T}_a = e^{a \frac{\partial}{\partial x}}} \quad (3.9)$$

Как это всё связано с оператором импульса? Проще всего последний определяется через теорему Нётер: импульс — физическая величина, сохранение которой соответствует трансляционной симметрии системы. Математически это записывается с использованием формализма замены базиса из упражнений к первому семинару:

$$\hat{T}_a \hat{H} \hat{T}_a^\dagger \equiv \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{T}_a] = 0 \quad (3.10)$$

Это условие должно выполняться для произвольного значения a , что эквивалентно его выполнению для инфинитезимального a — что означает, что $[\hat{H}, \frac{\partial}{\partial x}] = 0$. Отметим, что оператор производной антиэрмитов:

$$\langle \chi | \frac{\partial}{\partial x} | \psi \rangle = \int dx \chi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \chi^*(x) \psi(x) |_{-\infty}^{\infty} - \int dx \frac{\partial}{\partial x} \chi^*(x) \psi(x) = - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \chi | \psi \right\rangle \Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = - \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.11)$$

Домножив его на $\pm i$, мы получим эрмитов оператор, который коммутирует с гамильтонианом (что, как известно, в квантовой механике соответствует закону сохранения) только если система обладает трансляционной инвариантностью — значит, это оператор импульса. Общепринятое обозначение следующее:

$$\boxed{\hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \Leftrightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \quad (3.12)$$

Замечание (теория групп)

Совокупность всех трансляций \hat{T}_a представляет собой *группу Ли* симметрий данной задачи; а действие этих операторов в \mathcal{H} представляет собой *представление* этой группы. Из наличия такой непрерывной симметрии следует, что *генераторы* этой группы Ли будут представлять собой физические сохраняющиеся величины. Это — общее утверждение, которое в дальнейшем позволит нам вывести также и операторы орбитального момента, которые связаны с группой Ли трёхмерных вращений $SO(3)$.

²Говорят, этот набор операторов реализует представление соответствующей **группы Ли** — непрерывной группы трансляций одномерного пространства $\sim \mathbb{R}$

Импульсное представление и преобразование Фурье

Спектр оператора импульса, как и координаты, непрерывен. Определим собственные состояния оператора импульса в координатном представлении:

$$\hat{p} |p_0\rangle = p_0 |p_0\rangle \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi_{p_0}(x)}{\partial x} = p_0 \psi_{p_0}(x) \Rightarrow \psi_{p_0}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \langle x | p_0 \rangle = e^{ip_0 x / \hbar} \quad (3.13)$$

Это — **плоские волны**, волны де Бройля. Определим нормировку этих состояний³:

$$\langle p | p' \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle = \int dx \cdot e^{-i(p-p')x/\hbar} = 2\pi\hbar \delta(p-p') \Rightarrow \hat{\mathbb{I}} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} |p\rangle \langle p| \quad (3.14)$$

Наконец, можно выписать явно формулы перехода от координатного представления к импульсному и обратно:

$$\begin{cases} \psi(p) & \equiv \langle p | \psi \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle \equiv \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ \psi(x) & \equiv \langle x | \psi \rangle = \int (dp) \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle = \int (dp) e^{ipx/\hbar} \psi(p) \end{cases}, \quad (dp) \equiv \frac{dp}{2\pi\hbar} \quad (3.15)$$

Несложно видеть, что эти формулы попросту реализуют стандартное преобразование Фурье.

3.3 Общие свойства связанных состояний одномерного уравнения Шрёдингера

Построение квантомеханического описания движения классической системы сводится к замене в классической функции Гамильтона $H(x, p)$ значения координат и импульса на соответствующие им операторы⁴. Далее мы будем рассматривать задачи об одной квантовой частице, движущейся в потенциале $U(x)$; Гамильтониан такой системы даётся выражением:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \quad (3.16)$$

Мы будем интересоваться **стационарными состояниями** — собственными состояниями оператора энергии $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$. В общем случае, спектр Гамильтониана может включать в себя как дискретный спектр связанных состояний, так и непрерывный спектр бегущих волн.

Связанные состояния состояния характеризуются тем, что для них волновая функция на больших расстояниях достаточно быстро спадает, а интеграл $\langle \psi | \psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2$ сходится. Несложно видеть, что понятие «связанное состояние» и «состояние дискретного спектра» совпадают. Свойства состояний непрерывного спектра этой задачи мы обсудим на следующем семинаре, а пока сфокусируемся на связанных состояниях.

Рассмотрим для начала какой-то локализованный потенциал, который достаточно быстро спадает на бесконечности: $U(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$. Тогда в уравнении Шрёдингера в координатном представлении можно приближённо выбросить член с потенциальной энергией; получится следующее уравнение и его решение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x) \Rightarrow \begin{cases} \psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & E = \hbar^2 k^2 / 2m > 0 \\ \psi(x) = C'_1 e^{\kappa x} + C'_2 e^{-\kappa x}, & E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m < 0 \end{cases}, \quad x \rightarrow \pm\infty \quad (3.17)$$

Непрерывный спектр в таком виде соответствует положительной энергии, а связанные состояния — отрицательным. Более того, при $x \rightarrow +\infty$, константа C'_1 должна тождественно зануляться, а при $x \rightarrow -\infty$ должна зануляться константа C'_2 . Эти два условия оказывается возможным выполнить только для дискретного набора энергий, которые и дают спектр связанных состояний.

Отметим ещё несколько свойств решений:

- Состояния дискретного спектра одномерной задачи невырождены⁵
- Их всегда можно выбрать вещественными. Действительно, если $\psi(x)$ — решение, то легко видеть, что и $\psi^*(x)$ удовлетворяет тому же уравнению, а значит — по линейности — и $\text{Re}\psi = (\psi + \psi^*)/2$, и $\text{Im}\psi = (\psi - \psi^*)/2i$.

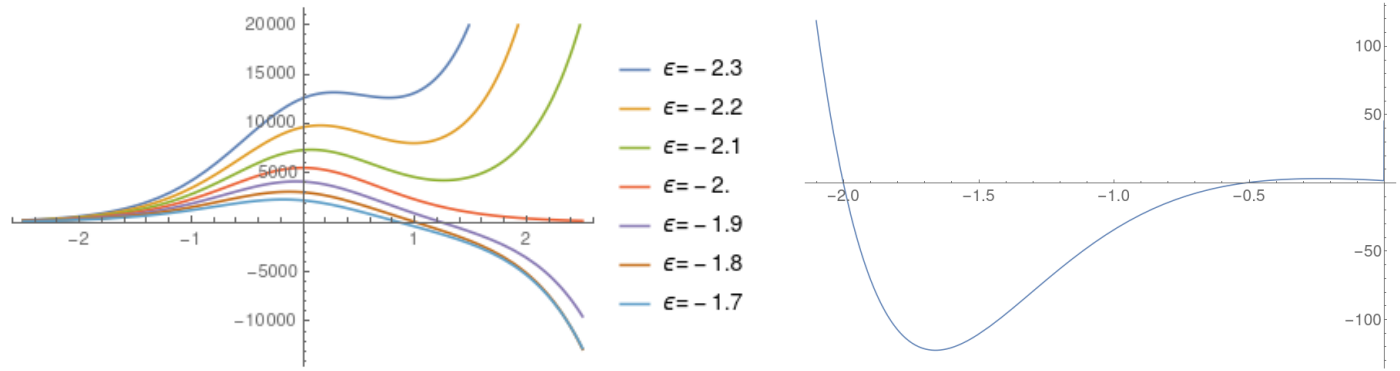
³Написанная тут нормировка несколько удобнее нормировки $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$, потому что в последней состояния выглядят менее красиво: $\langle x | p \rangle = e^{ipx/\hbar} / \sqrt{2\pi\hbar}$

⁴Вообще говоря, если классическая функция Гамильтона содержит члены вида $x \cdot p$, то соответствующий оператор $\hat{x} \cdot \hat{p}$ не является эрмитовым. Рецепт в таком случае сводится к процедуре симметризации; например, комбинация $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$ уже является эрмитовой.

⁵Доказательство этого утверждение приведено в [ЛЛ02, §21 «Общие свойства одномерного движения»]

- Волновая функция n -го возбуждённого состояния содержит ровно n узлов (нулей волновой функции). Так, например, основное состояние узлов вовсе не содержит.

Последнее утверждение носит название **осцилляторной теоремы**⁶. Его можно просто проиллюстрировать для задачи о яме с бесконечными стенками, где волновые функции — стоячие волны. Для того, чтобы понять, почему она выполняется в общем случае, полезно подумать о том, как меняется поведение решения уравнения Шрёдингера с правильными (затухающими) граничными условиями на $-\infty$ при увеличении параметра E , начиная с больших отрицательных значений (см. рис).



(а) Поведение волновой функции при различных энергиях. Видно, что $\epsilon = -2$ соответствует связанному состоянию

(б) «Характеристическая функция» $C'_1(x \rightarrow +\infty)$ как функция энергии. Видно наличие связанных состояний при $\epsilon = -2.0$ и $\epsilon = -0.5$.

Рис. 3.1: Численный анализ уравнения Шрёдингера $-\frac{1}{2}\psi''(x) - \frac{3}{\cosh^2 x}\psi(x) = \epsilon\psi(x)$ методом стрельбы. Детали см. в файле Mathematica

3.4 Задача о мелкой яме

3.4.1 Масштабы

Рассмотрим произвольный локализованный потенциал $U(x)$ — яму, которая может быть охарактеризован двумя *масштабами*: глубиной U_0 и шириной a . Обсудим сперва некоторые общие свойства связанных состояний в такой яме (предполагая, что они имеются). Для конкретности, можно говорить об основном состоянии.

Первое, что приходит в голову — это то, что частица, находясь в связанном состоянии, находится большей частью в яме и масштаб пространственного изменения её волновой функции также равен a (как это было, скажем, в яме с бесконечно высокими стенками). В этом случае из соотношения неопределённостей следует, что типичное значение её импульса — это $p \sim \hbar/a$, и типичное значение кинетической энергии, связанной просто с пространственной локализацией частицы в яме, равно $\langle \hat{T} \rangle \sim \hbar^2/ma^2$. Это — второй (помимо U_0) важный энергетический масштаб, характеризующий любую яму.

Особый интерес представляет предел, соответствующий $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ — называемый **мелкой ямой**⁷. Если выше высказанное предположение верно, то полная энергия частицы $E = \langle \hat{U} \rangle + \langle \hat{T} \rangle \sim -U_0 + \hbar^2/ma^2 > 0$ и частица просто «вылетит» из ямы в состояния непрерывного спектра. Единственное разрешение полученного парадокса — это предположить, что типичный масштаб волновой функции связанного состояния в мелкой яме $l \gg a$ (так, чтобы выполнялось во всяком случае нестрогое неравенство $U_0 \gtrsim \hbar^2/ml^2$). Но это означает, что большая часть волновой функции частицы располагается *вне* ямы⁸. В таком случае, масштаб l волновой функции определяется уравнением Шрёдингера вне ямы, где, как было сказано выше, волновая функция экспоненциально затухает $\psi(x) \simeq e^{-\kappa|x|}$, и $\kappa = l^{-1}$ непосредственно связан

⁶Аналогичного утверждения для пространства произвольной размерности нет, поскольку волновая функция может зануляться не только в точках, но и на каких-то поверхностях. Тем не менее, в основном состоянии волновая функция не зануляется в любой размерности.

⁷Во избежание недоразумений отметим, что мелкость ямы не означает буквально малость глубины ямы — критерию мелкости можно удовлетворить также уменьшая a . Мелкая яма может быть сколь угодно глубокой, но узкой

⁸В противоположном пределе глубокой ямы $mU_0a^2/\hbar \gg 1$ это предположение, в действительности, тоже не работает — чаще всего основное состояние имеет масштаб $l \ll a$. Для достаточно гладкого потенциала (яма с бесконечными стенками не подходит) основное состояние будет расположено вблизи минимума потенциала, где работает разложение $U(x) = U_{\min} + \frac{1}{2}U''(x_{\min}) \cdot (x - x_{\min})^2 + \dots$. Ограничившись первыми двумя членами, мы свели задачу к гармоническому осциллятору, масштаб связанного состояния в котором равен $l \sim \hbar^{1/2}/(U''m)^{1/4} \sim a \cdot (\hbar^2/U_0ma^2)^{1/4} \ll a$, где сделана размерная оценка $U'' \sim U_0/a^2$. Конечно, такой рецепт не подходит на все случаи жизни — всегда следует контролировать законность приближения минимума гармоническим осциллятором и влияние следующих членов разложения.

с энергией связанного состояния $|E| = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$. Полученное соотношение масштабов волновой функции и ямы в действительности означает, что внутри ямы волновая функция практически не меняется — а значит, связанное состояние (если оно имеется!) нечувствительно к деталям потенциала. Именно это обстоятельство позволяет построить универсальное решение задач о мелких ямах.

Стоит обратить отдельное внимание на тот факт, что дельта-яма $U(x) = -u\delta(x)$, не смотря на кажущуюся парадоксальность, является мелкой ямой. Действительно, если промоделировать дельта-функцию прямоугольной ямой глубиной U_0 и шириной a , и начать уменьшать $a \rightarrow 0$, сохраняя постоянным произведение $U_0 a = u = \text{const}$ (классическое определение дельта-функции), то критерий малости ямы, $U_0 m a^2 / \hbar^2 = u m a / \hbar \ll 1$, будет выполняться всё лучше и лучше⁹.

3.4.2 Импульсное представление

Удобнее всего решать задачу именно в импульсном представлении. Более того, обсуждать мы будем сразу случай произвольной пространственной размерности $d = 1, 2, 3$. Также в этом разделе мы положим $\hbar = 1$.

УШ в импульсном представлении

Чтобы записать уравнение Шрёдингера в импульсном представлении, необходимо его спроецировать на бра-вектор $\langle \mathbf{p} |$, то есть рассмотреть $\langle \mathbf{p} | \hat{H} | \psi \rangle = E \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$. Кинетическая энергия в таком случае запишется тривиально — этот оператор *диагонален* в импульсном представлении:

$$\langle \mathbf{p} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) \quad (3.18)$$

Потенциальная энергия не является диагональным оператором; поэтому нам пригодятся её матричные элементы в этом базисе. Стандартный способ перехода между представлениями — вставление «разложения единиц» по базису, в котором мы знаем как действует оператор, в данном случае — в координатном базисе:

$$\langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) \underbrace{|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|}_{\mathbb{I}} | \mathbf{p}' \rangle = \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle = \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{x}} = U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}, \quad (3.19)$$

из чего мы заключаем, что эти матричные элементы тождественно совпадают с преобразованием Фурье от потенциала. В таком случае, потенциальная энергия записывается в импульсном представлении в следующем виде:

$$\langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) | \psi \rangle = \langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) \underbrace{\int (d\mathbf{p}') |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|}_{\mathbb{I}} | \psi \rangle = \int (d\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \psi(\mathbf{p}'), \quad (3.20)$$

где введено удобное обозначение $(d\mathbf{p}) \equiv d^d \mathbf{p} / (2\pi)^d$. Полученный объект называется свёрткой двух функций¹⁰. Таким образом, уравнение Шрёдингера в импульсном представлении записывается в следующем виде:

$$\boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) + \int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = E \psi(\mathbf{p})} \quad (3.21)$$

Вместо дифференциального уравнения, которым является уравнение Шрёдингера в координатном представлении, мы получили интегральное уравнение. Тем не менее, это уравнение иногда оказывается решать проще — и мелкая яма является одним из ключевых тому примеров.

Мелкая яма в импульсном представлении

Из общих рассуждений мы понимаем, что масштаб волновой функции в координатном представлении — большой масштаб $\kappa^{-1} \gg a$ — что из соотношения неопределённостей означает, что в импульсном представлении, напротив, волновая функция $\psi(\mathbf{p})$ является локализованной вблизи нуля на малом масштабе $\sim \kappa$. С другой стороны, масштаб $U(\mathbf{x})$ — это $a \ll \kappa^{-1}$; в свою очередь, масштаб $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ — это большой масштаб a^{-1} . Благодаря большой разнице в масштабах, в свёртке $\int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ основной вклад в интеграл приходит с $|\mathbf{p}'| \lesssim \kappa$, на котором функция $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ меняется слабо — поэтому

⁹Данная аргументация работает лишь для одномерного движения. В двумерии для ямы $U(\mathbf{x}) = -u\delta(\mathbf{x})$ нам придётся сохранять постоянным произведение $U_0 \pi a^2 = u = \text{const}$, из-за чего критерий малости будет соответствовать $u \ll \hbar^2 / m$ и в этом смысле улучшаться с уменьшением a не будет. В трёхмерии же ситуация ещё хуже — дельта-яма в действительности бесконечно глубока. Как мы увидим далее, физически это отвечает тому, что в двумерной мелкой яме уровень энергии будет *экспоненциально* мелким (но тем не менее, будет всегда), а в трёхмерной мелкой яме связанных состояний вообще не существует.

¹⁰При преобразовании Фурье произведение функций переходит в свертку Фурье-образов (и наоборот), что мы здесь и наблюдаем.

её можно вынести за интеграл как «медленную огибающую», положив в ней \mathbf{p}' нулём. Это приводит нас к следующему приближённому уравнению:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + U_p \int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}') = E\psi(\mathbf{p}) \Rightarrow \psi(\mathbf{p}) = -\frac{U_p}{-E + \frac{p^2}{2m}} \int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}') \quad (3.22)$$

(отметим, что поскольку мы имеем дело с ямой, то потенциал $U(x) < 0$; и поскольку мы имеем дело со связанным состоянием, то $E = -|E| < 0$). Данное уравнение — алгебраическое, ведь в правой части стоит интеграл от волновой функции, который является константой. Последнее упрощение можно сделать, заметив, что в произведении перед интегралом, опять-таки, U_p является медленной огибающей, а $(|E| + p^2/2m)^{-1}$ — относительно быстроизменяющейся функцией, посему можно вообще положить $p = 0$. Наконец, проинтегрировав получившееся уравнения по $(d\mathbf{p})$ и сократив на интеграл от волновой функции, мы получаем следующее *уравнение самосогласования* — которое является уравнением на допустимые уровни энергии:

$$|U_{\mathbf{p}=0}| \int \frac{(d\mathbf{p})}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = 1 \quad (3.23)$$

Данное уравнение устроено следующим образом. Перед интегралом стоит Фурье-компонента потенциала, которая, в меру мелкости ямы, ожидается в каком-то смысле маленькой¹¹. Поэтому единственная возможность удовлетворить этому уравнению — сделать интеграл пропорционально большим; при этом единственный параметр, который мы можем менять — это энергия $|E|$; и по мере уменьшения энергии, интеграл увеличивается. Дальнейший анализ мы будем проводить уже для конкретного случая пространства различной размерности.

Размерность $d = 1$

При буквально нулевой энергии, этот интеграл расходится степенным образом на малых импульсах, и сходится на больших¹² — поэтому ожидается степенная зависимость от энергии. Подбирая достаточно маленькую энергию, можно прийти к тому, что знак равенства будет иметь место. В действительности же, этот интеграл, разумеется, считается точно:

$$|U_{\mathbf{p}=0}| \sqrt{\frac{m}{2|E|}} = 1 \Rightarrow |E| = \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx \right|^2 \quad (3.24)$$

Размерность $d = 2$

Интеграл расходится логарифмически на малых и на больших импульсах. На больших импульсах очевидным образом интеграл нужно обрезать на масштабах $\sim 1/a$, поскольку это уравнение было выведено именно в таком предположении (это позволило нам заменить U_p на $U_{p=0}$; и поскольку интеграл логарифмический, то он нечувствителен к этой обрезке — она меняет лишь константу под логарифмом), а на маленьких — масштабом $\sqrt{2mE}$; сингулярность на малых энергиях оказывается слабой, логарифмической. Поэтому чтобы сделать левую часть порядка единицы, уровень энергии *ну очень маленьким*. Приступим теперь к непосредственному вычислению:

$$\int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = \int \frac{2\pi p dp}{4\pi^2} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \approx \frac{m}{\pi} \int_{\sim\sqrt{mE}}^{\sim 1/a} \frac{dp}{p} = \frac{m}{2\pi} \ln \frac{\#}{ma^2|E|} \quad (3.25)$$

Точность этого выражения следующая: число перед логарифмом определено точно, а в силу неточности при обрезании, число под логарифмом ($\#$) неизвестно. Для его нахождения нужно решать уравнение Шрёдингера точно; это число уже определяется явным видом потенциала. Тем самым, решая уравнение самосогласования, мы получаем (восстанавливая опять \hbar по размерности):

$$|E| = \# \frac{\hbar^2}{ma^2} \exp \left(-\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left| \int U(\mathbf{r})d^2\mathbf{r} \right|^{-1} \right) \quad (3.26)$$

Таким образом, мы определили уровень энергии в мелкой двумерной яме с экспоненциальной точностью; и этот уровень оказывается действительно *экспоненциально* мелким. Ведущая асимптотика даётся этой самой экспонентой, которая может быть оценена как $\exp(-\frac{\hbar^2/ma^2}{U_0}) \lll 1$. Число же в предэкспоненте таким способом определить нельзя.

¹¹ «В каком-то смысле» — потому что, конечно, размерные величины, коими являются как Фурье от потенциала, так и интеграл, сравнивать нельзя

¹²Расходимость на малых импульсах обычно называют *инфракрасной* расходимостью, а на больших — *ультрафиолетовой*.

Размерность $d \geq 3$

Исследуемый интеграл вообще не расходится на малых импульсах, поэтому он практически не зависит от энергии. На больших импульсах он может быть обрезан на масштабе $\sim 1/a$; тем самым, весь интеграл оценивается как

$$\int \frac{(d\mathbf{p})}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \sim m a^{2-d} \quad (3.27)$$

С другой стороны, $U_{p=0} \sim U_0 a^d$; тем самым вся комбинация имеет порядок $\frac{U_0}{\hbar^2/m a^2} \ll 1$. Из-за слабой чувствительности интеграла к изменению энергии, сделать это выражения порядка единицы изменяя энергию, невозможно и уравнение самосогласования не имеет решений. Из чего мы заключаем, что в старших размерностях в мелкой яме нет связанных состояний.

Выводы

Во-первых, мы получили, что сколь бы мелкой яма ни была, в размерности $d = 1$ и $d = 2$ в ней всегда имеются связанные состояния, соответствующие дискретному спектру гамильтониана; причём в размерности $d = 2$ уровень экспоненциально мелкий. В размерности $d \geq 3$ в мелкой яме уровней энергии нет.

3.4.3 Координатное представление и сшивка асимптотик (*)

Полезно также изучить решение этой задачи в координатном представлении¹³. Для этого необходимо сделать дополнительное предположение о том, что уровень в мелкой яме сам по себе мелкий, а именно $|E| \ll U_0$ (из предыдущего решения мы видели, что это действительно так).

Выберем промежуточный масштаб b из условия $a \ll b \ll \kappa^{-1}$. С одной стороны, поскольку $b \gg a$, то потенциальную энергию на этом масштабе уже можно считать нулём; с другой, поскольку $b \ll \kappa^{-1}$ — то волновая функция ещё не успела значительно измениться. Проинтегрируем уравнение Шредингера от $-b$ до b :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+b) - \psi'(-b)] = - \int_{-b}^b [U(x) - E] \psi(x) dx. \quad (3.28)$$

Сделанные замечания позволяют нам с одной стороны — вынести волновую функцию за знак интеграла (и приравнять её, скажем к $\psi(0)$), а с другой — распространить пределы интегрирования до бесконечных¹⁴:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+b) - \psi'(-b)] = -\psi(0) \int_{-b}^b U(x) dx \approx -\psi(0) \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx, \quad (3.29)$$

Наконец, мы можем заметить, что поскольку $b \gg a$, то на этом масштабе можно пренебречь потенциалом, в связи с чем мы знаем, как устроено решение — а именно, как $\psi(|x| \gg a) \simeq C e^{-\kappa|x|}$. Подставляя это знание в полученное уравнение (удобно «сшивать» логарифмические производные $\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \equiv (\ln \psi(x))' = \mp \kappa$), мы получаем уравнение на величину κ , а значит — и на уровень энергии:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} 2\kappa = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \Rightarrow |E| = \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx U(x) \right|^2 \quad (3.30)$$

Оценка величины этого интеграла позволяет продемонстрировать верность сделанных предположений, ровно как и общих рассуждений, приведённых в начале раздела. А именно, $\int dx U(x) \sim U_0 a$, поэтому $E \sim U_0 \frac{m U_0 a^2}{\hbar^2} \ll U_0$ — уровень действительно мелкий; а кроме того, $l = \kappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \sim \frac{\hbar}{m U_0 a} \equiv a \cdot \frac{\hbar}{m U_0 a^2} \gg a$ — волновая функция действительно широкая.

Наконец, ответ также подтверждает и общие рассуждения о том, что результат должен быть нечувствителен к деталям потенциала — он зависит только от полного его интеграла.

Понимая физический смысл дельта-функции — как произвольный узкий пик с фиксированной нормировкой и шириной, много меньшей всех релевантных параметров в задаче — можно понять, что любую мелкую яму в 1D можно заменить на дельта-яму с сохранением нормировки $U(x) \mapsto \delta(x) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx$, и такая замена сохранит основные физические результаты (вид волновой функции, уровень энергии, и т.п.). Это привносит дополнительный смысл в задачу с дельта-ямой — ведь ясно, что в природе дельта-функциональных потенциалов не бывает — но такой потенциал идеально аппроксимирует мелкую яму.

¹³Этот способ изложен в [JL102, глава 6 «Теория возмущений», §45 «Потенциальная энергия как возмущение», задачи 1 и 2]

¹⁴Это, конечно, требует достаточно быстрого спада потенциала на бесконечности, и, разумеется, сходимости соответствующего интеграла

3.5 Асимптотический вид состояний непрерывного спектра

Обсудим теперь некоторые свойства состояний непрерывного спектра для локализованных (т.е. спадающих достаточно быстро на бесконечности) потенциалов. Как обсуждалось ранее, на бесконечности общее решение уравнения Шрёдингера устроено следующим образом:

$$\psi(x) \approx \begin{cases} a_L e^{ikx} + b_L e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ a_R e^{ikx} + b_R e^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad E = \frac{k^2}{2m} \quad (3.31)$$

Напомним, при исследовании дискретного спектра мы фиксировали, скажем, при $x \rightarrow -\infty$ один из параметров (при растущей экспоненте $e^{-\kappa x}$) нулём, решали соответствующую краевую задачу — и в общем случае получали при $x \rightarrow +\infty$ пару коэффициентов $C_1 e^{\kappa x} + C_2 e^{-\kappa x}$. Дальнейшее требование $C_1(E) = 0$ задавало нам дискретный спектр уровней энергии связанных состояний.

Для непрерывного спектра требования зануления одного из коэффициентов нет, из-за чего состояния непрерывного спектра **двукратно вырождены**: фиксируя, например, $a_L = 0$, $b_L = 1$ и решая краевую задачу, мы будем получать какие-то значения a_R и b_R ; и фиксируя $a_L = 1$ и $b_L = 0$ мы будем получать другое решение. В общем же случае, на эти коэффициенты имеет место линейная связь.

Стандартный выбор пары линейно независимых решений для непрерывного спектра — это так называемые состояния **стационарной задачи рассеяния**, имеющие следующие асимптотики:

$$\psi_k^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ t e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad \psi_k^{(-)}(x) = \begin{cases} t' e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{-ikx} + r' e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.32)$$

Первое решение описывает волну, падающую слева (e^{ikx}), которая с какой-то амплитудой отражается ($r e^{-ikx}$) и с какой-то амплитудой проходит ($t e^{ikx}$). Второе же решение описывает волну, падающую справа. Амплитуды r, t, r', t' , вообще говоря, зависят от энергии (или от параметра k) и от явного вида потенциала. Решение задачи рассеяния заключается в нахождении этих амплитуд.

3.6 Поток вероятности и унитарность рассеяния

Одно из основополагающих свойств квантовой механики — это унитарность эволюции: уравнение Шрёдингера сохраняет нормировку волновой функции $\langle \psi | \psi \rangle = \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \text{const}$. Ранее обсуждалось, что величина $\rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$ несёт смысл плотности вероятности обнаружить частицу в точке \mathbf{x} ; это — наблюдаемая величина, и ей соответствует эрмитов оператор плотности числа частиц:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}_0) = \delta(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0) \quad (3.33)$$

Как правило¹⁵, если имеет место закон сохранения какой-то величины, то для *плотности* этой величины можно написать **уравнение непрерывности**:

$$\int \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \text{const} \Leftrightarrow \partial_t \rho(\mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0. \quad (3.34)$$

Величина $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ носит название **плотности потока** этой величины. Действительно, проинтегрировав это уравнение по произвольной области Ω , и воспользовавшись теоремой Лиувилля-Остроградского, мы получаем:

$$\partial_t \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (3.35)$$

(то есть изменение величины в области Ω определяется интегралом от потока через границу этой поверхности).

В частности, используя уравнение Шрёдингера, можно вывести выражение для плотности потока импульса:

¹⁵Это относится, в частности, ко всем сохраняющимся величинам, которые связаны с теоремой Нётер

$$\begin{aligned}\partial_t |\psi(\mathbf{x})|^2 &= \psi^*(\mathbf{x}) \partial_t \psi(\mathbf{x}) + \text{c.c.} = \psi^*(\mathbf{x}) \left[\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}) + \text{c.c.} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\nabla (\psi^* \nabla \psi(\mathbf{x})) - |\nabla \psi|^2 \right] + \text{c.c.} = \nabla \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)\end{aligned}\quad (3.36)$$

(тут мы воспользовались тождеством $\nabla(f\nabla g) = \nabla f \cdot \nabla g + f\nabla^2 g$, а также мнимостью члена с $V(\mathbf{x})$ и $|\nabla \psi|^2$ — поэтому они выпадают при комплексном сопряжении). Тем самым, с произвольной волновой функцией связан ток¹⁶:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \text{Re} \psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi \quad (3.37)$$

Последняя форма — лёгкий способ запомнить это выражение; тут мы ввели оператор групповой скорости $\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla$. В таком виде плотность потока вероятности имеет смысл просто плотности частиц, умноженной на их скорость — ровно это было бы в классической механике. Не стоит, однако, забывать о том, что просто выражение $\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi$ не является вещественным и не может соответствовать физической величине; для этого мы добавляем знак вещественной части.

Наконец, приведём ещё одну полезную формулу для вычисления плотности потока вероятности. Если представить волновую функцию в виде $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| e^{i\varphi(\mathbf{r})}$ и подставить в выражение, то мы получим:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \nabla \varphi \quad (3.38)$$

Это выражение показывает явно, что чтобы имелся некоторый *поток* частиц, необходимо пространственное изменение фазы волновой функции. При этом скорость частиц в этом потоке равна $v = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi$.

Следствия для задачи рассеяния Обсудим теперь следствия условия унитарности для одномерной задачи рассеяния. Если мы попробуем вычислить токи числа частиц для состояний дискретного спектра, то мы немедленно получим ноль — ведь последние всегда можно выбрать чисто вещественными, и поэтому для них $\nabla \varphi = 0$.

Однако, несложно видеть, что для состояний задачи рассеяния с каждым из слагаемых — падающей (e^{ikx}), отражённой (re^{-ikx}) и прошедшей (te^{ikx}) связан конечный поток вероятности, и суммарный поток в каждой точке отличен от нуля:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{отр}} = \frac{\hbar k}{m} |r|^2, \quad j_{\text{прош}} = \frac{\hbar k}{m} |t|^2 \quad (3.39)$$

С другой стороны, для стационарных состояний зависимость различных наблюдаемых от времени отсутствует; поэтому уравнение непрерывности устроено просто как $\nabla \cdot \mathbf{j}(x) = 0 \Rightarrow j(x) = \text{const}$. В частности, вычисляя потоки при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$, мы получаем¹⁷:

$$j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}} = j(x \rightarrow -\infty) = j(x \rightarrow +\infty) = j_{\text{прош}} \Leftrightarrow |r|^2 + |t|^2 = 1, \quad (3.40)$$

и аналогичное соотношение можно выписать, рассматривая и «правую» задачу рассеяния: $|r'|^2 + |t'|^2 = 1$.

Мы можем ввести также классическую интерпретацию: определить **вероятность отражения** R и **вероятность прохождения** T следующим образом:

$$R \equiv \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |r|^2, \quad T = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |t|^2 \quad (3.41)$$

и в таком случае условие унитарности — это просто условие того, что частица либо отражается, либо проходит — третьего (поглощения) не дано.

¹⁶Формально говоря, мы получили равенство $\text{div} \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \text{div} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*]$, из которого, вообще говоря, не следует равенство самих токов — ведь к \mathbf{j} можно прибавить ротор произвольного векторного поля $\text{rot} \mathbf{a}$, и дивергенция при этом не изменится. Непосредственно равенство для \mathbf{j} будет следовать, если потребовать дополнительное условие $\text{rot} \mathbf{j} = 0$ — ведь вихревые потоки вероятности не являются наблюдаемыми.

Внимательный читатель может обратить внимание, что вихревые потоки вероятности для *заряженных* частиц соответствуют вихревым электрическим токам, и согласно уравнению Максвелла могут порождать магнитное поле. В действительности же, выражение для электрического тока, хоть формально практически совпадает с выражением для \mathbf{j} , получается из немного других соображений — а именно, из варьирования *действия* по вектор-потенциалу $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

¹⁷Вообще говоря, мы не имеем права обходиться с различными слагаемыми в волновой функции независимо — плотность частиц или ток зависят от волновой функции квадратично. Однако, можно убедиться прямым вычислением, что все интерференционные члены сокращаются.

3.6.1 Симметрия по отношению к обращению времени

В классической механике имеет место симметрия по отношению к обращению времени, и формулируется она достаточно просто: если $(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t))$ является решением классических уравнений движения, то $(\mathbf{x}(-t), -\mathbf{p}(-t))$ — тоже. Последняя, однако, соответствует частице, движущийся по траектории в обратном направлении.

В квантовой механике этой симметрии соответствует вещественность гамильтониана¹⁸ $\hat{H} = \hat{H}^*$. Действительно, если мы комплексно сопряжём УШ, то при наличии этой симметрии мы получим, что $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ тоже ему удовлетворяет.

Для стационарного УШ это означает, что если $\psi(\mathbf{r})$ — решение стационарного УШ, то $\psi^*(\mathbf{r})$ — тоже. Для связанных состояний это никакой информации не даёт, поскольку волновые функции всегда можно выбрать вещественными. Однако, это несёт полезную информацию для состояний непрерывного спектра: сопрягая, например, $\psi_k^{(+)}(x)$ из уравнения (3.32), мы получаем линейно-независимое с $\psi_k^{(+)}(x)$ решение. А это, в свою очередь, означает, что $\psi_k^{(-)}(x)$ должно линейно выражаться через них:

$$\psi_k^{(-)}(x) \equiv \alpha \psi_k^{(+)}(x) + \beta (\psi_k^{(+)}(x))^* = \begin{cases} \alpha(e^{ikx} + r e^{-ikx}) + \beta(e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) \equiv t' e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \alpha t e^{ikx} + \beta t^* e^{-ikx} \equiv e^{-ikx} + r' e^{ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.42)$$

откуда мы получаем следующую связь амплитуд:

$$\begin{cases} \alpha + \beta r^* &= 0 \\ \alpha r + \beta &= t' \\ \alpha t &= r' \\ \beta t^* &= 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha &= -\frac{r^*}{t^*} \\ \beta &= \frac{1}{t^*} \end{cases}, \quad \boxed{\begin{cases} t' &= t \\ r' &= -r^* t / t^* \end{cases}} \quad (3.43)$$

В частности, отсюда следует, что вероятности прохождения слева направо и справа налево совпадают: $R = R'$, $T = T'$.

Потенциальные ступени Вышесказанные утверждения необходимо модифицировать, если потенциал имеет характер «ступеньки» — т.е. имеет различные пределы при $x \rightarrow \pm\infty$. Для определённости, рассмотрим следующий потенциал:

$$U(x) \approx \begin{cases} 0, & x \rightarrow -\infty \\ U_0 > 0, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.44)$$

Перечислим основные отличия в таком случае:

1. При энергии $U_0 > E > 0$, волновые функции при $x \rightarrow +\infty$ имеют экспоненциальный характер, из-за чего требование зануления коэффициента при растущей экспоненте восстанавливается. В этой области спектр непрерывный, но однократно вырожденный. Вероятности отражения/прохождения в этом случае тривиальны: $R = 1$, $T = 0$, а вот фаза амплитуды рассеяния r содержит в себе нетривиальную информацию.
2. При энергии $E > U_0$, спектр по-прежнему двукратно вырожден; однако волновые вектора слева и справа от рассеивателя, вообще говоря, различны: $k = \sqrt{2mE}$ и $k' = \sqrt{2m(E - U_0)}$. Из-за этого модифицируются выражения для вероятностей отражения и прохождения, а поэтому и условие унитарности:

$$\boxed{R = |r|^2, \quad T = \frac{k'}{k} |t|^2, \quad R + T = 1} \quad (3.45)$$

3. Операция обращения времени также несколько модифицируется: $t' = \frac{k'}{k} t$. При этом соотношение на вероятности $R' = R$ и $T' = T$ остаётся верным.

¹⁸Если гамильтониан описывает частицу со спином, и волновая функция — многокомпонентный спинор, то может оказаться необходимым добавить к комплексному сопряжению ещё какое-то унитарное преобразование (например, обращение времени изменяет направление магнитного момента, а значит — и спина; поэтому для задачи со спином, обращение времени включает в себя оператор переворота спина).

С другой стороны, даже в отсутствие спина, магнитное поле входит в гамильтониан явно комплексным образом — путём замены оператора импульса на $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, из-за чего говорят, что магнитное поле в квантовой механике эту симметрию нарушает. Дело в том, что из теории поля известно, что вектор-потенциал \mathbf{A} тоже должен менять знак при обращении времени.

3.7 Аналитические свойства амплитуд рассеяния

Решая *хорошие* уравнения с *хорошими* свойствами¹⁹, мы будем получать решения, которые являются как аналитическими функциями координаты, так и аналитическими функциями параметров (в частности, энергии E или параметра k).

Заметим, что если аналитически продолжить, скажем, состояние $\psi_k^{(+)}(x)$ по параметру k на верхнюю мнимую полуось $k \equiv i\kappa$, $\kappa > 0$, то мы формально получим следующее решение уравнения Шрёдингера:

$$\psi_{i\kappa}^{(+)}(x) = \begin{cases} e^{-\kappa x} + r(i\kappa)e^{\kappa x}, & x \rightarrow -\infty \\ t(i\kappa)e^{-\kappa x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad E = -\frac{\kappa^2}{2m} \quad (3.46)$$

Выражения $r(i\kappa)e^{\kappa x}$ и $t(i\kappa)e^{-\kappa x}$ экспоненциально затухают при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$, соответственно. Поэтому, если бы удалось избавиться от слагаемого $e^{-\kappa x}$, которое растёт на бесконечности ($x \rightarrow -\infty$), то такая волновая функция описывала бы связанное состояние. Это возможно, в случае, если $t(i\kappa) \rightarrow \infty$ и $r(i\kappa) \rightarrow \infty$ [при этом будет $t/r = O(1)$], потому что в таком пределе «неправильное» слагаемое с коэффициентом 1 исчезает по сравнению с слагаемыми с неогранично растущими коэффициентами r и t . Формально, пользуясь свободой нормировки, можно разделить (3.46) на $r(i\kappa)$ и взять соответствующий предел. Таким образом: полюса амплитуд прохождения и отражения²⁰ на верхней мнимой полуоси (как аналитических функций параметра k) соответствуют связанным состояниям.

Полюса на нижней комплексной полуоси $k = -i\kappa$, хотя тоже наивно соответствуют вещественной энергии $E = -\frac{\kappa^2}{2m}$, связанным состояниям не соответствуют — несложно видеть, что им соответствуют экспоненциально растущие решения. Если мы перейдём от параметра k к параметру $E = \frac{k^2}{2m}$ (для чего нам необходимо рассмотреть двулистную Риманову поверхность, например, с разрезом $[0, \infty)$), то процедура аналитического продолжения $k \mapsto i\kappa$ и $k \mapsto -i\kappa$ будут приводить нас попросту на различные листы этой Римановой поверхности. Полюса, соответствующие связанным состояниям, лежат на так называемом *физическом* листе.

3.8 Пример: дельта-яма

Всё вышесказанное можно продемонстрировать на простейшем примере рассеяния на потенциале дельта-ямы: $U(x) = \frac{\kappa}{m}\delta(x)$. При этом асимптотический вид (3.32) является точным, а дельта-яма всего лишь накладывает дополнительное граничное условие при $x = 0$, из которого мы можем найти амплитуды:

$$\Delta(\ln \psi)'_{x=0} = 2\kappa \Rightarrow \boxed{r = \frac{\kappa}{ik - \kappa}, \quad t = 1 + r = \frac{ik}{ik - \kappa}} \quad (3.47)$$

Мы видим, что $R = \frac{\kappa^2}{k^2 + \kappa^2} = \frac{E_0}{E + E_0}$, $T = \frac{k^2}{k^2 + \kappa^2} = \frac{E}{E + E_0}$ (где $E_0 = \frac{\kappa^2}{2m}$ — энергия связанного состояния в этой яме, если оно имеется), и поэтому $R + T = 1$. Кроме того, мы видим, что у этих выражений имеется полюс при $k = -i\kappa$; этот полюс соответствует связанным состояниям только при $\kappa < 0$, и энергия этого связанного состояния равна попросту $-E_0$. Что отражает наше знание про спектр дельта-ямы.

3.9 Нормировка состояний непрерывного спектра

Ранее мы обсуждали, что состояния непрерывного спектра невозможно нормировать на единицу, и вместо этого они нормируются на дельта-функцию:

$$\langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = c(f)\delta(f - f') \quad (3.48)$$

Если мы хотим работать с непрерывным спектром — раскладываться по состояниям, искать функцию распределения величины f , и т.п. — то нам очень полезно было бы научиться вычислять величину $c(f)$. С другой стороны, если $\psi_f(x)$ является каким-то сложным состоянием непрерывного спектра какого-то сложного потенциала, то прямолинейное вычисление интеграла перекрытия с дальнейшим сведением его к известному интегральному представлению дельта-функции, как правило, связано с большими трудностями. К счастью, часто это не требуется — оказывается, для определения нормировочного множителя достаточно знать только асимптотический вид волновых функций.

Трюк заключается в следующем. Введём произвольный масштаб Λ и запишем перекрытие следующим образом:

¹⁹Математический эквивалент *хорошести* мы опустим

²⁰Полюса амплитуды прохождения и отражения будут совпадать, что следует, например, из соотношения (3.45).

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) = \int_{-\infty}^{-\Lambda} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) + \int_{\Lambda}^{\infty} dx \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \psi_{f'}^*(x) \psi_f(x) dx. \quad (3.49)$$

Дальше мы можем заметить, что при произвольном значении Λ , последний член — конечен при $f = f'$, а вообще он представляет собой *регулярную функцию* от f и f' . Как мы знаем, напротив, ответ — сингулярен, представляет собой дельта-функцию от $f - f'$. Поэтому если мы стремимся «отловить» дельта-функциональный вклад, то возникнуть он может только с бесконечности, с первых двух членов. Проводя эти рассуждения для достаточно больших Λ , мы понимаем, что для нормировки мы действительно можем пользоваться только асимптотическим представлением волновых функций.

Продemonстрируем, как это работает для задачи рассеяния — для этого вычислим их нормировку (поверим, что $\langle \psi_k^{(+)} | \psi_k^{(-)} \rangle = 0$ и будем работать только с «левыми» состояниями):

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^{-\Lambda} (e^{-ikx} + r_k^* e^{ikx})(e^{ik'x} + r_{k'} e^{-ik'x}) dx + \int_{\Lambda}^{\infty} t_k^* e^{-ikx} t_{k'} e^{ik'x} dx$$

Дальше заметим, что если уже в этом выражении мы заменим пределы интегрирования на ноль, мы опять добавим всего лишь регулярный вклад, и характер сингулярности не изменится; однако вычисление будет проще. Кроме того, отметим, что сингулярные при $k \rightarrow k'$ члены могут возникать только если осцилляции в экспонентах будут гасить друг друга; интерференционные члены несингулярны. Наконец, поскольку амплитуды являются в каком-то смысле «медленными огибающими», то в них мы можем положить $k = k'$. Поэтому мы получаем:

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^0 (e^{-i(k-k')x} + |r_k|^2 e^{i(k-k')x}) dx + \int_0^{\infty} |t_k|^2 e^{-i(k-k')x} dx \quad (3.50)$$

Заменяя во втором члене первого интеграла $x \mapsto -x$ и пользуясь условием унитарности $|r_k|^2 + |t_k|^2 = 1$, мы получаем стандартное представление дельта-функции; из чего мы заключаем, что состояния задачи рассеяния нормированы точно так же, как и обыкновенные плоские волны:

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \text{reg.} + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k')x} dx = 2\pi\delta(k - k') \quad (3.51)$$

(отметим, что регулярная часть после всех этих процедур обязана сократиться — как мы знаем, в ответе её нет, состояния с различными $k \neq k'$ обязаны быть ортогональными).

Нормировка «в ящике»

Вообще говоря, не самый плохой способ работать с непрерывным спектром — это полностью избавиться от него. Скажем, для квантомеханической частицы мы всегда можем поместить всю систему в ящик конечного, но большого объёма V — такая процедура, очевидным образом, дискретизует задачу²¹. При этом отличие качественное отличие дискретного и непрерывного спектра останется — скажем, в энергетическом представлении расстояние между соседними уровнями энергиями $\propto \frac{1}{V} \rightarrow 0$, а между состояниями дискретного спектра — $\sim \text{const}$. Трудности этого способа заключаются в том, что очень много величин оказываются зависящими от этого объёма, и его приходится «таскать» до самого конца, усложняя вычисления — хотя, разумеется, физические ответы от него зависеть не могут. Более того, всегда требуется явно разграничить явления, для которых конечный, но большой объём важен (например, квантование энергии и импульса), и для которых он совершенно несущественен (к примеру, вид волновых функций связанных состояний). Наконец, конкретная техника вычислений может зависеть от того, какого вида граничные условия выбраны — нулевые, периодические, и т.п. — хотя, разумеется, ни одна разумная физическая величина от этого зависеть никак не может.

Продemonстрируем, как это работает на примере свободного движения. Удобнее всего использовать периодические граничные условия Борна-Кармана $\psi(\mathbf{r} + L_i \hat{\mathbf{e}}_i) \equiv \psi(\mathbf{r})$ (тут L_i — размер ящика в пространственном измерении $i = x, y, z$, а $\hat{\mathbf{e}}_i$ — единичный вектор вдоль этого измерения) — потому что при этом остаётся условие трансляционной инвариантности, и собственные функции оператора импульса устроены точно так же, как и без ящика:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (3.52)$$

Периодические граничные условия теперь накладывают условия на допустимые компоненты импульса: $p_i L_i = 2\pi n_i$ и $n_i \in \mathbb{Z}$. Это — проявление того, что импульс, в действительности, обладает непрерывным спектром — расстояние между

²¹Во всяком случае, у импульсного и энергетического представления непрерывного спектра не станет. Однако, разумеется, координатное представление останется непрерывным; для того, чтобы справиться и с ним, необходимо также «посадить» систему на решётку.

соседними импульсами $\Delta p = 2\pi/L_i \rightarrow 0$ при $V \rightarrow \infty$. В таком случае, суммирование по всем состояниям непрерывного спектра (которое возникает, скажем, при разложении по такому базису), как правило, можно заменять на интегрирование

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) \equiv \sum_{\{n_i \in \mathbb{Z}\}} f\left[\mathbf{p} = \sum_i \frac{2\pi n_i}{L_i} \hat{\mathbf{e}}_i\right] \approx \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dn_i f(\mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{dp_i}{(2\pi/L_i)} f(\mathbf{p}), \quad (3.53)$$

или, символически:

$$\sum_{\mathbf{p}} \leftrightarrow \int \frac{V d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \quad (3.54)$$

К примеру, разложение единицы:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \approx \int \frac{V d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\mathbf{p}\mathbf{r}'} = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.55)$$

Таким образом, используя этот способ, мы получим явную зависимость от объёма некоторых величин, но, на примере разложения единицы видно, что из конечных ответов объём должен исчезнуть.

Плотность состояний

Если система находится в ящике, то можно ввести следующую величину — плотность состояний $\mathcal{N}(f_0) = \sum_f \delta(f - f_0)$ (по аналогии с «плотностью числа частиц», что мы обсуждали в самом начале семинара). Такая величина буквально позволяет ответить на вопрос, сколько собственных состояний оператора \hat{f} находятся в произвольном отрезке собственных значений от f_1 до f_2 как $N = \int_{f_1}^{f_2} \mathcal{N}(f) df$. Будучи так определённой, эта функция не является регулярной функцией, а скорее какой-то плотной гребёнкой из дельта-функций (если мы имеем дело с дискретным спектром). Однако, по мере увеличения объёма, расстояние между соседними пиками будет уменьшаться. Если же искусственно уширить каждую дельта-функцию, то при достаточно больших конечных объёмах получится вполне регулярная функция²². Более того, поскольку расстояние между соседними уровнями, как правило, обратно пропорционально объёму системы, то в пределе $V \rightarrow \infty$ оказывается хорошо определённой величина $\nu(f_0) = \frac{1}{V} \mathcal{N}(f_0) = \frac{1}{V} \sum_f \delta(f - f_0)$. Эту величину также часто называют плотностью состояний²³.

3.10 Нестационарная задача рассеяния и задержка волнового пакета (*)

Вообще говоря, до сих пор мы обсуждали стационарные задачи. С другой стороны, с точки зрения задачи рассеяния более логичной кажется задача нестационарная, для определения которой нам необходимо:

1. Задать начальные условия, которые соответствуют волновому пакету, находящемуся на $x \rightarrow -\infty$ при времени $\tau \rightarrow -\infty$ и имеющему конечный импульс p_0 , направленный на рассеиватель. Примером такого волнового пакета может служить следующая волновая функция:

$$\psi(x, -\tau_0) \equiv \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} a^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x+L)^2}{2a^2} + ip_0 x\right). \quad (3.56)$$

В координатном представлении она представляет собой волновой пакет ширины a вокруг точки $x = -L$, а в импульсном — волновой пакет ширины $\sim 1/a$ вокруг среднего значения k_0 .

2. Решить *нестационарное* уравнение Шрёдингера, рассмотрев эволюцию этого волнового пакета.
3. Исследовать асимптотики полученного решения при $\tau \rightarrow +\infty$, которые представляли бы пару волновых пакетов — отражённый, который находится на $x \rightarrow -\infty$ и имеет импульс $-p$, и прошедший, который летит на $x \rightarrow +\infty$ и имеет импульс p .

²²В действительности же такое уширение действительно возникает, и оно вполне даже конечно — для открытых систем, взаимодействующих с окружающей средой.

Альтернативно, получить регулярную функцию можно если по какой-то причине (например, наличии в системе случайных примесей), собственные значения являются случайными — в таком случае усреднение по беспорядку приведёт к вполне регулярной функции.

²³Хотя, разумеется, более корректно её называть плотностью (в смысле объёмной плотности) плотности состояний. Но такое название довольно нелепо.

4. Наконец, вычислить вероятность отражения $R = \int_{-\infty}^0 |\psi(x, \tau \rightarrow +\infty)|^2 dx$ и $T = \int_0^{\infty} |\psi(x, \tau \rightarrow +\infty)|^2 dx$.

Априори утверждение о том, что эти вероятности совпадают с вероятностями, которые мы определили в стационарной задаче рассеяния, не является очевидным. Тем не менее, это действительно так, что мы попробуем продемонстрировать ниже, для чего мы попробуем решить нестационарное уравнение Шрёдингера в общем виде.

При $\tau \rightarrow +\infty$ будет иметься волновой пакет, соответствующий прошедшей волне. С другой стороны, если бы рассеивателя не было, то волновой пакет тоже имелся бы, но двигался бы он *правее*. Явление это носит название **задержки волнового пакета** — частица может на некоторое время «застрять» в рассеивателе²⁴. Мы ставим своей целью найти время этой задержки.

Для решения нестационарного УШ, как обычно, необходимо разложиться по базису стационарных решений (3.32), для чего мы можем воспользоваться выведенной выше нормировкой состояний непрерывного спектра²⁵:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int_0^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \left(|\psi_p^{(+)}\rangle \langle \psi_p^{(+)}| + |\psi_p^{(-)}\rangle \langle \psi_p^{(-)}| \right) \quad (3.57)$$

Разложимся по базису, используя асимптотики при $x \rightarrow -\infty$:

$$\psi_+(p) = \langle \psi_p^{(+)} | \psi_0 \rangle = 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \left[\exp \left(-\frac{1}{2} (p - p_0)^2 a^2 + i(p - p_0)L \right) + r^* \exp \left(-\frac{1}{2} (p + p_0)^2 a^2 - i(p + p_0)L \right) \right] \quad (3.58)$$

Из физической интуиции понятно, что нас интересует именно первый член, ведь он возник из асимптотики падающей волны в задаче рассеяния. Математически же это соответствует тому, что интегрируем мы по импульсам $p > 0$, а p_0 — большой положительный импульс, поэтому второй вклад оказывается экспоненциально малым. Ровно по этой же причине, коэффициенты разложения по $|\psi_p^{(-)}\rangle$, как и следует из нашей физической интуиции (ведь это — решение задачи рассеяния «справа-налево»!) тоже будут экспоненциально малы и нас интересовать не будут.

Дальше мы должны решать нестационарное уравнение Шрёдингера. Поскольку $|\psi_p^{(+)}\rangle$ эволюционируют тривиальным образом, накручивая фазу $e^{-i\varepsilon_p \tau}$, то $\psi_+(p, t) = e^{-i\varepsilon_p \tau} \psi_+(p)$. Наконец, мы должны сделать «обратное преобразование Фурье» и записать:

$$\psi(x, \tau) = \int \frac{dp}{2\pi} \psi_+(p, \tau) \cdot \psi_p^{(+)}(x) = 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \int \frac{dp}{2\pi} \psi_p^{(+)}(x) \exp \left(-\frac{1}{2} (p - p_0)^2 a^2 + i(p - p_0)L \right) e^{-i\varepsilon_p(\tau + \tau_0)} \quad (3.59)$$

Мы не знаем явный вид функции $\psi_p^{(+)}(x)$, но знаем асимптотики при $x \rightarrow \pm\infty$, поэтому давайте посмотрим на асимптотики $\psi(x, \tau)$ при $x \rightarrow \pm\infty$. При этом интеграл имеет пик вблизи $p = p_0$, поэтому все величины мы разложим вблизи этой точки и возьмём интеграл методом перевала. При этом учтём, что амплитуды прохождения, вообще говоря, тоже зависят от импульсов, и их тоже стоит раскладывать: $t \equiv t(p) = \sqrt{T(p)} e^{i\theta_p}$. Именно из-за зависимости фазы от импульса и произойдёт в конечном итоге эффект задержки. Итак, раскладываем ε_p и θ_p до второго порядка и берем Гауссов интеграл:

$$\begin{aligned} \psi(x \rightarrow +\infty, \tau) &\approx 2^{1/2} \pi^{1/4} a^{1/2} \int \frac{dp}{2\pi} \sqrt{T(k)} \exp \left(i \left[\theta_{p_0} + \theta'_{p_0} (p - p_0) + \frac{1}{2} \theta''_{p_0} (p - p_0)^2 \right] \right) \cdot e^{ipx} \cdot \\ &\cdot \exp \left(-\frac{1}{2} (p - p_0)^2 a^2 + i(p - p_0)L \right) \cdot \exp \left(-i \left[\varepsilon_{p_0} + \varepsilon'_{p_0} (p - p_0) + \frac{1}{2} \varepsilon''_{p_0} (p - p_0)^2 \right] (\tau + \tau_0) \right) = \\ &= \frac{a^{1/2}}{\pi^{1/4} \tilde{a}(t)} \sqrt{T(p_0)} \exp \left[-\frac{[(x + L) + \theta'(p_0) - \varepsilon'(p_0)(\tau + \tau_0)]^2}{2\tilde{a}^2(t)} + i \cdot \text{phase} \right] \end{aligned} \quad (3.60)$$

где $\tilde{a}^2(t) = a^2 - i\theta''(p_0) + i\varepsilon''(p_0)(\tau + \tau_0)$. Исследуем теперь полученное выражение:

²⁴В классической физике такой эффект тоже имеет место быть.

²⁵Разумеется, в потенциале также могут быть связанные состояния $|\psi_n\rangle$, и к этому выражению нужно добавить сумму проекторов на них. Для задачи рассеяния это несущественно — перекрытия исходного волнового пакета со связанными состояниями будет экспоненциально малым.

1. Это — гауссов волновой пакет, центр которого расположен при $x_0(\tau) = -L - \theta'(p_0) + \varepsilon'(p_0)(\tau + \tau_0) = -L + \varepsilon'(p_0)(\tau + \tau_0 - \theta'/\varepsilon')$. Это соответствует пакету, который движется с групповой скоростью $v = \partial\varepsilon/\partial p = p/m$. Однако выражение это устроено так, будто он стартовал из точки $-L$ не в момент времени $\tau = -\tau_0$ (как было бы со свободным движением), а чуть позже, в момент времени $\tau = -\tau_0 + \theta'/\varepsilon'$. Это и есть явление задержки волнового пакета; время же задержки равно $\Delta\tau = \theta'/\varepsilon' = \partial\theta/\partial\varepsilon$. Тут сразу же возникает важнейшее свойство фазы — ведь в силу причинности, $\Delta\tau > 0$ (частица не может прилететь к детектору раньше, чем если бы она летела баллистически!) — а значит, фаза рассеяния является монотонной функцией энергии.
2. Ширина этого пакета определяется из условия $\frac{1}{a^2(t)} = \text{Re} \frac{1}{\bar{a}^2(t)} \Rightarrow a^2(t) = a^2 + \frac{[\varepsilon''(p_0)(\tau + \tau_0) - \theta''(p_0)]^2}{a^2}$. Этот эффект называется «расплыванием волнового пакета», и связан он с наличием у спектра кривизны ²⁶ $\varepsilon''(p_0)$; из-за соотношения неопределённостей, в пакет всегда будут входить частицы со слегка разными импульсами, а значит — и с разными скоростями. Поэтому со временем ширина пакета будет меняться.
3. Наконец, полное число частиц в этом пакете равно $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x \rightarrow +\infty, \tau)|^2 dx = T(p_0)$ — что и завершает связь стационарной и нестационарной задачи рассеяния.

Исследование асимптотики $\psi(x \rightarrow -\infty, \tau)$ проходит абсолютно аналогично — вклад при этом будет приходить от «отражённой волны» re^{-ipx} , а вклад от «падающей» e^{ipx} будет экспоненциально маленьким.

²⁶Для фотонов или для электронов в графене с приближении линейного спектра это явление отсутствует.

Глава 4

Математические дополнения

4.1 Функции Бесселя $J_m(z)$, $Y_m(z)$, $H_m^{(1,2)}(z)$, $I_m(z)$, $K_m(z)$

Преамбула

Функций Бесселя, как вынесено в заглавие, достаточно много. Они носят следующие названия и естественным образом объединяются в пары (мы увидим дальше, по какому признаку):

- Функция Бесселя $J_m(z)$ и функция Неймана $Y_m(z)$
- Функции Ганкеля первого и второго рода $H_m^{(1,2)}(z)$
- Функция Инфильда (модифицированная функция Бесселя первого рода) $I_m(z)$ и функция Макдональда (модифицированная функция Бесселя второго рода) $K_m(z)$

Возникают эти функции очень часто в самых различных задачах, но наибольшее значение они имеют при рассмотрении двумерного уравнения Лапласа и обсуждении двумерного уравнения Шрёдингера в цилиндрических координатах.

Задача

Обсуждать функции Бесселя мы будем на примере конкретной задачи. Предлагается найти уровни энергии для частицы массы M в двумерной прямоугольной яме:

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} -U_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (4.1)$$

Уравнение Шрёдингера в цилиндрических координатах $\psi(r, \varphi)$ запишется следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + U(r) \psi(r) = E \psi(r) \quad (4.2)$$

Мы интересуемся связанными состояниями, поэтому введём $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2M} = -E = |E|$. Заметим, что переменные r и φ разделяются, поэтому сделаем стандартную подстановку $\psi(r, \varphi) = \psi(r) e^{im\varphi}$:

$$\psi''(r) + \frac{1}{r} \psi'(r) - \left(\frac{2MU(r)}{\hbar^2} + \kappa^2 + \frac{m^2}{r^2} \right) \psi(r) = 0 \quad (4.3)$$

(величина m носит название углового квантового числа, и обязана быть целым числом в силу периодичности по $\varphi \mapsto \varphi + 2\pi$).

Отрицательная энергия ($r > a$)

Вне ямы мы имеем $U(r) = 0$; вводя координату $z = \kappa r$, мы приходим к уравнению:

$$\psi''(z) + \frac{1}{z} \psi'(z) - \left(1 + \frac{m^2}{z^2} \right) \psi(z) = 0 \quad (4.4)$$

Двумя линейно-независимыми решениями этого уравнения являются модифицированные функции Бесселя:

$$\psi(z) = A_1 I_m(z) + A_2 K_m(z) \quad (4.5)$$

Асимптотики при больших аргументах у этих функций соответствуют затухающим и возрастающим экспонентам:

$$I_m(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z, \quad K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad z \gg 1 \quad (4.6)$$

В свою очередь, при малых значениях аргумента одна из функций регулярна, а другая — расходится¹ ($\gamma \approx 0.577$ — постоянная Эйлера-Маскерони)

$$I_m(z) \approx \frac{1}{m!} \left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad K_m(z) \approx \begin{cases} \frac{(m-1)!}{2} \left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ \ln \frac{2}{z} - \gamma, & m = 0 \end{cases}, \quad z \ll 1 \quad (4.7)$$

Для нашей задачи поиска связанных состояний коэффициент $A_1 \equiv 0$, поскольку волновая функция должна затухать на бесконечности. Значит $\psi(r > a) = AK_m(\kappa r)$.

Положительная энергия ($r < a$)

Внутри ямы мы имеем $U(r) = -U_0$. Введём эффективный волновой вектор внутри ямы $k^2 = \frac{2M(U_0 - |E|)}{\hbar^2} = \frac{2MU_0}{\hbar^2} - \kappa^2$ и сделаем подстановку $z = kr$. Получаем похожее уравнение, отличающееся лишь знаком единицы (эквивалентно, эти уравнения связаны заменой $z \mapsto iz$):

$$\psi''(z) + \frac{1}{z} \psi'(z) + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right) \psi(z) = 0 \quad (4.8)$$

Уравнение очень похоже на предыдущее; в качестве его линейно-независимых решения, как правило, выбирают либо функции Бесселя и Неймана, либо функции Ганкеля²:

$$\psi(z) = B_1 J_m(z) + B_2 Y_m(z) = C_1 H_m^{(1)}(z) + C_2 H_m^{(2)}(z) \quad (4.9)$$

Функции Бесселя и Неймана при больших значениях аргумента ведут себя подобно косинусу и синусу с дополнительным фазовым сдвигом:

$$J_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad Y_m(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad z \gg 1 \quad (4.10)$$

Как и в прошлом случае, функция Бесселя в нуле регулярна, а Неймана — сингулярна³:

$$J_m(z) \approx \frac{1}{m!} \left(\frac{z}{2}\right)^m, \quad Y_m(z) \approx \begin{cases} -\frac{(m-1)!}{\pi} \left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ -\frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{2}{z} - \gamma\right), & m = 0 \end{cases}, \quad z \ll 1 \quad (4.11)$$

Другой выбор линейно-независимой комбинации решений — функции Ганкеля, которые определяются как $H_m^{(1,2)}(x) = J_m(x) \pm iY_m(x)$. Они обе, естественно, сингулярны в нуле, но представляет интерес их асимптотика на бесконечности — она соответствует сходящейся и расходящейся цилиндрическим волнам:

$$H_m^{(1,2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{\pm i(z - m\pi/2 - \pi/4)}, \quad z \gg 1 \quad (4.12)$$

$$H_m^{(1,2)}(z) \approx \begin{cases} \mp i \frac{(m-1)!}{\pi} \left(\frac{2}{z}\right)^m, & m \neq 0 \\ \mp \frac{2i}{\pi} \left(\ln \frac{2}{z} - \gamma\right) + 1, & m = 0 \end{cases}, \quad z \ll 1 \quad (4.13)$$

¹Одно из решений непременно обязано расходиться в нуле, поскольку вронскиан этого уравнения, по формуле Лиувилля-Остроградского, с точностью до произвольной постоянной равен $1/x$. Функция Инфилда определяется как регулярное в нуле решение, а функция Макдональда — как решение, затухающее на бесконечности.

²Конечно, можно их перемешивать, рассматривая, например, любые другие линейные комбинации; но, как будет показано ниже, это не несет большого смысла

³Опять-таки, функция Бесселя определяется именно как решения соответствующего уравнения, регулярное в нуле. Функция Неймана же определяется по асимптотике на бесконечности, выписанной выше

Опять-таки, возвращаясь к нашей задаче — нас интересует решение, которое в нуле регулярно, поэтому естественный выбор — это функция Бесселя $\psi(x < a) = B J_m(kr)$.

Ремарка о регулярности в нуле

В действительности, требование на связанные состояние накладывается одно — а именно, функция в нуле (да и вообще везде) должна быть интегрируема. Это исключает возможность иметь степенные сингулярности (которые имеют функции $Y_m(z)$ и $H_m^{(1,2)}(z)$ при $m > 0$), но не исключает возможность иметь лишь логарифмическую особенность (которая имеется при $m = 0$). Аргумент, по которому эту логарифмическую особенность нужно отбросить, немного иной. С физической точки зрения, конечно, очевидно, что поскольку потенциал в нуле вполне себе регулярен, то было бы как минимум странно иметь там сингулярность волновой функции. Математически же это связано с тем, что⁴ $\nabla^2 \ln \frac{1}{r} = 2\pi\delta(r)$ — поэтому функция Неймана, в действительности, решает задачу о двумерной дельта-яме. В исходном потенциале такой сингулярности нет, и именно по этой причине мы можем отсеять $Y_m(z)$ также и при $m = 0$.

Аналогия с одномерным движением

Об этом «зоопарке» функций Бесселя очень удобно думать, проводя аналогии с одномерным свободным движением. Эта аналогия может быть записана в виде следующей таблицы:

1D:	$\cos x$	$\sin(x)$	e^{ix}	e^{-ix}	$\cosh x$	e^{-x}
2D:	$J_m(x)$	$Y_m(x)$	$H_m^{(1)}(x)$	$H_m^{(2)}(x)$	$I_m(x)$	$K_m(x)$

Таблица 4.1: Аналогия между 1D и 2D свободным движением

Заключается она в сходном поведении на бесконечности, а также в следующих тривиальных соотношениях между этими функциями (как было отмечено выше, уравнения переходят друг в друга при замене $z \mapsto iz$):

$$H_m^{(1,2)}(x) = J_m(x) \pm iY_m(x), \quad K_m(x) = \frac{\pi}{2} i^{m+1} H_m^{(1)}(ix) = \frac{\pi}{2} (-i)^{m+1} H_m^{(2)}(-ix), \quad J_m(ix) = i^m I_m(x) \quad (4.14)$$

Сшивки

Уровни энергии, как это обычно бывает, определяется сшивкой обеих функций при $x = a$: $\psi(a-0) = \psi(a+0)$ и $\psi'(a-0) = \psi'(a+0)$. Разрешимость этого уравнения относительно констант A и B обычно даёт условие на уровни энергии. Однако, поскольку явный вид этих констант нас пока совершенно не интересует, вместо этого запишем сшивку логарифмической производной $\frac{d}{dz} \ln \psi(a-0) = \frac{d}{dz} \ln \psi(a+0)$. Таким образом, уровни энергии определяются из условия:

$$\frac{kaJ'_m(ka)}{J_m(ka)} = \frac{\kappa aK'_m(\kappa a)}{K_m(\kappa a)} \quad (4.15)$$

Это — точное уравнение, определяющее все связанные состояния в яме. Аналитически это уравнение можно решить лишь в разных предельных случаях. Ранее мы разбирали задачу о мелкой яме; поэтому, в целях сравнения, давайте решим это уравнение аналитически в этом пределе: $U_0 \ll \frac{\hbar^2}{Ma^2}$. Этот предел соответствует малым $ka \approx \sqrt{\frac{U_0}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$ и $\kappa a = \sqrt{\frac{|E|}{\hbar^2/2Ma^2}} \ll 1$, благодаря чему мы можем воспользоваться выписанными выше асимптотиками. Основное состояние (а в мелкой яме оно единственно), из общих соображений минимальности энергии, должно соответствовать нулевому орбитальному квантовому числу $m = 0$. Единственное замечание заключается в том, что формула даёт $J_0(z \ll 1) \approx 1$, и производная зануляется; поэтому для дифференцирования нужен следующий член разложения — он выглядит как $J_0(z \ll 1) \approx 1 - \frac{z^2}{4}$. Окончательно, уравнение на сшивку в этом пределе записывается следующим образом:

$$ka \cdot \left(-\frac{ka}{2} \right) = \frac{\kappa a \left(-\frac{1}{\kappa a} \right)}{\ln \frac{2e^{-\gamma}}{\kappa a}} \Rightarrow \kappa a = 2e^{-\gamma} \exp \left(-\frac{2}{k^2 a^2} \right) \Rightarrow |E| = C \frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp \left(-\frac{2\hbar^2/Ma^2}{U_0} \right), \quad C = 2e^{-2\gamma} \approx 0.630 \quad (4.16)$$

(поскольку энергия экспоненциальна мала, то мы также воспользовались приближением $k^2 \approx 2mU_0/\hbar^2$). Этот ответ можно сравнить с общим ответом для мелкой ямы; интеграл $\int U(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} = -U_0\pi a^2$, и тем самым общая формула для

⁴Понять это равенство очень просто. Если проинтегрировать обе части по кругу малого радиуса ρ и воспользоваться формулой Гаусса-Остроградского, то мы получим: $\int_{|\mathbf{r}|<\rho} d^2\mathbf{r} \nabla^2 \ln \frac{1}{r} = \int_{|\mathbf{r}|=\rho} dl \cdot \nabla_n \ln \frac{1}{r} = \int_{|\mathbf{r}|=\rho} \frac{dl}{r} = 2\pi$

мелкой ямы даёт:

$$|E| = \# \frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp \left(-\frac{2\pi\hbar^2}{M} \left| \int U(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \right|^{-1} \right) = \# \frac{\hbar^2}{Ma^2} \exp \left(-\frac{2\hbar^2/Ma^2}{U_0} \right) \quad (4.17)$$

Она абсолютно точно воспроизводит главный экспоненциальный множитель, а также параметрическую зависимость предэкспоненты, в соответствии с общей аргументацией для той задачи. Но её точности не хватает, чтобы определить константу C в предэкспоненте — для её определения этого нам потребовалось точное решение уравнения Шрёдингера.

4.2 Гипергеометрическая функция ${}_2F_1(a, b; c; z)$

Преамбула

Гипергеометрические функции образуют, в действительности, очень широкое семейство спецфункций, определяемым следующим образом:

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = 1 + \frac{a_1 \dots a_p}{b_1 \dots b_q} z + \frac{a_1(a_1+1)a_2(a_2+1) \dots a_p(a_p+1)}{b_1(b_1+1)b_2(b_2+1) \dots b_q(b_q+1)} \frac{z^2}{2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)^{(n)} \dots (a_p)^{(n)}}{(b_1)^{(n)} \dots (b_q)^{(n)}} \frac{z^n}{n!} \quad (4.18)$$

(тут введено обозначение «восходящего факториала» $(a)_k = a(a+1) \dots (a+k-1)$). Чаще всего в приложениях встречаются функции ${}_1F_1(a; b; z)$ и ${}_2F_1(a, b; c; z)$ — о последней и будет идти речь в этом разделе. Альтернативно её можно определить как решение следующего дифференциального уравнения, регулярное в нуле (убедиться в эквивалентности этих определений можно стандартным методом поиска решения дифференциального уравнения в виде ряда):

$$z(1-z)f''(z) + (c - (a+b+1)z)f'(z) - abf(z) = 0, \quad f(0) = 1 \quad (4.19)$$

Можно убедиться, что второе линейно-независимое решение этого уравнения тоже можно выразить через гипергеометрическую функцию. Общее решение имеет следующий вид (при $c \neq 1$):

$$f(z) = C_1 {}_2F_1(a, b; c; z) + C_2 z^{1-c} {}_2F_1(b-c+1, a-c+1; 2-c; z) \quad (4.20)$$

К уравнению такого вида можно свести очень большой класс дифференциальных уравнений. В действительности, имеется классификация линейных дифференциальных уравнений с дробно-рациональными коэффициентами по их особенностям в комплексной плоскости (особенностями уравнения, записанного в канонической форме $f^{(n)}(z) + p_1(z)f^{(n-1)}(z) + \dots + p_n(z)f(z) = 0$, называются особенности функций $p_k(z)$ — точки, где она обращается в бесконечность) — в частности, у гипергеометрической функции их ровно три: $z = \{0, 1, \infty\}$; и более или менее любое уравнение с тремя особенностями можно свести к гипергеометрическому виду.

Продолжая обсуждение свойств этой функции, отметим, что она не определена при целых отрицательных c (знаменатель зануляется). Радиус сходимости ряда равен единице, и в действительности у гипергеометрической функции в точке $z = 1$ имеется особенность. Единственное исключение из этого правила — это когда либо a , либо b — отрицательное целое число: в таком случае, ряд обрывается и превращается в полином конечной степени, имеющий, естественно, бесконечный радиус сходимости. Последнее замечание будет важно при поиске связанных состояний.

Задача

Опять-таки, разбираться с гипергеометрической функцией мы будем на примере конкретной задачи. Полностью исследуем движение частицы в потенциале $U(x) = -U_0/\cosh^2(x/a)$ — а именно, мы найдём все связанные состояния на отрицательной энергии $E < 0$, а также решим задачу рассеяния при положительной энергии $E > 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - \frac{U_0}{\cosh^2(x/a)}\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.21)$$

Если мы хотим привести это уравнение к гипергеометрической функции, то первым делом нам стоит избавиться от гиперболических функций. Естественным кандидатом для этого выглядит подстановка $y = \tanh \frac{x}{a} \in (-1, 1)$:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{a} \frac{1}{\cosh^2 \frac{x}{a}} \frac{d\psi}{dy} = \frac{1}{a} (1-y^2) \frac{d\psi}{dy}, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{a^2} (1-y^2) \frac{d}{dy} \left[(1-y^2) \frac{d\psi}{dy} \right] \quad (4.22)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d}{dy} \left[(1-y^2) \frac{d\psi}{dy} \right] - \left(U_0 + \frac{E}{1-y^2} \right) \psi(y) = 0 \quad (4.23)$$

Это уравнение нам нравится куда больше: если раскрыть скобки, то можно увидеть, что у него имеются три особенности — в точках $y = \{\pm 1, \infty\}$, в связи с чем есть надежда привести его к гипергеометрическому виду.

Связанные состояния

Для начала, рассмотрим случай связанных состояний $E = -|E|$. Обезразмерим уравнение, введя следующие параметры:

$$u = \frac{U_0}{\hbar^2/2ma^2}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad (4.24)$$

Первый шаг при приведении уравнения к гипергеометрическому виду — совмещение особенностей. Несложно видеть, что точки $\{\pm 1, \infty\}$ переходят в $\{0, 1, \infty\}$ при простом линейном преобразовании $z = \frac{1-y}{2} \in (0, 1)$; кроме того, раскроем сразу скобки:

$$z(1-z)\psi'' + (1-2z)\psi' + \left(u - \frac{\kappa^2 a^2}{4z(1-z)}\right)\psi = 0 \quad (4.25)$$

Дальше универсальный рецепт заключается в выделении наиболее сингулярного поведения решения вблизи особенностей. Вблизи $z = 0$, уравнение приблизительно записывается следующим образом:

$$\psi'' + \frac{1}{z}\psi' - \frac{\kappa^2 a^2}{4z^2}\psi = 0 \Rightarrow \psi(z) \approx z^{\pm \kappa a/2}, \quad z \ll 1 \quad (4.26)$$

(это — однородное уравнение Эйлера, поэтому решается степенной подстановкой). То же самое можно проделать и в окрестности $|z - 1| \ll 1$. Это мотивирует подстановку $\psi(z) = (z(1-z))^{\kappa a/2} \chi(z)$ — которая приводит, наконец, уравнение к гипергеометрическому виду

$$z(1-z)\chi''(z) + (\kappa a + 1)(1-2z)\chi'(z) - \left(\left(\frac{1}{2} + \kappa a\right)^2 - u - \frac{1}{4}\right)\chi(z) = 0 \quad (4.27)$$

Обратим сразу внимание, что $(z(1-z))^{\kappa a/2} = (\frac{1}{4}(1-y^2))^{\kappa a/2} = (2 \cosh \frac{x}{a})^{-\kappa a} \approx e^{-\kappa|x|}$ при $x \rightarrow \pm\infty$; то есть этот префактор уже сам по себе соответствует затухающей волновой функции. Поэтому на функцию $\chi(z)$ накладывается требование — отсутствие сингулярностей при $z = 0, 1$.

Удобно использовать параметризацию параметра u через вспомогательный параметр s согласно:

$$u = s(s+1) \Rightarrow s = \frac{1}{2}(\sqrt{1+4u} - 1) \quad (4.28)$$

В таком случае, параметры гипергеометрической функции имеют вид $a = \kappa a - s$, $b = \kappa a + s + 1$ и $c = \kappa a + 1$. Таким образом, общее решение уравнения записывается следующим образом:

$$\psi(z) = (z(1-z))^{\kappa a/2} \cdot {}_2F_1(\kappa a - s, \kappa a + s + 1; \kappa a + 1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1 - \tanh(x/a)) \quad (4.29)$$

(можно убедиться, что второе линейно независимое решение всегда растёт на бесконечности).

По построению, оно регулярно при $z = 0$ ($x \rightarrow +\infty$); поэтому условие на связанные состояние соответствует условию регулярности гипергеометрической функции при $z = 1$. Как мы выяснили выше, происходит это может только когда гипергеометрическая функция превращается в полином, то есть когда $a = \kappa a - s = -n$ и $n = 0, 1, \dots$ (очевидно, что $b > 0$). Возвращаясь к исходным параметрам, мы получаем:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{8ma^2} \left(\sqrt{1 + \frac{8U_0ma^2}{\hbar^2}} - (2n+1) \right)^2 \quad (4.30)$$

Параметр $s \geq n \geq 0$, поэтому величина s определяет число связанных уровней в яме. Когда s достигает целого числа, в яме появляется новый уровень на нулевой энергии. Для справки, приведём волновую функцию основного состояния (с точностью до нормировки)

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\cosh^s(x/a)}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \left(\sqrt{1 + \frac{8U_0ma^2}{\hbar^2}} - 1 \right)^2 \quad (4.31)$$

Этот ответ поучительно сравнить в общем пределе мелкой ямы, который мы рассматривали во втором семинаре. Полагая $\frac{U_0 m a^2}{\hbar^2} \ll 1$, мы можем разложить и получить $E_0 \approx \frac{2U_0^2 m a^2}{\hbar^2}$. С другой стороны, поскольку $\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx = -2U_0 a$, и поэтому формула из семинара даёт $|E| \approx \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int dx U(x) \right|^2 = \frac{2U_0^2 m a^2}{\hbar^2}$ — то есть воспроизводит точный ответ.

Непрерывный спектр и задача рассеяния

Теперь мы будем рассматривать непрерывный спектр $E > 0$. Для этого удобно воспользоваться параметризацией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, и решение можно получить из выписанного выше простой заменой $\kappa a = -ika$:

$$\psi(z) = (z(1-z))^{-ika/2} \cdot {}_2F_1(-ika-s, -ika+s+1; -ika+1; z), \quad z = \frac{1}{2}(1 - \tanh(x/a)) \quad (4.32)$$

Мы получили какое-то решение непрерывного спектра; однако, ещё не факт что оно соответствует задаче рассеяния. Тем не менее, даже если и не соответствует — задачу рассеяния мы всё равно сможем построить, выбрав линейную комбинацию с комплексно сопряжённым решением (которое является вторым линейно-независимым). Чтобы это понять, нам необходимо найти асимптотическое поведение этого решения на бесконечности.

При $x \rightarrow +\infty \Rightarrow y = \tanh \frac{x}{a} \approx 1 - 2e^{-2x/a} \Rightarrow z \approx e^{-2x/a} \rightarrow 0$, гипергеометрическая функция ${}_2F_1(\dots, z) \approx 1$. Поэтому:

$$\psi(x \gg a) \approx e^{ikx} \quad (4.33)$$

Нам повезло — эта асимптотика содержит только прошедшую волну, то есть соответствует задаче рассеяния слева направо! Осталось определить асимптотики при $x \rightarrow -\infty \Rightarrow y = \tanh \frac{x}{a} \approx -1 + 2e^{2x/a} \Rightarrow z \approx 1 - e^{2x/a}$, и мы получим коэффициенты прохождения и отражения от такого потенциала. Для этого нам необходимо научиться получать асимптотику гипергеометрической функции вблизи единицы, где у неё особенность. Делается это регулярным способом — для гипергеометрической функции есть целая серия тождеств, которые выражают гипергеометрическую функцию вблизи одной особенности через неё же (с другими индексами) вблизи другой особой точки (то есть связывают $z \leftrightarrow \{1-z, \frac{1}{z}\}$). Одно из таких тождеств, связывающее $z \rightarrow 1-z$, взятое из справочников, мы и используем. Оно выглядит достаточно замысловато:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b+1-c, 1-z) + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b; c+1-a-b; 1-z) \quad (4.34)$$

Поскольку $z \approx 1$, то в правой части тождества непосредственно гипергеометрические функции раскладываются как ${}_2F_1(\dots; 1-z) \approx 1$, и основная асимптотика определяется выражениями с Гамма-функциями и $(1-z)^{c-a-b} = (1-z)^{ika} \approx e^{2ikx}$. Вспоминая также о префакторе $(z(1-z))^{-ika/2} \approx e^{-ikx}$, мы немедленно получаем асимптотику волновой функции при $x \rightarrow -\infty$, которая, следуя общей логике задачи рассеяния, содержит падающую и отражённую волну:

$$\psi(x \rightarrow -\infty) = \frac{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)} e^{ikx} + \frac{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)} e^{-ikx}, \quad (4.35)$$

Обычно в задаче рассеяния коэффициент при падающей волне e^{ikx} берётся равным единице; тогда остальные коэффициенты отвечают амплитуде отражения и прохождения. У нас нормировка чуть другая, и амплитуды даются отношением коэффициентов:

$$t = \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(-ika+1)\Gamma(-ika)}, \quad r = \frac{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)} \quad (4.36)$$

Это — окончательный ответ. Однако осознать его достаточно тяжело, поскольку он представляет собой нетривиальную комбинацию спец.функций. К счастью, выражение для коэффициентов прохождения и отражения достаточно хорошо упрощаются, используя соотношения на Гамма-функции $\Gamma(z)^* = \Gamma(z^*)$, $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$, $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$, благодаря чему от них можно просто избавиться:

$$T = |t|^2 = \frac{\sinh^2(\pi \kappa a)}{\sinh^2(\pi \kappa a) + \sin^2(\pi s)}, \quad R = |r|^2 = \frac{\sin^2(\pi s)}{\sinh^2(\pi \kappa a) + \sin^2(\pi s)} \quad (4.37)$$

Такой ответ уже нам симпатичен. Можно проверить, насколько полученный ответ физичен. Во-первых, разумеется, для него выполняется общее соотношение, накладываемое унитарностью квантовой механики $R + T = 1$; при большой энергии $\kappa a \gg 1$, коэффициент отражения уменьшается, что разумно — ведь движение с большой энергией квазиклассично,

а в классической механике частица, пролетающая над ямой (или горбом!) совершенно не рассеивается. Любопытно также, что при целом $s \in \mathbb{Z}$, коэффициент отражения обращается в ноль (на уровне амплитуды отражения это соответствует тому, что у аналитической функции $\Gamma(z)$ имеются полюса первого порядка при $z = -s$) — то есть имеется резонансное безотражательное рассеяние *на всех энергиях*! Выше мы получили, что целое s также соответствует ситуации, когда в яме зарождается очередное связанное состояние.

Обратим внимание, что при целом s происходит резонанс, и отражение полностью отсутствует. Кроме того, при целом s в яме появляется новое связанное состояние на нулевой энергии. Наличие резонансов в коэффициенте прохождения при появлении в яме связанных уровней — общее свойство квантовой механики.

4.3 Вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1(a; b; z)$

Преамбула

На прошлом семинаре обсуждался общий класс гипергеометрических функций ${}_pF_q$; однако для приложений наиболее часто встречаются именно функции ${}_2F_1$ (обсуждённая на прошлом семинаре) и ${}_1F_1$. Она, естественно, тоже определяется через гипергеометрический ряд⁵:

$${}_1F_1(a; b; z) = 1 + \frac{a}{b}z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)}}{b^{(n)}} \frac{z^n}{n!} \quad (4.38)$$

Кроме того, альтернативное её определение — через решение дифференциального уравнения следующего вида:

$$zf''(z) + (b - z)f'(z) - af(z) = 0, \quad f(0) = 1 \quad (4.39)$$

Сразу отметим, что второе линейно-независимое решение, как правило, в нуле сингулярно, и, в чём несложно убедиться, тоже выражается через гипергеометрическую функцию⁶: $f^{(2)}(z) = z^{1-b}{}_1F_1(a - b + 1; 2 - b; z)$. Как и с обычной гипергеометрической функцией, несложно видеть, что при целых отрицательных $b = -n$ функция не определена, а при целых отрицательных $a = -n$ она является конечным полиномом степени n . В общем случае, отношение соседних коэффициентов разложения в ряд ведёт себя как $1/n$, поэтому радиус сходимости этого ряда — бесконечность (в отличие ${}_2F_1$, где радиус сходимости был единичным). Асимптотическое поведение на бесконечности следующее:

$${}_1F_1(a; b; z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} z^{a-b} e^z, \quad z \gg 1 \quad (4.40)$$

Опять-таки, мы ранее говорили, что всякое уравнение с тремя особенностями сводится к гипергеометрическому виду — так и всякое уравнение с коэффициентами, которые представляют собой линейные функции z приводится к вырожденному гипергеометрическому виду.

Задача

Поучительно будет рассмотреть вырожденную гипергеометрическую функцию на примере простого гармонического осциллятора — частицы в потенциале $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Поскольку потенциальная энергия $U(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \infty$, то в этом потенциале нет непрерывного спектра, а только дискретный. Переходя к безразмерной координате $y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ и вводя безразмерную энергию согласно $E = \hbar\omega(\epsilon + \frac{1}{2})$, мы получаем уравнение Шрёдингера в виде:

$$\psi''(y) + (2\epsilon + 1 - y^2)\psi(y) = 0 \quad (4.41)$$

Сделаем замену координат $z = y^2 \Rightarrow y = \sqrt{z}$:

$$\frac{d\psi}{dy} = 2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}, \quad \frac{d^2\psi}{dy^2} = 2\sqrt{z}\frac{d}{dz}\left(2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}\right) = 4z\psi''(z) + 2\psi'(z) \quad (4.42)$$

$$4z\psi''(z) + 2\psi'(z) + (2\epsilon + 1 - z)\psi(z) = 0 \quad (4.43)$$

⁵Обратим внимание, она выражается через ${}_2F_1$ согласно ${}_1F_1(a; b; z) = \lim_{b \rightarrow \infty} {}_2F_1(a, b; c; z/b)$

⁶Этот трюк, конечно, работает только при $b \neq 1$. Однако, при $b \rightarrow 1$ можно построить предел вида $(f^{(2)} - f^{(1)})/(b - 1)$, который и будет давать второе решение

Мы получили уравнение с линейными коэффициентами — значит, его можно привести к ${}_1F_1$. Стандартный способ такой процедуры — это выделение асимптотик. В частности, при $z \rightarrow \infty$, асимптотический вид уравнения выглядит как $4z\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) \approx e^{-z/2}$. Поэтому мы сделаем подстановку $\psi(z) = \chi(z)e^{-z/2}$; получаем:

$$z\chi''(z) + \left(\frac{1}{2} - z\right)\chi'(z) + \frac{\epsilon}{2}\chi(z) = 0 \quad (4.44)$$

В нашем конкретном случае $b = \frac{1}{2}$, $a = -\frac{\epsilon}{2}$, и поэтому общее решение уравнения записывается следующим образом:

$$\chi(z) = C_1 \cdot {}_1F_1\left(-\frac{\epsilon}{2}; \frac{1}{2}; z\right) + C_2 \sqrt{z} \cdot {}_1F_1\left(-\frac{\epsilon-1}{2}; \frac{3}{2}; z\right) \quad (4.45)$$

В общем случае ${}_1F_1 \sim e^z$, что соответствует экспоненциально растущей волновой функции и нас не устраивает; поэтому ряд должен обрываться. Имеются две альтернативы:

$$C_1 \neq 0, \quad C_2 = 0, \quad \epsilon = 2n \Rightarrow \boxed{\psi_{2n}(y) = {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2) \cdot e^{-y^2/2}, \quad E_{2n} = \hbar\omega(2n + \frac{1}{2})}, \quad (4.46)$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 \neq 0, \quad \epsilon = 2n + 1 \Rightarrow \boxed{\psi_{2n+1}(y) = y {}_1F_1\left(-n; \frac{3}{2}; y^2\right) e^{-y^2/2}, \quad E_{2n+1} = \hbar\omega(2n + 1 + \frac{1}{2})}, \quad (4.47)$$

что, конечно, исчерпывает все решения задачи о простом гармоническом осцилляторе.

Ортогональные полиномы

Для справки приведём связь написанных тут гипергеометрических функций с полиномами Эрмита и нормированными волновыми функциями:

$$H_{2n}(y) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} \cdot {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2), \quad H_{2n+1}(y) = (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2y \cdot {}_1F_1(-n; \frac{3}{2}; y^2) \quad (4.48)$$

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (4.49)$$

Кроме того, к вырожденной гипергеометрической функции ${}_1F_1$ также сводится задача об атоме водорода. В таком случае, радиальные волновые функции выражаются уже не через полиномы Эрмита, но через полиномы Лагерра:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(\alpha + 1 + n)}{\Gamma(\alpha + 1)} \frac{1}{n!} \cdot {}_1F_1(-n; \alpha + 1; x) \quad (4.50)$$

$$\psi_{nl}(\rho \equiv \frac{2r}{na}) = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \rho^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho) e^{-\rho/2} \quad (4.51)$$

(волновые функции нормированы условием $\int_0^\infty |\psi_{nl}(\rho)|^2 \cdot \rho^2 d\rho = 1$).

4.4 Лестничная алгебра

Однако, гораздо более простой способ решения задачи о гармоническом осцилляторе — это через так называемую **алгебру лестничных операторов**. Этот способ универсален, он позволяет решать любые линейные (в смысле линейности, скажем, классических уравнений движения) задачи. Для построения этих операторов полезно решить сперва классическую задачу об осцилляторе, выделив так называемые циклические переменные. Первым делом, однако, предлагается эту задачу обезразмерить, «собрав» из параметров задачи \hbar , m , ω параметры масштаба длины и импульса:

$$\hat{X} = \frac{\hat{x}}{\sqrt{\hbar/m\omega}}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}} \quad (4.52)$$

Какая подстановка чуть меняет коммутационные соотношения $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ (поэтому $\hat{P} = -i \frac{\partial}{\partial \hat{X}}$), и приводит гамильтониан к следующему виду:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (4.53)$$

Классические уравнения движения

Забудем на небольшое время о квантовой механике⁷, и вспомним, как обстоит жизнь в классической физике. В ней уравнения движения в форме уравнений Гамильтона имеют вид:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} = -m\omega^2 x \quad (4.54)$$

Это — система линейных уравнений, и для её решения систему необходимо диагонализировать. Это делается путём введения комплексных координат (естественно, их можно ввести с точностью до произвольной константы C — вообще говоря, комплексной!)

$$a = C(m\omega x + ip) \Rightarrow \frac{da}{dt} = -i\omega a \Rightarrow a(t) = a e^{-i\omega t} \quad (4.55)$$

$$a^* = C(m\omega \cdot x - ip) \Rightarrow \frac{da^*}{dt} = i\omega a^* \Rightarrow a^*(t) = a^* e^{i\omega t} \quad (4.56)$$

Квантовая механика

В квантовой механике координатам a и a^* соответствует какая-то пара операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger . Константу C удобно выбрать так, чтобы операторы получились безразмерными, что соответствует следующему выбору:

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \\ \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \end{cases}, \quad \begin{cases} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \end{cases} \quad (4.57)$$

(выбор фазы остаётся произвольным — скажем, операторы $\hat{a}e^{i\varphi}$ и $\hat{a}^\dagger e^{-i\varphi}$ ничем не хуже). Наконец, можно выразить через эти операторы также и гамильтониан. Тривиальной подстановкой, получаем:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.58)$$

Алгебра лестничных операторов

Важнейшую роль в дальнейшем будут играть их коммутационные соотношения; фактически, мы получим полное решение задачи об осцилляторе используя только лишь их:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (4.59)$$

Задаваемая этим соотношением алгебра — одна из важнейших алгебр в квантовой механике. Сейчас мы будем исследовать, какие выводы можно сделать, исходя исключительно из неё.

- Заметим, что оператор $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ — эрмитов и положительно определён (а еще это — наш гамильтониан с точностью до константы и множителя). Значит, его собственные состояния образуют базис, в котором мы и будем работать. Эти состояния обозначим следующим образом:

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\lambda_n\rangle = \lambda_n |\lambda_n\rangle \quad (4.60)$$

- Несложно проверить, что $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \hat{a}$. Подействовав этим соотношением на $|\lambda_n\rangle$ и раскрыв явно коммутатор, мы приходим к соотношению

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} |\lambda_n\rangle = (\lambda_n - 1) \hat{a} |\lambda_n\rangle, \quad (4.61)$$

то есть $\hat{a} |\lambda_n\rangle$ тоже является собственным для $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ с собственным числом на единицу меньшим, чем у $|\lambda_n\rangle$:

$$\hat{a} |\lambda_n\rangle = c_n |\lambda_n - 1\rangle. \quad (4.62)$$

Из-за этого условия, оператор \hat{a} называют **понижающим оператором**.

- Константа c_n может быть выбрана вещественной и определяется из условия нормировки

$$\lambda_n = \langle \lambda_n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \lambda_n \rangle = c_n^2 \langle \lambda_n - 1 | \lambda_n - 1 \rangle = c_n^2 \Rightarrow c_n = \sqrt{\lambda_n} \quad (4.63)$$

⁷Согласно соотношению неопределённости, чтобы забыть о квантовой механике на маленькое время, необходима большая энергия порядка $E \sim \hbar/\Delta t$.

- Поскольку спектр оператора $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ обязан быть неотрицательно определённым, то должно быть состояние $|\lambda_0\rangle$ такое, что $\hat{a}|\lambda_0\rangle = 0$ (в противном случае, «понижать» можно до бесконечности) — из этого мы заключаем, что $c_0 = \lambda_0 = 0$, а значит $\lambda_n = n$. Таким образом, спектр оператора $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ даётся неотрицательными целыми числами.
- Поступая аналогично с коммутатором $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = -\hat{a}^\dagger$, убедимся, что

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (4.64)$$

и тем самым оператор \hat{a}^\dagger называют **повышающим**.

Наконец, соберём все соотношения, которые следуют из алгебры, вместе:

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle &= n |n\rangle, \quad n = 0, 1, \dots \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{cases} \quad (4.65)$$

Обратим внимание, что все эти рассуждения строятся исключительно на коммутационном соотношении $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$!

Приложения к гармоническому осциллятору

Вернёмся к выражению для гамильтониана. После проделанного анализа сразу можно заключить, что у этого гамильтониана имеется дискретный спектр состояний $|n\rangle$; их энергия даётся знаменитой формулой

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.66)$$

Но на нахождении спектра прелесть этой алгебры не заканчивается; продемонстрируем пару простых приложений. Можно найти, например, волновую функцию основного состояния в координатном представлении. Для этого заметим, что $\hat{a}|0\rangle = 0$; подставляя координатное представление оператора \hat{a} , мы получаем (возвращаясь к исходным операторам \hat{x} и \hat{p} вместо безразмерных, с которыми мы работали до этого):

$$\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right) \psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right). \quad (4.67)$$

Обратите внимание, что вместо уравнения второго порядка мы получили уравнение первого порядка, решить которое существенно проще. Это вычисление также подтверждает единственность основного состояния и, следовательно, всей последовательности равноотстоящих уровней.

В качестве второго примера, рассмотрим вычисление флуктуации координаты в произвольном состоянии гармонического осциллятора. Для этого заметим:

$$\hat{x}^2 |n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2) |n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left((2n+1) |n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle \right) \quad (4.68)$$

Спроецировав это соотношение на состояние $\langle n|$ и воспользовавшись ортогональностью, мы получаем $\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n + \frac{1}{2})$.

Ремарка о теореме вириала

Обратим внимание, что $\langle n | U(x) | n \rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega (n + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} E_n$; из чего следует, что для осциллятора в стационарных состояниях средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают. Это — не случайное совпадение, а является квантомеханическим обобщением классической **теоремы вириала**. Эта теорема гласит, что при движении в потенциале $U(r) \propto r^n$, средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны $2 \langle \hat{T} \rangle = n \langle \hat{U} \rangle$.

4.5 Функция Эйри

Функция Эйри возникает буквально при решении уравнения Шрёдингера под действием постоянной силы (в постоянном электрическом поле) — потенциал $U(x) = Fx$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + Fx\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.69)$$

Первым делом, как и раньше, стоит это уравнение обезразмерить. Обратим внимание, что от энергии E можно тривиально избавиться, сделав дополнительную сдвигку начала координат:

$$z = \frac{x - E/F}{(\hbar^2/2mF)^{1/3}}. \quad (4.70)$$

Такая подстановка приводит уравнение к **уравнению Эйри**:

$$\boxed{\psi''(z) - z\psi(z) = 0.} \quad (4.71)$$

Его общее решение — произвольная линейная комбинация функций Эйри первого и второго рода:

$$\psi(z) = C_1 \text{Ai}(z) + C_2 \text{Bi}(z) \quad (4.72)$$

Следуя общей логике, в классически разрешённой области решения — растущие и затухающие экспоненты. Для квантовой механики наиболее интересно решение с затухающей асимптотикой — собственно, функция Эйри — которая обладает следующей асимптотикой:

$$\boxed{\text{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z \rightarrow +\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z \rightarrow -\infty. \end{cases}} \quad (4.73)$$

Второе линейно независимое решение выбирается из условия, чтобы на $-\infty$ его асимптотика соответствовала косинусу; при этом, разумеется, на $+\infty$ решение — растущая экспонента⁸:

$$\boxed{\text{Bi}(z) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z \rightarrow \infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z \rightarrow -\infty. \end{cases}} \quad (4.74)$$

Функция Эйри возникает естественным образом при выводе граничных условий для квазиклассического приближения (мы обсудим это в соответствующем семинаре).

Задача

Исследуем движение частицы в потенциале:

$$U(x) = \begin{cases} Fx, & x \geq 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases} \quad (4.75)$$

Поскольку $U(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \infty$, то в задаче присутствует только дискретный спектр. При $x > 0$, уравнение совпадает с уравнением Эйри, в связи с чем его решение даётся $\psi(x) = C \cdot \text{Ai}(z(x))$ (выбрано затухающее при $x \rightarrow \infty$ решение), а z определяется (4.70). Наличие бесконечной означает граничное условие $\psi(0) = 0$, что определяет спектр:

$$\text{Ai}(z_n) = 0, \quad E_n = -z_n(\hbar^2 F^2 / 2m)^{1/3}.$$

Для справки приведём список первых нулей функции Эйри $z_n = \{-2.33811, -4.08795, -5.52056, \dots\}$. Используя асимптотику для $z \rightarrow -\infty$ мы можем получить асимптотику для нулей функции Эйри:

$$\sin\left(\frac{2}{3}(-z_n)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \rightarrow z_n \approx -\left(\frac{3\pi}{2}(n - 1/4)\right)^{2/3} \quad (4.76)$$

⁸То, что лишь в одном из четырех мест стоит множитель $1/2\sqrt{\pi}$, а в остальных — $1/\sqrt{\pi}$ не является опечаткой!

К примеру по этой формуле получается $z_{10} \approx -12.8281$, что отличается от численного только в 5ой значущей цифре (обратите внимание, что если пренебречь $1/4$ по сравнению с n то для $n = 10$ точность ухудшается в 1000 раз). Для асимптотики уровней получаем:

$$E_n \approx \left(\frac{9\pi^2}{8} \frac{\hbar^2 F^2}{m} \right)^{1/3} n^{2/3} \quad (4.77)$$

Ремарка о комплексной плоскости

Имеется несколько тонкостей, связанных с поведением функции Эйри в комплексной плоскости $z \in \mathbb{C}$. Более подробно эти тонкости будут обсуждаться в следующих семинарах, а пока просто наметим, в чём они заключаются. Кажется естественным, что асимптотические выражения можно аналитически продолжать за пределы вещественной оси. Однако, обратите внимание на то, что асимптотики не представляются однозначными функциями на комплексной плоскости — для их определения требуется проведение разрезов и выделение ветвей. В то же время сама функция Эйри, разумеется, является однозначной. Другой такой тонкостью является то, что, например, функция $\text{Ai}(z)$ на $+\infty$ содержит одну экспоненту, а на $-\infty$ — две (в составе синуса), и одно из другого получить аналитическим продолжением невозможно.

Всё это связано с так называемым **явлением Стокса**. В действительности, асимптотики работают только в определённых секторах комплексной плоскости, разделённых лучами (они называются **линиями Стокса**), на которых коэффициенты перед компонентами асимптотики (одна компонента содержит $\exp(\frac{2}{3}y^{3/2})$, другая — $\exp(-\frac{2}{3}y^{3/2})$) меняются скачком. На этих линиях выражение в экспоненте является вещественным, так что одна из экспонент является максимально убывающей, а другая — максимально растущей⁹. За этими наблюдениями стоит интересная разработанная наука, с которой некоторые из вас ещё столкнутся в процессе обучения.

4.6 Метод Лапласа

Метод Лапласа — очень мощный метод решения дифференциальных уравнений произвольного порядка с линейными коэффициентами¹⁰:

$$\sum_{m=0}^N (a_m + b_m x) \cdot \frac{d^m Y}{dx^m} = 0$$

Метод заключается в поиске решения в виде некоторого интегрального преобразования:

$$Y(x) = \int_C dt Z(t) e^{xt}$$

Нашей конечной целью будет определение функции $Z(t)$. Интегрирование производится вдоль некоторого контура C в комплексной плоскости, который тоже будет определён потом¹¹. Подстановка в уравнение даёт:

$$\int_C dt Z(t) \left[\left(\sum_{m=0}^N a_m t^m \right) + \left(\sum_{m=0}^N b_m t^m \right) x \right] e^{xt} = 0$$

Тут удобно ввести обозначения $P(t) = \sum_m a_m t^m$ и $Q(t) = \sum_m b_m t^m$. Во втором члене нам «мешает» x ; однако, от него можно избавиться путём интегрирования по частям: $x e^{xt} dt = d(e^{xt})$. Поэтому:

$$\int_C dt Z(t) Q(t) x e^{xt} = \cancel{\int_C dt Z(t) Q(t) e^{xt}} \Big|_C^0 - \int_C e^{xt} \frac{d}{dt} (Z(t) Q(t)) dt$$

Потребуем, чтобы на границах контура интегрирования внеинтегральный член занулялся (это будет некоторым требованием на контур интегрирования). Получаем:

⁹На этих линиях погрешность растущей асимптотики сравнивается по порядку величины с затухающей экспонентой. Скачок в коэффициентах перед экспонентами компенсирует скачок в поправке к растущей экспоненте, так что суммарное выражение остаётся регулярным, как и должно быть.

¹⁰Обратим внимание, что при $N = 2$ общее решение таких уравнений выражается через гипергеометрическую функцию; в частности, с помощью этого метода можно построить для неё интегральное представление

¹¹Заметим, что если контур интегрирования совпадает с мнимой осью, то это преобразование совпадает с обычным преобразованием Фурье. На сам метод можно смотреть как на некое обобщение последнего.

$$\int_C dt \underbrace{\left[Z(t)P(t) - \frac{d}{dt}(Z(t)Q(t)) \right]}_0 e^{xt} = 0$$

Если мы теперь подберём функцию $Z(t)$ так, чтобы выражение в скобках занулялось, то тем самым мы решим уравнение. Решение этого уравнения записывается тривиально $Z(t) = \frac{1}{Q(t)} \exp\left(\int \frac{P(t)}{Q(t)} dt\right)$. Таким образом, мы получаем следующий «рецепт»:

1. Смотрим на дифференциальное уравнение, строим функции $P(t)$, $Q(t)$; вычисляем функцию $Z(t)$.
2. Исследуем возможные контура в комплексной плоскости, на концах которого функция $Z(t)Q(t)e^{xt} = \exp\left(xt + \int \frac{P(t)}{Q(t)} dt\right)$ зануляется. Как правило, это либо замкнутые контура, обходящие какие-то особенности подынтегрального выражения; либо контура, уходящие на бесконечность вдоль какого-нибудь из направлений.
3. Далее требуется выбрать какой-нибудь один контур интегрирования, который обычно фиксируется выбором граничных условий. Причём в квантовой механике, как правило, граничные условия фиксируются при x на вещественной оси, при $x \rightarrow \pm\infty$. Поэтому для выбора контура интегрирования, сперва требуется вычислить асимптотики решений, которые получаются, если по-разному выделять контура.
4. Наконец, глядя на различные асимптотики, мы должны выбрать интересующий нас контур.

4.7 Функция Эйри и комплексный метод перевала

Применим теперь разработанный метод к дифференциальному уравнению Эйри:

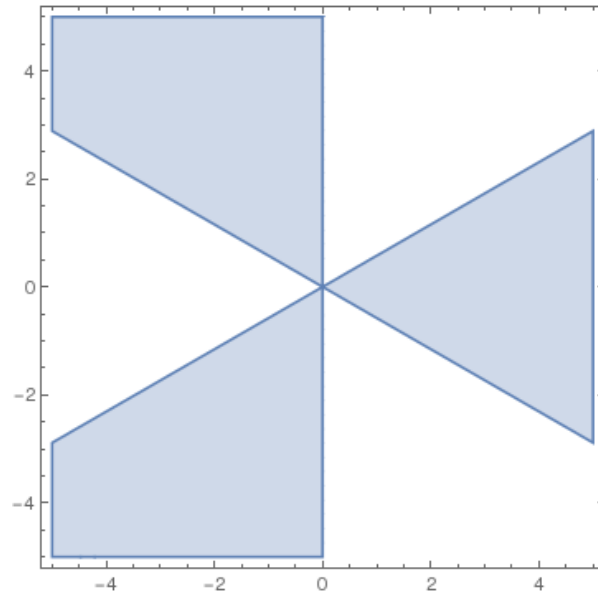
$$y''(x) - xy(x) = 0$$

Ему соответствует $P(t) = t^2$ и $Q(t) = -1$. Тем самым, $\int \frac{P}{Q} dt = -\frac{t^3}{3}$ и $Z = \exp(-\frac{t^3}{3})$ ¹². Тем самым, мы получаем интегральное представление:

$$y(x) = \int_C dt \exp\left(xt - \frac{t^3}{3}\right)$$

Далее требуется определить контур. Поскольку у подынтегральной функции особенностей нет, единственная возможность заключается в выборе контура, приходящего из бесконечности и уходящего на бесконечность. Поэтому требуется построить сектора, в которых функция в экспоненте затухает (это соответствует условию $ZQe^{xt} \rightarrow 0$). Член с t^3 , вообще говоря, на бесконечности важнее; поэтому условие, определяющее сектора, формулируется следующим образом: $\operatorname{Re} t^3 > 0$; если выбрать $t = |t|e^{i \arg t}$, то это значит $\cos(3 \arg t) > 0$. Выбирая различные контура, можно получать различные решения.

¹²Поскольку уравнение линейное, то его можно домножить на произвольную константу; в этом смысле знак Z не играет никакой роли


 Рис. 4.1: Сектора, в которые можно уводить контур интегрирования C при $t \rightarrow \infty$

Удобно выбрать три контура C_1 (снизу-вверх), C_2 (сверху-направо) и C_3 (справа-вниз). Соответствующие функции $y_{1,2,3}$ будут решениями уравнения; причём $y_1 + y_2 + y_3 = 0$, поэтому среди них имеются два линейно-независимых. Далее мы покажем, что $\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi i} y_1(x)$.

4.7.1 Метод перевала

Пусть зафиксирован некоторый контур; и нам требуется найти асимптотики функции $y(x \rightarrow \pm\infty)$. Эту задачу отлично решает метод перевала, который применяется к интегралам вида:

$$y = \int_C A(z) e^{\Phi(z)} dz$$

С вещественным методом перевала мы уже сталкивались; если функция $\Phi(z)$ чисто вещественна на контуре интегрирования, то достаточно найти максимумы этой функции $\Phi'(z_0) = 0$, разложиться квадратично вблизи этих максимумов (а «медленную» огибающую $A(z)$ можно просто взять в максимуме $A(z_0)$). Метод перевала в комплексной плоскости базируется на этой же простой идее, и он использует то хорошее свойство комплексных интегралов от аналитических функций, а именно — возможность модифицировать контур интегрирования. Таким образом, для асимптотической оценки интеграла всегда модифицировать контур так, чтобы «ходить» только по линиям постоянной фазы $\text{Im}\Phi(z) = \text{const}$. Обратим внимание, что линии постоянной фазы тождественно совпадают с линиями *наискорейшего спуска*, то есть с направлением $\nabla \text{Re}\Phi$.

Шаг первый Сперва требуется найти положение так называемых седловых точек¹³ $\Phi'(z_0) = 0$. В нашем случае есть функция $\Phi(t) = xt - \frac{t^3}{3} \Rightarrow \Phi' = x - t^2 = 0$. При $x > 0$, имеется пара седловых точек на вещественной оси $t_{1,2} = \pm\sqrt{x}$; при $x < 0$ имеется пара седловых точек на мнимой оси $t_{3,4} = \pm i\sqrt{|x|}$. Определим сразу значения функции в этих седловых точках:

$$\Phi(t) = \begin{cases} \pm \frac{2}{3} x^{3/2}, & t = t_{1,2} = \pm\sqrt{x} \\ \mp \frac{2}{3} i |x|^{3/2} & t = t_{3,4} = \pm i\sqrt{|x|} \end{cases}$$

Шаг второй Затем требуется найти направление линий наискорейшего спуска из точки z_0 . Вблизи каждой точки функция в общем виде раскладывается квадратично $\Phi(z) \approx \Phi(z_0) + \frac{1}{2} \Phi''(z_0) \cdot (z - z_0)^2 + \dots$. Рассмотрим поведение функции

¹³Название связано с следующим утверждением. Как известно из ТФКП, функция $\text{Re}\Phi(z = x + iy)$ — гармоническая функция, то есть удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\Phi = 0$. Это значит, что если вдоль какого-то направления функция имеет локальный минимум $\frac{\partial^2 \text{Re}\Phi}{\partial x^2} < 0$, то вдоль перпендикулярного — локальный максимум $\frac{\partial^2 \text{Re}\Phi}{\partial y^2} > 0$. Это значит, что в окрестности точки z_0 функция $\text{Re}\Phi(z)$ устроена как седло.

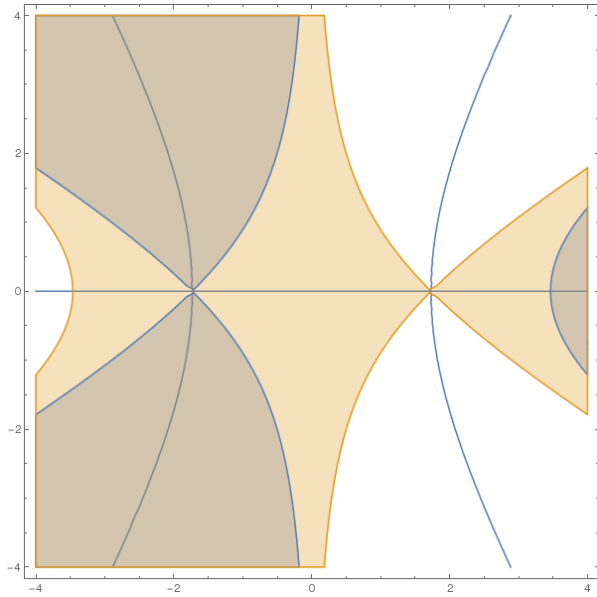
$\operatorname{Re}\Phi(z)$ в окрестности z_0 ; если положить $\Phi'' = |\Phi''|e^{i\arg\Phi''}$ и $z - z_0 = \rho e^{i\theta}$, тогда $\operatorname{Re}(\Phi(z) - \Phi(z_0)) = \frac{1}{2}|\Phi''|\rho^2 e^{i(\arg\Phi'' + 2\theta)}$. Имеются следующие взаимно-перпендикулярные направления:

$$\arg\Phi'' + 2\theta = 2\pi n \Rightarrow \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'', \quad \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'' + \pi \quad (\text{направления наискорейшего возрастания})$$

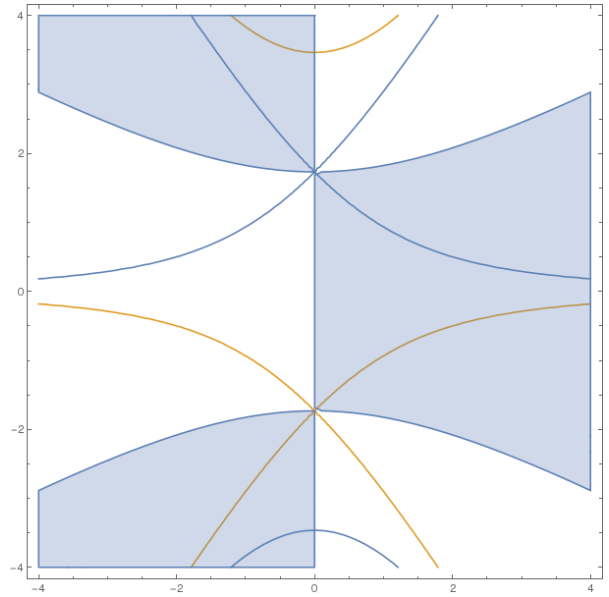
$$\arg\Phi'' + 2\theta = \pi + 2\pi n \Rightarrow \theta = -\frac{1}{2}\arg\Phi'' \pm \frac{\pi}{2}, \quad (\text{направления наискорейшего спуска})$$

В нашем случае получается следующее:

$$\Phi''(t) = -2t = \begin{cases} -2\sqrt{x} \Rightarrow \theta = 0, \pi, & t_1 = \sqrt{x}, \quad x > 0 \\ 2\sqrt{x} \Rightarrow \theta = \pm \frac{\pi}{2} & t_2 = -\sqrt{x}, \quad x > 0 \\ -2i\sqrt{|x|} \Rightarrow \theta = -\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, & t_3 = i\sqrt{|x|}, \quad x < 0 \\ 2i\sqrt{|x|} \Rightarrow \theta = -\frac{3\pi}{4}, \frac{\pi}{4}, & t_4 = -i\sqrt{|x|}, \quad x < 0 \end{cases}$$



(а) Случай $x = 3 > 0$. Видно, что для левой седловой точки линия наискорейшего спуска идёт вертикально, $\theta = \frac{\pi}{2}$; а для правой — наоборот, горизонтально, $\theta = 0$



(б) Случай $x = -3 < 0$. Верхней седловой точке соответствует направление наискорейшего спуска $\theta = -\frac{\pi}{4}$, а нижней — $\theta = \frac{\pi}{4}$

Рис. 4.2: Анализ топологии комплексной плоскости. Затемнённые области соответствуют областям, куда функция затухает $\operatorname{Re}\Phi(z) < \operatorname{Re}\Phi(z_0)$. Линии соответствуют линиям постоянной фазы $\operatorname{Im}\Phi(z) = \operatorname{Im}\Phi(z_0)$

Шаг третий Таким образом, нам бы хотелось пустить контур через точку z_0 под углом, соответствующим линии постоянной фазы — линии наискорейшего спуска. Если мы поступим так, то вклад в интеграл от окрестности z_0 оценится следующим образом¹⁴:

$$y = \int_C dz A(z) e^{-\Phi(z)} \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta} d\rho A(z) e^{\Phi(z_0) - \frac{1}{2}|\Phi''|\rho^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{|\Phi''|}} A(z_0) e^{\Phi(z_0) + i\theta}$$

Обратим внимание, что ведущая зависимость от параметра, как правило, даётся просто посредством $e^{\Phi(z_0)}$. Конечно, тут предполагается выполнение стандартных критериев метода перевала (а именно, что максимум достаточно узкий, и функция $A(z)$ достаточно медленна, так что такое разложение оправдано).

¹⁴Не стоит забывать фазу $e^{i\theta}$, связанную с переходом от интеграла по dz к интегралу вдоль направления наискорейшего спуска!

Шаг четвёртый Теперь нам можно наконец выбрать контур, соответствующий функции Эйри. Функция Эйри определяется как вещественное решение, которое при $x > 0$ экспоненциально затухает. Поэтому при $x > 0$ контур должен проходить только через седловую точку t_2 , и никак не через t_1 . Такой контур единственный — это C_1 (контур, идущий из нижнего сектора в верхний). Для удобства его можно пустить чисто по мнимой оси; выбирая константу так, чтобы определение совпало с стандартным (она равна $\frac{1}{2\pi i}$), мы можем написать:

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} e^{xt-t^3/3} dt = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(xt - \frac{t^3}{3}\right) dt$$

Шаг пятый Теперь проведём непосредственно «перевальную» оценку интеграла по выбранному контуру для различных знаков x . При $x > 0$, контур «насаживается» на единственную седловую точку $t = t_2 = -\sqrt{x}$ и проходит через неё по направлению $\theta = \frac{\pi}{2}$; получается вклад:

$$\text{Ai}(x \rightarrow \infty) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}}$$

При $x < 0$ контур «насаживается» на обе седловые точки. Однако стоит обратить внимания, что фазы в них различны $\text{Im}\Phi(t_3) \neq \text{Im}\Phi(t_4)$; в связи с этим, вообще говоря, не существует единого контура, который проходит по линиям постоянной фазы через обе седловые точки. В действительности же контур идёт «снизу», проходит через седло $t = -2i\sqrt{|x|}$ под углом $\theta = \frac{\pi}{4}$; затем уходит на $t \rightarrow +\infty$ (подобно контуру $-C_3!$). Там он «перескакивает» на другую линию постоянной фазы, откуда от «возвращается» по ней до второго седла $t = 2i\sqrt{|x|}$, проходит его под направлением $\theta = \frac{3\pi}{4}$ и уходит «наверх» (как контур $-C_2$; смотри рисунок 4.2). Перевальная оценка тем самым даёт:

$$\text{Ai}(x \rightarrow -\infty) \approx \frac{1}{2\pi i} \sqrt{\frac{2\pi}{2\sqrt{|x|}}} \left[e^{\frac{2}{3}i|x|^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} + e^{-\frac{2}{3}i|x|^{3/2} + i\frac{3\pi}{4}} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}|x|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

4.8 Пример: задача Ландау – Зенера

Напомним, что задача Ландау – Зенера описывает общий случай «пересечения уровней» (level crossing), и описывается следующим гамильтонианом: $\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha t & \gamma \\ \gamma & -\alpha t \end{pmatrix}$. На $-\infty$ мы стартуем с волновой функции $\psi_1 \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; и интересуемся мы вероятностями оказаться в каждом из состояний при $t \rightarrow \infty$.

В домашнем задании к теории возмущений мы уже разбирали случай «быстрого» проскока, $\alpha \gg \gamma^2$, где мы получили, что вероятность перехода в состояние ψ_2 мала и в ведущем порядке теории возмущений равна $P = \pi \frac{\gamma^2}{\alpha}$. В адиабатическом пределе $\alpha \ll \gamma^2$, напротив, с близкой к единице вероятности мы остаёмся в том же адиабатическом состоянии (обратим внимание, что оно при $t \rightarrow \infty$ совпадает с $\psi_2!$); а переходы — экспоненциально редки, $P = \#e^{-\pi\gamma^2/\alpha}$ (константа перед экспонентой из адиабатики не находится). Эта задача помимо всего прочего очень важна хотя бы потому, что допускает точное решение, которое можно построить, используя метод Лапласа. Итак, мы решаем следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} i\partial_t \psi_1 = \alpha t \cdot \psi_1 + \gamma \cdot \psi_2 \\ i\partial_t \psi_2 = \gamma \cdot \psi_1 - \alpha t \cdot \psi_2 \end{cases}, \quad |\psi_1(-\infty)|^2 = 1, \quad \psi_2(-\infty) = 0$$

Система из двух уравнений первого порядка эквивалентна одному уравнению второго порядка, которое можно получить, исключая $\psi_2(t)$ ¹⁵. Кроме того, сразу обезразмерим уравнения, введя $z = \alpha^{1/2}t$ и $\beta = \frac{\gamma^2}{2\alpha}$ ¹⁶:

$$\psi_1'' + (i + 2\beta + z^2)\psi_1 = 0$$

Чтобы свести это уравнение к уравнению с линейными коэффициентами, можно явно выделить «динамическую» фазу $\psi_1(z) = e^{iz^2/2} f(z)$ ¹⁷:

$$f'' + 2iz \cdot f' + 2(i + \beta)f = 0$$

¹⁵Это можно сделать, например, следующим образом: продифференцировать первое уравнение; подставить в него $\partial_t \psi_2$ из второго уравнения, и ψ_2 — напротив, из исходного первого

¹⁶Общее решение этого уравнения выражается через так называемые функции параболического цилиндра $D_{-i\beta}(\sqrt{2}e^{i\pi/4}t)$ и $D_{-1+i\beta}(-\sqrt{2}e^{-i\pi/4}t)$

¹⁷Это уравнение уже гипергеометрическое

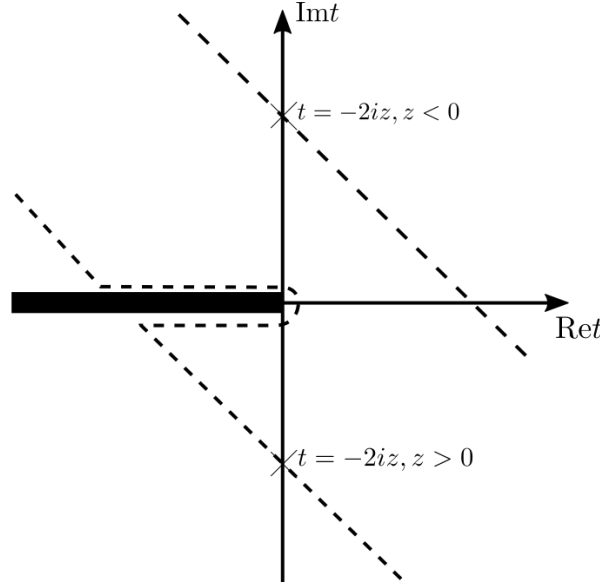


Рис. 4.3: Структура комплексной плоскости и контур интегрирования для задачи Ландау-Зенера

Итак, мы получаем уравнение, которое можно решать с помощью метода Лапласа. Давайте его применим! Получаем:

$$P(t) = t^2 + 2(i + \beta), \quad Q(t) = 2it, \quad \int \frac{P}{Q} dt = -\frac{i}{4}t^2 + (-i\beta + 1) \ln t$$

$$f(z) = \int_C dt \cdot t^{-i\beta} \exp\left(-\frac{i}{4}t^2 + zt\right)$$

Определим седловые точки полученного интеграла:

$$\varphi(t) = -\frac{i}{4}t^2 + zt, \quad \varphi'(t_0) = -\frac{i}{2}t_0 + z = 0 \Rightarrow t_0 = -2iz, \quad \varphi(t_0) = -iz^2$$

$$\varphi'' = -\frac{i}{2} \Rightarrow \theta = -\frac{\pi}{4}$$

Таким образом, вклад от «седла» будет даваться $f(z) \sim e^{-iz^2} \Rightarrow \psi_1(z) \sim e^{-iz^2/2}$.

Кроме этого, для того, чтобы определить многозначную функцию $t^{-i\beta}$, требуется провести разрез. Вообще говоря, перевальный контур может этот разрез задеть, и в интеграл будет вклад от разреза. Такой вклад удобно будет оценить, если разрез пустить по вещественной оси влево $t \in (-\infty; 0)$; тогда вдоль разреза функция экспоненциально затухает, и вклад от разреза будет $f \sim 1 \Rightarrow \psi_1 \sim e^{iz^2/2}$. Исходя из постановки задачи, мы понимаем, что при $z \rightarrow -\infty$ вклад должен быть только от седла, а при $z \rightarrow +\infty$ — и от седла, и от разреза. Это достигается выбором контура, который идёт из 4 четверти во вторую (смотри рисунок).

Случай $z < 0$ Тут имеется только вклад от седла. При этом многозначная функция $t_0^{-i\beta} = e^{\pi\beta/2} \cdot |t_0|^{-i\beta}$, и получаем (вспоминая, что $\psi_1(z) = e^{-iz^2/2} f(z)$):

$$\psi_1(z \rightarrow -\infty) \approx \sqrt{2\pi} e^{\pi\beta/2} e^{-iz^2/2 - i\beta \ln 2|z| - i\pi/4}, \quad |\psi_1(z \rightarrow -\infty)|^2 = 2\pi e^{\pi\beta}$$

Воспользуемся первым уравнением, чтобы показать, что $\psi_2(-\infty) = 0$. Подставляя, получаем:

$$\psi_2(z \rightarrow -\infty) \approx -\sqrt{\pi\beta} e^{\pi\beta/2} \frac{1}{|z|} e^{-iz^2/2 - i\beta \ln(2|z|) - \frac{i\pi}{4}}, \quad |\psi_2(z \rightarrow -\infty)| \approx \frac{\pi\beta e^{\pi\beta}}{z^2} \rightarrow 0$$

Тем самым, мы проверили, что найденное решение — ровно то, что мы ищем!

Случай $z > 0$ Наша многозначная функция даёт $t_0^{-i\beta} = e^{-\pi\beta/2}|t_0|^{-i\beta}$; тем самым, вклад от седла даётся:

$$\psi_1^{(1)}(z \rightarrow +\infty) = \sqrt{2\pi}e^{-\pi\beta/2}e^{-iz^2/2-i\beta \ln 2z-i\pi/4}, \quad |\psi_1^{(1)}(z \rightarrow +\infty)|^2 = 2\pi e^{-\pi\beta/2}$$

Оценим теперь вклад от разреза. На разных берегах разреза мы имеем:

$$t^{-i\beta} = (-|t|)^{-i\beta} = \begin{cases} e^{\pi\beta}|t|^{-i\beta}, & \text{Im}t = +0 \\ e^{-\pi\beta}|t|^{-i\beta}, & \text{Im}t = -0 \end{cases}$$

Тем самым, вклад от разреза оценивается следующим образом. На нём затухающая экспонента e^{zt} «важнее», чем медленная $e^{-it^2/4}$; получаем:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(2)}(z) &= e^{iz^2/2} \left[e^{-\pi\beta} \int_{-\infty}^0 dt \cdot |t|^{-i\beta} e^{zt} + e^{\pi\beta} \int_0^{-\infty} dt |t|^{-i\beta} e^{zt} \right] = \\ &= e^{iz^2/2} (e^{-\pi\beta} - e^{\pi\beta}) \int_0^{\infty} dt \cdot t^{-i\beta} e^{-zt} = -2 \sinh \pi\beta \Gamma(1-i\beta) \frac{1}{z} e^{i\beta \ln z + iz^2/2}, \quad |\psi_1^{(2)}(z \rightarrow +\infty)|^2 \sim \frac{4\pi\beta \sinh \pi\beta}{z^2} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

(тут мы воспользовались тем, что $|\Gamma(1-i\beta)|^2 = \Gamma(1-i\beta)\Gamma(1+i\beta) = i\beta \frac{\pi}{\sin(i\pi\beta)} = \frac{\pi\beta}{\sinh \pi\beta}$).

Ответ Мы построили все необходимые асимптотики. Адиабатическое состояние, которое на $-\infty$ соответствовало в нашем базисе $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, на $+\infty$ соответствует $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Поэтому вероятность адиабатического перехода даётся просто величиной $P = \frac{|\psi_1(t \rightarrow +\infty)|^2}{|\psi_1(t \rightarrow -\infty)|^2} = e^{-2\pi\beta} \equiv e^{-\pi\gamma^2/\alpha}$ (обратим внимание, что вклад от разреза в эту величину, вообще говоря, нулевой). Этот ответ воспроизводит как пертурбативный ответ (при этом $1 - e^{-\pi\gamma^2/\alpha} \approx \pi \frac{\gamma^2}{\alpha}$), так и адиабатический.

Глава 5

Теория возмущений

5.1 Стационарная теория возмущений

Точно-решаемых квантомеханических задач, в действительности, очень мало, и огромное значение имеют различные приближённые методы. Рассмотрение мы начнём с классической теории возмущений. Задача ставится так — имеется гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где спектр «невозмущённого» гамильтониана $\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$ известен, а матричные элементы возмущения \hat{V} — в каком-то смысле малы (далее мы выясним, что именно это означает). Интересуемся же мы устройством спектра полного гамильтониана. Если возмущение действительно мало, то малы и поправки — мы ожидаем, что точные волновые функции и точные уровни энергии $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$ будут параметрически близки к невозмущённым. Идея метода заключается в подстановке в стационарное уравнение Шрёдингера волновых функций и энергий в виде ряда по малому параметру, который содержится в операторе \hat{V} :

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle + \dots, \quad E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots \quad (5.1)$$

и дальнейшем итеративном нахождении этих самых поправок. Сразу отметим, что ряды теории возмущений часто имеют смысл асимптотических рядов, и в действительности расходятся. Это никак не умаляет её ценности — чаще всего точность, которой можно достичь теорией возмущений в нескольких первых порядках, вполне достаточна для приложений.

Стоит сделать замечание, что условия $\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$ недостаточно, чтобы однозначно зафиксировать все поправки теории возмущений, просто в силу того, что волновую функцию можно домножить на произвольную комплексную постоянную (которая, в частности, может также зависеть от малого параметра). К этому необходимо можно добавить условие нормировки¹, которое в произвольном порядке p , которое записывается следующим образом:

$$\langle n|n\rangle = 1 \Rightarrow \sum_{l=0}^p \langle n^{(l)}|n^{(p-l)}\rangle = 0 \quad (5.2)$$

5.1.1 Невырожденный случай

Итак, сделаем искомую подстановку в стационарное уравнение Шрёдингера, и соберём члены порядка p :

$$\hat{H}_0 |n^{(p)}\rangle + \hat{V} |n^{(p-1)}\rangle = \sum_{l=0}^p E_n^{(p-l)} |n^{(l)}\rangle \quad (5.3)$$

Это уравнение рекуррентно выражает поправку порядка p через предыдущие. Искать поправку произвольного порядка можно в виде разложения по исходному базису: $|n^{(p)}\rangle = \sum_m c_m^{(p)} |m^{(0)}\rangle$; в таком случае, проецируя это уравнение на бра-вектор $\langle m^{(0)}|$, мы получаем систему уравнений на коэффициенты $c_m^{(p)}$:

$$E_m^{(0)} c_m^{(p)} + \sum_k V_{mk} c_k^{(p-1)} = E_n^{(0)} c_m^{(p)} + \sum_{l=0}^{p-1} E_n^{(p-l)} c_m^{(l)} \Rightarrow c_{m \neq n}^{(p)} = \frac{1}{\omega_{nm}} \left(\sum_k V_{mk} c_k^{(p-1)} - \sum_{l=0}^{p-1} E_n^{(p-l)} c_m^{(l)} \right), \quad (5.4)$$

¹Альтернативный вариант заключается в фиксировании нормировки требованием $\langle n^{(0)}|n^{(p)}\rangle = 0$, то есть ортогональность поправки исходному состоянию. Полученная таким образом волновая функция, очевидно, не будет нормирована на единицу, о чём не стоит забывать при вычислении по ней каких-либо наблюдаемых.

и тут введены обозначения $\omega_{nm} = E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ и $V_{nm} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle$ — величины, определяемые чисто из решения исходной задачи. При $m = n$, это же уравнение задаёт поправку p -го порядка к уровню энергии²:

$$E_n^{(p)} = \sum_k V_{nk} c_k^{(p-1)} - \sum_{l=1}^{p-1} E_n^{(p-l)} c_n^{(l)} \quad (5.5)$$

Наконец, коэффициент при $c_n^{(p)}$ найти таким образом невозможно; он определяется из условия нормировки (5.2):

$$c_n^{(p)} + (c_n^{(p)})^* + \sum_{l=1}^{p-1} \langle n^{(l)} | n^{(p-l)} \rangle = 0 \Rightarrow c_n^{(p)} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{p-1} \sum_k c_k^{(l)*} c_k^{(p-l)} \quad (5.6)$$

Мнимая часть $\text{Im} c_n^{(p)}$ произвольна — и связано это с оставшейся свободой выбора фазы состояния $|n\rangle$, которая остаётся даже после наложения условия нормировки. Для того, чтобы избавиться от этой свободы, мы дополнительно потребуем, чтобы $\langle n^{(0)} | n \rangle$ было чисто вещественным — что буквально означает $\text{Im} c_n^{(p)} = 0$ — после чего весь ряд оказывается однозначно определённым. Взятые в рамку уравнения можно итерировать явно, получая порядок за порядком. На практике же, как правило, достаточно первых двух-трёх порядков, формулы для которых мы и приведём.

Первый порядок теории возмущений

Чтобы найти поправку первого порядка к уровню энергии E_n , достаточно заметить, что $c_k^{(0)} = \delta_{nk}$; поэтому непосредственно уравнения, выписанные выше, дают:

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, \quad c_{m \neq n}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{\omega_{nm}}, \quad c_n^{(1)} = 0 \quad (5.7)$$

Второй порядок теории возмущений

Как правило, исследовать второй порядок теории возмущений имеет смысл, если первый по каким-то причинам занулился (что, вообще говоря, не является редкостью — в приложениях чаще всего в силу симметрии, матричный элемент V_{nn} равен нулю). Тем не менее, общие формулы дают:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{\omega_{nm}}, \quad c_{m \neq n}^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{mk} V_{kn}}{\omega_{nk} \omega_{nm}} - \frac{V_{nn} V_{mn}}{\omega_{nm}^2}, \quad c_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_m \frac{|V_{nm}|^2}{\omega_{mn}^2} \quad (5.8)$$

Формула для поправки к энергии особенно часто возникает в приложениях. Ее можно интерпретировать, как вклад *виртуальных переходов* с уровня n на уровень k и обратно. Заметим, что из нее следует, что поправка второго порядка к энергии основного состояния всегда отрицательна.

Третий порядок теории возмущений

Поправка энергии третьего порядка получается достаточно просто из поправки к волновым функциям второго порядка, поэтому приведём также и формулу для неё:

$$E_n^{(3)} = \sum_{m \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{V_{nm} V_{mk} V_{kn}}{\omega_{nk} \omega_{nm}} - V_{nn} \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{\omega_{nm}^2} \quad (5.9)$$

Дальнейшее обсуждение

Во-первых, формулы непосредственно обобщаются и на случай непрерывного спектра — просто суммы по промежуточным виртуальным состояниям нужно заменить на интеграл с соответствующей этим состояниям плотностью состояний $\int d\nu_k$ (с этим объектом мы познакомились ранее, на семинаре про непрерывный спектр).

Стоит также обсудить критерии применимости метода. Разумеется, как и для любого итеративного метода решения, разумно требовать, чтобы поправки были малыми — условно это можно записать как $E_n^{(p)} \ll E_n^{(p-1)}$ и $\langle n^{(p)} | n^{(p)} \rangle \ll$

²При использовании альтернативной нормировки условием $c_n^{(p)} = 0$, вторая сумма в этом выражении тождественно равна нулю. Никакого противоречия в этом нет, наблюдаемые величины — такие как энергия — очевидным образом от нормировки зависеть не могут и не будут.

$\langle n^{(p-1)} | n^{(p-1)} \rangle$. Это — самый главный и применяемый критерий, который обосновывается *a-posteriori* — сперва применяется теория возмущений, а затем требуется малость поправок.

Тем не менее, какие-то общие слова можно сказать. Глядя, например, на поправку первого порядка к волновым функциям $c_{m \neq n}^{(1)}$ мы, в принципе, видим, что они малы если $|V_{nm}| \ll |\omega_{nm}|$ — то есть матричные элементы возмущения меньше типичного расстояния между соседними уровнями. Бросается в глаза явно проблематичный случай, когда имеются какие-то уровни, которые близки друг к другу — или даже в точности совпадают — как говорят, случай *вырождения*. Для него тоже можно применить теорию возмущений, но требуется её модификация.

5.1.2 Пример: сжатие сферической ямы

В качестве примера рассмотрим такую задачу. Имеется трёхмерная сфера радиуса R с бесконечными стенками; потенциал имеет вид:

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r}| < R \\ \infty, & |\mathbf{r}| > R \end{cases} \quad (5.10)$$

что соответствует граничным условиям $\psi(\mathbf{r})|_{|\mathbf{r}|=R} = 0$. Требуется найти сдвиг энергии основного состояния при слабом сжатии сферы вдоль оси z (сфера превращается в эллипс $\frac{x^2+y^2}{R^2} + \frac{z^2}{R'^2} = 1$ и $\epsilon = \frac{R-R'}{R} \ll 1$).

Вообще говоря, гамильтониан у возмущённой и невозмущённой задачи совпадают — это просто гамильтониан свободного движения $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$, и сходу непонятно, как применять теорию возмущений. Однако, можно сделать замену, которая сделает граничные условия совпадающими — а именно, сделать преобразование $\hat{z}' = \hat{z} \cdot \frac{R}{R'}$, которое переведёт эллипсоид обратно в сферу; при этом из-за ненулевого якобиана такого перехода возникнет поправка к гамильтониану. При таком сжатии $\hat{p}'_z = \hat{p}_z \cdot \frac{R'}{R}$, и поэтому гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2m} + \frac{\hat{p}'_z{}^2}{2m} \left(\left(\frac{R}{R'} \right)^2 - 1 \right) \approx \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2m}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{\hat{p}'_z{}^2}{m}}_{\hat{V}}. \quad (5.11)$$

Теперь мы уже можем применять теорию возмущений. Невозмущённый гамильтониан представляет собой просто свободное движение в сфере, которое можно решить, используя сферические координаты. Основное состояние сферически симметрично, и для него УШ записывается следующим образом:

$$-\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = E \psi(r), \quad \psi(r=R) = 0 \quad (5.12)$$

Стандартная подстановка $\psi(r) = \chi(r)/r$ сводит задачу к одномерному уравнению Шрёдингера:

$$-\frac{1}{2m} \chi''(r) = E \chi(r) \Rightarrow \chi(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr), \quad \frac{k^2}{2m} = E \quad (5.13)$$

В силу граничных условий, $\chi(r) = r\psi(r)$ и значит³ $\chi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$, и условие квантования на импульс даёт $kR = \pi n$; в частности, для основного состояния $k = \frac{\pi}{R}$ и $E_0 = \frac{\pi^2}{2mR^2}$. Для применения теории возмущений, это состояние необходимо отнормировать:

$$\int_0^R 4\pi r^2 dr \cdot \frac{\sin^2 kr}{r^2} = 2\pi R \Rightarrow \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \frac{\sin kr}{r} \quad (5.14)$$

Наконец, поправка первого порядка теории возмущений записывается как $E_0^{(1)} = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \epsilon/m \langle \psi | \hat{p}_z^2 | \psi \rangle$. Поскольку основное состояние сферически симметрично, то $\langle p_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle p^2 \rangle = \frac{2m}{3} \langle \hat{H} \rangle = \frac{2m}{3} E_0$. Значит:

$$E_0^{(1)} = \frac{\pi^2}{3mR^3} \epsilon \quad (5.15)$$

Обратим внимание на следующий факт. Этот сдвиг можно было найти иначе, посчитав *работу*, которую необходимо было бы затратить, чтобы адиабатически сжать такую сферу. Работа даётся выражением $E_0^{(1)} = P \cdot \Delta V$, где $\Delta V = \frac{4\pi}{3}(R^3 - R'^3) = \frac{4\pi}{3} R^3 \epsilon$ — изменение объёма, а P — давление, которое оказывает частица на стенки. Давление удобно

³Как уже обсуждалось ранее, вообще говоря ничего не мешает волновой функции иметь особенность в нуле типа $\psi(r \rightarrow 0) \approx C/r$ — при этом волновая функция останется нормируемой, ведь интеграл $|\psi(r)|^2 r^2 dr$ сходится. Но такая особенность соответствовала бы дельта-функциональному потенциалу в нуле.

найти, рассмотрев изотропное изменение объёма: $P = -\partial E/\partial V = -1/(4\pi R^2) \cdot \partial E_0/\partial R$. Полученное выражение в точности воспроизводит полученный ранее ответ, это подтверждает утверждение о том, что в первом порядке теории возмущений важно лишь изменение объёма — и совершенно не важно, как именно сфера сжимается (до тех пор, пока это сжатие мало). Например, так можно было бы решить задачу об изменении энергии в случае, когда у сферы отрезают сферический сегмент малого объёма.

Заметим, что в этом рассуждении важную роль играет сферическая симметрия невозмущенного состояния — в противном случае давление бы зависело от углов, и его вычисление было бы уже не столь тривиально.

5.1.3 Пример: поляризуемость дельта-ямы

Классическое применение теории возмущений — это различные задачи о линейном отклике. Примером такой задачи является нахождение поляризуемости — к системе прикладывается слабое электрическое поле \mathcal{E} , описываемое гамильтонианом $\hat{V} = -\hat{d}\mathcal{E}$, где \hat{d} — оператор дипольного момента; в таком случае система поляризуется и в ней возникает дипольный момент $\langle \hat{d} \rangle = \chi \mathcal{E}$. Величина χ носит название поляризуемости, и её можно и нужно находить используя теорию возмущений. Эффект линейный по полю, поэтому достаточно найти линейную по полю поправку к волновой функции, и по поправке уже определить поляризуемость. Абсолютно эквивалентный подход заключается в исследовании поправки второго порядка к энергии — поскольку⁴ $\frac{\partial E_0}{\partial \mathcal{E}} = \langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial \mathcal{E}} \rangle = -\langle \hat{d}(\mathcal{E}) \rangle = -\chi \mathcal{E} \Rightarrow \delta E_0 = -\frac{1}{2}\chi \mathcal{E}^2$. Именно второй поправкой к уровню энергии мы и займёмся. Для конкретности, мы будем исследовать поляризуемость основного состояния в одномерной мелкой яме $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m) - (\kappa/m) \cdot \delta(x)$, в которой параметр κ связан с энергией связанного состояния в этой яме как $E_0 = \kappa^2/(2m)$; и в таком случае, оператор дипольного момента — это просто $\hat{d} = -e\hat{x}$.

Волновая функция связанного состояния мелкой ямы $\langle x|\psi_0 \rangle = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}$ является чётной; возмущение же — нечётное. Поэтому первый порядок теории возмущений $E_0^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle \equiv 0$ — что неудивительно (если сдвиг энергии линеен по полю, то это означает, что исходно система обладает дипольным моментом $\frac{\partial E_0}{\partial \mathcal{E}} = d = \text{const}$). Волновые функции непрерывного спектра также удобно классифицировать по чётности — имеются чётные функции $\psi_k^{(+)}$ и нечётные функции $\psi_k^{(-)}$:

$$\langle x|\psi_k^{(-)} \rangle = \sin kx, \quad \langle x|\psi_k^{(+)} \rangle = \cos(k|x| + \varphi_k), \quad E_k = \frac{k^2}{2m} \quad (5.16)$$

Такой вид волновых функций обусловлен следующим соображением. Нечётная функция в нуле обращается в ноль, из-за чего она эффективно «не чувствует» дельта-яму — поэтому волновая функция нечётного состояния совпадает с волновой функцией свободного движения. Чётная же функция обязана испытывать излом при $x = 0$, что обуславливает наличие фазового сдвига φ_k , как-то зависящего от параметров задачи.

Явный вид фазового сдвига, тем не менее, нам не нужен — ведь, опять-таки, из соображений чётности, виртуальные переходы будут только в нечётные состояния непрерывного спектра (только для них матричный элемент возмущения V_{0k} отличен от нуля). Поправка второго порядка тогда имеет вид:

$$E_0^{(2)} = \int d\nu_k \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (5.17)$$

Плотность состояний непрерывного спектра $d\nu_k$ находится из нормировки волновых функций — несложно убедиться, что $\langle \psi_{k'}^{(+)} | \psi_k^{(+)} \rangle = \pi \delta(k - k')$, поэтому $d\nu_k = \frac{dk}{\pi}$. Наконец, матричные элементы вычисляются непосредственно:

$$V_{k0} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin kx \cdot e\mathcal{E}x \cdot \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|} = -2e\mathcal{E}\sqrt{\kappa}\partial_k \text{Re} \int_0^{\infty} dx e^{ikx - \kappa x} = 4e\mathcal{E} \frac{k\kappa^{3/2}}{(\kappa^2 + k^2)^2} \quad (5.18)$$

Обезразмеривая оставшийся интеграл по k подстановкой $k = \kappa x$, и выражая ответ через физическую величину — энергию связанного состояния в яме, мы получаем:

$$E_0^{(2)} = -\frac{8me^2\mathcal{E}^2}{\pi\kappa^4} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^5} = -\frac{5}{32} \frac{e^2\mathcal{E}^2}{mE_0^2} \Rightarrow \boxed{\chi = -\frac{\partial^2 E_0}{\partial \mathcal{E}^2} = \frac{5}{16} \frac{e^2}{mE_0^2}}. \quad (5.19)$$

⁴Это утверждение носит название теоремы Геллмана-Фейнмана, оно будет доказано в адиабатике

5.1.4 Случай вырождения

Итак, пусть в системе теперь имеется обратная ситуация: имеется несколько уровней, для которых матричные элементы возмущения оказываются большими по сравнению с расстоянием между этими уровнями⁵. В таком случае можно считать, что уровень энергии один, но он вырожден — то есть в невозмущённой задаче имеются N уровней $|n_\alpha^{(0)}\rangle$, соответствующие энергии $E_n^{(0)}$. В таком случае выбор вырожденного состояния, к которому мы ищем поправку, неоднозначен — вообще говоря, в качестве невозмущённой функции необходимо рассматривать произвольную линейную комбинацию $|n^{(0)}\rangle = \sum_\alpha c_{n,\alpha}^{(0)} |n_\alpha^{(0)}\rangle$.

Первый порядок вырожденной теории возмущений

Общие формулы, выведенные выше, тем не менее, работают, и в первом порядке теории возмущений мы можем записать:

$$\hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle + \hat{V} |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle \quad (5.20)$$

Поступая аналогично невырожденному случаю, подставим поправку первого порядка в виде разложения:

$$\begin{aligned} |n^{(1)}\rangle &= \sum_\beta c_{n,\beta}^{(1)} |n_\beta^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} c_k^{(1)} |k^{(0)}\rangle \\ \sum_{k \neq n} E_k^{(0)} c_k^{(1)} |k^{(0)}\rangle + \sum_\beta c_{n,\beta}^{(0)} \hat{V} |n_\beta^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_k^{(1)} |k^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} \left(\sum_\beta c_{n,\beta}^{(0)} |n_\beta^{(0)}\rangle \right) \end{aligned} \quad (5.21)$$

Проецируя это уравнение на состояния вырожденного уровня $\langle n_\alpha^{(0)}|$, мы получаем:

$$\sum_\beta V_{\alpha\beta} c_{n,\beta}^{(0)} = E_n^{(1)} c_{n,\alpha}^{(0)}, \quad V_{\alpha\beta} \equiv \langle n_\alpha^{(0)} | \hat{V} | n_\beta^{(0)} \rangle, \quad (5.22)$$

Данное уравнение выглядит в точности, как уравнение Шрёдингера — с единственным отличием в том, что в роли гамильтониана тут выступает не вся матрица \hat{H} (которая, как правило, бесконечномерна), а лишь возмущение, спроецированное на вырожденное подпространство — то есть матрица $N \times N$. Эта задача несоизмеримо более простая — ведь, как правило, вырождение если и имеется, то достаточно слабое. В этом выражается эссенция вырожденной теории возмущений — достаточно рассматривать задачу лишь для вырожденных уровней, как будто остальных в задаче вовсе нет.

Дальнейший ход стандартен. Поправки первого порядка определяются как собственные значения спроецированного на вырожденное подпространство возмущения, из так называемого **секулярного уравнения** $\det(\hat{V} - E_n^{(1)}) = 0$ — и их N штук. Если они различны, то говорят о снятии вырождения возмущением или о расщеплении мультиплета⁶. Собственные вектора, отвечающие этим значениям, носят название **правильных волновых функций ведущего приближения** — именно такие волновые функции будут иметь уже невырожденные уровни энергии.

Проецируя же уравнение (5.20) на остальные уровни $\langle m^{(0)}|$, мы получаем поправку первого порядка к остальным коэффициентам — для них теория возмущений никак не модифицируется:

$$c_{m \neq n}^{(1)} = \sum_\alpha \frac{V_{m\alpha}}{\omega_{nm}} c_{n,\alpha}^{(0)} = \frac{V_{mn}}{\omega_{nm}}, \quad c_{n,\alpha}^{(1)} \equiv 0 \quad (5.23)$$

Зануление коэффициентов $c_{n,\alpha}^{(1)}$ следует, как и ранее, из сохранения нормировки.

⁵К примеру, в атоме водорода уровни энергии расщепляются из-за релятивистских поправок — спин-орбитальному взаимодействию (слабое расщепление), а также из-за взаимодействия спинов электрона со спинами ядра (сверхтонкое расщепление), и большое вырождение $2n^2$ уровней энергии частично снимается. Тем не менее, когда энергетические масштабы возмущения больше, чем это расщепление, им можно пренебречь и применять вырожденную теорию возмущений для всего уровня.

⁶Скажем, в случае с магнитным полем, приложенным к атому, это явление носит название **эффекта Зеемана**

Второй порядок вырожденной теории возмущений

Разумеется, может быть ситуация, в которой возмущение не снимается в первом порядке (или снимается лишь частично) — в таком случае нужно двигаться дальше. Опять-таки, мы используем уравнение (5.3):

$$\hat{H}_0 |n^{(2)}\rangle + \hat{V} |n^{(1)}\rangle = E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle \quad (5.24)$$

Тут мы ограничимся лишь поправкой второго порядка к уровням энергии, поэтому спроецируем сразу это уравнение на $\langle n_\alpha^{(0)} |$:

$$\sum_{m \neq n, \beta} \frac{V_{\alpha m} V_{m \beta}}{\omega_{nm}} c_{n, \beta}^{(0)} \equiv \sum_{\beta} H_{\alpha \beta}^{(\text{eff})} c_{n, \beta}^{(0)} = E_n^{(2)} c_{n, \alpha}^{(0)}, \quad H_{\alpha \beta}^{(\text{eff})} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{\alpha m} V_{m \beta}}{\omega_{nm}} \quad (5.25)$$

Полученное уравнение, как и в первом порядке, устроено в точности как уравнение Шрёдингера, спроецированное на вырожденное подпространство, но с **эффективным гамильтонианом** $H^{(\text{eff})}$ (который раньше попросту совпадал с \hat{V}). Поступать с ним нужно точно так же — если вырождение не было снято в первом порядке, то поправки второго порядка определяются секулярным уравнением $\det(\hat{H}^{(\text{eff})} - E_n^{(2)}) = 0$, а правильные волновые функции ведущего приближения будут соответствовать этим уровням энергии.

Про эффективный гамильтониан можно думать, как про вклад виртуальных переходов с одного из уровней вырожденного подпространства $E_\alpha^{(0)}$ на невырожденный уровень $E_m^{(0)}$ и обратно на уровень $E_\beta^{(0)}$, принадлежащий тому же вырожденному подпространству ($E_\alpha^{(0)} = E_\beta^{(0)}$), но не обязательно являющийся тем же состоянием (только для $\alpha = \beta$).

5.1.5 Пример: вырожденная теория возмущений

Продemonстрируем, как пользоваться приведёнными выше формулами, на примере минимальной модели — матрица 3×3 , которая описывает двухкратно вырожденный уровень энергии E_1 и отделённый от него энергетической щелью уровень энергии E_2 . При этом возмущение — туннелирование между этими уровнями энергии, и оно не снимает вырождение в первом порядке теории возмущений:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & t_1 \\ 0 & E_1 & t_2 \\ t_1 & t_2 & E_2 \end{pmatrix}, \quad |\Delta| = |E_2 - E_1| \gg t_{1,2}^2 \quad (5.26)$$

Разумеется, задачу эту можно решить точно. Точные собственные значения записываются следующим образом:

$$E = \left\{ E_1, \quad \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \sqrt{(\Delta/2)^2 + |t_1|^2 + |t_2|^2} \right\} \approx \left\{ E_1 - \frac{t_1^2 + t_2^2}{\Delta}, \quad E_1, \quad E_2 + \frac{t_1^2 + t_2^2}{\Delta} \right\} \quad (5.27)$$

Поскольку возмущение не связывает состояния с вырожденного подпространства, то можно было бы попробовать наивно применить второй порядок *невырожденной* теории возмущений (5.8):

$$E_{1,1}^{(2)} = \frac{|V_{13}|^2}{E_1 - E_2} = -\frac{t_1^2}{\Delta}, \quad E_{1,2}^{(2)} = \frac{|V_{23}|^2}{E_1 - E_2} = -\frac{t_2^2}{\Delta}, \quad E_2^{(2)} = \frac{|V_{31}|^2}{E_2 - E_1} + \frac{|V_{32}|^2}{E_2 - E_1} = \frac{t_1^2 + t_2^2}{\Delta} \quad (5.28)$$

что для уровня энергии E_2 даёт правильный ответ, а для вырожденного уровня E_1 — нет. Чтобы получить правильные ответы, необходимо пользоваться вторым порядком вырожденной теории возмущений. Рецепт говорит, что необходимо составить эффективный гамильтониан для первых двух уровней:

$$H_{11}^{(\text{eff})} = \frac{V_{13}V_{31}}{E_2 - E_1} = -\frac{t_1^2}{\Delta}, \quad H_{12}^{(\text{eff})} = H_{21}^{(\text{eff})} = \frac{V_{13}V_{32}}{E_2 - E_1} = -\frac{t_1 t_2}{\Delta}, \quad H_{22}^{(\text{eff})} = \frac{V_{23}V_{32}}{E_2 - E_1} = -\frac{t_2^2}{\Delta} \Rightarrow \hat{H}^{(\text{eff})} = -\frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} t_1^2 & t_1 t_2 \\ t_1 t_2 & t_2^2 \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

Диагонализуя матрицу, мы немедленно получаем поправки второго порядка к вырожденному уровню:

$$E_{1,1}^{(2)} = 0, \quad E_{1,2}^{(2)} = -\frac{t_1^2 + t_2^2}{\Delta} \quad (5.30)$$

которые на сей раз воспроизводят правильный ответ (5.27), полученный из точного решения. Наивный же подход не учитывает недиагональные элементы матрицы эффективного гамильтониана, которые дают вклад того же порядка, что и диагональные.

5.2 Нестационарная теория возмущений

5.2.1 Постановка задачи

В стационарной теории возмущений исследуется то, как изменяются свойства спектра при возмущении, независимом от времени — решения стационарного уравнения Шрёдингера. Как несложно догадаться, постановка задачи нестационарной теории возмущений соответствует ситуации, когда малое возмущение зависит от времени, а исследуем мы решения нестационарного уравнения Шрёдингера $i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))|\psi(t)\rangle$.

Представление взаимодействия

Прежде, чем развивать теорию возмущений, необходимо избавиться от «быстрой», но тривиальной эволюции согласно невозмущённому гамильтониану. Это делается посредством так называемого представления взаимодействия. Суть его в следующем: мы раскладываем волновую функцию $|\psi(t)\rangle$ по собственным состояниям гамильтониана \hat{H}_0 (как мы делали бы обычно), но учитываем для этих собственных состояний их эволюцию, какая имела бы место в отсутствие взаимодействия:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n(t)\rangle, \quad |n(t)\rangle = e^{-iE_n t} |n\rangle; \quad (5.31)$$

соответственно, для невозмущённой задачи решение было бы тривиальным и в каком-то смысле «медленным»: $\psi_n(t) \equiv \text{const}$; именно на фоне этого решения мы и будем строить теорию возмущений. Такая подстановка в уравнение Шрёдингера даёт:

$$i\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \sum_m V_{nm}^{(I)}(t) \psi_m(t), \quad V_{nm}^{(I)} \equiv \langle n(t) | \hat{V}(t) | m(t) \rangle = e^{i\omega_{nm} t} V_{nm}(t) \quad (5.32)$$

(где, как всегда, обозначено $\omega_{nm} = E_n - E_m$). Оператор $\hat{V}^{(I)}$ с указанными матричными элементами носит название «оператора возмущения в представлении взаимодействия». Это уравнение прекрасно тем, что мы избавились от «быстрой» эволюции за счёт гамильтониана \hat{H}_0 , и величины $\psi_n(t)$ зависят от времени уже за счёт слабого возмущения. В таком виде задачу уже можно решать методом итераций.

5.2.2 Возмущения, действующие в течении конечного времени

Самый простейший случай, представляющий интерес с точки зрения нестационарной теории возмущений — это если возмущение действует в течение конечного времени. Пусть в начальный момент времени (при $t \rightarrow -\infty$) система находилась в каком-то стационарном состоянии невозмущённого гамильтониана (initial state) $|i\rangle$; а возмущение $\hat{V}(t)$ достаточно быстро затухает при $t \rightarrow \pm\infty$. Мы интересуемся вероятностью возбуждения системы — а именно, вероятностью перехода в произвольное состояние (final state) $|f\rangle$ при $t \rightarrow \infty$.

Решается такая задача достаточно просто. В качестве нулевого приближения в уравнении (5.32) мы подставляем $\psi_i^{(0)}(-\infty) = 1$; тогда в первом приближении для произвольного другого состояния $\psi_f^{(1)}(t)$ мы получаем:

$$\psi_f^{(1)}(t) = -i \int_{-\infty}^t V_{fi}^{(I)}(\tau) d\tau \Rightarrow w_{i \rightarrow f} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 \quad (5.33)$$

(величина $w_{i \rightarrow f}$ буквально соответствует вероятности перехода из $|i\rangle$ в $|f\rangle$). Разумеется, метод применим только если возмущение мало, и спадает на бесконечности достаточно быстро — так что интеграл предполагается сходящимся.

5.2.3 Пример: возбуждение осциллятора

Рассмотрим задачу об возбуждении гармонического осциллятора под действием силы, которая действует в течении конечного времени:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} - F\hat{x}e^{-t^2/\tau^2} \quad (5.34)$$

Допустим, при $t \rightarrow -\infty$ мы находились в основном состоянии осциллятора $|i\rangle = |0\rangle$; ищем мы вероятность перехода в первое и второе возбуждённые состояния.

Решение

Определим, какие матричные элементы возмущения вообще отличны от нуля. Используя лестничные операторы, мы видим, что отличны от нуля только переходы между соседними уровнями:

$$V_{nm}(t) = -F e^{-t^2/\tau^2} \langle n | \hat{x} | m \rangle = -\frac{F e^{-t^2/\tau^2}}{\sqrt{2m\omega}} \cdot \begin{cases} \sqrt{n}, & m = n - 1 \\ \sqrt{n+1}, & m = n + 1 \end{cases} \quad (5.35)$$

В частности, в первом порядке теории возмущений переход происходит только в первое возбуждённое состояние, разность энергий которых равна $\omega_{10} = \omega$:

$$w_{0 \rightarrow 1} = \left| -\frac{F}{\sqrt{2m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega t} dt \right|^2 = \frac{\pi F^2 \tau^2}{2m\omega} e^{-\omega^2 \tau^2/2} \quad (5.36)$$

Требуя малость поправки, мы приходим к выводу, что теория возмущений работает по параметру $F^2 \tau^2 / m\omega \ll 1$ либо $\omega \tau \gg 1$.

Чтобы найти вероятность перехода во второе возбуждённое состояние, первого порядка теории возмущений недостаточно, и нужно решить уравнение (5.32) точнее. Во втором приближении, получаем:

$$\partial_t \psi_2^{(2)}(t) = -i \int_{-\infty}^t d\tau_1 V_{21}^{(I)}(\tau_1) \psi_1^{(1)}(\tau_1) = (-i)^2 \int_{-\infty}^t d\tau_1 V_{21}^{(I)}(\tau_1) \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 V_{10}^{(I)}(\tau_2), \quad (5.37)$$

а значит, искомая вероятность равна:

$$w_{0 \rightarrow 2} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 V_{21}(\tau_1) e^{i\omega \tau_1} \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 V_{10}(\tau_2) e^{i\omega \tau_2} \right|^2 = \frac{2F^4}{(2m\omega)^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 e^{-\tau_1^2/\tau^2 + i\omega \tau_1} \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\tau_2^2/\tau^2 + i\omega \tau_2} \right|^2 \quad (5.38)$$

Можно заметить, что стоящий тут интеграл равен половине такого же интеграла, но с бесконечными пределами $\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2$, благодаря чему мы можем сразу выписать для него результат:

$$w_{0 \rightarrow 2} = \frac{\pi^2 F^4 \tau^4}{8m^2 \omega^2} e^{-\omega^2 \tau^2} \quad (5.39)$$

Полученный результат оказался параметрически меньше $w_{0 \rightarrow 1}$, поскольку он связан со вторым порядком теории возмущений.

5.2.4 Золотое правило Ферми

Второй важный класс задач зависящей от времени теории возмущений — это вопрос об ионизации исходного состояния $|i\rangle$ (опять-таки, стационарного состояния невозмущённого гамильтониана) периодическим возмущением общего вида $\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t}$ (с каким-то произвольным оператором \hat{F} — вообще говоря, не обязательно эрмитовым; эрмитовость \hat{V} автоматически удовлетворяется). Такое возмущение будет индуцировать переходы между уровнями, и через конечное время t вероятность обнаружить частицу в состоянии $|i\rangle$ уже будет отлична от единицы. Как правило, эта вероятность спадает экспоненциально $P_i \propto e^{-t/\tau}$; и характеризуется так называемой скоростью распада (ionization rate) $1/\tau$. Поиском этой величины мы и зададимся.

Рассмотрим эволюцию амплитуды какого-то состояния $|f\rangle \neq |i\rangle$, в которое будут происходить переходы. Решая уравнение итеративно, с нулевым приближением $\psi_i^{(0)}(0) = 1$, мы в первом порядке получаем:

$$i \frac{\partial \psi_f^{(1)}(t)}{\partial t} = V_{fi}^{(I)}(t) \psi_i^{(0)}(t) = (F_{fi} e^{-i\omega t} + F_{if}^* e^{i\omega t}) e^{i\omega_f t} \quad (5.40)$$

$$\psi_f^{(1)}(T) = -i \int_0^T dt (F_{fi} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} + F_{if}^* e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}) = F_{fi} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)T}}{\omega_{fi} - \omega} + F_{if}^* \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)T}}{\omega_{fi} + \omega} \quad (5.41)$$

Исследуем структуру полученного выражения при больших временах $T \gg \omega_{fi}, \omega$. Исследуем, как устроено каждое из этих слагаемых:

$$\left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)T}}{\omega_{fi} \pm \omega} \right| = \frac{\sin[(\omega_{fi} \pm \omega)T/2]}{(\omega_{fi} \pm \omega)/2} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \pi \delta\left(\frac{\omega_{fi} \pm \omega}{2}\right) = 2\pi \delta(\omega_{fi} \pm \omega) \quad (5.42)$$

(эта функция быстро осциллирует на $|\omega_{fi} \pm \omega| \gtrsim T^{-1}$, поэтому в пределе получается дельта-функция; а значение коэффициента получается из того, что интеграл $\int d\omega \cdot \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega/2} = \pi$). Поэтому интерпретация следующая — переходы через большое время T происходят только в состояния, энергия которых отличается от энергии исходного на ω (на жаргоне, можно говорить об ионизации с **поглощением одного фотона**), либо $-\omega$ (что соответствует **испусканию фотона**). Из-за разнесения по энергиям, эти члены можно рассматривать совершенно независимо друг от друга, они существенно отличны от нуля для различных состояний $|f\rangle$.

Вероятность ионизации даётся $|\psi_f(T)|^2$. Буквально возводить дельта-функции в квадрат бессмысленно — получается бесконечность. Это разумно, ведь мы ожидаем, что количество таких переходов, вообще говоря, будет пропорционально времени T (что соответствует линейному разложению экспоненциального закона распада $e^{-T/\tau} = 1 - T/\tau + \dots$), и в пределе $T \rightarrow \infty$ действительно должна получаться бесконечность (разумеется, теория возмущений работает только пока $T/\tau \ll 1$, подробнее обсудим это позднее). Имея это в виду, возведём выражение для $\psi_f(T)$ в квадрат, учитывая, что перекрёстные члены сильно осциллируют (а в пределе $T \rightarrow \infty$ превращаются в комбинацию $\delta(\omega_{if} + \omega)\delta(\omega_{if} - \omega) \equiv 0$) и потому вклада не дают:

$$|\psi_f(T)|^2 = |F_{fi}|^2 \left(\frac{\sin^2[(\omega_{fi} - \omega)T/2]}{[(\omega_{fi} - \omega)/2]^2} + \frac{\sin^2[(\omega_{fi} + \omega)T/2]}{[(\omega_{fi} + \omega)/2]^2} \right) \quad (5.43)$$

Опять-таки, на временах t (таких что $\omega t \gg 1$), $\frac{\sin^2 \omega t}{\omega^2}$ — узкая функция с пиком в $\omega = 0$, и должна быть заменена на дельта-функцию. Однако условие нормировки даёт $\int d\omega \frac{\sin^2 \omega t}{\omega^2} = \pi t$; из чего мы заключаем, что в этом случае замена делается согласно $\frac{\sin^2 \omega t}{\omega^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \pi t \delta(\omega)$. Получаем:

$$|\psi_f(T)|^2 \approx 2\pi T |F_{fi}|^2 (\delta(E_f - E_i - \omega) + \delta(E_f - E_i + \omega)) \quad (5.44)$$

Очень важное замечание заключается в следующем. Если имеется строгий резонанс — а именно, $|f\rangle$ является состоянием дискретного спектра, с энергией, отстоящей от энергии исходного состояния ровно на ω — то эта формула теряет смысл, правая часть обращается в бесконечность даже будучи поделённой на большое время T . Связано это с тем, что в действительности в такой ситуации будут происходить **осцилляции Раби** между парой резонансных состояний, которые обсуждались на первом семинаре⁷.

Однако, если переходы происходят в непрерывный спектр (конечное состояние $|f\rangle$ принадлежит непрерывному спектру), то формула (5.44) имеет смысл, будучи проинтегрирована по конечным состояниям. Меру такого интегрирования обозначают $d\nu_f$ (например, в отсутствие потенциала конечные состояния — плоские волны e^{ikx} и нужно интегрировать по k с мерой $d\nu_f = dk/(2\pi)$). В этом случае величина

$$dw_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) d\nu_f \quad (5.45)$$

(\hbar восстановлено по размерности) имеет смысл количества переходов в единицу времени в полосу состояний $d\nu_f$ непрерывного спектра. Эта формула носит название **золотого правила Ферми (Fermi Golden Rule)**. Подразумевается, что ее нужно проинтегрировать по состояниям⁸ $|f\rangle$, что даст конечную величину, определяющую вероятность ионизации в единицу времени, или время жизни состояния: $1/\tau_i = \int dw_{i \rightarrow f}$. Дельта-функция имеет смысл закона сохранения энергии, учитывающего поглощение или испускание фотона с энергией $\hbar\omega$.

Критерии применимости

Стоит обсудить критерии применимости полученного метода. С одной стороны, мы работаем в рамках теории возмущений, поэтому буквально устремить $T \rightarrow \infty$ некорректно — в рамках теории возмущений мы нашли число переходов T/τ_i , которое всё-таки должно быть маленьким: $T \ll \tau_i$. С другой стороны, мы заменяли различные осциллирующие члены на дельта-функцию, что корректно делать, только если масштаб «огibaющей», на которую эта дельта-функция домножается, больше масштаба самой дельта функции (который, как было сказано выше, имеет порядок T^{-1}). Роль «огibaющей» в выражениях играют матричные элементы F_{fi} ; таким образом, мы заключаем, что масштаб энергии, на которых меняются матричные элементы, обозначенный как Ω (разумеется, это относится и к самой частоте ω), должен соотноситься как $\omega, \Omega \gg 1/T$. Имеем, $1/\tau \ll 1/T \ll \omega, \Omega$, откуда следует, что золотое правило Ферми применимо, только если найденное время жизни удовлетворяет критерию $\boxed{\omega, \Omega \gg 1/\tau}$.

⁷В этом случае необходимо сначала взять предел $\omega_{fi} \pm \omega \rightarrow 0$ в формуле (5.43), тогда получится $|\psi_f(T)|^2 \propto T^2$, что соответствует разложению результата первого семинара $P_f = \sin^2 \Delta \cdot T$ на маленьких T .

⁸Имеет смысл также интегрировать не по всем конечным состояниям, а по какому-то подмножеству, содержащему ноль аргумента дельта-функции в (5.45). Например, так можно отдельно рассмотреть процессы с поглощением и испусканием фотона.

Для задач «в ящике» с конечным размером пространства L интеграл по конечным состояниям является приближением суммы. Пусть соседние уровни энергии отстоят друг от друга на величину порядка $\delta \sim 1/L^2$ (**level spacing**). Тогда заменять сумму на интеграл корректно, если масштаб δ много меньше всех энергетических масштабов в подынтегральном выражении (5.45), и даже много меньше ширины дельта-функции $1/T$. Таким образом, в этом случае (в отличие от случая строгого резонанса) переходы осуществляются одновременно в большое количество состояний вблизи пика уширенной дельта-функции $\delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega)$, отвечающей закону сохранения энергии.

Закон радиоактивного распада

Выше мы получили в первом порядке теории возмущений линейную зависимость вероятности остаться в связанном состоянии и интерпретируя ее как разложение настоящей экспоненциальной зависимости $P \propto \exp T/\tau$, нашли параметр $1/\tau$.

Экспоненциальную зависимость можно получить следующим способом. Разобьем процесс ионизации на небольшие отрезки размера $\delta T \ll \tau$, каждый из которых описывается золотым правилом Ферми. Ранее мы считали, что $|\psi_i|^2 = 1$, несложно видеть, что для произвольного ψ_i в $dw_{i \rightarrow f}$ войдет множитель $|\psi_i|^2$. Это позволяет написать дифференциальное уравнение $d|\psi_i|^2/dt = -(1/\tau_i)|\psi_i|^2$, которое допускает тривиальное решение — закон радиоактивного распада $|\psi_i(t)|^2 = e^{-t/\tau_i}$. При этом вычислении пренебрегалось обратными переходами из континуума в связанное состояние, и здесь совершенно неочевидно, почему можно так делать, ведь вероятность оказаться в континууме больше не является малой. Опустим здесь обсуждение этого вопроса.

Полученный результат допускает ещё одну интерпретацию: этот закон означает, что амплитуда (работая уже не в представлении взаимодействия) $\langle i|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_it - t/2\tau)$ — то есть результат интерпретируется как маленькая мнимая поправка к уровню энергии $E_i \mapsto E_i - \frac{i}{2\tau}$. Такая интерпретация естественным образом возникает при использовании аппарата функций Грина.

Переходы в непрерывном спектре

Полученная схема требует тривиальной модификации, если исходное состояние тоже находилось в непрерывном спектре, а возмущение постоянно ($\hat{V} = \text{const}$, $\omega = 0$) — к примеру, такая ситуация описывает задачу рассеяния. В таком случае оказывается, что формула устроена в точности также:

$$d\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f \quad (5.46)$$

(единственное отличие — что матричные элементы берутся от всего возмущения, а не от коэффициента перед экспонентой $e^{\pm i\omega t}$, как было ранее).

5.2.5 Пример: ионизация мелкой ямы

Рассмотрим мелкую одномерную яму под действием периодического электрического поля $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\kappa}{m} \delta(x) + e\mathcal{E}x \cos \omega t$. Пусть частица находилась в основном состоянии; требуется найти частоту переходов в состояния непрерывного спектра в однофотонном приближении.

Решение

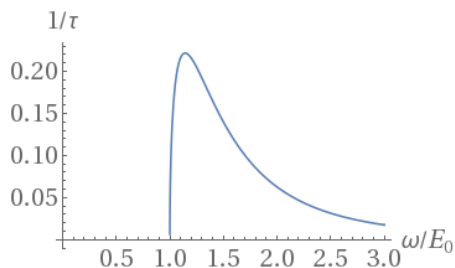
Задача эта — на буквальное применение золотого правила Ферми. Возмущение перепишем в виде $\hat{V} = \frac{1}{2}e\mathcal{E}x(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \Rightarrow \hat{F} = \frac{1}{2}e\mathcal{E}x$. Следуя логике, описанной в предыдущем семинаре, переходы из основного состояния $\psi_i(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}$ будут только в нечётные состояния непрерывного спектра $\psi_k^{(-)}(x) = \sin kx$, и для матричного элемента таких переходов можно просто взять ответ с прошлого семинара:

$$F_{fi} = 2e\mathcal{E} \frac{k\kappa^{3/2}}{(\kappa^2 + k^2)^2} \quad (5.47)$$

С учётом плотности состояний $d\nu_f = dk/\pi$, непосредственное применение золотого правила Ферми в таком случае даёт (тут учтено, что член $+\hbar\omega$, отвечающий испусканию фотона, отсутствует):

$$\frac{1}{\tau} = \int_0^\infty 2\pi |F_{fi}|^2 \delta\left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2m} - \omega\right) \frac{dk}{\pi} = \frac{2e^2\mathcal{E}^2}{m} \cdot \frac{E_0^{3/2} \sqrt{\omega - E_0}}{\omega^4} \quad (5.48)$$

Рис. 5.1: Зависимость вероятности однофотонной ионизации $1/\tau$ от частоты прикладываемого электрического поля (схематично)



Характерный масштаб изменения матричных элементов как функции энергии тут — это просто E_0 , поэтому теория возмущений работает только покуда $E_0\tau \gg 1$. Сам параметр достаточно нетривиален — скажем, поле \mathcal{E} вовсе не обязано быть маленьким (что, казалось бы, естественный параметр — глядя на гамильтониан) — оно может быть вполне конечным, если частота возмущения достаточно большая. Напротив, при $\omega \lesssim E_0$ данная формула даёт ноль, что не соответствует действительности: это огрехи однофотонного приближения. Разумеется, имеются также и **многофотонные процессы**, соответствующие старшим порядкам теории возмущений — хоть они и параметрически меньше (содержат величину электрического поля в большей степени) — но соответствуют поглощению энергии $n\omega$, и таким образом, дают отличный от нуля вклад уже при $\omega > E_0/\hbar$.

Глава 6

Адиабатическое приближение

6.1 Нестационарное адиабатическое приближение. Фаза Берри

6.1.1 Постановка задачи

Пусть гамильтониан системы **адиабатически** — очень медленно — меняется во времени, $\hat{H} = \hat{H}(t)$. Мы будем интересоваться тем, как устроены решения нестационарного уравнения Шрёдингера:

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (6.1)$$

В принципе, адиабатичность изменения параметров подразумевает предельный случай — параметры меняются бесконечно медленно. Естественно, в реальных задачах бесконечно медленно параметры менять невозможно, и поэтому всегда имеется некий характерный масштаб времени T , определяющий скорость изменения параметров, и адиабатичность означает, что этот масштаб времени — большой. Но с чем его нужно сравнивать? Для этого предлагается привлечь интуицию, приходящую от нестационарной теории возмущений. Если имеется возмущение, которое зависит от времени периодически, то имеются переходы между состояниями, причём состояния разнесены по энергии на ω — частоту этого возмущения. Всякое непериодическое возмущение, в свою очередь, можно расписать в интеграл Фурье и представить как комбинацию периодических; в нашем случае, характерные частоты преобразования Фурье определяются из соотношения неопределённостей, $\omega \sim 1/T$ (тем самым, частоты очень маленькие). Теперь можно более чётко сформулировать критерий адиабатичности — а именно, частоты должно быть недостаточно для обеспечения переходов, $\boxed{\omega \ll \Delta E \Rightarrow T \gg 1/\Delta E}$, где ΔE — типичное расстояние между соседними уровнями энергии системы, («level spacing»).

Вообще говоря, если гамильтониан зависит от времени, то его уровни энергии — вещь, как правило, бессмысленная. Однако, в случае с адиабатическим приближением, базис мгновенных собственных состояний гамильтониана оказывается удобным:

$$\hat{H}(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle. \quad (6.2)$$

Ещё раз подчеркнём, что $|n(t)\rangle$ ни в коем случае не являются решениями нестационарного уравнения Шрёдингера!

Пусть теперь в начальный момент времени $t = t_0$ мы «посадили» частицу в одно из собственных состояний гамильтониана $|\psi(t_0)\rangle = |n(t_0)\rangle$. Вышеприведённые рассуждения позволяют нам заключить, что в адиабатическом пределе $T \rightarrow \infty$, состояние системы в произвольный момент времени t будет $|\psi(t)\rangle \propto |n(t)\rangle$ (с точностью до фазового множителя) — то есть волновая функция будет следовать мгновенному состоянию данного гамильтониана. Это утверждение носит название **адиабатической теоремы**. Когда мы будем изучать квазиклассическое приближение, мы также покажем, что это утверждение напрямую связано с сохранением адиабатического инварианта в классической механике.

6.1.2 Адиабатический анзац

Подкрепим рассуждения, приведённые выше, конкретным вычислением, а также построим систематическое адиабатическое разложение по малому параметру. Поскольку мгновенные собственные состояния гамильтониана образуют базис, то предлагается искать волновую функцию в виде разложения по этому базису:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n(t)\rangle \Rightarrow i \sum_n (\partial_t \psi_n |n(t)\rangle + \psi_n \partial_t |n(t)\rangle) = \sum_n E_n(t) \psi_n(t) |n(t)\rangle \quad (6.3)$$

Если бы гамильтониан не зависел от времени, то есть $E_n(t) = \text{const}$ и $|n(t)\rangle = \text{const}$, то коэффициенты испытывали бы «быструю», но тривиальную эволюцию во времени: $\psi_n(t) = \exp(-iE_n t)$. В зависящем от времени случае предлагается эту «быструю» осциллирующую зависимость выделить явно, чтобы получить уравнение, содержащее только медленно меняющиеся во времени величины¹. Подстановка, которая это реализует, следующая:

$$\psi_n(t) = c_n(t) \cdot \exp\left(-i \int_{t_0}^t E_n(\tau) d\tau\right), \quad (6.4)$$

и написанный тут фазовый множитель носит название **динамической фазы**. Несложно видеть, что такая подстановка сокращает правую («быструю») часть уравнения. Проецируя теперь всё уравнение на бра-вектор $\langle n(t)|$, и пользуясь ортонормированностью мгновенного базиса, мы получаем:

$$i\partial_t c_n(t) = -i \sum_m \exp\left(i \int_{t_0}^t \omega_{nm}(\tau) d\tau\right) \langle n(t)| \partial_t |m(t)\rangle c_m(t), \quad \omega_{nm}(t) \equiv E_n(t) - E_m(t) \quad (6.5)$$

Правая часть уравнения мала — она содержит производные по времени мгновенного базиса, который меняется на больших временных масштабах $t \sim T$; поэтому это уравнение уже приспособлено для решения его методом последовательных приближений.

6.1.3 Переходы на другие состояния

Возвращаясь к исходной постановке вопроса, мы будем решать следующую задачу. Пусть в начальный момент времени мы находились в каком-то состоянии n , то есть $c_n(t_0) = 1$ и $c_{m \neq n}(t_0) = 0$. Сейчас мы будем интересоваться амплитудой перехода в другое состояние за конечное время $c_m(t)$.

Для оценки правой части уравнения (6.5) имеющийся «матричный элемент»² можно выразить, продифференцировав по времени уравнение (6.2) для состояния $|m(t)\rangle$, и спроецировав его на бра-вектор $\langle n(t)|$. Воспользовавшись затем соотношением ортогональности, мы получаем:

$$\langle n(t)| \partial_t \hat{H} |m(t)\rangle = \partial_t E_n \delta_{nm} + \omega_{mn}(t) \langle n(t)| \partial_t |m(t)\rangle \Rightarrow \langle n(t)| \partial_t |m(t)\rangle = -\frac{\langle n(t)| \partial_t \hat{H} |m(t)\rangle}{\omega_{nm}(t)}, \quad m \neq n \quad (6.6)$$

Полученное выражение уже явно содержит матричные элементы производной гамильтониана по времени, которая имеет порядок $\sim 1/T$. Поэтому мы заключаем, что весь этот матричный элемент должен содержать малость по $1/(\Delta E \cdot T) \ll 1$.

Рассматривая теперь ведущее приближение для $c_m(t)$, интегрируя уравнение (6.5), мы получаем:

$$c_m(T) \approx \int_{t_0}^T \exp\left(i \int_{t_0}^t \omega_{mn}(\tau) d\tau\right) \frac{\langle m(t)| \partial_t \hat{H} |n(t)\rangle}{\omega_{mn}(t)} dt \quad (6.7)$$

Это выражение, в действительности, представляет собой интеграл типа «медленная огибающая на быстроосциллирующий фактор». Такого рода интегралы, как правило, содержат экспоненциальную малость, что мы и продемонстрируем на примере следующей задачи.

6.1.4 Пример: Задача Ландау – Зенера

Поскольку параметр адиабатичности явно содержит level spacing, который, вообще говоря, зависит от времени — то мы заключаем, что больше всего переходы между различными состояниями будут происходить, когда какая-то пара уровней максимально сближаются; и переходы при этом будут происходить именно между этой парой уровней. Поэтому такую ситуацию можно сформулировать в достаточно общем виде как чисто двухуровневую задачу. Такая задача носит название задачи Ландау – Зенера, и описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} \alpha t & \gamma \\ \gamma & -\alpha t \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

Следуя логике адиабатического приближения, сперва требуется найти мгновенные собственные состояния такого гамильтониана. Они выражаются следующим образом:

¹Идеологически, проходящие тут вычисления похожи на вычисления из нестационарной теории возмущений

²Строго говоря, это не матричный элемент, поскольку «оператор» ∂_t не является оператором, действующим на Гильбертовом пространстве волновых функций.

$$E_+(t) = \sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2}, \quad |\psi_+(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(\gamma^2 + (\alpha t)^2 + \alpha t\sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2})}} \begin{pmatrix} \sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2} + \alpha t \\ \gamma \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

$$E_-(t) = -\sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2}, \quad |\psi_-(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(\gamma^2 + (\alpha t)^2 - \alpha t\sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2})}} \begin{pmatrix} \sqrt{\gamma^2 + (\alpha t)^2} - \alpha t \\ -\gamma \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

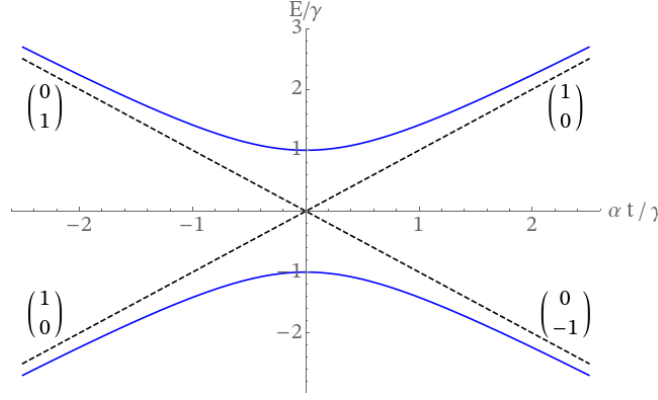


Рис. 6.1: Мгновенные уровни энергии гамильтониана Ландау-Зенера как функция времени. Прямые — асимптотика при $\alpha t \gg \gamma$

Для конкретно этой задачи, чтобы по максимуму избавиться от корней, удобно использовать параметризацию через гиперболический параметр $\alpha t = \gamma \sinh \theta$. В таком случае, эти выражения слегка упрощаются:

$$E_+(\theta) = \gamma \cosh \theta, \quad |\psi_+(\theta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cosh \theta}} \begin{pmatrix} e^{\theta/2} \\ e^{-\theta/2} \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

$$E_-(\theta) = -\gamma \cosh \theta, \quad |\psi_-(\theta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cosh \theta}} \begin{pmatrix} e^{-\theta/2} \\ -e^{\theta/2} \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

Пусть в момент времени $t \rightarrow -\infty$ ($\theta \rightarrow -\infty$), система находилась на нижней ветке, то есть $c_-(-\infty) = 1$ и $c_+(-\infty) = 0$. Мы же интересуемся вероятностью перейти на верхнюю ветку, $P = |c_+(\infty)|^2$, в результате адиабатического прохождения этого пересечения уровней.

Сразу выделим параметр адиабатичности. Если уровни находятся достаточно далеко по энергии, то переходов не будет — поэтому масштаб времени T , который входит в критерий адиабатичности, определяется из условия достаточной близости уровней: $\alpha T \sim \gamma \Rightarrow T \sim \frac{\gamma}{\alpha}$. С другой стороны, масштаб расстояния между уровнями при этом равен γ . Поэтому адиабатическое приближение соответствует случаю, когда $\gamma^2 \gg \alpha$.

Пользуясь формулой (6.7), мы можем сразу записать³ (используя параметризацию через θ):

$$c_+(\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(i \int_0^{\theta} \omega_{+-}(\theta) \frac{d\tau}{d\theta} d\theta \right) \frac{\langle \psi_+ | \partial_{\theta} \hat{H} | \psi_- \rangle}{\omega_{+-}(\theta)} d\theta \quad (6.13)$$

Входящие сюда величины равны:

$$\partial_{\theta} \hat{H} = \gamma \begin{pmatrix} \cosh \theta & 0 \\ 0 & -\cosh \theta \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \psi_+ | \partial_{\theta} \hat{H} | \psi_- \rangle = \gamma \quad (6.14)$$

$$\int_0^{\theta} \omega_{+-}(\theta) \cdot \frac{d\tau}{d\theta} d\theta = \frac{2\gamma^2}{\alpha} \int_0^{\theta} \cosh^2 \theta d\theta = \frac{\gamma^2}{\alpha} \left(\theta + \frac{1}{2} \sinh 2\theta \right) \quad (6.15)$$

и поэтому мы окончательно получаем следующий интеграл:

³Выбор нижнего предела интегрирования в экспоненте несущественен, поэтому тут мы положили его равным нулю. Действительно, изменение оно не модифицирует зависимость от времени всего подынтегрального выражения, а даёт лишь постоянный фазовый множитель, который можно вынести за знак интеграла.

$$c_+(+\infty) \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\theta}{2 \cosh \theta} \exp \left(i \frac{\gamma^2}{\alpha} \left(\theta + \frac{1}{2} \sinh 2\theta \right) \right) \quad (6.16)$$

Перед нами — классический пример интеграла вида «быстро-осциллирующая функция + медленная огибающая». Интегралы такого вида берутся методом стационарной фазы, или более общо — методом перевала⁴. В данном конкретном случае, фаза $f(\theta) = \theta + \frac{1}{2} \sinh 2\theta$ и $f'(\theta) = 1 + \cosh 2\theta \geq 2$, поэтому точек стационарной фазы на вещественной оси нет. Тут мы не будем гоняться за точностью оценки, а выделим лишь ведущую экспоненциальную асимптотику интеграла. Для этого мы можем сделать так, чтобы в экспоненте стояла линейная функция, перейдя к интегралу по $z = \theta + \frac{1}{2} \sinh 2\theta \Rightarrow dz = d\theta(1 + \cosh 2\theta) = 2 \cosh^2 \theta d\theta$, и переписав интеграл в виде:

$$c_+(+\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp \left(i \frac{\gamma^2}{\alpha} z \right)}{4 \cosh^3 \theta} dz \quad (6.17)$$

Теперь мы можем применить лемму Жордана, замкнув контур интегрирования в нижней полуплоскости (где экспонента затухает), и сведя его к вычетам в полюсах, которые определяются из уравнения $\cosh \theta = 0 \Rightarrow \theta_k = i\pi(1/2 + k) = z_k$. Беря только полюс с $k = 0$, и оставляя только экспоненту, мы получаем ответ:

$$c_+^{(1)}(+\infty) \sim \exp(-\pi\gamma^2/2\alpha) \Rightarrow \boxed{P \sim \exp(-\pi\gamma^2/\alpha)} \quad (6.18)$$

- Во-первых, ответ получился экспоненциально мал — что и обосновывает адиабатическое приближение. Действительно, переходы в другие состояния практически отсутствуют! Это — утверждение весьма общего характера — глядя на уравнение (6.5), мы понимаем, что поправка всегда будет устроена как быстро-осциллирующая функция (связанная с динамической фазой) + медленная огибающая (связанная с медленной зависимостью мгновенных стационарных волновых функций), а интегралы такого вида, как правило, действительно содержат экспоненциальную малость.
- Во-вторых, следует сделать комментарий по поводу того, почему мы не стали оценивать предэкспоненту. Дело в том, что если сделать вторую итерацию адиабатического приближения, то поправка окажется малой с той же экспонентой и не будет содержать малости по сравнению с первой. Это — достаточно неприятная ситуация. В данном случае это означает, что адиабатическое приближение позволяет правильно определить показатель экспоненты, но предэкспонента находится за пределами её точности.
- В-третьих, показатель экспоненты в более или менее общем виде можно определить, используя метод перевала. Действительно, для этого достаточно определить комплексную точку перевала, условие на которую, в действительности, очень просто: $\omega_{mn}(t_0) = 0$ (в нашем случае это соответствует $t = -i\frac{\gamma}{\alpha}$), и тогда вероятность перехода дастся интегралом⁵

$$\boxed{P \sim \exp \left(-2 \operatorname{Im} \int_{t_0}^{t_0} \omega_{mn}(t) dt \right)} \quad (6.19)$$

Более того, точно такое же выражение возникает при изучении вопроса о сохранении адиабатического инварианта в классической механике, что подчёркивает сходство этих двух задач.

- Наконец, задача Ландау-Зенера решается абсолютно точно и без адиабатического приближения⁶, и ответ в ней оказывается точно равен этой экспоненте: $P = \exp(-\pi\gamma^2/\alpha)$.

⁴Точная асимптотическая оценка величины стоящего тут интеграла (включающая в себя предэкспоненту) с помощью метода перевала — забавное математическое упражнение, и связано это с двумя фактами. Первый заключается в том, что перевальная точка $\theta_0 = -i\frac{\pi}{2}$ совпадает с полюсом подынтегральной функции. Второй — разложение в окрестности перевала начинается не с квадратичного члена вида $\frac{1}{2}f''(\theta_0)(\theta - \theta_0)^2$ — который, как несложно заметить, тоже зануляется — а с кубического, $\frac{1}{6}f^{(3)}(\theta_0)(\theta - \theta_0)^3$.

Оценку интеграла любопытному читателю предлагается проделать самому. Правильный ответ такой: $I(z) \approx \left[\frac{\pi}{3} + \frac{\Gamma(2/3)}{2^{8/3}3^{5/6}z^{2/3}} \right] e^{-\pi z/2}$ (где $z = \gamma^2/\alpha \gg 1$). Любопытно, что получаемая таким образом константа в предэкспоненте для перехода Ландау-Зенера $\frac{\pi^2}{9} \approx 1.096$, слабо отличается от правильного ответа — единицы.

⁵Двойка тут возникла от возведения амплитуды в квадрат, а мнимая часть — от взятия модуля амплитуды. Начальная точка интегрирования должна находиться в произвольной точке вещественной оси. Подробнее об этом можно прочитать в 3 томе, §53 «Переходы под влиянием адиабатических возмущений».

⁶Что требует, конечно, некоторой возни со спецфункциями — в данной задаче решение выражается через функции параболического цилиндра D_ν

6.1.5 Эволюция исходного состояния. Фаза Берри

Мы исследовали вопрос переходов под влиянием адиабатического изменения параметров гамильтониана в другие состояния — эволюцию коэффициентов $c_{m \neq n}$ и выяснили, что такие переходы экспоненциально редки; теперь перейдём к обсуждению эволюции самого коэффициента c_n . При этом достаточно очевидно, что ничего кроме «накручивания» фазы с коэффициентом происходить не может.

Итак, уравнение 6.5 с $m = n$ записывается и тривиально интегрируется:

$$\partial_t c_n = i c_n(t) \langle n(t) | i \partial_t | n(t) \rangle \Rightarrow c_n(t) = c_n(0) \exp(i \gamma_n(t)), \quad \gamma_n(t) \equiv \int dt \langle n(t) | i \partial_t | n(t) \rangle \quad (6.20)$$

Величина $\gamma(t)$ носит название **фазы Берри**. Исследуем полученный объект.

Во-первых, стоит убедиться, что это действительно фаза — а именно, что эта величина вещественная. Сделать это просто, дифференцируя условие нормировки мгновенных стационарных состояний:

$$0 = \partial_t \langle n(t) | n(t) \rangle = (\partial_t \langle n(t) |) | n(t) \rangle + \langle n(t) | \partial_t | n(t) \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle n(t) | \partial_t | n(t) \rangle \Rightarrow \langle n(t) | i \partial_t | n(t) \rangle \in \mathbb{R} \quad (6.21)$$

Во-вторых, мы можем рассмотреть случай, когда гамильтониан зависит не явно от времени, но зависит от какого-то конечного набора параметров $\mathbf{R} = \{R_i\}$: $\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{R})$, которые, в свою очередь, как-то меняются со временем — описывают некоторую траекторию $\mathbf{R}(t)$ в пространстве параметров. В свою очередь, мгновенные состояния гамильтониана тоже являются функциями этих параметров $|n\rangle = |n(\mathbf{R})\rangle$. Тогда выражение для фазы Берри можно переписать:

$$\gamma_n = \int_{t_0}^t \langle n(\mathbf{R}) | i \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} dt = \int_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \langle n(\mathbf{R}) | i \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \quad (6.22)$$

Это — криволинейный интеграл 2 рода. Величина $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ носит название **связности Берри** и является вектором, живущим в том-же пространстве параметров. В такой записи видно следующее немаловажное свойство: фаза Берри не зависит от того, *как именно* мы меняем параметры $\mathbf{R}(t)$ (от скорости движения вдоль этой траектории — лишь бы это изменение было адиабатически) — но зависит только от *самой траектории* в пространстве параметров. Из-за этого фундаментального свойства фазу Берри называют также **геометрической фазой**.

В-третьих, связность и фаза Берри не являются калибровочно-инвариантными величинами. Априори выбор фазы собственных состояний $|n(\mathbf{R})\rangle$ произволен — мы лишь требуем, чтобы оно было собственным для гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{R})$. Вместо набора состояний можно выбрать любой другой — $|\tilde{n}(\mathbf{R})\rangle = e^{i\varphi(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle$ (это называется калибровочным преобразованием); формулы для связности и фазы изменятся:

$$\tilde{\mathbf{A}}_n(\mathbf{R}) = \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{R}), \quad \tilde{\gamma}_n = \gamma_n - \varphi(\mathbf{R}_f) + \varphi(\mathbf{R}_i) \quad (6.23)$$

(где \mathbf{R}_f и \mathbf{R}_i — конечные и начальные точки траектории, по которым мы изменяем наши параметры).

Однако, есть важный случай циклических траекторий $\mathbf{R}_f = \mathbf{R}_i$ — тогда фаза Берри уже не зависит от выбора калибровки, и, вообще говоря, является физически измеримой величиной. Именно для циклических траекторий $\mathbf{R}(t)$ имеет смысл говорить о фазе Берри.

6.1.6 Пример: спин в магнитном поле

Классическая задача, на примере которой можно продемонстрировать концепцию фазы Берри — это задача о движении спина- $\frac{1}{2}$ в магнитном поле, которое медленно меняется во времени. Гамильтониан системы имеет следующий вид:

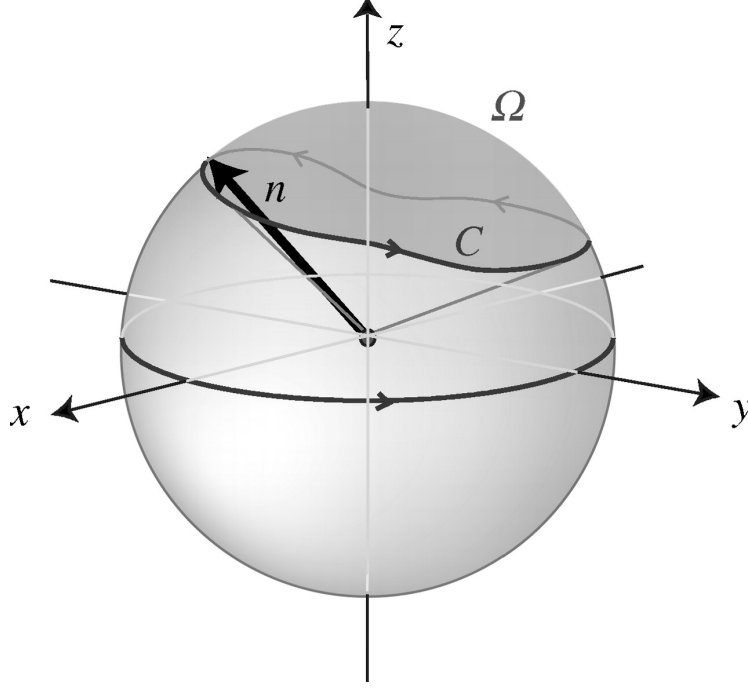
$$\hat{H}(\mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (6.24)$$

(где $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ — матрицы Паули). Рассмотрим состояние с энергией $E = +B$, которое соответствует спину, поляризованному вдоль поля. Если теперь поле заставить пройти замкнутый цикл (при этом наш спин адиабатически будет следить за полем, в силу адиабатической теоремы), то в конце мы получим исходное состояние. Изучим, как устроена фаза Берри для данной задачи.

Изучать её мы будем в сферических координатах: $\mathbf{B} = (B \sin \theta \cos \varphi, B \sin \theta \sin \varphi, B \cos \theta)$. Сперва нам требуется найти мгновенные собственные состояния гамильтониана:

$$\hat{H} = B \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} E_+ = +B, & |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ E_- = -B, & |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{cases} \quad (6.25)$$

Рис. 6.2: Замкнутая эволюция магнитного поля (и спина)



Ключевых параметра тут 2 — углы θ и φ (имеются в виду параметры, задающие вектор \mathbf{R} ; изменение длины B , как мы видим, на волновые функции не влияет никак). Поэтому у связности Берри будет две компоненты:

$$A_{\theta}^{(+)} = \langle \psi_+ | i\partial_{\theta} | \psi_+ \rangle = 0, \quad A_{\varphi}^{(+)} = \langle \psi_+ | i\partial_{\varphi} | \psi_+ \rangle = -\sin^2 \frac{\theta}{2} = -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \quad (6.26)$$

и поэтому для любой замкнутой эволюции фаза Берри будет иметь вид:

$$\boxed{\gamma_+ = -\frac{1}{2} \oint (1 - \cos \theta) d\varphi = -\frac{1}{2} \Omega} \quad (6.27)$$

В действительности же, этот интеграл в точности равен телесному углу, который заметает замкнутая траектория на единичной сфере. Проще всего это продемонстрировать в простом случае $\theta = \text{const} \Rightarrow \gamma = -\pi(1 - \cos \theta)$; в то время как телесный угол равен $2\pi(1 - \cos \theta)$. Это — демонстрация того факта, что фаза Берри является геометрической фазой, в данной задаче она определяется чисто геометрической характеристикой траектории. Сделаем ещё несколько замечаний:

- Телесный угол ориентирован — если изменить направление обхода контура, то поменяется и знак Ω .
- Можно выбрать как телесный угол «внутри» контура Ω , так и телесный угол «вне» контура, $4\pi - (-\Omega)$ — при этом знак Ω поменяется из-за неправильного направления обхода. Очевидно, что полученные фазы Берри отличаются на 2π — что не является большой проблемой, ведь это фаза.
- Этот результат достаточно просто обобщается на произвольный спин S (не $\frac{1}{2}$) и на состояние с произвольной проекцией $M \in [-S, S]$ на направление магнитного поля — ответ записывается как $\gamma_M = -M\Omega$. Поскольку M бывает либо полуцелым, либо целым, то проблем с неоднозначностью фазы не возникает.
- Утверждение про калибровочную инвариантность связности Берри можно тут продемонстрировать явно. Действительно, можно выбрать волновую функцию, скажем, в чуть ином виде:

$$|\tilde{\psi}_+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.28)$$

Это изменит и выражение для связности Берри:

$$\tilde{A}_{\varphi}^{(+)} = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta). \quad (6.29)$$

Однако выражение для интеграла от фазы *по замкнутому контуру* при этом не изменится (разумеется, по модулю 2π).

Наконец, отметим, что в современной физике конденсированного состояния к фазе Берри проявляется огромный интерес, связанный с её применениями при исследовании **топологических изоляторов**. В них фаза Берри играет ключевую роль, и именно в связи с ней эти вещества проявляют нетривиальные (топологические) свойства.

6.2 Стационарное адиабатическое приближение. Приближение Борна – Оппенгеймера

6.2.1 Постановка задачи

На прошлом семинаре обсуждалось решение квантомеханического уравнения Шрёдингера в ситуации, когда гамильтониан зависит от медленно меняющихся параметров. Теперь мы разберём ситуацию, когда эти медленно меняющиеся параметры сами представляют собой квантомеханические степени свободы, которые тоже необходимо рассматривать с точки зрения стационарного уравнения Шрёдингера. Как количественно выразить «медленность» или «быстроту» степеней свободы, будет разобрано ниже.

Итак, предположим, что в системе имеются «быстрые» степени свободы \mathbf{x}_f и «медленные» степени свободы \mathbf{x}_s , которые описываются квантомеханически. Гамильтониан представляет собой сумму гамильтониана быстрой подсистемы $\hat{H}_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{x})$ (куда включено в том числе и её взаимодействие с медленной), который зависит от конкретного положения медленной как от параметров, и гамильтониана медленной подсистемы:

$$\hat{H} = \hat{H}_s(\mathbf{x}_s) + \hat{H}_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_s) \quad (6.30)$$

Каноническим примером, для которого впервые был развит адиабатический метод, является задача о квантомеханическом описании молекулы. Молекула состоит из атомарных $\mathbf{x}_s = \{\mathbf{R}_i\}_{i=1}^{N_n}$ и электронных $\mathbf{x}_f = \{\mathbf{r}_i\}_{i=1}^{N_e}$ степеней свободы. Поскольку атомы в тысячи раз тяжелее электронов, то их движение (в том числе и в квантомеханическом смысле) — медленное, а движение электронов — быстрое. Для молекулы гамильтониан представляет собой сумму кинетических энергий всех атомов и электронов, а также попарных Кулоновских энергий взаимодействия. Разбиение гамильтониана в таком случае естественно следующее:

$$\hat{H}_s(\{\mathbf{R}_i\}) = \sum_{i=1}^{N_n} \frac{-\nabla_{\mathbf{R}_i}^2}{2M_i} + \sum_{i<j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (6.31)$$

$$\hat{H}_f(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_j\}) = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\nabla_{\mathbf{r}_i}^2}{2m} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=1}^{N_e} \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (6.32)$$

В применении к описанию молекулы, адиабатическое приближение носит также название **приближения Борна-Оппенгеймера**.

Другой канонический пример — это взаимодействие электронов с колебаниями решётки в металлах (электрон-фононное взаимодействие). При этом движение «электронов» является быстрым, а движение атомов — «медленным».

6.2.2 «Быстрые» и «медленные» подсистемы

Логика метода очень сильно перекликается с нестационарной адиабатикой, разобранной ранее. Если имеется сильное разделение временных масштабов, на которых «живут» различные подсистемы, то можно считать, что для «быстрой» подсистемы, «медленная» практически покоится. Поэтому разумно решать для неё стационарное уравнение Шрёдингера, считая положение быстрой системы просто как параметр (заглавными буквами мы будем обозначать квантовые числа «быстрой» подсистемы):

$$\hat{H}_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_s) |N(\mathbf{x}_s)\rangle = \varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s) |N(\mathbf{x}_s)\rangle \quad (6.33)$$

Таким образом мы находим полный набор состояний «быстрой» подсистемы $|N(\mathbf{x}_s)\rangle$ и набор уровней энергии $\varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s)$, при фиксированном положении «медленной» подсистемы. Теперь, следуя логике нестационарной адиабатики, если «медленная» подсистема будет испытывать движение, то «быстрая» будет следовать мгновенным уровням энергии. Таким образом, энергия $\varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s)$ выступит в роли **эффективного потенциала** для движения медленной подсистемы. После этого мы можем записать уравнение Шрёдингера для медленной подсистемы (квантовые числа которой мы будем обозначать маленькими буквами):

$$\left[\hat{H}_s(\mathbf{x}_s) + \varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s) \right] |n, N\rangle = E_{N,n} |n, N\rangle \quad (6.34)$$

и тем самым, завершив решение задачи. Результирующие уровни энергии в рамках этого приближения будут зависеть как от квантовых чисел быстрой системы N , так и от квантовых чисел медленной подсистемы n .

Чуть позже, при изучении квазиклассического приближения, мы увидим, что разница между соседними уровнями энергии связана с *классическим* периодом движения частиц как $\Delta E = \hbar\omega = 2\pi\hbar/T$. «Медленность» и «быстрота» подсистем, на классическом языке, означает что характерные периоды для «быстрой» и для «медленной» подсистем должны быть связаны соотношением $T_f \ll T_s$. Исходя из этих соображений мы можем заключить, что такое разделение переменных работает по следующему параметру:

$$\Delta E^{(f)} \gg \Delta E^{(s)}, \quad \Delta E^{(f)} \simeq E_{(N+1),n} - E_{N,n}, \quad \Delta E^{(s)} \simeq E_{N,(n+1)} - E_{N,n}, \quad (6.35)$$

где $\Delta E^{(f,s)}$ — характерное расстояние между уровнями энергии «быстрой» и «медленной» подсистем. Отсюда также видно, что если мы интересуемся низкоэнергетической физикой, то имеет смысл рассматривать «быструю» подсистему только в основном состоянии⁷.

6.2.3 Адиабатическое разделение переменных

Проведём теперь чуть более конкретные оценки. При любом фиксированном наборе координат медленной подсистемы $\{\mathbf{x}_s\}$, мы можем разложить волновую функцию по базису быстрой подсистемы (и сами коэффициенты разложения, в таком случае, тоже будут зависеть от $\{\mathbf{x}_s\}$):

$$\Psi_n(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_f) = \sum_N \psi_{Nn}^{(s)}(\mathbf{x}_s) \psi_N^{(f)}(\mathbf{x}_f, \{\mathbf{x}_s\}) \quad (6.36)$$

Если мы сделаем такую подстановку в полное уравнение Шрёдингера, и спроецируем его на произвольный бра-вектор $\langle N(\mathbf{x}_s)|$, то мы получим следующее уравнение:

$$\sum_M \hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) \psi_{Mn}^{(s)}(\mathbf{x}_s) + \varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s) \psi_{Nn}^{(s)}(\mathbf{x}_s) = E_{Nn} \psi_{Nn}^{(s)}(\mathbf{x}_s), \quad (6.37)$$

$$\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) = \langle N(\mathbf{x}_s) | \hat{H}_s(\mathbf{x}_s) | M(\mathbf{x}_s) \rangle = \int d\mathbf{x}_f \psi_N^{(f)*}(\mathbf{x}_f, \{\mathbf{x}_s\}) \hat{H}_s(\mathbf{x}_s) \psi_M^{(f)}(\mathbf{x}_f, \{\mathbf{x}_s\}), \quad (6.38)$$

Стоит отметить, что не смотря на внешнюю схожесть, $\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s)$ не является матричным элементом какого-то оператора — ведь функции $|N\rangle$ относятся к гильбертовому пространству быстрой подсистемы, а $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)$ — оператор, действующий на медленные степени свободы; поэтому $\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s)$ остаётся оператором, действующим на медленные степени свободы. С другой стороны, если оператор \hat{H}_s содержит вклады типа градиентов по \mathbf{x}_s , то он, вообще говоря, будет действовать и на волновые функции $|M(\mathbf{x}_s)\rangle$, просто как дифференцирование по соответствующему параметру — именно поэтому $\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s)$. Именно по этой причине, вообще говоря, $\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) \neq \hat{H}_s(\mathbf{x}_s) \delta_{NM}$.

Если, однако, зависимость функций $|M(\mathbf{x}_s)\rangle$ от параметров по какой-то причине слабая («медленная»), и мы можем по какой-то причине пренебречь действием $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)$ на $|M(\mathbf{x}_s)\rangle$, то мы в ведущем порядке можем заменить:

$$\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) \approx \hat{H}_s(\mathbf{x}_s) \delta_{NM} \quad (6.39)$$

что немедленно приводит нас к уравнению (6.34). В частности, эта зависимость заведомо отсутствует, если переменные разделяются. Поэтому такое приближение также называют **адиабатическим разделением переменных** — хоть в реальной задаче переменные могут и не разделяться точно, но могут разделяться приближённо. Чтобы продвинуться дальше, нам необходимо провести оценку и выяснить, насколько это приближение обосновано.

⁷ В частности, в применении к молекулам, где «быстрая» подсистема описывает электроны, первое возбуждённое состояние электронной подсистемы обладает настолько большой энергией, что молекула уже не может существовать как целое — происходит диссоциация, и атомы переходят в непрерывный спектр.

Переходы на другие состояния (оффдиагональные элементы)

Начнём с оценки «матричных элементов», соответствующих возбуждению «быстрой» подсистемы. Поступим в полной аналогии с нестационарной адиабатикой, когда мы оценивали выражение $\langle n | i\partial_t | m \rangle$; для этого рассмотрим матричный элемент следующего коммутатора:

$$\langle N(\mathbf{x}_s) | [\hat{H}_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_s), \hat{H}_s(\mathbf{x}_s)] | M(\mathbf{x}_s) \rangle \equiv \varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s) \hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) - \hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) \varepsilon_M^{(f)}(\mathbf{x}_s) \quad (6.40)$$

Опять подчеркнём, что $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)$ может содержать градиенты, действующие на \mathbf{x}_s , и в этом смысле может не коммутировать с $\varepsilon_N^{(f)}(\mathbf{x}_s)$. Мы можем учесть этот коммутатор и записать:

$$\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s) = \frac{\langle N(\mathbf{x}_s) | [\hat{H}_f(\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_s), \hat{H}_s(\mathbf{x}_s)] | M(\mathbf{x}_s) \rangle + [\hat{H}_{NM}(\mathbf{x}_s), \varepsilon_M^{(f)}(\mathbf{x}_s)]}{\omega_{NM}^{(f)}(\mathbf{x}_s)}, \quad \omega_{NM}^{(f)} = E_N^{(f)} - E_M^{(f)} \quad (6.41)$$

Не смотря на то, что нам не удалось явно выразить сам матричный элемент \hat{H}_{NM} , это выражение тем не менее демонстрирует, что этот матричный элемент будет мал в случае, если $\omega_{NM}^{(f)}$ в каком-то смысле большое. Эта оценка находится в согласии с выписанным ранее критерием, $\Delta E^{(f)} \gg \Delta E^{(s)}$.

Диагональные элементы

Как обсуждалось ранее, отличие диагональных элементов $\hat{H}_{NN}(\mathbf{x}_s)$ от $\hat{H}(\mathbf{x}_s)$ может возникать в случае, если $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)$ содержит операторы типа градиента по \mathbf{x}_s . Поэтому мы рассмотрим диагональный элемент на примере задачи о молекуле, где нетривиальный вклад будет возникать только от кинетической энергии, $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s) = \hat{p}_s^2/2M$ — и тогда нам нужно учесть поправки от дифференцирования «быстрой» волновой функции по «медленным» параметрам:

$$\hat{H}_{NN}(\mathbf{x}_s)\psi(\mathbf{x}_s) = \frac{1}{2M} (\hat{p}_s^2\psi(\mathbf{x}_s) - 2\langle N(\mathbf{x}_s) | i\nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle \hat{p}_s\psi(\mathbf{x}_s) - \langle N(\mathbf{x}_s) | \nabla_s^2 N(\mathbf{x}_s) \rangle \psi(\mathbf{x}_s)) \quad (6.42)$$

Первый член — это основной вклад, просто $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)\psi(\mathbf{x}_s)$. Второй вклад может показаться знакомым из нестационарной адиабатики — он соответствует связности Берри:

$$\mathbf{A}_N(\mathbf{x}_s) = \langle N(\mathbf{x}_s) | i\nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle \quad (6.43)$$

Последнее слагаемое можно слегка преобразовать, рассмотрев дивергенцию от связности Берри:

$$-i\nabla_s \mathbf{A}_N(\mathbf{x}_s) \equiv \langle \nabla_s N(\mathbf{x}_s) | \nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle + \langle N(\mathbf{x}_s) | \nabla_s^2 N(\mathbf{x}_s) \rangle \quad (6.44)$$

В первом слагаемом мы можем вставить разложение единицы по базису из «быстрой» подсистемы и записать:

$$\langle N(\mathbf{x}_s) | \nabla_s^2 N(\mathbf{x}_s) \rangle = -i\nabla_s \mathbf{A}_N(\mathbf{x}_s) - \sum_K \langle \nabla_s N(\mathbf{x}_s) | K(\mathbf{x}_s) \rangle \langle K(\mathbf{x}_s) | \nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle \quad (6.45)$$

Наконец, мы можем выделить из суммы слагаемое с $K = N$, которое, соберётся в квадрат связности Берри:

$$\langle N(\mathbf{x}_s) | \nabla_s^2 N(\mathbf{x}_s) \rangle = -i\nabla_s \mathbf{A}_N(\mathbf{x}_s) + \mathbf{A}_N^2(\mathbf{x}_s) + \sum_{K \neq N} |\langle K(\mathbf{x}_s) | \nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle|^2 \quad (6.46)$$

Окончательно, все члены со связностью Берри собираются просто в следующую комбинацию:

$$\hat{H}_{NN}(\mathbf{x}_s) = \frac{(\hat{p}_s - \mathbf{A}_N(\mathbf{x}_s))^2}{2M} + \frac{1}{2M} \sum_{K \neq N} |\mathbf{A}_{NK}(\mathbf{x}_s)|^2, \quad \mathbf{A}_{NK}(\mathbf{x}_s) = \langle K(\mathbf{x}_s) | i\nabla_s N(\mathbf{x}_s) \rangle$$

Поэтому главное отличие $\hat{H}_{NN}(\mathbf{x}_s)$ от $\hat{H}_s(\mathbf{x}_s)$ заключается в том, что «быстрые» степени свободы приводят к появлению связности Берри, а также к ещё небольшой добавке к эффективному потенциалу. Связность Берри входит как обычный электромагнитный векторный потенциал, и, по аналогии с электромагнетизмом, может соответствовать какому-то «магнитному полю» (описывать случай с ненулевой кривизной). В таком случае она вполне может давать заметный вклад в эффективное уравнение Шрёдингера для медленных степеней свободы.

Результат

Подытожим, что же мы получили.

1. Рецепт следующий: мы фиксируем положение медленной подсистемы, решаем задачу для быстрой. Энергию, зависящую от положения медленной подсистемы, мы подставляем в стационарное уравнение Шрёдингера для медленной подсистемы, и решаем его.
2. Основные поправки происходят от возбуждений более высокоэнергетичных состояний быстрой подсистемы (пренебрежение $\hat{H}_{N \neq M}(\mathbf{x}_s)$), и малы по параметру $\Delta E^{(f)} \gg \Delta E^{(s)}$.
3. Кроме того, поправки происходят и от диагональных элементов $\hat{H}_{nn}(\mathbf{x}_s)$, приводят к дополнительной малой поправке к потенциальной энергии (по тому же параметру) и возникновению кривизны Берри в эффективном уравнении Шрёдингера для медленной подсистемы.

6.2.4 Пример: адиабатический квантовый транспорт

Представим себе длинную двумерную полосу, ширина которой $a(x)$ как-то медленно зависит от координаты x . Такая задача имеет важные применения — буквально такие системы умеют создавать экспериментаторы, занимающиеся наноинженерией (см. схему).

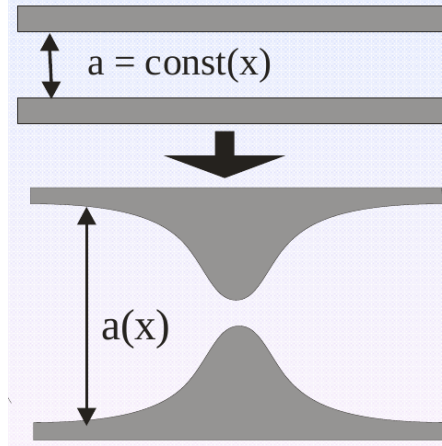


Рис. 6.3: Адиабатический квантовый транспорт

Если бы ширина не изменялась, то переменные разделялись бы, и точное решение гамильтониана представлялось бы в виде $\psi_{N,p}(x, y) = e^{ipx} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi N}{a}\left(y - \frac{a}{2}\right)\right)$ (если стенка соответствует $y \in (-\frac{a}{2}; \frac{a}{2})$); энергия такого состояния равнялась бы $E_{N,p} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\pi^2 N^2}{2ma^2}$. Когда ширина как-то плавно зависит от координаты x , то мы можем применить адиабатическое приближение. В данной задаче, «быстрая» подсистема соответствует поперечному движению; поэтому мы в первую очередь должны зафиксировать координату x и решить задачу для быстрой подсистемы. Решение записывается тривиально:

$$\psi_N^{(f)}(y, x) = \sqrt{\frac{2}{a(x)}} \sin\left[\frac{\pi N}{a(x)}\left(y - \frac{a(x)}{2}\right)\right], \quad \varepsilon_N^{(f)}(x) = \frac{\pi^2 N^2}{2ma^2(x)}$$

В результате для оставшегося эффективного одномерного движения мы можем записать эффективный гамильтониан:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(s)} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\pi^2 N^2}{2ma^2(x)} \quad (6.47)$$

Дальше можно уже работать с этим гамильтонианом — к примеру, интересна задача рассеяния, когда электрон запускают с фиксированной энергией E с $x \rightarrow -\infty$, и интересуются, с какой вероятностью он пройдёт через такое сужение. Однако решение оставшейся одномерной задачи (скажем, когда $a(x)$ задано явно) уже производится другими методами, которые обсуждаются в других семинарах, поэтому на этом мы остановимся.

В данной задаче адиабатическое приближение, как всегда, будет работать, покуда не будут возбуждаться другие поперечные моды. Это будет верно, если потенциал плавный и не может передать частице импульс порядка $\delta p \sim \frac{1}{a}$ — а значит, масштаб типичного изменения величины $a(x)$ должен быть меньше самой величины $a(x)$: $da/dx \ll 1$.

6.2.5 Пример: свободная частица в эллипсе

Пусть свободная частица помещена в сильно вытянутый эллипс $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$, $a \gg b$. Мы будем интересоваться низколежащими уровнями энергии в такой задаче. Отметим, что мы уже решали такую задачу для частицы в круге $a = b$, а также в случае, если круг слегка деформирован $\epsilon = \frac{|a-b|}{a} \ll 1$.

Решение Типичный энергетический масштаб поперечного движения (вдоль y) — это $E^{(f)} \sim \frac{1}{mb^2}$, большая величина; из этого мы заключаем, что поперечное движение — быстрое, а продольное — медленное. Как и в предыдущем примере, мы сразу можем записать эффективный гамильтониан для движения вдоль оси x (отличие в том, что теперь $y \in (-y(x), y(x))$):

$$\psi_N^{(f)}(y, x) = \frac{1}{\sqrt{y(x)}} \sin \left[\frac{\pi N y}{2y(x)} (y - y(x)) \right], \quad \varepsilon_N^{(f)} = \frac{\pi^2 N^2}{8m y^2(x)} \Rightarrow \hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\pi^2 N^2}{8m y^2(x)} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\pi^2 N^2}{8mb^2} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)^{-1} \quad (6.48)$$

Для нахождения низколежащих уровней энергии в таком потенциале в пределе $a \gg b$ можно воспользоваться осцилляторным приближением — а именно, разложить потенциал по $x \ll a$. Полученный потенциал соответствует осциллятору с частотой $\omega_N = \frac{\pi N}{2mab}$. Из этого мы заключаем, что уровни энергии можно приближённо записать как:

$$E_{N,n} = \frac{\pi^2 N^2}{8mb^2} + \frac{\pi N}{2mab} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (6.49)$$

Отметим, что типичное расстояние между «быстрыми» подуровнями оценивается как $\Delta E^{(f)} \sim \frac{1}{mb^2}$, а между «медленными» — как $\Delta E^{(s)} = \omega \sim \frac{1}{mab}$, и несложно видеть, что $\Delta E^{(f)} \gg \Delta E^{(s)}$, поэтому адиабатическое приближение оправдано. В этом смысле, для буквально низколежащих уровней энергии необходимо положить $N = 1$.

Второе, что необходимо проверить — что разложение по x/a тоже было законным. Движение вдоль оси x в нашем решении соответствует осциллятору, у которого масштаб волновой функции — это $x_0 \sim \frac{1}{\sqrt{m\omega}} = \sqrt{ab} \ll a$ — поэтому это приближение тоже работает.

Наконец, отметим, что такую же задачу можно было бы поставить и в классической механике, в которой частицу с фиксированным импульсом запускают в такой эллиптический бильярд. В таком случае уже с классической точки зрения, поперечное движение было бы быстрым (это означает, что прежде чем x -компонента импульса поменяет знак, произойдёт огромное количество столкновений вдоль оси y), а вдоль оси x частица бы испытывала практически гармонические колебания.

6.2.6 Пример: конус в поле тяжести (*)

Разберём также третий пример. Трёхмерный конус помещён в поле тяжести g как показано на рисунке. Требуется, опять-таки, найти низколежащие уровни энергии в случае, если угол раствора конуса мал $\alpha \ll 1$.

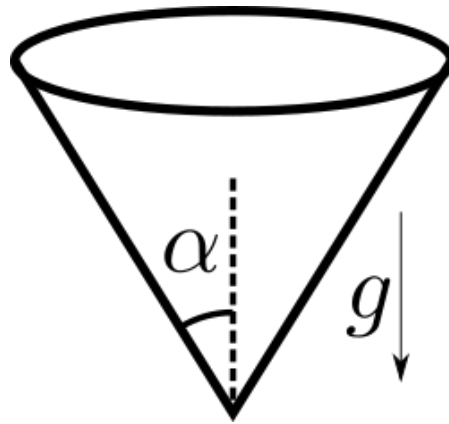


Рис. 6.4: Конус в поле тяжести

В этой задаче имеется противоборство двух эффектов. С одной стороны, сила тяжести норовит «запихнуть» нашу частицу в самую вершину конуса. С другой — соотношение неопределённости Гейзенберга этому препятствует, ведь для

локализации электрона необходимо «заплатить» большую кинетическую энергию. В результате электрон типично окажется на каком-то конечном расстоянии от вершины, которое определяется балансом этих двух эффектов. В данной задаче, опять-таки, поперечное двумерное движение — быстрое, и волновые функции для него даются функциями Бесселя (см. семинар 5); в свою очередь, уровни энергии определяются нулями функции Бесселя, которые в конечном итоге войдут и в ответ. Приведём в этой задаче оценки на буквенные параметры; а восстановить численные зависимости любопытный читатель сможет дома. Такого рода оценки всегда полезно проводить перед тем, как приступать к решению задачи — просто чтобы понять, каким методом к задаче подступиться.

Итак, энергия поперечного движения оценивается как $\varepsilon^{(f)}(z) \sim \frac{1}{mR^2(z)} = \frac{1}{m\alpha^2 z^2}$. Поэтому для эффективного движения вдоль оси z потенциальная энергия устроена как

$$U_{\text{эф}}(z) \sim \frac{1}{m\alpha^2 z^2} + mgz \quad (6.50)$$

Мы опять попробуем применить осцилляторное разложение; тогда у энергии имеется минимум z_0 , положение которого (по порядку) определяется из равенства двух вкладов:

$$\frac{1}{m\alpha^2 z_0^2} \sim mgz_0 \Rightarrow z_0 \sim (m\alpha)^{-2/3} g^{-1/3} \quad (6.51)$$

(обратим внимание, что эта величина — большая, в меру малости угла $\alpha \ll 1$!). Частота осциллятора определяется из второй производной, что даёт нам

$$m\omega^2 \sim \frac{1}{m\alpha^2 z_0^4} \sim \frac{mg}{z_0} \Rightarrow \omega \sim \sqrt{\frac{g}{z_0}} = (m\alpha)^{1/3} g^{2/3} \quad (6.52)$$

Опять-таки, убедимся, что адиабатика тут применима приближение работает — для этого мы должны сравнить частоту с типичной энергией поперечного движения (которая по порядку, опять таки, совпадает со значением потенциальной энергии в минимуме $\sim U_{\text{эф}}(z_0)$):

$$\frac{\omega_s}{\omega_f} = \frac{\omega}{1/mR^2(z_0)} \sim \frac{(m\alpha)^{1/3} g^{2/3}}{m^{1/3} g^{2/3} \alpha^{-2/3}} \sim \alpha \ll 1 \quad (6.53)$$

Кроме того, стоит сделать и оценку осцилляторной волновой функции — убедиться, что и осцилляторное приближение работает — в этом можно сомневаться, ведь частота оказалась маленькой — а значит, волновая функция, вообще говоря, широкая:

$$\delta z \sim \frac{1}{\sqrt{m\omega}} = m^{-2/3} g^{-1/3} \alpha^{-1/6} \quad (6.54)$$

Тем не менее, эта величина оказывается малой по сравнению с z_0 , поэтому осцилляторное приближение всё-таки применимо:

$$\frac{\delta z}{z_0} \sim \alpha^{1/2} \ll 1 \quad (6.55)$$

Из приведённых рассуждений, мы заключаем, что низколежащие уровни энергии устроены как:

$$E_n = \#mg^{2/3}\alpha^{-2/3} + \#(m\alpha)^{1/3}g^{2/3}\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (6.56)$$

Единственное, что мы не определили — это правильные числа, которые в приведённой формуле обозначены решётками. Оставим это в качестве домашнего упражнения.

Глава 7

Квазиклассическое приближение

7.1 Квазиклассические волновые функции

Квазиклассическое приближение — полезный и мощный метод, который используется в решении большого количества задач. Он хорошо работает в том случае, когда характерное действие для системы много больше постоянной Планка \hbar и позволяет находить вид волновых функций, матричных элементов, и пр.

Последовательный вывод вида волновых функций — метод WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) — сводится к следующей процедуре. В одномерное уравнение Шрёдингера делается подстановка $\psi(x) = e^{\pm iS(x)/\hbar}$; и дальше методом последовательных приближений строится формальный асимптотический ряд для «действия» $S(x)$ по степеням \hbar .

В ведущем порядке для действия мы получаем уравнение, известное из механики — уравнение Гамильтона-Якоби¹:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U(x) = E \Rightarrow S(x) = \int_{x_0}^x p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (7.1)$$

Решения этого уравнения буквально соответствуют классическому действию как функции координат. Однако, несложно заметить, что волновые функции в ведущем приближении «плохие» — они нарушают унитарность. Действительно, если вычислить поток на такой волновой функции, мы получим $j(x) = \hbar p(x)/m$ — а в стационарных состояниях этот поток обязан не зависеть от координат. Поэтому необходим учёт следующего порядка, который восстанавливает унитарность. Тем самым, общий вид волновой функции в квазиклассическом приближении имеет вид (тут и дальше мы положили $\hbar = 1$):

$$\boxed{\psi_{\pm}(x) = \frac{e^{\pm i \int_{x_0}^x p(x) dx}}{\sqrt{p(x)}}, \quad \psi(x) = c_+ \psi_+(x) + c_- \psi_-(x)} \quad (7.2)$$

Квазиклассически запрещённая область Буквально написанное выше относилось к классически разрешённой области — $U(x) \leq E$. Однако, покуда критерии применимости квазиклассического приближения выполнены, его можно также применять и к запрещённой области $U(x) > E$ — в них импульс становится мнимым, а решения — экспоненциально растущими или затухающими:

$$\boxed{\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \int_{x_0}^x |p(x)| dx}, \quad |p(x)| = \sqrt{2m(U(x) - E)} \quad (7.3)$$

Критерии применимости Формальная процедура разложения по степеням \hbar говорит нам, что квазиклассическое приближение применимо при $\hbar \rightarrow 0$. Однако \hbar является размерным параметром и сама по себе не может выступать в роли малого параметра. Если аккуратно проследить за выводом, то правильным критерием оказывается *плавность потенциала*:

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| \ll p^2 \Leftrightarrow \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \Leftrightarrow m \left| \frac{\partial U / \partial x}{p^3} \right| \ll 1. \quad (7.4)$$

Этот критерий означает, что характерный масштаб изменения потенциала должен быть меньше (локальной) длины волны де Бройля.

¹Это утверждение относится к пространству произвольной размерности

В частности это означает, что квазиклассика, как правило, применима на больших энергиях; а также, что немаловажно, она нарушается вблизи квазиклассических точек остановки, в которых квазиклассический импульс обращается в ноль, а длина волны — в бесконечность.

7.2 Задача сшивки

В одномерии, квазиклассические точки остановки нарушают связность задачи. Мы приходим к следующей картинке — вещественная ось разделяется квазиклассическими точками остановки на несколько областей, в каждой из которых волновые функции имеют вид (7.2) или (7.3), причём в каждой — со своими коэффициентами. С другой стороны, между этими коэффициентами, в силу линейности уравнения Шрёдингера, должна существовать линейная связь. Нахождение этой линейной связи и составляет задачу сшивки.

Задача сшивки существенно зависит от явного вида области, где нарушается квазиклассическое приближение. Простейший случай, который мы разберём — это случай, когда потенциал в окрестности точки остановки $x = x_0$ можно аппроксимировать линейным² $U(x) = F(x - x_0)$. Основная идея метода заключается в следующем. С одной стороны, на достаточном отдалении от точки остановки (а именно, $|x - x_0| \gg (mF)^{-1/3}$) квазиклассическое приближение начинает работать. С другой стороны, в линейном потенциале имеется точное решение — функции Эйри. Поэтому, покуда линейное приближение работает ($|x - x_0| \ll a$, где a — масштаб изменения потенциала), мы знаем вид волновых функций. Если эти области перекрываются (что означает $a \gg (mF)^{-1/3}$), имеется промежуточная область, где работает как квазиклассическое приближение, так и аппроксимация с помощью функций Эйри. «Подшивая» асимптотики в этой промежуточной области слева и справа от точки остановки, мы найдём искомую линейную связь.

Квазиклассические решения Обезразмерим координату³ $z = (2mF)^{1/3}(x - x_0) \Rightarrow p(z) = \sqrt{-z}$. В квазиклассически разрешённой области, имеем:

$$x < x_0 \Rightarrow z < 0: \quad p(z) = \sqrt{-z}, \quad S(z) = \int_0^z p(z) dz = -\frac{2}{3}(-z)^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{(-z)^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}i(-z)^{3/2}\right) \quad (7.5)$$

С другой стороны точки остановки мы получаем:

$$x > x_0 \Rightarrow z > 0, \quad |p(z)| = \sqrt{z}, \quad \tilde{S}(z) = \int_0^z |p(z)| dz = \frac{2}{3}z^{3/2} \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}z^{3/2}\right) \quad (7.6)$$

Точные решения С другой стороны, аналогично обезразмеренное уравнение Шрёдингера в линейном потенциале и его решение имеет вид:

$$-\psi''(z) + z\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) = C_1 \text{Ai}(z) + C_2 \text{Bi}(z) \quad (7.7)$$

$$\text{Ai}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z < 0. \end{cases}, \quad \text{Bi}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z < 0 \end{cases} \quad (7.8)$$

Мы сразу получаем, эти решения соответствуют следующим линейным комбинациям квазиклассических решений (7.2) и (7.3):

$$\psi(z) = 2\sqrt{\pi} \text{Ai}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ &= 0 \\ c_{\text{right}}^- &= 1 \\ c_{\text{left}}^+ &= e^{i\pi/4} \\ c_{\text{left}}^- &= e^{-i\pi/4} \end{cases}, \quad \psi(z) = \sqrt{\pi} \text{Bi}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ &= 1 \\ c_{\text{right}}^- &= 0 \\ c_{\text{left}}^+ &= \frac{e^{-i\pi/4}}{2} \\ c_{\text{left}}^- &= \frac{e^{i\pi/4}}{2} \end{cases} \quad (7.9)$$

из чего мы заключаем о следующей линейной связи на коэффициенты:

²Это, разумеется, не всегда так. Наиболее важные примеры, когда это не так:

- Имеются две параметрически близкие точки остановки (например, основное состояние гармонического осциллятора)
- Потенциал имеет сингулярность (например, трёхмерный «центробежный потенциал» $U(r) = \frac{l(l+1)}{2mr^2}$ или Кулоновский потенциал $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ в начале координат)

³Импульс тоже необходимо обезразмерить так, чтобы действие осталось инвариантным $p(x)dx = p(z)dz$

$$\begin{pmatrix} c_{\text{left}}^+ \\ c_{\text{left}}^- \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} c_{\text{right}}^+ \\ c_{\text{right}}^- \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4}/2 & e^{i\pi/4} \\ e^{i\pi/4}/2 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

Второй случай Аналогичным образом можно рассмотреть зеркально симметричный случай $U(x) = -F(x - x_0)$, когда разрешённая и запрещённая область меняются местами. В таком случае решения ψ_{\pm} устроены следующим образом:

$$x > x_0 \Rightarrow z > 0, \quad p(z) = \sqrt{z}, \quad S(z) = \int_0^z p(z) dz = \frac{2}{3} z^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3} i z^{3/2}\right), \quad z > 0 \quad (7.11)$$

$$x < x_0 \Rightarrow z < 0, \quad |p(z)| = \sqrt{-z}, \quad \tilde{S}(z) = \int_0^z |p(z)| dz = -\frac{2}{3} (-z)^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{(-z)^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3} (-z)^{3/2}\right) \quad (7.12)$$

Ситуация зеркальная, поэтому решения даются $\text{Ai}(-z)$ и $\text{Bi}(-z)$; они раскладываются по квазиклассическим функциям следующим образом:

$$\text{Ai}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right), & z > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & z < 0. \end{cases}, \quad \text{Bi}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} z^{3/2}\right), & z > 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} (-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} (-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z < 0 \end{cases} \quad (7.13)$$

$$\psi(z) = 2\sqrt{\pi} \text{Ai}(-z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ &= 1 \\ c_{\text{right}}^- &= 0 \\ c_{\text{left}}^+ &= e^{-i\pi/4} \\ c_{\text{left}}^- &= e^{i\pi/4} \end{cases}, \quad \psi(z) = \sqrt{\pi} \text{Bi}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ &= 0 \\ c_{\text{right}}^- &= 1 \\ c_{\text{left}}^+ &= \frac{e^{i\pi/4}}{2} \\ c_{\text{left}}^- &= \frac{e^{-i\pi/4}}{2} \end{cases} \quad (7.14)$$

$$\begin{pmatrix} c_{\text{left}}^+ \\ c_{\text{left}}^- \end{pmatrix} = \hat{B} \begin{pmatrix} c_{\text{right}}^+ \\ c_{\text{right}}^- \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4}/2 \\ e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4}/2 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{i\pi/4} & \frac{1}{2} e^{-i\pi/4} \\ e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \hat{A}^\dagger \quad (7.15)$$

7.3 Пример: правило квантования Бора – Зоммерфельда

Рассмотрим простейший пример квантовой ямы с двумя точками остановки и обсудим связанные состояния в таком потенциале.

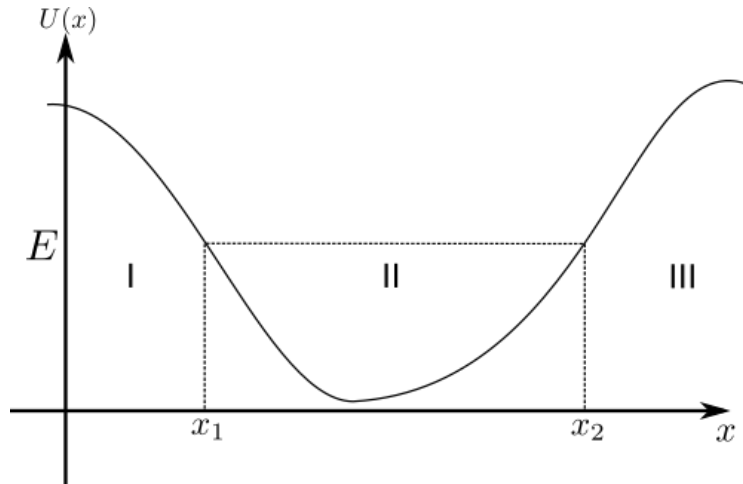


Рис. 7.1: Схематическое изображения потенциала для задачи о связанных состояниях

Имеется небольшой нюанс. Правила шивки были выведены для случая, когда действие в формулах (7.2) и (7.3) было записано от точки остановки. Тем самым, в области II нам будет необходимо записать волновую функцию в виде интеграла как от левой точки остановки, так и от правой, и соответствующие коэффициенты c_{\pm} будут связаны тривиальной

трансфер-матрицей:

$$\psi_{II} \simeq \vec{c}_{II} e^{i \int_{x_2}^x p(x) dx} + \vec{c}_{II} e^{-i \int_{x_2}^x p(x) dx} \equiv \vec{c}_{II} e^{-iS} e^{i \int_{x_1}^x p(x) dx} + \vec{c}_{II} e^{iS} e^{-i \int_{x_1}^x p(x) dx}, \quad S = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \quad (7.16)$$

$$\overleftarrow{c}_{II} = \hat{S}_{12} \vec{c}_{II} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix} \vec{c}_{II} \quad (7.17)$$

В области III, волновая функция должна экспоненциально затухать; поэтому мы накладываем граничное условие $c_{III} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Сшивая в окрестности точки остановки x_2 , мы понимаем, что в области II, волновая функция устроена как $\vec{c}_{II} = \hat{A} c_{III}$. Наконец, используя сшивку в окрестности точки остановки $x = x_1$, мы получаем:

$$c_I = \hat{A}^\dagger \overleftarrow{c}_{II} = \hat{A}^\dagger \hat{S}_{12} \hat{A} c_{III} = \begin{pmatrix} \sin S \\ 2 \cos S \end{pmatrix} \quad (7.18)$$

Для связанного состояния, волновая функция в области I также экспоненциально затухает, поэтому $c_I^- = 0 \Rightarrow \cos S = 0$. Таким образом, уровни энергии определяются из следующего выражения, которое носит название **правила квантования Бора-Зоммерфельда**:

$$\boxed{\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (7.19)$$

Обсудим дополнительно несколько его свойств.

- Его можно применять только для высоковозбуждённых уровней $n \gg 1$.
- Член $1/2$, хоть и мал по сравнению с n — но тем не менее законен; следующие члены разложения будут начинаться с $O(1/n)$. Кроме того, если проследить внимательно, этот член возник из различных фаз, которые были в задаче сшивки; этот член будет другим для других типов точек остановки. Поэтому часто записывают правило квантования в виде $\pi \hbar(n + \gamma)$ в правой части.
- Номер n тут в точности равен числу нулей квазиклассической волновой функции (которые могут быть только в разрешённой области), то есть полученная волновая функция описывает n -тое возбуждённое состояние.
- Для квантового гармонического осциллятора, правило квантования воспроизводит точный ответ $E = \hbar \omega(n + \frac{1}{2})$.
- Его можно переписать в следующем виде:

$$\oint p(x) dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (7.20)$$

что означает, что номер уровня связан с классическим адиабатическим инвариантом. В частности, сохранения адиабатического инварианта в классической механике и адиабатическая теорема в квантовой механике оказываются связаны посредством этой формулы.

- Об этой формуле можно думать так — если взять классическое фазовое пространство (p, x) , рассмотреть в нём поверхность постоянной энергии $E = H(p, x)$, то число состояний внутри этой поверхности будет даваться следующей формулой

$$N(E) = \iint \frac{d^d p d^d x}{(2\pi \hbar)^d} \theta(E - H(p, x)) \quad (7.21)$$

и эта формула обобщается на пространство произвольной размерности. В частности, говорят, что на одно квантовое состояние приходится ячейка $(2\pi \hbar)^d$ фазового пространства.

- Разницу между соседними уровнями энергии можно получить, разложив эту формулу по $\Delta E \equiv E_{n+1} - E_n$:

$$2\pi \hbar = \Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \Delta E \oint \frac{dx}{v} = \Delta E \cdot T \Rightarrow \Delta E = \frac{2\pi \hbar}{T} = \hbar \omega \quad (7.22)$$

где T — классический период движения, а $\omega = \frac{2\pi}{T}$ — его частота.

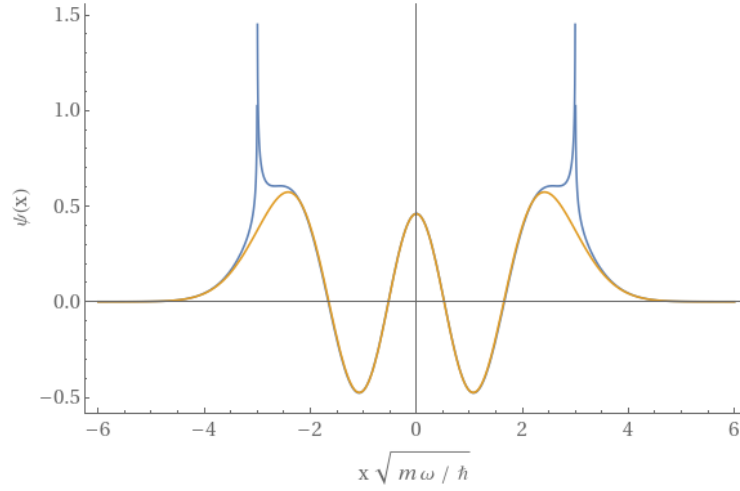


Рис. 7.2: Точная осцилляторная волновая функция и её квазиклассическое приближение для $n = 3$. Заметное отличие наблюдается только вблизи точек остановки.

7.4 Пример: вероятность квазиклассического туннелирования

Рассмотрим другое применение приведённого формализма для задачи рассеяния.

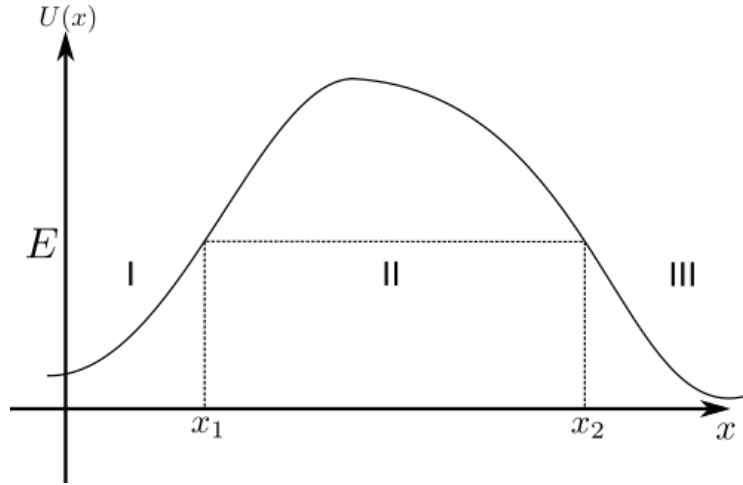


Рис. 7.3: Схематическое изображения потенциала для задачи о связанных состояниях

Трансфер-матрица в запрещённой области будет устроена следующим образом:

$$\psi(x) = \vec{c}_{II}^+ e^{\int_{x_2}^x |p(x)| dx} + \vec{c}_{II}^- e^{-\int_{x_2}^x |p(x)| dx} \equiv \vec{c}_{II}^+ e^{-S} e^{\int_{x_1}^x |p(x)| dx} + \vec{c}_{II}^- e^S e^{-\int_{x_1}^x |p(x)| dx}, \quad \boxed{S = \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx} \quad (7.23)$$

$$\vec{c}_{II} = \hat{S}_{12} \vec{c}_{II} = \begin{pmatrix} e^{-S} & 0 \\ 0 & e^S \end{pmatrix} \vec{c}_{II} \quad (7.24)$$

Для задачи рассеяния, мы фиксируем асимптотику в области III как $c_{III} = \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}$, а в области I — как $c_I = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$; и между ними имеется следующая связь:

$$c_I = \hat{A}\hat{S}_{12}\hat{A}^\dagger c_{III} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-S}}{4} + e^S \\ (\frac{1}{4}ie^{-S} - ie^S) \end{pmatrix} t \Rightarrow \begin{cases} t \approx e^{-S} \\ r \approx -i \end{cases} \Rightarrow \boxed{\begin{cases} T \approx e^{-2S} \\ R \approx 1 \end{cases}} \quad (7.25)$$

Эта формула носит название **формулы Гамова**. Разумеется, в классической физике коэффициент отражения был бы строго равен единице, а прохождения — нулю. Квантовая механика же допускает возможность туннелирования, просто вероятность туннелирования оказывается экспоненциально малой. Обсудим несколько свойств выведенной формулы:

- Естественно, что данное приближение применимо только при $S \gg 1$.
- Наивное квазиклассическое приближение утверждает, что при надбарьерном рассеянии $E > \max U(x)$, коэффициент отражения строго равен нулю. Из точных решений для некоторых потенциалов мы знаем, что в действительности это не так — коэффициент отражения просто оказывается экспоненциально мал. Решение этой задачи мы рассмотрим в будущем.
- При наличии других граничных условий (например, если одна из точек поворота представляет собой скачок потенциала) предэкспонента может поменяться, но экспоненциальный фактор (наиболее важный) является совершенно универсальным.

7.5 Пример: двухъямный потенциал

Применим теперь наш матричный формализм к решению задачи о туннельном расщеплении уровня в квазиклассическом двухъямном потенциале⁴. Если туннельный барьер достаточно высок, а вероятность проникновения через него — мала, то каждую из двух ям с хорошей точностью можно считать независимыми. Если при этом потенциал симметричный, то в каждой из двух ям имеется набор квазиклассических уровней энергии, даваемых правилом Бора-Зоммерфельда.

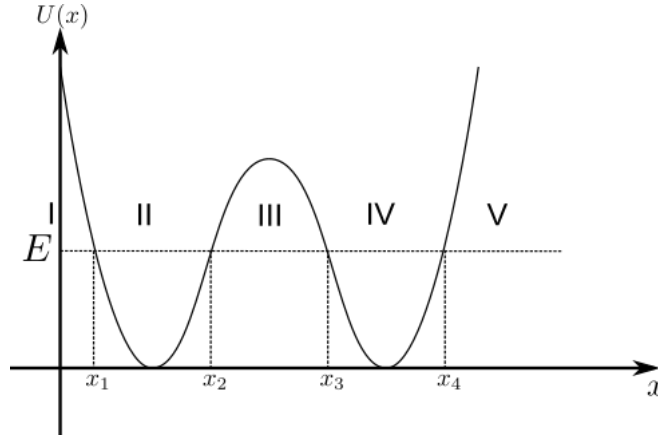


Рис. 7.4: Двухъямный потенциал

Однако, учёт возможности туннелирования — хоть и экспоненциально маленькое, но конечное перекрытие волновых функций в каждой из ям — приводит к гибридизации. Двукратно вырожденные уровни энергии слабо (в меру малости проницаемости барьера) расщепляются на пары, соответствующие симметричным и анти-симметричным волновым функциям, которые с некоторой точностью являются простыми линейными комбинациями волновых функций в отдельных ямах, $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle)$ и $|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle)$ ($|\psi_{S,A}\rangle$ — симметричная и антисимметричная волновые функции, а $|\psi_{L,R}\rangle$ — волновые функции, локализованные в левой и правой ямах соответственно). Такое расщепление называют **туннельным расщеплением**. Такую ситуацию мы уже рассматривали на примере двух мелких ям, $U(x) = -U_0(\delta(x-a) + \delta(x+a))$; теперь же рассмотрим такую задачу в квазиклассическом приближении.

⁴Иной способ решения этой задачи изложен в [ЛЛ02, глава 7 «квазиклассический случай», §50 «прохождение через потенциальный барьер», задача 3]. Разумеется, приводит он к такому же ответу.

В области V фиксируется экспоненциально затухающее решение $\psi_-: c_V = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Проводя дальнейшую последовательную сшивку с помощью трансфер-матриц, мы приходим к следующим амплитудам в области I:

$$c_I = \hat{A}^\dagger \hat{S}_{12} \hat{A} \hat{S}_{23} \hat{A}^\dagger \hat{S}_{34} \hat{A} c_V, \quad \hat{S}_{12} = \hat{S}_{34} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{23} = \begin{pmatrix} e^{-S_T} & 0 \\ 0 & e^{S_T} \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} S &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \\ S_T &= \int_{x_2}^{x_3} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \end{cases} \quad (7.26)$$

что, после соответствующего перемножения, и нехитрых преобразований, приводит нас к следующему ответу:

$$c_I = \begin{pmatrix} \sin 2S \left(\frac{1}{4} e^{-S_T} + e^{S_T} \right) \\ 4e^{S_T} \cos^2 S - e^{-S_T} \sin^2 S \end{pmatrix} \quad (7.27)$$

Как и ранее, для связанных состояний мы требуем $c_I^- = 0$, что даёт следующее уравнение:

$$\cot^2 S = \frac{1}{4} e^{-2S_T} \Rightarrow \cot S(E) = \pm \frac{1}{2} e^{-S_T(E)} \quad (7.28)$$

В рамках квазиклассического приближения, $S_T \gg 1$, поэтому справа стоит малая величина. В ведущем приближении, уровни энергии тем самым определяются условием $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$ — что тождественно совпадает с правилом Бора-Зоммерфельда в каждой отдельной яме (в полном согласии с тем, что было сказано в начале параграфа). Чтобы учесть вклад правой части, необходимо разложиться:

$$\cot(S_0(E_n^{(0)} + \delta E_n)) \approx \cot \left(S_0 + \frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n \right) \approx -\frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n \quad (7.29)$$

Поскольку $S_0(E) = \int_{x_2}^{x_1} p_E(x) dx$, то $\frac{\partial S_0}{\partial E} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{\partial E / \partial p} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{v} = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\omega}$ (где $T = \frac{2\pi}{\omega}$ — период классического периодического движения в каждой из ям на уровне энергии E). Тем самым, мы получаем окончательный ответ (тут восстановлен \hbar по размерности):

$$E = E_n^{(0)} \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_3}^{x_2} |p_E(x)| dx} \quad (7.30)$$

Важно отметить, что интегрирование тут происходит между квазиклассическими точками остановки (а не, например, между минимумами ям)! Расщепление действительно оказалось экспоненциально маленьким (сравните с задачей о двух мелких ямах). Кроме того, стоит отметить, что данный ответ, вообще говоря, был получен только для высоких по энергии уровней, то есть $n \gg 1$; однако, даже для основного состояния $n = 0$ он даёт правильную экспоненциальную зависимость, и правильную параметрическую зависимость предэкспоненты. Неправильным оказывается лишь число в предэкспоненте, которое требует гораздо более нетривиальных вычислений.

7.6 Пример: распад метастабильного состояния

О метастабильных состояниях имела задача в семинаре 4 «Непрерывный спектр». Тем не менее, мы изложим тут основные свойства метастабильных состояний. Пусть имеется яма, отделённая туннельным барьером. В такой задаче, вообще говоря, не имеется дискретного спектра, а движение является инфинитным — всякая частица рано или поздно «уйдёт» на бесконечность. Однако, из физических соображений понятно, что если барьер достаточно высок, туннельная проницаемость его мала, а частица была «посажена» в эту яму в состоянии, близкие к собственным для данной ямы, то частица будет оставаться в яме достаточно продолжительное время, и в течении этого времени волновая функция будет вести себя практически как стационарная. Такие состояния называют **квазистационарными**, или **метастабильными**.

Как правило, уход частицы из такой ямы определяется экспоненциальным законом, $P(t) = |\psi(t)|^2 \sim e^{-\Gamma t}$, с некоторой малой величиной Γ . Оказывается возможным утверждать, что часть волновой функции, отвечающая яме, с некоторой точностью эволюционирует согласно $\psi(t) \sim e^{-iEt - \Gamma t/2}$, что позволяет интерпретировать обратное время жизни квазистационарного уровня $\Gamma = \tau^{-1}$ как комплексную добавку к энергии: $E - i\frac{\Gamma}{2}$ (обратите внимание, что знак этой мнимой добавки важен!). Величину Γ также часто называют **шириной уровня**⁵.

Искать метастабильные состояния можно по-разному. Наиболее прямолинейным способом является решение нестационарного уравнения Шрёдингера, используя разложение по непрерывному спектру, и явный поиск этой самой вероятности

⁵Это связано, к примеру, с туннельной плотностью состояний. Для отдельного уровня, плотность состояний устроена как $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i0} = \delta(E - E_0)$; в свою очередь, для квазистационарного состояния она устроена как $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{1}{\pi} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$, то есть уровень действительно оказывается уширенным.

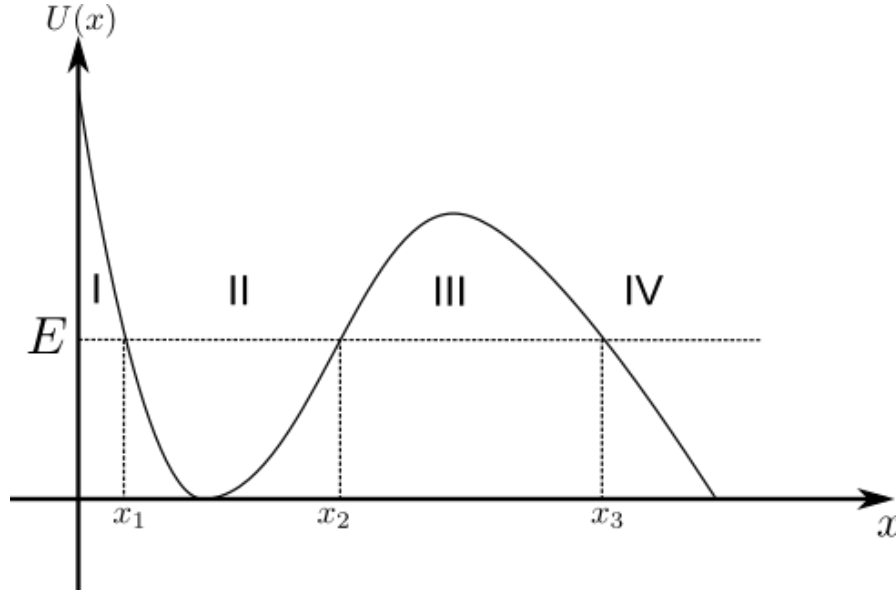


Рис. 7.5: Квазистационарное состояние

(о чём и имеется соответствующая задача). Однако это может оказаться достаточно трудоёмкой задачей, и имеется более простой способ. Дело в том, что квазистационарным состояниям, как правило, соответствуют решения *стационарного* уравнения Шрёдингера, с асимптотикой волновой функции, соответствующей только вылетающим из ямы частицам. Такое решение очевидным образом нарушает унитарность эволюции, поэтому может существовать только с комплексной энергией, и оно ненормируемо (на одной из бесконечностей оно будет экспоненциально расходиться). Это решение как раз отвечает метастабильному состоянию; а мнимая часть энергии — ширине уровня.

Квазиклассическое приближение

Из вышесказанного следует, что нас интересует решение, которое в области IV соответствует $c_{IV} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Проводя шивки, в области I мы получаем:

$$c_I = \underbrace{\hat{A}^\dagger}_{x_1} \underbrace{\hat{S}_{12}}_{II} \underbrace{\hat{A}}_{x_2} \underbrace{\hat{S}_{23}}_{III} \underbrace{\hat{A}^\dagger}_{x_3} c_{IV}, \quad \hat{S}_{12} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{23} = \begin{pmatrix} e^{-S_T} & 0 \\ 0 & e^{S_T} \end{pmatrix} \quad (7.31)$$

Получаем:

$$c_I = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} e^{-S_T + i\pi/4} \cos S + e^{S_T - i\pi/4} \sin S \\ 2e^{S_T - i\pi/4} \cos S - \frac{1}{2} e^{-S_T + i\pi/4} \sin S \end{pmatrix} \quad (7.32)$$

Поскольку в области I имеется только затухающее решение, мы требуем $c_I^- = 0$ и получаем:

$$\cot S(E) = \frac{i}{4} e^{-2S_T(E)} \quad (7.33)$$

Как и раньше, в ведущем приближении $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$ отвечало ведущему приближению — правилу Бора-Зоммерфельда; а при разложении, мы получаем $E_n = E_n^{(0)} - i\frac{\Gamma_n}{2}$, причём:

$$\Gamma_n = \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_2}^{x_3} |p_E(x)| dx} \quad (7.34)$$

Обратим внимание, что время жизни такого уровня даётся $\tau = \Gamma^{-1} \equiv D^{-1}T$, где $T = \frac{2\pi}{\omega}$ — период классического движения, а $D = \exp(-2 \int_{x_2}^{x_3} |p(x)| dx)$ — туннельная проницаемость потенциального барьера. Таким образом, полученный результат имеет сугубо классическую интерпретацию: в яме колеблется классическая частица, и каждый раз отражаясь от точки поворота, она может протуннелировать с конечной вероятностью D . При этом среднее число соударений со стенкой будет равно D^{-1} , а время жизни — $D^{-1}T$.

7.7 Метод WKБ в комплексной плоскости

На прошлом семинаре изменение амплитуд при различных квазиклассических решениях объяснялся тем, что в одномерной области, разделённые точкой остановки, не связаны. В действительности это не совсем так — если формально рассмотреть уравнение Шрёдингера для *комплексных* координат x , то область применимости квазиклассического приближения становится односвязной: оно нарушается по-прежнему лишь в окрестности точек остановки. В таком случае скачки в амплитудах при квазиклассических решениях могут вызывать вопросы. Для разрешения данного парадокса предлагается подробно исследовать решения в окрестности обычной точки остановки. Соответствующее уравнение Шрёдингера записывается следующим образом:

$$-\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \quad (7.35)$$

Квазиклассический импульс имеет вид $p^2(z) = z \Rightarrow p(z) = \sqrt{z}$. Поскольку мы имеем дело с комплексной плоскостью, нам нужно определить ветвь квадратного корня — направим её вдоль мнимой оси вниз ($\arg z = -\frac{\pi}{2}$). Квазиклассическое действие имеет вид $S(z) = \int_0^z p(z)dz = \frac{2}{3}z^{3/2}$, и произвольное решение (во всей комплексной плоскости, куда работает квазиклассическое приближение — то есть при $|z| \gg 1$) раскладывается по паре линейно независимых решений следующего вида:

$$\psi(z) = C_+\psi_+(z) + C_-\psi_-(z), \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}iz^{3/2}\right) \quad (7.36)$$

7.7.1 Структура решений WKБ

Давайте исследуем, как устроены представленные тут решения в комплексной плоскости, при $z = |z|e^{i\varphi}$ (напомним, наш выбор разреза соответствует выбору фазы $\varphi \in (-\frac{\pi}{2}; \frac{3\pi}{2})$):

$$\psi_{\pm}(|z|e^{i\varphi}) = \frac{e^{-i\varphi/4}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}ie^{3i\varphi/2}|z|^{3/2}\right) \quad (7.37)$$

У этого решения имеются специальные линии, где показатель экспоненты — чисто вещественный, а решения имеют не осциллирующую природу, а экспоненциально возрастающие и затухающие. Эти линии носят название **линий Стокса**, и в данной задаче они устроены следующим образом:

$$\text{Stokes' lines: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/12}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \pi & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/4}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = -\frac{\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/12}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \end{cases} \quad (7.38)$$

В противовес им, имеются **линии анти-Стокса**⁶, на которых решения — чисто осциллирующие:

$$\text{anti-Stokes' lines: } \begin{cases} \arg z = 0 & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \frac{2\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/6}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \frac{4\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/3}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \end{cases} \quad (7.39)$$

Структура линий Стокса очень важна с точки зрения метода WKБ. С каждым WKБ-решением связан целый асимптотический ряд, который можно оптимальным образом просуммировать, получив его *суперасимптотику* — а также неустранимую ошибку, погрешность этого асимптотического ряда. Погрешность, как правило, экспоненциально мала — но если одно решение экспоненциально большое, а второе — экспоненциально маленькое, то может так оказаться, что ошибка экспоненциально большого решения оказывается *больше* экспоненциально маленького решения — в связи с чем сохранение этого решения, вообще говоря, незаконно. Именно это, как правило, происходит на линиях Стокса, где разница между решениями максимальна. В свою очередь это означает, что на линиях Стокса (и только на них!) коэффициент при экспоненциально маленьком решении может измениться скачкообразно. Такой скачок носит название *явления Стокса*, и это явление будет ключевым для нашего анализа. Давайте проследим, как проявляет себя явление Стокса для функции Эйри.

⁶Терминология, увы, порой разнится. В частности, в математической литературе иногда определения поменяны местами

7.7.2 Функция Эйри

Итак, функция Эйри определяется как решение рассматриваемого нами дифференциального уравнения⁷, которое при $z < 0$ содержит чисто экспоненциально затухающее решение. Важно, что $z < 0$ — это линия Стокса, и зафиксировать решение, выбрав только *экспоненциально растущее решение* на линии Стокса невозможно (т.к коэффициент при экспоненциально затухающем в таком случае был бы не определён):

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad \arg z = \pi \quad (7.40)$$

Обход сверху Давайте проследим, как это решение устроено в комплексной плоскости, «обходя» точку остановки сверху — вдоль контура $z = |z|e^{i\varphi}$, $\varphi \in (\pi, 0)$.

- $\pi > \arg z > \frac{\pi}{3}$: покуда мы не пересекаем линии Стокса, коэффициенты C_{\pm} измениться не могут — из чего мы заключаем следующее:

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad \pi > \arg z > \frac{\pi}{3} \quad (7.41)$$

- $\arg z = \frac{\pi}{3}$. На этой линии решение $\psi_+(z)$, которое было экспоненциально растущим, становится экспоненциально маленьким — в связи с чем коэффициент C_+ может измениться произвольным образом. С другой стороны, решение $\psi_-(z)$, которое было затухающим, стало растущим, и коэффициент при нём измениться не может!
- $-\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3}$: вплоть до следующей линии Стокса мы тем самым можем записать:

$$\begin{cases} C_+ = ? \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3} \quad (7.42)$$

Таким образом, мы дошли до вещественной оси $z > 0$, обойдя комплексную точку остановки сверху, и смогли определить один из коэффициентов. Второй коэффициент можно найти двумя способами, и мы изложим оба.

Вещественность Первый аргумент прост, но менее универсален. Заметим, что решение $\tilde{\psi}(z) = e^{i\pi/4}\psi(z)$ при $z < 0$ чисто вещественно, поэтому оно обязано быть вещественным и при $z > 0$. С другой стороны, при $z > 0$ имеем:

$$\tilde{\psi}(z > 0) = \frac{C_+ e^{i\pi/4}}{z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}iz^{3/2}\right) + \frac{e^{i\pi/4}}{z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}iz^{3/2}\right) \quad (7.43)$$

Полученная комбинация вещественна только при $C_+ = e^{-i\pi/2} = -i$. Из этого мы заключаем:

$$\begin{cases} C_+ = -i \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3}, \quad (7.44)$$

а само решение $\tilde{\psi}(z)$ на вещественной оси имеет следующий вид⁸:

$$\tilde{\psi}(z) = \begin{cases} \frac{1}{|z|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}, & z < 0 \\ \frac{2}{z^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), & z > 0 \end{cases} \quad (7.45)$$

Обход снизу Второй способ следующий. Предлагается посмотреть, что же будет происходить при обходе снизу.

- $\frac{3\pi}{2} > \arg z > \pi$: имеется небольшое отличие от предыдущего способа — а именно, наш обход сперва упирается в разрез, который был пущен вдоль $\arg z = \frac{3\pi}{2}$, на котором коэффициенты тоже, вообще говоря, могут измениться:

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad \frac{3\pi}{2} > \arg z > \pi \quad (7.46)$$

⁷На самом деле, у функции Эйри коэффициент при линейной части имеет другой знак, поэтому решения нашего уравнения — это $\text{Ai}(-z)$

⁸В этом решении мы немедленно узнаём функцию Эйри $\tilde{\psi}(z) \equiv \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\text{Ai}(-z)$.

- $\arg z = \frac{3\pi}{2} \vee \arg z = -\frac{\pi}{2}$. Изменение коэффициентов на разрезе определяется очень просто. Дело в том, что построенный нами разрез — вещь фиктивная: само решение, конечно, является однозначной функцией во всей комплексной плоскости. Разрез мы сделали сами (при этом мы могли пустить его куда угодно), и он был нужен нам для определения WKВ-решений. В частности, решения при $\arg z = \frac{3\pi}{2}$ и $\arg z = -\frac{\pi}{2}$ должны тождественно совпадать:

$$C_+ \psi_+(|z|e^{3i\pi/2}) + C_- \psi_-(|z|e^{3i\pi/2}) \equiv C'_+ \psi_+(|z|e^{-i\pi/2}) + C'_- \psi_-(|z|e^{-i\pi/2}) \quad (7.47)$$

Если аргумент z изменить на 2π (обойти против часовой стрелке точку ветвления, остановившись на другом берегу разреза), то решения попросту поменяются местами (с точностью до фаз):

$$\psi_{\pm}(ze^{2\pi i}) = \frac{-i}{z^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}iz^{3/2}\right) = -i\psi_{\mp}(z) \quad (7.48)$$

и поэтому условие однозначности функции сводится к следующему простому условию сшивки:

$$\begin{cases} C'_+ &= -iC_- \\ C'_- &= -iC_+ \end{cases}, \quad \arg z = \frac{3\pi}{2} \vee -\frac{\pi}{2} \quad (7.49)$$

- $-\frac{\pi}{2} < \arg z < -\frac{\pi}{3}$: тем самым, от разреза и до следующей линии Стокса, коэффициенты имеют следующий вид:

$$\begin{cases} C_+ &= -i \\ C_- &= 0 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} > \arg z > -\frac{\pi}{2} \quad (7.50)$$

- $\arg z = -\frac{\pi}{3}$: тот факт, что решения поменялись местами на разрезе, нам очень помогает — потому что именно решение $\psi_+(z)$ на этой линии Стокса экспоненциально растущее, и коэффициент C_+ измениться не может. C_- же изменяется произвольным образом — но нам оно не интересно, ведь мы его уже нашли, обойдя точку остановки снизу! Тем самым, мы подтверждаем вывод, сделанный из аргумента вещественности.

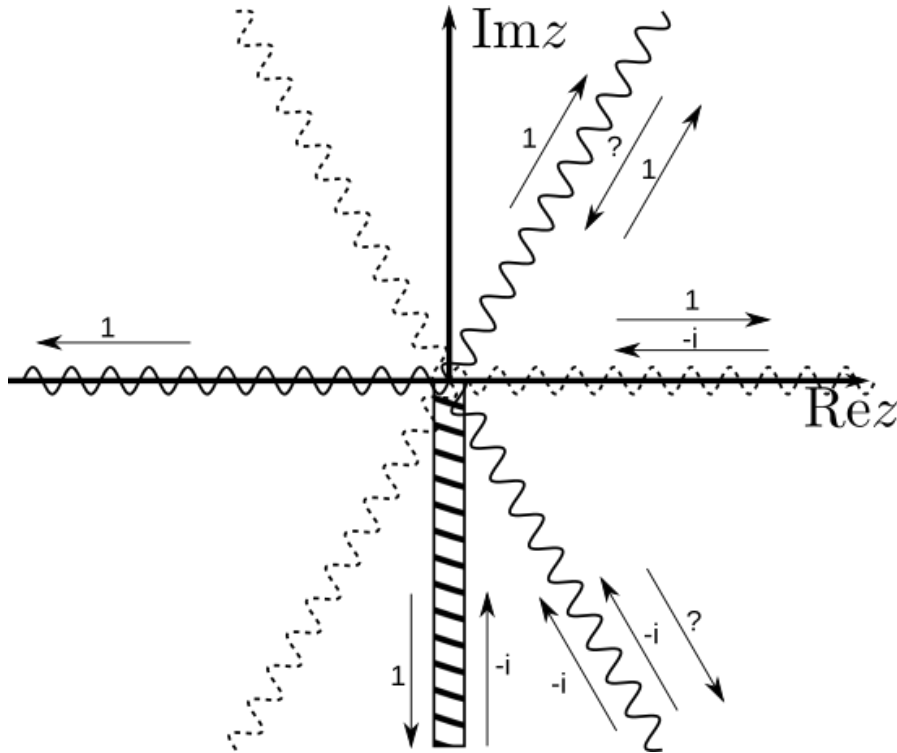


Рис. 7.6: Структура комплексной плоскости для функции Эйри. Заштрихованная область — разрез. Волнистые сплошные линии — линии Стокса; пунктирные — линии анти-Стокса. Стрелка, направленная к центру — решение $\psi_+(z)$; от центра — решение $\psi_-(z)$.

7.8 Пример: квадратичный потенциал

Теперь, продемонстрировав метод на простом примере, давайте его применим к чуть более сложному — к задаче надбарьерного отражения над потенциалом $U(x) = -\frac{m\omega^2 x^2}{2}$, $E > 0$. Линии Стокса определяются из условия $\text{Im}S(z) = \text{Im}S(x_{1,2})$, а анти-Стокса — условием $\text{Re}S(z) = \text{Re}S(x_{1,2})$; они изображены на рисунке.

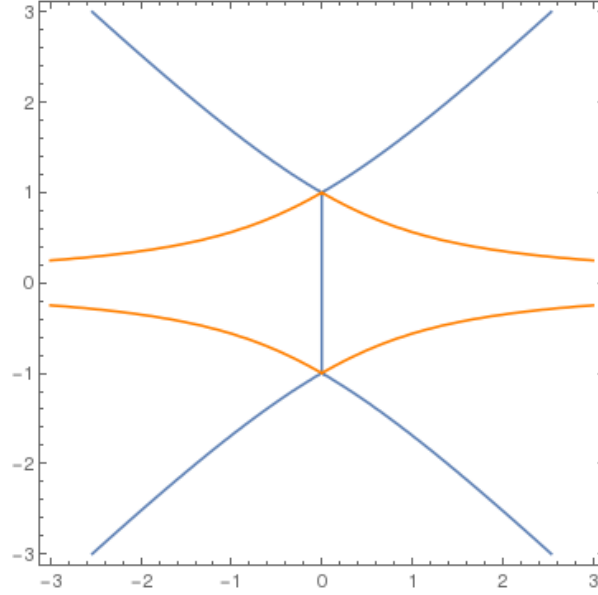


Рис. 7.7: Линии Стокса (синие) и анти-Стокса (оранжевые) квазиклассических решений в комплексной плоскости $(\text{Re}x, \text{Im}x)$ в потенциале $U(x) = -\frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Оси в единицах x_0 . Третью линию анти-Стокса, которая должна быть направлена вдоль мнимой оси, Mathematica рисовать отказалась — видимо, из-за совпадения последней с разрезом.

Видно, что проблема заключается в том, что при движении по вещественной оси мы пересекаем одну из линий Стокса (даже не замечая этого) — и теряем отражённую волну. Для того, чтобы её найти, мы сделаем следующую процедуру: вдоль одной из линий анти-Стокса мы пройдем до одной из комплексных точек остановки; используя анализ, проделанный выше, мы найдём амплитуды обеих волн на второй линии анти-Стокса; а затем мы по ней спустимся обратно на вещественную ось. Таким способом мы сможем найти связь коэффициентов прохождения и отражения⁹.

Квазиклассический импульс имеет следующий вид:

$$p(x) = \sqrt{2m \left(E + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} = m\omega \sqrt{x_0^2 + x^2} \quad (7.51)$$

Можно пустить разрезы $(x_1, i\infty)$ и $(-i\infty, x_2)$, но чуть левее линий анти-Стокса, и зафиксировать физическую ветвь естественным условием вещественности на вещественной оси¹⁰. Сшивки мы будем проводить, скажем, в окрестности точки остановки ix_0 , где УШ имеет следующий приближённый (обезразмеренный) вид:

$$-\psi''(z) - iz\psi(z) = 0, \quad z = (2m^2\omega^2 x_0)^{1/3}(x - ix_0) \quad (7.52)$$

Сшивка вблизи $x_1 = ix_0$ Сразу можно обсудить применимость изложенного метода. Квазиклассическое приближение для этого уравнения будет работать при $|z| \gg 1$, а само разложение потенциала работает пока $|x - x_1| \ll x_0 \Leftrightarrow |z| \ll (\frac{E}{\omega})^{2/3}$. Тем самым, имеется ненулевая область применения только если $E \gg \omega$ — что довольно естественно. С учётом этого, импульс и действие, а также квазиклассические решения имеют вид:

$$p(z) = \sqrt{iz} = e^{i\pi/4} z^{1/2}, \quad S(z) = \frac{2}{3} e^{i\pi/4} z^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/8}}{z^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} i e^{i\pi/4} z^{3/2}} \quad (7.53)$$

⁹Удобней всего «ходить» именно по линиям анти-Стокса, потому что на них оба решения всегда всегда законно сохранять; а кроме того, поскольку на вещественной оси решения тоже чисто осциллирующие, то линии анти-Стокса, связанные с точкой остановки, асимптотически с ней приближаются.

¹⁰Выбор разрезов и ветвей, конечно же, совершенно произволен. Единственное — может быть неудобно, если разрез совпадает буквально с линией Стокса или анти-Стокса, с которыми мы будем работать

Разрез корня уходит вверх, $\arg z \in (-\frac{3\pi}{2}; \frac{\pi}{2})$, а условие, фиксирующее ветвь — при $z = -i|z|$, $p(z)$ вещественно (что как раз соответствует «физической» ветви). На линиях Стокса и анти-Стокса решения принимают следующие значения:

$$\text{Stokes: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/6}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3}|z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{\pi}{2} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{|z|^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3}|z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{7\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/6}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3}|z|^{3/2}} \end{cases}, \quad \text{anti-Stokes: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{2} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/4}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3}i|z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/12}}{|z|^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3}i|z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{5\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/12}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3}i|z|^{3/2}} \end{cases} \quad (7.54)$$

- На линии анти-Стокса $\arg z = -\frac{\pi}{6}$, решение $\psi_+(z)$ соответствует прошедшей волне, а $\psi_-(z)$ — падающей. Поскольку мы решаем задачу рассеяния, мы фиксируем решение следующим образом:

$$\begin{cases} C_+ = \tilde{t} \\ C_- = 0 \end{cases}, \quad \arg z = -\frac{\pi}{6} \quad (7.55)$$

- $\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{\pi}{2}$: обходим сверху. На линии Стокса $\arg z = \frac{\pi}{6}$, решение $\psi_+(z)$ экспоненциально затухает, а $\psi_-(z)$ — растёт. Коэффициент C_- тем самым не может измениться; однако, поскольку он равен 0, то измениться не может также и C_+ . Поэтому написанные выше коэффициенты, в действительности, работают вплоть до разреза $\arg z = \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{cases} C_+ = \tilde{t} \\ C_- = 0 \end{cases}, \quad \frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{\pi}{2} \quad (7.56)$$

- $-\frac{7\pi}{6} > \arg z > -\frac{3\pi}{2}$: сшивку на разрезе делается аналогично из требования однозначности функции. При обходе точки ветвления снизу против часовой стрелке, решения опять-таки меняются местами с дополнительной фазой: $\psi_{\pm}(ze^{2\pi i}) = -i\psi_{\mp}(z)$, поэтому слева (вплоть до линии Стокса $\arg z = -\frac{7\pi}{6}$) и справа от разреза коэффициенты связаны: $C'_{\pm} = -iC_{\mp}$. В частности:

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = -i\tilde{t} \end{cases}, \quad -\frac{7\pi}{6} > \arg z > -\frac{3\pi}{2} \quad (7.57)$$

- $-\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6}$: наконец, на линии Стокса $\arg z = -\frac{7\pi}{6}$, решение ψ_- экспоненциально растёт, поэтому C_- не меняется. Мы заключаем:

$$C_- = -i\tilde{t}, \quad -\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6} \quad (7.58)$$

- Теперь давайте устроим обход снизу. Он устроен куда проще, ведь на ближайшей линии Стокса $\arg z = -\frac{\pi}{2}$, решение ψ_+ экспоненциально растёт — поэтому C_+ не меняется, а значит в этом же секторе имеем:

$$C_+ = \tilde{t}, \quad -\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6}$$

Тем самым, мы получили слева как падающую (ψ_+), так и отражённую (ψ_-) волны.

Вещественная ось Теперь давайте вернёмся на вещественную ось, и найдём коэффициенты прохождения и отражения. Вещественное решение определено следующим образом:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int_0^x p(x) dx} + \frac{r}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int_0^x p(x) dx}, & x < 0 \\ \frac{t}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int_0^x p(x) dx}, & x > 0 \end{cases} \quad (7.59)$$

(в отличие от решения ψ_{\pm} , тут интегрирование ведётся от нуля — или во всяком случае, от произвольной точки на вещественной оси — это важно!). Это же решение переписывается в следующем виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_+(x) + r e^{-i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_-(x), & \text{Re } x < 0 \\ t e^{i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_+(x), & \text{Re } x > 0 \end{cases} \quad (7.60)$$

Сравнивая с найденным выше квазиклассическим решением, мы получаем:

$$\begin{cases} r &= -ie^{2i \int_0^{x_1} p(x) dx} \\ t &= 1 \end{cases} \quad (7.61)$$

(отличие t от 1 уже находится за пределами квазиклассического приближения — условие $|t|^2 + |r|^2 = 1$ гарантирует, что поправка к t должна быть того же порядка, что и $|r|^2$). Тем самым, мы получили ключевую формулу для коэффициента отражения:

$$\boxed{R = |r|^2 = e^{-4 \operatorname{Im} \int_0^{x_1} p(x) dx}} \quad (7.62)$$

Поскольку $x_1 = ix_0$, то $\operatorname{Im}(dx) > 0$ и, тем самым, ответ действительно экспоненциально мал. В действительности, для данной формулы совершенно неважен вид потенциала, и коэффициент отражения определяется таким интегралом, взятым до ближайшей к вещественной оси комплексной точки остановки, лежащей в верхней комплексной полуплоскости. Неважен также и нижний предел интегрирования — интегрировать можно от любой точки, лежащей на действительной оси, т.к. добавляемый при этом интеграл по вещественной оси чисто вещественный и вклада не даёт. Интересные модификации этой задачи включают в себя случаи, когда параметрически близко к комплексной точке остановки располагается полюс¹¹, или если имеется несколько комплексных точек остановки, лежащих на одинаковом расстоянии от вещественной оси¹². Для нашей же задачи осталось лишь сосчитать тривиальный интеграл, воспроизводящий часть точного ответа

$$\int_0^{x_1} p(x) dx = im\omega x_0^2 \int_0^1 \sqrt{1-z^2} dz = i \frac{\pi E}{2\omega} \Rightarrow \boxed{R = e^{-2\pi E/\omega}} \quad (7.63)$$

¹¹Что не так экзотично, как может показаться. Действительно, точка остановки определяется условием $E = U(x)$, и если энергия большая, то большим также должен быть и потенциал. А как правило, потенциал как раз расходится вблизи полюсов. В таком случае, решать уравнение Шрёдингера в окрестности приходится точнее.

¹²В таком случае может существовать линия анти-Стокса, их соединяющая — приходится проводить несколько шпиков вблизи каждой из точек остановки. При этом может возникнуть интересные интерференционные явления — интерференция волн в комплексной плоскости между точками остановки...

Глава 8

Теория рассеяния

8.1 Постановка задачи рассеяния

Ранее (на семинаре про непрерывный спектр) изучалась задача одномерного рассеяния. В ней мы искали решения уравнения Шрёдингера в некотором локализованном потенциале $V(x)$, имеющие следующие асимптотики вдали от рассеивающего центра (при $x \rightarrow \pm\infty$), включающие в себя падающую, отражённую, и прошедшую волны:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ te^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (8.1)$$

Такая постановка обобщается на пространство произвольной размерности. В рамках этого семинара будет рассмотрен трёхмерный случай. Пусть имеется локализованный рассеивающий потенциал $V(\mathbf{r})$; мы будем искать решения стационарного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$, имеющие следующий асимптотический вид (см. рис. (8.1)):

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \rightarrow \infty}, \quad \mathbf{n} \equiv \mathbf{n}_k = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \mathbf{n}' \equiv \mathbf{n}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad E = \frac{k^2}{2m}. \quad (8.2)$$

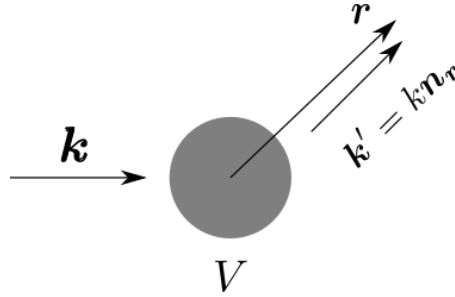


Рис. 8.1: Задача рассеяния в многомерном пространстве.

Направление \mathbf{n} соответствует направлению падающей волны $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, а \mathbf{n}' — направлению на наблюдателя в точке \mathbf{r} (направление рассеянной волны); введём также $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$. Данный вид волновой функции представляет собой первые два члена асимптотического разложения по $1/r$, поэтому, вообще говоря дальше будут иметься члены $O(1/r^2)$, но в рамках задачи рассеяния они нас не будут интересовать.

По аналогии с тем, как в одномерной задаче необходимо было найти величины (t, r) — амплитуды прохождения и отражения, так и в трёхмерной задаче необходимо искать неизвестную функцию $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$, которая носит название *амплитуды рассеяния*. Несложно видеть, что она имеет размерность длины $[f] = \text{см}$, и зависит в случае общего положения от направления обоих векторов¹; однако в случае сферической симметрии потенциала амплитуда рассеяния может зависеть только от *угла рассеяния* — угла θ между векторами \mathbf{n} и \mathbf{n}' :

¹Хотя уже в случае общего положения она обладает определённым набором симметрий; в частности, с унитарностью рассеяния связано соотношение $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = f(-\mathbf{n}', -\mathbf{n})$.

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \equiv f(\theta), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' = \cos \theta. \quad (8.3)$$

Потоки и сечение рассеяния Тот факт, что рассеянная волна содержит именно $\frac{1}{r}$, связан с сохранением потока вероятности в телесный угол в трёхмерном пространстве². Действительно, используя известную формулу из третьего семинара для потока частиц, в ведущем по $\frac{1}{r}$ приближении можно вычислить плотности потока частиц в падающей и рассеянной волне:

$$\mathbf{j}_{\text{пад}} = \frac{1}{m} \mathbf{k}, \quad \mathbf{j}_{\text{расс}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{m} \frac{|f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2}{r^2} \mathbf{k}', \quad (8.4)$$

где $\mathbf{k}' = k \cdot \mathbf{n}'$ — волновой вектор рассеянной волны. Тогда поток частиц через некоторый телесный угол $d\Omega$ равен $dN_{\text{расс}} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{n}' dS = \frac{1}{m} |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 k d\Omega$ — видно, что расстояние r из асимптотики волновой функции сократилось с $dS = r^2 d\Omega$; именно поэтому асимптотика волновых функций имеет именно такой вид. Наконец, по аналогии с классической механикой, можно ввести *дифференциальное сечение рассеяния*, которое определяется как отношение числа рассеявшихся частиц в единицу времени к плотности потока налетающих частиц:

$$d\sigma = \frac{dN_{\text{расс}}}{j_{\text{пад}}} = |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 d\Omega_{\mathbf{n}'} = 2\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (8.5)$$

Оно имеет размерность площади $[\sigma] = \text{см}^2$ и может быть интерпретировано, как площадь поверхности, перпендикулярной потоку, которая собирала бы на себя (в классическом случае) количество частиц, равное количеству частиц, улетевающих в сектор телесных углов $d\Omega$.

Величину $\sigma = \int d\sigma$ называют *полным сечением рассеяния*³. Кроме того, в приложениях⁴ часто встречается так называемое *транспортное сечение рассеяния*, определяемое согласно:

$$\sigma_{\text{tr}} = \int (1 - \cos \theta) d\sigma \quad (8.6)$$

Дальнейшее построение теории рассеяния сводится к изучению методов вычисления амплитуды рассеяния.

8.2 Функция Грина и теория возмущений

В случае слабого (далее будет пояснено, в каком смысле слабого) потенциала, амплитуду рассеяния можно находить, используя теорию возмущений относительно невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0 = p^2/2m$. Пусть $|\psi\rangle = |\mathbf{k}\rangle + |\chi\rangle$ — искомая волновая функция задачи рассеяния ($|\mathbf{k}\rangle$ — падающая плоская волна, а $|\chi\rangle$ — рассеянная). Путём тождественных преобразований перепишем уравнение Шрёдингера (учитывая, что $\hat{H}_0 |\mathbf{k}\rangle = E |\mathbf{k}\rangle$, $E = k^2/2m$):

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(|\mathbf{k}\rangle + |\chi\rangle) = E(|\mathbf{k}\rangle + |\chi\rangle) \Rightarrow (E - \hat{H}) |\chi\rangle = \hat{V} |\mathbf{k}\rangle \quad (8.7)$$

Таким образом, если мы научимся обращать оператор $(E - \hat{H})$, то формальное решение этого уравнение можно записать как $|\chi\rangle = (E - \hat{H})^{-1} \hat{V} |\mathbf{k}\rangle$.

8.2.1 Резольвента (функция Грина)

Объект, с которым мы только что столкнулись, носит название *резольвенты оператора \hat{H}* , и обозначается следующим образом:

$$(E - \hat{H}) \hat{G}_E = \hat{\mathbb{I}}, \quad \hat{G}_E = (E - \hat{H})^{-1} \quad (8.8)$$

Несложно записать решение этого уравнения в общем виде. Пусть $\{|n\rangle, E_n\}$ образуют спектр гамильтониана. В этом базисе оператор $E - \hat{H}$ легко обращается:

²В двумерном случае множитель был бы $\frac{1}{\sqrt{r}}$, а в одномерном его, как несложно видеть, вообще нет

³В случаях, если потенциал достаточно сильный или дальнодействующий (примером такого потенциала может являться Кулоновский потенциал $U(r) = \frac{e^2}{r}$), полное сечение рассеяния вполне может обращаться в бесконечность; ничего страшного в этом нет.

⁴Как правило, в приложениях, связанных с переносом и релаксацией импульса — а именно, при вычислении электрической проводимости или теплопроводности

$$\hat{G}_E = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n} \quad (8.9)$$

Это выражение означает, что на комплексной плоскости параметра энергии E , оператор \hat{G}_E содержит полюса; вычеты в этих полюсах дают проекторы на собственные подпространства гамильтониана. В предельном переходе к непрерывному спектру полюса сливаются в разрез; это будет продемонстрировано ниже на примере функции Грина свободной частицы.

Представление резольвенты в координатном представлении называется *функцией Грина*⁵ $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E | \mathbf{r}' \rangle$. Она удовлетворяет следующему уравнению:

$$(E - \hat{H})G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (8.10)$$

при этом оператор $\hat{H} = -\nabla_{\mathbf{r}}^2/2m + V(\mathbf{r})$ действует на первый аргумент (\mathbf{r}) функции Грина. Несложно видеть, что она определена неоднозначно: если к ней добавить произвольное решение однородного уравнения (например, плоскую волну), то она по-прежнему будет удовлетворять уравнению (8.8) (это непосредственно связано с аналитической структурой функции Грина — на энергиях, где такое решение однородного уравнения существует, она имеет либо полюса, либо разрез).

8.2.2 Функция Грина свободной частицы

Определим функцию Грина для свободной частицы $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$; и на этом простом, но тем не менее важном примере продемонстрируем основные свойства функции Грина. В силу трансляционной инвариантности, функция Грина для свободной частицы является функцией лишь разности координат $G_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv G_E^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Для её нахождения, воспользуемся известным полным набором собственных функций гамильтониана \hat{H}_0 — набором плоских волн $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, нормированных условием $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ — и формулой (8.9):

$$G_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{E - \frac{k^2}{2m}} \quad (8.11)$$

Тут мы немедленно сталкиваемся с проблемой: при $E > 0$ этот интеграл не определён, потому что в области интегрирования имеется неинтегрируемая особенность при $E = k^2/2m$. Это полностью согласуется со сделанным выше утверждением, что в области непрерывного спектра функция Грина содержит разрез, и на самом разрезе она плохо определена. Функция Грина на верхнем берегу разреза, при $E = E + i0$, уже определена хорошо и носит название *запаздывающей* (*retarded*) функцией Грина, а на нижнем берегу — *опережающей* (*advanced*) функцией Грина. Это связано с тем, что преобразование Фурье по энергии — функция $G(t, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int (dE) G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-iEt}$ является *пропагатором*⁶ временного уравнения Шрёдингера $i\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle$; и запаздывающей функции Грина соответствует пропагатор $G^R(t < 0) \equiv 0$, а опережающей — $G^A(t > 0) \equiv 0$.

Для нахождения запаздывающей функции Грина можно поступить следующим образом: рассмотреть её на отрицательной энергии $G_{E<0}$, где интеграл определён хорошо, а затем аналитически продолжить его либо на верхний, либо на нижний берег разреза. Однако мы поступим более прямолинейно:

$$\begin{aligned} G_E^{(0,R)}(\mathbf{r}) &= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{E + i0 - \frac{k^2}{2m}} = \frac{m}{2\pi^2} \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{e^{ikr \cos\theta}}{k_E^2 - k^2 + i0} = \\ &= \frac{m}{2\pi^2 i r} \int_0^\infty k dk \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{k_E^2 - k^2 + i0} = \frac{m}{2\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty \frac{k}{k_E^2 - k^2 + i0} e^{ikr} dk \end{aligned} \quad (8.12)$$

Полученное выражение имеет полюса при $k = \pm(k_E + i0)$. Так как модуль радиус-вектора $r > 0$, контур интегрирования замыкается в верхней комплексной полуплоскости, и вклад в интеграл даёт единственный полюс $k = k_E + i0$. Используя теорему о вычетах (а заодно, восстанавливая \hbar по размерности, поскольку это важный результат) получим:

$$G_E^{(0,R)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_E r}}{r}, \quad k_E = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (8.13)$$

⁵Мы будем использовать эти термины как взаимозаменяемые

⁶Для нас это будет ещё одним синонимом функции Грина

Во-первых, отметим, что у функции Грина действительно имеется разрез в комплексности плоскости E (из-за \sqrt{E}). Путём аналитического продолжения (или просто комплексного сопряжения) легко получить выражение для запаздывающей функции Грина (опережающей):

$$G_E^{(0,A)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-ik_E r}}{r} \quad (8.14)$$

Во-вторых, запаздывающая функция Грина соответствует расходящейся волне, а опережающая — сходящейся. Поэтому для решения задачи рассеяния необходимо использовать именно запаздывающую функцию Грина.

8.2.3 Теория возмущений и T -матрица

Для функции Грина удобно строить теорию возмущений; действительно, пусть функция Грина невозмущенного гамильтониана известна $\hat{G}_E^{(0)} = (E - \hat{H}_0)^{-1}$. В таком случае, полную функцию Грина можно записать в виде ряда:

$$\hat{G}_E = (E - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} = \hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} + \dots \quad (8.15)$$

В задаче рассеяния, однако, требуется найти не функцию Грина, а рассеявшуюся компоненту волновой функции $|\chi\rangle$. Как мы видели раньше, она равна

$$|\chi\rangle = (E - \hat{H})^{-1} \hat{V} |\mathbf{k}\rangle = \left[\hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} + \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} + \dots \right] |\mathbf{k}\rangle = \hat{G}_E^{R(0)} \left[\hat{V} + \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} + \dots \right] |\mathbf{k}\rangle = \hat{G}_E^{R(0)} \hat{T}_E |\mathbf{k}\rangle, \quad (8.16)$$

где был введён важный объект, носящий название \hat{T} -матрицы:

$$\hat{T}_E = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)} \hat{V} + \dots = (1 - \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)})^{-1} \hat{V}. \quad (8.17)$$

\hat{T} -матрицу тоже удобно вычислять по теории возмущений, и, как мы покажем ниже, через нее легко выражается амплитуда рассеяния:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{m}{2\pi} \langle \mathbf{k}' | \hat{T}_E | \mathbf{k} \rangle \quad (8.18)$$

Напомним, что здесь $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = \sqrt{2mE}$ (находятся на «массовой поверхности»), хотя в принципе T -матрица определена для произвольных значений импульса.

8.2.4 Связь T -матрицы и амплитуды рассеяния

Воспользуемся уравнением (8.16) и запишем $|\chi\rangle$ в координатном представлении:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E^{(0)} \hat{T}_E | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E^{(0)} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \hat{T}_E | \mathbf{k} \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E^{(0)} | \mathbf{r}' \rangle e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} T_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E^{(0)} | \mathbf{r}' \rangle \frac{e^{i\mathbf{k}_E \cdot |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} T_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (8.19)$$

где была введена T -матрица в импульсном представлении $T_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \mathbf{k}' | \hat{T}_E | \mathbf{k} \rangle$. Заметим также, что $k_E = k$. Так как нас интересует асимптотика $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ на больших \mathbf{r} , то разложим $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{r}'$. В экспоненте сохраним два члена, а в предэкспоненте один:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx -\frac{m}{2\pi} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{G}_E^{(0)} | \mathbf{r}' \rangle \frac{e^{ikr - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{r}'}}{r} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} T_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (8.20)$$

Интеграл по \mathbf{r}' даёт трёхмерную дельта-функцию, которая фиксирует значение \mathbf{k}' равным $k\mathbf{n}_r$:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{ikr}}{r} T_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (8.21)$$

Отсюда получаем (8.18), в котором $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}_r$ имеет смысл, введённый в начале семинара.

8.3 Оптическая теорема и соотношение унитарности

Свойство унитарности квантовомеханической эволюции приводит к определенным соотношениям для амплитуды рассеяния, самое известное из которых носит название **оптической теоремы**. В трёхмерном случае она имеет вид:

$$\boxed{\operatorname{Im} f(\theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma.} \quad (8.22)$$

Её можно приблизительно понять как соотношение между полным количеством рассеянных частиц и убылью количества частиц, не изменивших направления. Часто оптическая теорема представляет более простой способ вычислить полное сечение рассеяния — поскольку для него не требуется вычисления всей амплитуды рассеяния $f(\theta)$.

Для вывода соотношения унитарности рассмотрим объект $\hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger$ (по аналогии с $\operatorname{Im} f = (f - f^*)/2i$). Подставляя выражение (8.17), получим:

$$\begin{aligned} \hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger &= (1 - \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)})^{-1} \hat{V} - \hat{V} (1 - \hat{G}_E^{A(0)} \hat{V})^{-1} = (1 - \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)})^{-1} \left[\hat{V} (1 - \hat{G}_E^{A(0)} \hat{V}) - (1 - \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)}) \hat{V} \right] (1 - \hat{G}_E^{A(0)} \hat{V})^{-1} = \\ &= (1 - \hat{V} \hat{G}_E^{R(0)})^{-1} \hat{V} (\hat{G}_E^{R(0)} - \hat{G}_E^{A(0)}) \hat{V} (1 - \hat{G}_E^{A(0)} \hat{V})^{-1} \equiv \hat{T}_E (\hat{G}_E^{R(0)} - \hat{G}_E^{A(0)}) \hat{T}_E^\dagger \end{aligned} \quad (8.23)$$

Применим к функции Грина формулу Сохоцкого:

$$\hat{G}^{R(A)} = \frac{1}{E - \hat{H} \pm i0} = \mathcal{P} \frac{1}{E - \hat{H}} \mp i\pi \delta(E - \hat{H}), \quad (8.24)$$

которое нужно понимать, как определённое в базисе собственных функций гамильтониана, например, $\delta(E - \hat{H}) := \sum_n \delta(E - E_n) |n\rangle \langle n|$ ⁷. Тогда

$$\boxed{\hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger = -2\pi i \hat{T}_E \delta(E - \hat{H}_0) \hat{T}_E^\dagger.} \quad (8.25)$$

Переписывая это соотношение на языке амплитуды рассеяния с помощью (8.18), получим *соотношение унитарности*:

$$\boxed{f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = i \frac{k}{2\pi} \int d\mathbf{n}'' f(\mathbf{n}', \mathbf{n}'') f^*(\mathbf{n}, \mathbf{n}'').} \quad (8.26)$$

Если взять частный случай $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$, то получим оптическую теорему (8.22).

8.4 Борновское приближение

Ведущее приближение для T -матрицы есть $\hat{T}_E \approx \hat{V}$. Это приближение носит название *Борновского*. В нем амплитуда рассеяния выражается очень просто: как Фурье-образ потенциала, взятый на волновом векторе $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ (который соответствует переданному от потенциала частице импульсу при акте рассеяния):

$$\boxed{f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{m}{2\pi} \tilde{V}_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}} \quad (8.27)$$

Заметим что $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2)$, тогда для сферически симметричного потенциала

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{m}{2\pi} \tilde{V} \left(2k \sin \frac{\theta}{2} \right),} \quad (8.28)$$

Отметим, что в рамках формулы Борна, амплитуда рассеяния вперёд $f(\theta = 0) = -\frac{m}{2\pi} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r})$ — чисто вещественная величина; мнимость появляется лишь во втором порядке теории возмущений, поэтому оптическая теорема для формулы Борна не даёт никаких преимуществ.

⁷Это общий правильный подход к определению функций от матриц и операторов. Определение через разложение в ряд плохо тем, что возникает множество проблем с областью сходимости.

8.4.1 Применимость

Пусть потенциал имеет характерную глубину $\sim V_0$ и характерный линейный размер $\sim a$. Обсудим вопрос применимости Борновского приближения. Необходимо, чтобы поправка была мала $|\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \ll 1$. Это условие заведомо выполнено вдали от рассеивателя, т.к. там $\chi(r) \propto 1/r$. Существенно, что это условие должно быть также выполнено и при $r \lesssim a$. В Борновском приближении поправку (8.19) можно переписать в координатном представлении в следующем виде:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} + i\mathbf{k}\mathbf{r}'}{r'} V(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \quad (8.29)$$

Для оценки этого интеграла, принципиально важно различать случай «медленных» частиц $ka \lesssim 1$ и «быстрых» частиц $ka \gg 1$. Для медленных частиц, осцилляции в экспоненте слабые, и в рамках оценки мы можем заменить их на 1; интеграл оценивается как:

$$|\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \lesssim mV_0 a^2, \quad (ka \lesssim 1) \quad (8.30)$$

В случае $ka \gg 1$ сильно осциллирующая экспонента $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} + i\mathbf{k}\mathbf{r}' = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'(1+\cos\theta)}$ «обрежет» этот интеграл. Для его оценки вычислим объем области, ограниченной с одной стороны областью локализации потенциала, а с другой стороны, кривой, на которой фаза в экспоненте поменяется на величину порядка 1: $\mathbf{k}\mathbf{r}'(1+\cos\theta) \sim \mathbf{k}\mathbf{r}' \sin^2(\theta/2) \sim 1$. Поправка максимальна внутри ямы $r, r' \lesssim a$, и в этом случае можно видеть, что искомая область хорошо приближается частью конуса с углом раствора $\theta^* \sim 1/\sqrt{ka}$ (см. Рис. (8.2)), а вклад приходит с небольших углов $|\pi - \theta| \lesssim \theta^*$. Благодаря параметрической малости этой области, оценка интеграла для $\chi_{\mathbf{k}}$ оказывается более строгой: оценивая объем конуса как $(\theta^* a)^2 \cdot a \sim a^3/ka$ (в ka раз меньше, чем вся область потенциала), имеем

$$|\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \lesssim \frac{mV_0 a^2}{ka}, \quad (ka \gg 1) \quad (8.31)$$

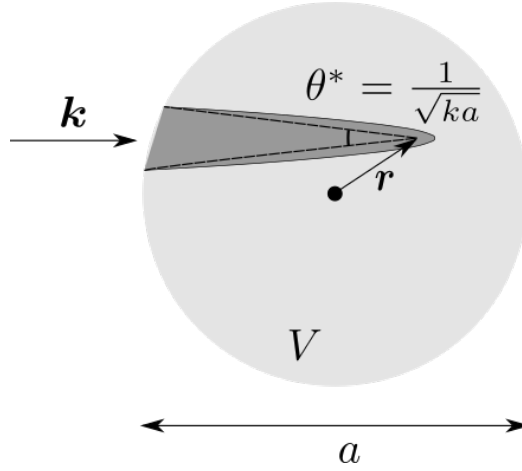


Рис. 8.2: Рассеяние быстрых частиц на локализованном потенциале; обозначена область, от которой приходит наибольший вклад в $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Из выражений (8.30) и (8.31) следует, что для выполнения условия $|\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \ll 1$ достаточно одного из двух условий: либо $mV_0 a^2 \ll 1$, что совпадает с условием на мелкую яму, либо $mV_0 a^2/(ka) \ll 1$, что является условием на то, что частицы движутся достаточно быстро. Последнее также интуитивно понятно — быстро движущиеся частицы проводят мало времени в поле потенциала и поэтому рассеиваются слабо.

$$\begin{aligned} mV_0 a^2 \ll 1 & \quad (\text{мелкая яма}) \\ & \quad \text{либо} \\ \frac{mV_0 a^2}{ka} \ll 1 & \quad (\text{быстрые частицы}) \end{aligned} \quad (8.32)$$

8.4.2 Рассеяние быстрых и медленных частиц

Обсудим ещё некие общие свойства рассеяния, которые выполняются и за рамками Борновского приближения, но на примере которого их можно проследить.

- Если частицы медленные (то есть $ka \ll 1$), то $V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \approx V_0$; зависимость от θ пропадает, и частицы рассеиваются изотропно (или, как говорят, рассеяние происходит в s -канале — смысл этих слов станет понятен на следующем семинаре).
- Для случая быстрых частиц $ka \gg 1$, поскольку масштаб Фурье-образа потенциала \tilde{V} равен $1/a$, то характерные углы рассеяния оказываются малыми $\theta \lesssim 1/ka$. Таким образом, быстрые частицы рассеиваются на малые углы (что интуитивно понятно из тех же квазиклассических соображений — ведь быстрые частицы пролетают «быстро», и не успевают «почувствовать» потенциал).

8.4.3 Золотое правило Ферми

Тот факт, что амплитуда рассеяния получилась пропорциональной Фурье-компоненте потенциала — это общее свойство Борновского приближения в пространстве любой размерности. Выше рассматривался трёхмерный случай, а здесь мы рассмотрим альтернативный вывод, который легко проделать в пространстве любой размерности. Воспользуемся золотым правилом Ферми (семинар про нестационарную теорию возмущений, переходы в непрерывном спектре). В качестве исходного состояния мы возьмём падающую волну $|i\rangle = |\mathbf{k}\rangle$, а в качестве конечного — рассеянную волну $|f\rangle = |\mathbf{k}'\rangle$. Матричный элемент возмущения как раз равен $V_{fi} \equiv V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$; и тогда золотое правило Ферми приводит к следующему выражению для количества переходов в единицу времени:

$$dN_{\text{расс}} \equiv d\omega_{i \rightarrow f} = 2\pi |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k'^2}{2m}\right) \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} = \frac{mk'^{d-2}}{(2\pi)^{d-1}} |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 \delta(k - k') dk' d\Omega \quad (8.33)$$

Наконец, интегрируя по модулю импульса конечных состояний и деля на плотность потока частиц в падающей волне $j_{\text{пад}} = \mathbf{k}/m$, мы немедленно получаем дифференциальное сечение рассеяния в пространстве произвольной размерности:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 k'^{d-3}}{(2\pi)^{d-1}} |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2} \quad (8.34)$$

В частности, при $d = 3$, несложно видеть, $d\sigma/d\Omega = m^2 |V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2 / 4\pi^2 \equiv |f(\theta)|^2$, где $f(\theta)$ даётся формулой Борна (8.28).

Недостатком этого способа является то, что он позволяет найти только сечение рассеяния, но не амплитуду, а в фазе амплитуды рассеяния (как мы видели в семинаре про непрерывный спектр) содержится содержательная информация.

8.4.4 Пример

В качестве примера решения задачи, рассмотрим в рамках Борновского приближения рассеяние на трёхмерном потенциале $V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-r^2/a^2}$. Его Фурье-гармоника даётся:

$$V_{\mathbf{q}} = V_0 \int d\mathbf{r} e^{-r^2/a^2 + i\mathbf{q}\mathbf{r}} = V_0 \int d\mathbf{r} e^{-\frac{1}{a^2}(\mathbf{r} - \mathbf{q}a^2/2)^2 - q^2 a^2/4} = \pi^{3/2} V_0 a^3 e^{-q^2 a^2/4}. \quad (8.35)$$

Заметим, что $q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2k^2(1 - \cos \theta)$; поэтому амплитуда рассеяния равна:

$$f(\theta) = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-q^2 a^2/4} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-k^2 a^2(1 - \cos \theta)/2}. \quad (8.36)$$

Наконец, для вычисления сечения рассеяния удобно заметить (это стандартный приём для трёхмерия!), что $\sin \theta d\theta = d(1 - \cos \theta) = \frac{d(q^2)}{2k^2}$. Поэтому полное сечение рассеяния равно:

$$\sigma = \frac{\pi^2}{4} \frac{m^2 a^6 V_0^2}{k^2} \int_0^{4k^2} d(q^2) e^{-q^2 a^2/4} = \frac{\pi^2 m^2 a^4 V_0^2}{k^2} (1 - e^{-k^2 a^2}). \quad (8.37)$$

Для медленных частиц $ka \ll 1$ это даёт $\sigma_{\text{slow}} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 a^2 \ll a^2$, а для быстрых — $\sigma_{\text{fast}} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 \frac{1}{k^2} \ll \sigma_{\text{slow}}$. В полном согласии с интуицией, быстрые частицы рассеиваются гораздо слабее (сечение меньше в $k^2 a^2 \gg 1$ раз); а сечение медленных частиц оказывается независимым от энергии. В обоих случаях рассеивание оказывается слабым (а именно, сечение рассеяния гораздо меньше геометрических размеров рассеивателя a^2).

8.5 Сферическая симметрия и базис сферических волн

В приложениях наиболее часто встречаются сферически симметричные потенциалы $V(r)$; тут и далее мы имеем в виду трёхмерное пространство. Как обычно, наличие сферической симметрии приводит к появлению дополнительного интеграла движения — орбитального момента \hat{L}^2 , благодаря которому в решении задачи рассеяния можно продвинуться ещё чуть дальше.

Напомним, решение общей задачи рассеяния сводится к нахождению решения стационарного уравнения Шрёдингера, имеющего специального вида асимптотику на больших расстояниях от рассеивателя:

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{r}) \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \quad (8.38)$$

(мы выбрали систему координат так, что падающая волна падает параллельно оси z). Как известно, произвольное решение этого уравнения можно разложить по базису сферических волн $\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$. Стоит обратить внимание, что конкретно в задаче рассеяния аксиальная симметрия (по углу ϕ) всё ещё имеет место, поэтому разложения будет идти только по сферическим гармоникам $Y_{l0}(\theta)$, которые (с точностью до константы) совпадают с полиномами Лежандра $P_l(\cos \theta)$. Поэтому общий вид такого разложения для задачи рассеяния имеет следующий вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r). \quad (8.39)$$

Радиальные волновые функции $R_l(r)$ удовлетворяют следующему уравнению:

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) + \left[k^2 - 2mV(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl}(r) = 0 \quad (8.40)$$

Стандартной подстановкой $R_{kl}(r) = \frac{\chi_{kl}(r)}{r}$ это уравнение сводится к одномерному уравнению Шрёдингера в потенциале $V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$; поправка к потенциалу носит название **центробежного потенциала**.

8.5.1 Свободное движение

Сперва исследуем, как решения этого уравнения ведут себя в отсутствии потенциала $V(r) \equiv 0$ (это обсуждалось в 1 упражнении 4 семинара). Например, если $l = 0$, то центробежный потенциал отсутствует, и решение выписывается тривиально: $\chi_{k0}(r) = 2 \sin kr \Rightarrow R_{k0}^{(0)}(r) = 2 \frac{\sin kr}{r}$ (константа выбрана для согласования обозначений с [ЛЛ02, §33 «сферические волны»]).

Для произвольного l подстановкой $R_{kl}(r) = \frac{Q_{kl}(r)}{\sqrt{r}}$ уравнение сводится к уравнению Бесселя с полуцелым индексом $l + \frac{1}{2}$; общий вид решения⁸: $R_{kl}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr)$. Используя известную асимптотику функций Бесселя на больших расстояниях, мы можем записать:

$$R_{kl}^{(0)}(r) \underset{kr \gg 1}{\approx} \frac{2}{r} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \quad (8.41)$$

8.5.2 Несвободное движение

В задаче рассеяния нас интересует лишь асимптотика волновой функции вдали от рассеивателя, где $V(r) = 0$. Поэтому при $r \rightarrow \infty$ движение можно считать свободным, и полная волновая функция $R_l(r)$ является в общем случае линейной комбинацией функции Бесселя и Неймана. Поэтому общий вид решения точного уравнения Шрёдингера на больших расстояниях имеет следующий вид:

$$R_l(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2}{r} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right) \quad (8.42)$$

⁸Вообще говоря, функции Бесселя с полуцелым индексом не являются спецфункциями. Функции $j_l(z) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z)$ носят название *сферических функций Бесселя*, и выражаются через элементарные функции — синусы и косинусы. В частности,

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}, \quad \dots$$

Величины δ_l носят название **фазовых сдвигов**. Они определяются видом потенциала $V(r)$, могут зависеть от энергии и всего остального. Вся необходимая информация о задаче рассеяния в заданном потенциале сводится лишь к этому набору чисел; через них можно выразить амплитуды и сечения рассеяния.

Логика дальнейшего рассуждения следующая. Мы раскладываем точное решение уравнения Шрёдингера по базису сферических волн (8.39). По этому же базису мы раскладываем правую часть равенства (8.38). Сравнивая асимптотики на бесконечности, считая величины δ_l известными, мы тем самым сможем через них выразить амплитуду $f(\theta)$ и, в конечном итоге, и сечение рассеяния σ .

8.5.3 Разложение плоской волны

Для реализации намеченной схемы, нам необходимо провести разложение плоской волны по сферическим, то есть найти неизвестные коэффициенты B_l в следующем равенстве:

$$e^{ikz} \equiv e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l P_l(\cos \theta) R_{kl}^{(0)}(r) \quad (8.43)$$

Наиболее простой способ это сделать можно найти в [ЛЛ02, §34 «разложение плоской волны»]. Мы разложим левую и правую часть в ряд Тейлора; заметим, что полиномы Лежандра, для которых можно воспользоваться формулой Родрига, имеют вид $P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d}{dt} [(t^2 - 1)^l] = \sum_{n=0}^l p_n^{(l)} t^n$ (полином степени l); а для функций Бесселя воспользуемся известным разложением их в ряд. Получаем следующее тождество:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(ikr \cos \theta)^l}{l!} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l \left[\sum_{n=0}^l p_n^{(l)} \cos^n \theta \right] \left[\sqrt{\frac{2\pi k}{r}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m + l + \frac{3}{2})} \left(\frac{kr}{2} \right)^{l + \frac{1}{2} + 2m} \right] \quad (8.44)$$

Прелесть этого равенства в том, что в правой части равенства только члены с $n = l$ и $m = 0$ дают вклад в множитель $(r \cos \theta)^l$; а остальные имеют вид $r^n (\cos \theta)^m$ ($n \neq m$), и, поскольку в левой части таких членов нет, они обязаны сократиться — как именно это происходит нас не сильно интересует. Старший член полиномов Лежандра тоже достаточно легко извлечь, используя всю ту же формулу Родрига и разложение в бином Ньютона; получаем $p_l^{(l)} = \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2}$. Наконец, необходимая гамма-функция имеет вид $\Gamma(l + \frac{3}{2}) = \sqrt{\pi} \cdot (2l + 1) \cdot \frac{(2l)!}{l! 2^{2l+1}}$. Собирая всё вместе, мы получаем $B_l = \frac{1}{2k} (2l + 1) e^{i\pi l/2}$ и тем самым разложение плоской волны имеет следующий вид⁹:

$$e^{ikz} = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{\pi l}{2}} (2l + 1) P_l(\cos \theta) R_l^{(0)}(r) \underset{kr \gg 1}{\approx} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{\pi l}{2}} (2l + 1) P_l(\cos \theta) \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \quad (8.45)$$

Тем самым падающая волна в сферическом базисе на самом деле раскладывается по суперпозиции падающих сферических волн e^{ikr}/r и отражённых сферических волн e^{-ikr}/r .

8.6 Основные результаты фазовой теории рассеяния

Раскладывая все слагаемые в определении (8.38) на падающие и отражённые сферические волны, используя разложение (8.39) и (8.45), мы получаем следующее равенство:

$$\frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \equiv \frac{1}{ir} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) \left[e^{-i\frac{\pi l}{2}} e^{ikr + i\delta_l} - e^{i\frac{\pi l}{2}} e^{-ikr - i\delta_l} \right] \quad (8.46)$$

Приравнивая коэффициенты при падающих волнах e^{-ikr} , мы получим: $A_l = \frac{1}{2k} (2l + 1) e^{i\frac{\pi l}{2}} e^{i\delta_l}$. Поэтому, приравнивая теперь коэффициенты при расходящихся волнах, мы получим:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (8.47)$$

⁹Существует и прямолинейный способ разложения: достаточно домножить левую и правую стороны на соответствующий полином Лежандра и воспользоваться соотношением ортогональности. Получаем интегральное представление для коэффициентов разложения, вычисление которого сводится к одному из интегральных представлений для функции Бесселя.

Используя свойство ортогональности полиномов Лежандра $\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \cdot \delta_{ll'}$, мы можем выразить сечение рассеяния:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (8.48)$$

Физический смысл этой формулы простой. В случае сферической симметрии, вклады в волновую функцию с различными l рассеиваются независимо; и полное сечение рассеяния является суммой сечений рассеяния в разных **каналах** (вкладов с различными l). Эти каналы рассеяния носят специальные название; в частности, каналы $l = 0, 1, 2, 3$ называют соответственно s-, p-, d-, f-каналами. Тем самым, когда говорят, что «рассеяние происходит в s-канале» — имеют в виду, что наибольший вклад в полное сечение рассеяния вносит парциальное сечение σ_0 .

Оптическая теорема Исходя из формул для $f(\theta)$ и σ , можно заметить следующее интересное тождество:

$$\text{Im} f(0) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \cos 2\delta_l) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \equiv \frac{k}{4\pi} \sigma \quad (8.49)$$

С этим тождеством — оптической теоремой — мы уже сталкивались на прошлом семинаре в общем случае. Тут же мы продемонстрировали, как оно возникает в рамках фазовой теории рассеяния.

8.7 Квазиклассика

Один из способов нахождения фазовых сдвигов — это метод WKB, или же метод квазиклассики, который прекрасно работает в довольно широком классе задач. Действительно, поскольку радиальные волновые функции $\chi_{kl}(r)$ удовлетворяют одномерному уравнению Шрёдингера в потенциале $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2}$, для них можно сразу записать квазиклассическое решение:

$$\chi_{kl}(r) \approx \sin \left(\int_{r_0}^r dr \sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2mV(r)} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (8.50)$$

Тут точка r_0 является квазиклассической точкой остановки, $E = V_{eff}(r_0)$. Тем самым, можно сразу же записать квазиклассическое выражение для фазовых сдвигов:

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} dr \left(\sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2mV(r)} - k \right) - kr_0 + \frac{\pi l}{2} + \frac{\pi}{4} \quad (8.51)$$

Обратим внимание на следующий факт. Пусть мы рассматриваем рассеяние быстрых частиц на потенциале конечного радиуса $\sim a$, так что $ka \gg 1$. Если бы никакого рассеивателя не было, то квазиклассической точкой остановки была бы $k^2 = \frac{l(l+1)}{r_0^2} \Rightarrow kr_0 \approx (l + \frac{1}{2})$. Если полученная точка остановки $r_0 > a$, то частицы с такими l не будут даже долетать до рассеивателя, и фазовые сдвиги будут экспоненциально подавлены. Тем самым мы заключаем, что рассеяние на высоких энергиях происходит преимущественно в каналах с $l + \frac{1}{2} \lesssim ka$ (в частности, та же аргументация показывает, что медленные частицы $ka \ll 1$ рассеиваются лишь в s-канале $l = 0$; этот же факт демонстрировался на примере формулы Борна, и, как уже было сказано ранее, он носит совершенно общий характер). Данное утверждение является тривиальным в классической физике: ведь орбитальный момент $L = \hbar l = \hbar k \cdot \rho$, где ρ — прицельный параметр; поэтому это утверждение показывает лишь, что $\rho \lesssim a$, что в классической физике совершенно очевидно.

Если потенциал $|V(r)| \ll E$, то выражение для δ_l можно разложить (при этом все «лишние фазы» снаружи интеграла обязаны сократиться — поскольку при $V(r) \equiv 0$, $\delta_l \equiv 0$):

$$\delta_l \approx - \int_{r_0}^{\infty} dr \frac{mV(r)}{\sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}}} \quad (8.52)$$

8.8 Примеры решения задач

Задача 1

Давайте рассмотрим рассеяние медленных частиц на твёрдом шаре радиуса a ($ka \ll 1$), описываемом следующим потенциалом:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (8.53)$$

Рассеяние происходит в s -канале, и точное решение уравнения Шрёдингера в s -канале записывается согласно $\chi_0(r) = \sin(k(r-a))$. Тем самым фазовый сдвиг имеет вид $\delta_0 = -ka$, а сечение рассеяния равно:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(ka) \approx 4\pi a^2 \quad (8.54)$$

Данное сечение оказывается ровно в 4 раза больше классического сечения рассеяния πa^2 ; это является следствием волновой природы частиц и дифракционными эффектами.

Задача 2

Другим примером задачи, которая тривиально решается при помощи фазовой теории рассеяния, является задача рассеяния на потенциале $U(r) = \frac{\beta}{2mr^2}$ (для произвольного параметра¹⁰ $\beta > -\frac{1}{4}$). Действительно, в таком случае эффективный потенциал имеет вид $V_{eff}(r) = \frac{\beta+l(l+1)}{2mr^2} \equiv \frac{l_{eff}(l_{eff}+1)}{2mr^2}$, где $l_{eff} = \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 + \beta} - \frac{1}{2}$; решение уравнения Шрёдингера в таком потенциале выражается через те же сферические функции Бесселя $j_{l_{eff}}(r)$; и тем самым, *точное* выражение для фазовых сдвигов имеет следующий вид:

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}(l_{eff} - l) = -\frac{\pi}{2} \left(\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \beta} - \left(l + \frac{1}{2}\right) \right) \quad (8.55)$$

Можно исследовать фазы рассеяния в случае слабого потенциала $\beta \ll 1$. При этом $\delta_l \approx -\frac{\pi}{4} \frac{\beta}{l+\frac{1}{2}} \ll 1$, и парциальные сечения рассеяния равны $\sigma_l = \frac{\pi^3 \beta^2}{2k^2} \frac{1}{l+\frac{1}{2}} \propto \frac{1}{l}$; а значит, полное сечение $\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$ расходится. Однако как и в случае рассеяния на кулоновском потенциале можно вычислить дифференциальное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \approx \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} \delta_l \delta_{l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{\pi^2 \beta^2}{4k^2} \left(\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \right)^2 \quad (8.56)$$

Последнюю сумму можно легко вычислить используя производящую функцию для полиномов Лежандра $\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) t^l = (1 - 2t \cos \theta + t^2)^{-1/2}$ полагая $t = 1$. В итоге для дифференциального сечения получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi^2 \beta^2}{4k^2} \frac{1}{(1 - \cos \theta)^2} \quad (8.57)$$

Любопытно отметить, что при интегрировании по углам интеграл расходится логарифмически так же как и сумма по парциальным сечениям.

¹⁰При $\beta \leq -\frac{1}{4}$ происходит **падение на центр** — гамильтониан становится неограниченным снизу. Физически это бессмысленно — частица может неограниченно «падать» на центр, бесконечно излучая энергию.

Часть II

Теоретический максимум

Глава 9

Открытые системы

9.1 Спин-бозонная модель

Задача данного семинара — на *микроскопическом* уровне изучить динамику открытой системы, взаимодействующей с окружением. Изучать её мы будем на примере простейшей модели, которую можно придумать — так называемой **спин-бозонной модели** (**spin-boson model**). Система (s, system) будет представлять собой двухуровневую систему (это может быть спин-1/2 в магнитном поле, это может быть частица в двухъямном потенциале — детали совершенно не важны), которую мы будем описывать на языке спина-1/2 и матриц Паули. В качестве модели окружающей среды (e, environment; также часто её называют **баней** — **bath**) мы возьмём набор гармонических осцилляторов. Гамильтониан всей системы имеет вид:

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_z}_{\hat{H}_s} + \underbrace{\sum_n \omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n}_{\hat{H}_e} + \underbrace{\hat{\sigma}_x \sum_n \lambda_n \hat{X}_n}_{\hat{V}}, \quad \hat{X}_n = \hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger \quad (9.1)$$

Такой вид взаимодействия обусловлен следующими простыми соображениями. Во-первых, ничего сложнее чем какая-то линейная комбинация матриц Паули для двухуровневой системы предложить нельзя; поэтому взаимодействие линейно по $\hat{\sigma}$; без ограничения общности¹ можно устроить взаимодействие именно посредством $\hat{\sigma}_z$. Во-вторых, мы будем предполагать, что отклонения осцилляторов от положения равновесия будут в каком-то смысле малы, и поэтому «сила» раскладывается линейно по отклонениям \hat{X} . Величины λ_n играют роль констант связи, которые будут предполагаться в каком-то смысле маленькими; по ним мы будем устраивать теорию возмущений.

В принципе, вся система s+e является замкнутой и допускает описание на языке волновых функций. Однако интересоваться мы будем именно динамикой двухуровневой системы, для описания которой необходимо ввести редуцированную матрицу плотности $\hat{\rho}_s(t) = \text{Tr}_e \hat{\rho}(t)$, где $\hat{\rho}(t)$ — матрица плотности всей системы, а операция Tr_e подразумевает взятие частичного следа по степеням свободы окружающей среды. Полученный в результате такой операции объект — это матрица 2×2 .

9.1.1 Представление взаимодействия

Работать мы будем в операторном формализме, используя представление взаимодействия по отношению к невозмущённому гамильтониану $\hat{H}_e + \hat{H}_s$ и с возмущением \hat{V} .

Среда

Динамика повышающих и понижающих операторов записывается просто:

$$\frac{d\hat{a}_n}{dt} = i[\hat{H}_e, \hat{a}_n] = i[\omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n, \hat{a}_n] = -i\omega_n \hat{a}_n \Rightarrow \hat{a}_n(t) = \hat{a}_n e^{-i\omega_n t}, \quad \hat{a}_n^\dagger(t) = \hat{a}_n^\dagger e^{i\omega_n t} \quad (9.2)$$

¹Ось x в данной задаче является выделенной, но взаимодействие вида $\hat{\sigma}_x \hat{X}$ в каком-то смысле тривиально — оно сохраняет $\hat{\sigma}_x$ и не приводит к релаксации. Подробнее — см. домашнюю задачу к этому семинару

Система Для матриц Паули мы получаем:

$$\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt} = i[\hat{H}_s, \hat{\sigma}_x] = \Delta\hat{\sigma}_y, \quad \frac{d\hat{\sigma}_y}{dt} = -\Delta\hat{\sigma}_x, \quad \frac{d\hat{\sigma}_z}{dt} = 0 \quad (9.3)$$

и решение записывается как:

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x(t) &= \hat{\sigma}_x \cos \Delta t + \hat{\sigma}_y \sin \Delta t \\ \hat{\sigma}_y(t) &= -\hat{\sigma}_x \sin \Delta t + \hat{\sigma}_y \cos \Delta t \\ \hat{\sigma}_z(t) &= \hat{\sigma}_z \end{cases} \quad (9.4)$$

Такая «тривиальная» невозмущённая эволюция тем самым описывает просто прецессию спина с угловой скоростью Δ вокруг направления «магнитного поля» z . Если же мы говорим, к примеру, о частице в двухъямном потенциале — то такая когерентная прецессия соответствует осцилляциям Раби. В контексте спинов или кубитов, такое представление также часто называют **приближением вращающейся волны (rotating wave approximation)**; это связано с тем, что в каком-то смысле оно эквивалентно переходу во вращающуюся систему отсчёта.

Возмущение

Соответственно, от гамильтониана с представлении взаимодействия остаётся только лишь возмущение. Последнее мы можем записать через один-единственный оператор «случайной силы» $\hat{\Phi}(t)$, с которой баня действует на нашу двухуровневую систему:

$$\hat{V}(t) = \hat{\sigma}_x(t)\hat{\Phi}(t), \quad \hat{\Phi}(t) = \sum_n \lambda_n \hat{X}_n(t) \quad (9.5)$$

В дальнейшем мы увидим, что явный вид «силы», который тут предложен, в действительности не сильно важен — а важны лишь определённые корреляционные функции этой силы.

9.1.2 Приближение Борна – Маркова

Полная матрица плотности в представлении взаимодействия удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i[\hat{\rho}(t), \hat{V}(t)] \quad (9.6)$$

Мы интересуемся следующей постановкой задачи. В начальный момент времени $t = 0$ баня находилась в равновесии с температурой T , и поэтому описывалась своей матрицей плотности $\hat{\rho}_e(0) = \frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}_e}$; а система была приготовлена со своей матрицей плотности $\hat{\rho}_s(0)$ (которая может соответствовать чистому состоянию $|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$, или описывать смешанное состояние — сейчас это не очень важно); и изначально мы предполагаем, что баня и система никак не взаимодействовали, $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_e(0) \otimes \hat{\rho}_s(0)$. В результате временной эволюции, происходит запутывание и матрица плотности больше не представляет собой простое тензорное произведение; поэтому, вообще говоря, не очень понятно, как брать частичный след в правой части уравнения (9.6).

Предлагается сделать несколько приближений. Первое приближение заключается в том, что если система достаточно маленькая, а среда — достаточно большая², то разумно считать, что матрица плотности среды практически не меняется с течением времени. Если мы, однако, предположим, что матрица плотности в произвольный момент времени выглядит как $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_e \otimes \hat{\rho}_s(t)$, и возьмём в уравнении (9.6) частичный след, мы немедленно получим ноль в правой части; и связано это с тем, что в равновесии средняя сила равна нулю:

$$\text{Tr}_e(\hat{\rho}_e \hat{\Phi}(t)) \equiv \langle \hat{\Phi}(t) \rangle = \sum_n \lambda_n \langle \hat{X}_n(t) \rangle = 0 \quad (9.7)$$

поэтому делать такое такое приближение наивно нельзя.

Можно, однако, обойти эту трудность, сделав серию тождественных преобразований в уравнении (9.6): сперва мы его проинтегрируем от какого-то произвольного момента времени t_0 до t , а затем полученное выражение подставим опять в правую часть уравнения³:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t_0) + i \int_{t_0}^t dt' [\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')] \Rightarrow \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = i[\hat{\rho}(t_0), \hat{V}(t)] - \int_{t_0}^t dt' \left[[\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')], \hat{V}(t) \right] \quad (9.8)$$

²Это, в общем-то, верно более или менее всегда

³Отметим, что в таком виде это пока тождественное преобразование!

В этом уравнении уже можно взять частичный след, предположив матрицу плотности в таком виде. Идеологически то что было сейчас проделано — это второй порядок теории возмущений по \hat{V} , и сделанное приближение носит название **Борновского приближения**. Беря частичный след слева и справа, и переходя к $\tau = t - t'$, мы получаем:

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = - \int_0^{t-t_0} d\tau \text{Tr}_e \left([[\hat{\rho}_s(t-\tau)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)] \right) \quad (9.9)$$

Как мы продемонстрируем далее явно, в результате взятия частичного следа возникнут корреляционные функции вида $S(t-t') \equiv \langle \hat{\Phi}(t)\hat{\Phi}(t') \rangle$ (несложно видеть, они зависят только от разности времён). Такие автокорреляционные функции определяются динамикой среды, и как правило, они быстро спадают до нуля на очень малых масштабах времени — если окружающая среда содержит огромное количество степеней свободы, то о корреляциях на сколь либо продолжительных временах говорить не приходится. Это приближение носит название **Марковского приближения**, и сводится оно к следующему физическому свойству окружающей среды — как правило, среда *не обладает памятью*.

Если предположить, что этот масштаб времени много меньше масштаба времени, на котором меняется сама матрица плотности, то можно заменить $\hat{\rho}_s(t-\tau) \mapsto \hat{\rho}_s(t)$, а также в силу сходимости интеграла, заменить его верхний предел до бесконечности. В результате мы получаем следующее **квантовое кинетическое уравнение (master equation)**:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = - \int_0^\infty d\tau \text{Tr}_e \left([[\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t)] \right)} \quad (9.10)$$

В таком виде это — система линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами на компоненты матрицы плотности $\hat{\rho}_s$. Если окружающая среда не обладает памятью, то самый общий вид квантового кинетического уравнения имеет вид **уравнения Линблада**⁴:

$$\frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} = i[\hat{\rho}_s(t), \hat{H}_s] + \mathcal{L}\hat{\rho}_s(t) \quad (9.11)$$

В правой части стоит супероператор — линейный оператор, действующий на пространстве линейных операторов — носящий название оператора Линблада; он имеет смысл аналога **интеграла столкновений** в обычном кинетическом уравнении. Оператор этот не может быть произвольным — даже при взаимодействии с окружающей средой, такое уравнение должно сохранять нормировку $\text{Tr}\hat{\rho}_s(t) = 1$ и положительную определённую матрицу $\hat{\rho}_s$. То что мы сейчас получили — это явный вид оператора Линблада в приближении Борна-Маркова.

Явный вид

Чтобы продвинуться дальше, давайте подставим явный вид возмущения и раскроем коммутаторы:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = - \int_0^\infty d\tau \text{Tr}_e \left(\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\Phi}(t-\tau)\hat{\sigma}_x(t)\hat{\Phi}(t) - \hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\Phi}(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e\hat{\sigma}_x(t)\hat{\Phi}(t) \right. \\ \left. - \hat{\sigma}_x(t)\hat{\Phi}(t)\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\Phi}(t-\tau) + \hat{\sigma}_x(t)\hat{\Phi}(t)\hat{\sigma}_x(t-\tau)\hat{\Phi}(t-\tau)\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e \right) \quad (9.12) \end{aligned}$$

Подчёркнуты операторы, которые действуют на степени свободы окружающей среды (и которые, собственно, участвуют в операции взятии следа). При взятии следа мы:

- можем как угодно менять местами подчёркнутые и не подчёркнутые операторы — ведь они действуют на разные степени свободы, и потому коммутируют.
- не можем менять относительный порядок подчёркнутых операторов (аналогично и с не подчёркнутыми) — их коммутатор в общем случае отличен от нуля.
- можем циклически переставлять подчёркнутые операторы как хотим — из-за операции взятии следа

⁴Отметим, что оно записывается в представлении Шрёдингера, поэтому добавляется член, описывающий собственную динамику с гамильтонианом \hat{H}_s .

Наконец, введя следующие корреляционные функции:

$$S_{>}(\tau) = \text{Tr}_e(\hat{\rho}_e \hat{\Phi}(t) \hat{\Phi}(t - \tau)), \quad S_{<}(\tau) \equiv \text{Tr}_e(\hat{\rho}_e \hat{\Phi}(t - \tau) \hat{\Phi}(t)) = S_{>}(-\tau) \quad (9.13)$$

мы можем избавиться от частичного следа и получить:

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = - \int_0^\infty d\tau (S_{<}(\tau) [\hat{\rho}_s(t) \hat{\sigma}_x(t - \tau) \hat{\sigma}_x(t) - \hat{\sigma}_x(t) \hat{\rho}_s(t) \hat{\sigma}_x(t - \tau)] + S_{>}(\tau) [\hat{\sigma}_x(t) \hat{\sigma}_x(t - \tau) \hat{\rho}_s(t) - \hat{\sigma}_x(t - \tau) \hat{\rho}_s(t) \hat{\sigma}_x(t)]) \quad (9.14)$$

9.1.3 Корреляционные функции среды

Дальше нам необходимо научиться вычислять корреляционные функции среды:

$$S_{>}(t) = \langle \hat{\Phi}(t) \hat{\Phi}(0) \rangle = \sum_{nm} \lambda_n \lambda_m \langle \hat{X}_n(t) \hat{X}_m(0) \rangle = \sum_n \lambda_n^2 \langle (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_n^\dagger e^{i\omega_n t}) (\hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger) \rangle = \sum_n \lambda_n^2 (\langle \hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger \rangle e^{-i\omega_n t} + \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \rangle e^{i\omega_n t}) \quad (9.15)$$

Тут мы воспользовались тем, что осцилляторы независимы — поэтому остаются только члены $n = m$; и что средние значения $\langle \hat{a}_n \hat{a}_n \rangle = \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n^\dagger \rangle = 0$, поскольку матрица плотности диагональна в представлении чисел заполнения:

$$\hat{\rho}_e^{(n)} = \frac{1}{Z_n} e^{-\beta \omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n} \equiv \frac{1}{Z_n} \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle \langle k| \cdot e^{-\beta \omega_n k} \quad (9.16)$$

Отличные от нуля средние — следующие:

$$\langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \langle k | \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n | k \rangle e^{-\beta \omega_n k}}{\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta \omega_n k}} \equiv \frac{\sum_{k=0}^{\infty} k e^{-\beta \omega_n k}}{\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta \omega_n k}} = n_B(\omega_n) \equiv \frac{1}{e^{\beta \omega_n} - 1}, \quad \langle \hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \rangle + 1 \quad (9.17)$$

Поскольку числа заполнения являются функциями энергии, то можно заметить, что вся информация о среде содержится в следующей функции — так называемой **спектральной плотности среды**:

$$J(\omega) \equiv \pi \sum_n \lambda_n^2 \delta(\omega - \omega_n) \quad (9.18)$$

Континуальный предел для среды как раз будет представлять собой замену $J(\omega)$ на некоторую непрерывную функцию частоты; её явный вид мы обсудим позже, а пока перепишем корреляционную функцию среды в следующем виде:

$$S_{>}(t) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) ((n_B(\omega) + 1) e^{-i\omega t} + n_B(\omega) e^{i\omega t}) \Rightarrow S_{>}(\omega) = 2\tilde{J}(\omega) (n_B(\omega) + 1) \quad (9.19)$$

$$S_{<}(t) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) (n_B(\omega) e^{-i\omega t} + (n_B(\omega) + 1) e^{i\omega t}) \Rightarrow S_{<}(\omega) = 2\tilde{J}(\omega) n_B(\omega) \quad (9.20)$$

где обозначено $\tilde{J}(\omega) \equiv J(\omega) - J(-\omega)$ и использовано $n_B(\omega) + 1 = -n_B(-\omega)$.

9.1.4 Уравнения Блоха

В принципе, дальше можно было бы подставить явный вид матриц Паули в представлении взаимодействия, и получить систему из 4 уравнений на 4 компоненты матрицы плотности. Однако, более наглядным является представление Блоха, которое параметризует матрицу плотности произвольной двухуровневой системы при помощи вектора \mathbf{n} согласно:

$$\hat{\rho}_s(t) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbb{I}} + \mathbf{n}(t) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_z & n_- e^{-i\Delta t} \\ n_+ e^{i\Delta t} & 1 - n_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}(t) \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}_s(t) \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)) = \langle \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \rangle_s \quad (9.21)$$

(у вектора наглядный физический смысл — он представляет собой вектор поляризации спина). Напишем уравнения на компоненты вектора \mathbf{n} :

$$\frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \text{Tr} \left(\frac{d\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t)}{dt} \hat{\rho}_s(t) \right) + \text{Tr} \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} \right) = i \left\langle \left[\hat{H}_s, \hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \right] \right\rangle_s + \text{Tr} \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}(t) \frac{d\hat{\rho}_s(t)}{dt} \right) \quad (9.22)$$

Первый член тривиален, он описывает когерентную прецессию в отсутствии взаимодействия, см. (9.3); поэтому мы сфокусируемся на втором члене, подставив в него (9.14), а также все операторы в представлении взаимодействия; исследуем

что получилось покомпонентно. Сразу отметим, что уравнение на x -компоненту тривиально — $\frac{dn_x^{(2)}}{dt} = 0$. Связано это с тем, что $[\hat{\sigma}_x, \hat{V}] = 0$ — и поэтому точное уравнение имеет вид:

$$\boxed{\frac{dn_x(t)}{dt} = -\Delta n_y(t)}$$

Z-компонента

Подставляя и упрощая, получаем:

$$\frac{dn_z^{(2)}(t)}{dt} = -2 \int_0^\infty d\tau [n_z(t) S_K(\tau) \cos \Delta\tau - i S_R(\tau) \sin \Delta\tau] \quad (9.23)$$

где обозначены так называемые Келдышевские (K) и запаздывающие (R, retarded) корреляционные функции:

$$S_K(\tau) \equiv S_>(\tau) + S_<(\tau) \equiv \left\langle \left\{ \hat{\Phi}(\tau), \hat{\Phi}(0) \right\} \right\rangle, \quad S_R(\tau) \equiv \theta(\tau) (S_>(\tau) - S_<(\tau)) \equiv \theta(\tau) \left\langle \left[\hat{\Phi}(\tau), \hat{\Phi}(0) \right] \right\rangle \quad (9.24)$$

Вычислим стоящие тут преобразования Фурье (используя тот факт, что $S_K(\tau) \equiv S_K(-\tau)$ и $2n_B(\omega) + 1 = \coth \frac{\beta\Delta}{2}$):

$$2 \int_0^\infty d\tau S_K(\tau) \cos \Delta\tau = S_K(\omega = \Delta) = 2J(\Delta) \coth \frac{\beta\Delta}{2} \quad (9.25)$$

$$2i \int_0^\infty d\tau S_R(\tau) \sin \Delta\tau = S_>(\omega = \Delta) - S_<(\omega = \Delta) = 2J(\Delta) \quad (9.26)$$

Поэтому мы перепишем уравнение на z -компоненту в следующем виде:

$$\boxed{\frac{dn_z(t)}{dt} = -\frac{n_z(t) - n_z^{(eq)}}{T_1}, \quad \frac{1}{T_1} = 2J(\Delta) \coth \frac{\beta\Delta}{2}, \quad n_z^{(eq)} = \tanh \frac{\beta\Delta}{2}} \quad (9.27)$$

Это уравнение описывает процессы **релаксации**. Произвольное начальное значение намагниченности будет релаксировать за время T_1 (которое носит название времени релаксации) к своему равновесному значению $n_z^{(eq)}$ по закону $n_z(t) = n_z^{(eq)} + (n_z(0) - n_z^{(eq)})e^{-t/T_1}$. Отметим, что величина $n_z^{(eq)}$ совпадает со средней «намагниченностью», если система, описываемая гамильтонианом \hat{H}_s , будет находиться в термодинамическом равновесии с температурой, которая совпадает с температурой бани T . Тем самым, за время T_1 происходит **термализация** — устанавливается равновесие.

Для термализации необходимо, чтобы происходили реальные процессы переворота спина — при этом система должна забирать из бани (или отдавать туда) энергию Δ . Поэтому тот факт, что скорость релаксации оказалась пропорциональна $J(\Delta)$ — не удивительно; ведь если в окружающей среде, скажем, осцилляторы с частотой Δ отсутствовали бы, то было бы невозможно диссипировать в неё квант энергии Δ (во всяком случае, в первом порядке теории возмущений).

Y-компонента Аналогично, путём прямых вычислений мы получаем:

$$\frac{dn_y^{(2)}(t)}{dt} = -2 \int_0^\infty d\tau S_K(\tau) (n_y(t) \cos \Delta\tau + n_x(t) \sin \Delta\tau) \quad (9.28)$$

Первый член уже был сосчитан ранее, а вот второй отличается — он не сводится к преобразованию Фурье и для его вычисления требуется регуляризация $e^{-\epsilon\tau}$ — которая, после использования формулы Сохоцкого, говорит нам, что оставшийся интеграл по частоте нужно брать в смысле главного значения:

$$2 \int_0^\infty d\tau S_K(\tau) \sin \Delta\tau = 2 \int (d\omega) \tilde{J}(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \sin \Delta\tau = -\text{v.p.} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} \frac{2\Delta}{\omega^2 - \Delta^2} \quad (9.29)$$

Окончательно, собирая всё вместе, уравнение на y -компоненту выглядит следующим образом:

$$\boxed{\frac{dn_y}{dt} = (\Delta - 2\delta)n_x(t) - \frac{n_y(t)}{T_2/2}, \quad \frac{1}{T_2} = J(\Delta) \coth \frac{\beta\Delta}{2}, \quad \delta = \text{v.p.} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} \frac{2\Delta}{\omega^2 - \Delta^2}} \quad (9.30)$$

Выбор двоек в этом уравнении мотивирован следующим соображением. Полученная система линейных дифференциальных уравнений описывается следующей матрицей:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ \Delta - 2\delta & 2/T_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} \quad (9.31)$$

которая имеет собственные частоты $\omega_{1,2} \approx \pm(\Delta - \delta) - \frac{i}{T_2}$. Поэтому величина δ — это поправка к частоте Δ , а затухание всех решений происходит как e^{-t/T_2} .

Вклад δ носит название **Лэмбовского сдвига**⁵, он отвечает за перенормировку частоты «прецессии» Δ , связанную со взаимодействием с окружающей средой. В контексте двухъямного потенциала, Δ имеет смысл туннельного матричного элемента; тот факт, что δ уменьшает эффективную величину⁶ Δ , является демонстрацией того, как взаимодействие с окружающей средой подавляет туннелирование. Хотя уравнения были написаны в рамках теории возмущений, можно показать, что в данной модели имеется квантовый фазовый переход — при достаточно сильном взаимодействии со средой, туннелирование подавляется до нуля.

Наконец, член T_2 носит название **дефазировки**, он подавляет поперечную компоненту $n_{x,y}(t)$ так, что они начинают затухать как e^{-t/T_2} . На этом характерном времени затухают когерентные осцилляции Раби. Имеется наглядный способ представить себе дефазировку. Давайте рассмотрим ансамбль спинов, вращающихся *когерентно (синфазно)* вокруг оси z с одинаковой частотой Δ . Однако, из-за взаимодействия с «шумом», индуцированным окружающей средой, частота каждого из этих спинов чуть «дрожит», из-за чего каждый из них начинает вращаться с чуть изменённой частотой. Хотя на малых временах эта поправка будет незаметна, и динамика будет оставаться когерентной — однако спустя какое-то время спины окажутся совершенно случайным образом разбросаны в плоскости, и среднее значение проекции спина на плоскость xy выйдет на нулевое значение.

Подчёркнём, что физически члены T_1 и T_2 имеют совершенно разную природу, и отвечают за различные физические процессы (хотя в рамках тривиальной теории возмущений и получилось, что они отличаются в два раза — в реальной жизни они могут быть совершенно различными; в частности, в домашней задаче будет предложена модель с отсутствующей релаксацией, но с наличием дефазировки). Грубо говоря, время T_2 — это время, в течение которого в нашей кванто-механической системе ещё могут наблюдаться какие-либо когерентные квантовые эффекты, и после которого система ведёт себя в большой мере классически. Время T_1 же говорит нам, когда измеряемые значения наблюдаемых перестанут зависеть от времени (разумеется, усреднив по быстрым квантовым осцилляциям).

9.1.5 О спектральной плотности

Всю информацию о структуре окружающей среды мы «спрятали» в спектральную функцию $J(\omega)$. С другой стороны, мы пока ничего не говорили о том, как $J(\omega)$ устроена. Она зависит от констант связи и от плотности состояний в бане; как правило, последняя растёт как какая-то степень частоты; как следствие, типичное поведение — это $J(\omega) \propto \omega^s$. С другой стороны, как правило в окружающей среде нельзя найти моды со сколь угодно большими частотами — у функции $J(\omega)$ может иметься обрезка на какой-то достаточно большой частоте⁷ ω_c , выше которой $J(\omega)$ быстро спадает до нуля. Наличие такой обрезки может быть существенно для некоторых эффектов, которые происходят от ультрафиолетовых степеней свободы бани (к примеру, при исследовании Лэмбовского сдвига).

По поведению скорости релаксации при $\Delta \rightarrow 0$, выделяют несколько случаев:

- **Омическая баня:** $s = 1$, $J(\omega) = \pi\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$. При этом $\frac{1}{T_{1,2}} \rightarrow \text{const}$ при $\Delta \rightarrow 0$. Наиболее часто встречаемый и простой тип «бани».
- **Суб-омическая баня:** $s < 1$, $\frac{1}{T_{1,2}} \rightarrow \infty$ при $\Delta \rightarrow 0$.
- **Супер-омическая баня:** $s > 1$, $\frac{1}{T_{1,2}} \rightarrow 0$ при $\Delta \rightarrow 0$.

⁵Вообще говоря, вы наверняка уже слышали про Лэмбовский сдвиг, но в другом контексте. Исходно так называется расщепление между $^2S_{1/2}$ и $^2P_{1/2}$ уровнями энергии атома водорода, которое имеет порядок α^3 ($\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры) и вызванное релятивистскими эффектами — петлевыми поправками КЭД, за счёт рассмотрения виртуальных процессов рождения и уничтожения фотонов в старших порядках теории возмущений.

Можно на это смотреть и с точки зрения динамики открытых систем: Лэмбовский сдвиг возникает за счёт взаимодействия с нулевыми колебаниями фотонной «бани». Поэтому, как это ни странно, Лэмбовский сдвиг в КЭД и в нашей задаче имеют весьма схожую природу.

Тот факт, что он определяется не только степенями свободы бани, что находятся в резонансе — на частоте Δ — а интегралом по всем частотам, говорит о том, что он имеет природу поправки, связанной с виртуальными процессами. Скорее всего, эту формулу (скажем, при $T = 0$) можно получить исходя из стандартной формулы для второго порядка теории возмущений.

⁶Основной вклад в интеграл, как правило, приходит от частот $\omega \gg \Delta$, и поэтому величина δ положительна.

⁷Если баня обеспечена фоновыми степенями свободы, то ω_c — это частота Дебая, выше которой фононов нет. Если это фермионная баня (которая, конечно, требует отдельного рассмотрения), то в роли обрезки может выступать энергия Ферми.

9.2 Подавление туннелирования в двухуровневой системе

9.2.1 Пертурбативное рассмотрение

Исследуем чуть более подробно роль Лэмбовского сдвига δ , полученного для спин-бозонной модели ранее. Напомним, его роль заключается в подавлении матричного элемента $\Delta_{\text{eff}} = \Delta - \delta$, отвечающего туннельной амплитуде или частоте когерентных осцилляций Раби для двухъямного потенциала. Для простоты, мы будем исследовать случай нуля температур $T = 0$, и омическую баню $J(\omega) = \pi\alpha\omega\theta(\omega_c - \omega)$, считая $\omega_c \gg \Delta$. Прямое вычисление (9.30) даёт:

$$\delta = \text{v.p.} \int_0^{\omega_c} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \pi\alpha\omega \cdot \frac{2\Delta}{\omega^2 - \Delta^2} \approx 2\alpha\Delta \ln \frac{\omega_c}{\Delta} \quad (9.32)$$

Мы получили логарифмический интеграл, который набирается на всех масштабах, начиная от Δ и заканчивая ультрафиолетовой обрезкой на больших частотах ω_c (в отличие от всех предыдущих членов, которые определялись резонансным поведением — осцилляторами с частотами $\omega \approx \Delta$). Это значит, что несмотря на малость величины α , сам ответ δ вполне может оказаться сравним с Δ !

В старших порядках теории возмущений, вообще говоря, могут возникать такие же большие члены $(\alpha \ln \frac{\omega_c}{\Delta})^n$; и если логарифм достаточно большой, то, по-хорошему, такие члены нужно учитывать все. Систематический способ учёта логарифмических расходимостей в рамках теории возмущений вплоть до бесконечных порядков возможен, и составляет суть метода *ренормгруппы*. С ним вы ознакомитесь позже, а здесь мы ограничимся более простым и физически наглядным способом, который приводит к такому же результату.

9.2.2 Адиабатическое рассмотрение

Итак, мы получили логарифмическую поправку, которая приходит из широкого диапазона частот. Подавляющий вклад дают «быстрые» степени свободы бани с частотами $\omega_c \gg \omega \gg \Delta$. К счастью, когда имеется разделение быстрых и медленных степеней свободы, на помощь приходит адиабатическое приближение, которым можно воспользоваться и в этой задаче.

С точки зрения быстрых осцилляторов, удобно работать в базисе собственных состояний оператора $\hat{\sigma}_x$, соответствующих «частице в левой яме» $|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\sigma_x = -1$ и «частице в правой яме» $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sigma_x = +1$ (в терминах двухъямного потенциала). Для анализа поведения системы, перепишем гамильтониан осцилляторов обратно в терминах операторов координаты $\hat{X} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger$ и импульса $\hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2i}$, так что $[\hat{X}, \hat{P}] = i$:

$$\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n = \left(\frac{\hat{X}_n}{2} - i\hat{P}_n \right) \left(\frac{\hat{X}_n}{2} + i\hat{P}_n \right) = \hat{P}_n^2 + \frac{1}{4}\hat{X}_n^2 + \text{const} \quad (9.33)$$

В таком случае, с точки зрения «быстрых» осцилляторов, нахождение частицы в левой или правой яме соответствует попросту сдвигу центра осциллятора:

$$\hat{H}_n \simeq \omega_n \left(\hat{P}_n^2 + \frac{1}{4}\hat{X}_n^2 \mp \frac{\lambda_n}{\omega_n}\hat{X}_n \right) = \omega_n \left(\hat{P}_n^2 + \frac{1}{4} \left[\hat{X}_n \mp 2\frac{\lambda_n}{\omega_n} \right]^2 \right) + \text{const} \quad (9.34)$$

и основное состояние такого «сдвинутого» осциллятора устроено как $e^{\pm i\hat{P}_n \cdot 2\frac{\lambda_n}{\omega_n}} |0_n\rangle$ (применили оператор трансляции). Поскольку быстрые осцилляторы «подстраиваются» под движение медленной двухуровневой подсистемы, с точки зрения «быстрых» осцилляторов полная волновая функция системы при этом соответствует следующей:

$$|\leftarrow\rangle_{\text{tot}} = |\leftarrow\rangle \otimes \prod_{\omega_n \gg \Delta} e^{2i\frac{\lambda_n}{\omega_n}\hat{P}_n} |0_n\rangle, \quad |\rightarrow\rangle_{\text{tot}} = |\rightarrow\rangle \otimes \prod_{\omega_n \gg \Delta} e^{-2i\frac{\lambda_n}{\omega_n}\hat{P}_n} |0_n\rangle, \quad (9.35)$$

где тензорное произведение берётся по всем осцилляторам бани.

Из-за смещения осцилляторов из «бани», меняется также и эффективный матричный элемент, определяющий динамику двухуровневой системы: $\Delta_{\text{eff}} \equiv 2 \langle \leftarrow | \hat{H}_{\text{spin}} | \rightarrow \rangle = \Delta \cdot \prod_{\omega_n \gg \Delta} \left\langle e^{-4i\frac{\lambda_n}{\omega_n}\hat{P}_n} \right\rangle_n$. Последнее произведение несложно вычислить (включая усреднение по основному состоянию осциллятора⁸), и получить:

⁸Например, можно взять волновую функцию основного состояния в импульсном представлении и сосчитать гауссов интеграл. Для вычисления этого среднего при произвольной температуре удобно использовать общую формулу $\langle e^{\alpha a + \beta a^\dagger} \rangle = e^{\frac{1}{2}(\alpha a + \beta a^\dagger)^2}$, которая работает и для усреднения по температурной матрице плотности.

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta \cdot \exp \left(-2 \sum_{\omega_n \gg \Delta} \frac{\lambda_n^2}{\omega_n^2} \right) = \Delta \cdot \exp \left(-\frac{2}{\pi} \int_{\omega \gg \Delta} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \right) \simeq \Delta \cdot \exp \left(-2\alpha \ln \frac{\omega_c}{\Delta} \right) \quad (9.36)$$

В первом приближении это выражение совпадает с пертурбативным результатом (в пределе малых α), однако в этом выводе мы не накладывали никаких ограничений на α . Кроме того, заметим, что в действительности нижняя обрезка полученного логарифмического интеграла выбиралась из условия адиабатичности; поскольку *реальная* динамика двухуровневой подсистемы определяется именно Δ_{eff} , а не Δ , то это выражение нужно исправить и взять в качестве нижней обрезки именно Δ_{eff} . Это позволяет записать следующее уравнение самосогласования:

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta \left(\frac{\Delta_{\text{eff}}}{\omega_c} \right)^{2\alpha} \Rightarrow \Delta_{\text{eff}} = \Delta \cdot \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\frac{2\alpha}{1-2\alpha}} \quad (9.37)$$

Мы получили замечательный непертурбативный результат: в данной системе имеется *квантовый фазовый переход* при $\alpha = \frac{1}{2}$. При $\alpha < \frac{1}{2}$, система ведёт себя как квантовая двухуровневая система, в ней наблюдается туннелирование и осцилляции Раби (с перенормированной частотой Δ_{eff}). Однако при достаточно сильной связи с окружающей средой, а именно, при $\alpha > \frac{1}{2}$, единственное решение уравнений самосогласования — это $\Delta_{\text{eff}} = 0$. Это означает полное подавление квантового туннелирования; с точки зрения двухъямного потенциала, частица, «посаженная» в одну из ям, там и остаётся.

9.3 Модель Калдейры – Леггетта

На этом семинаре мы обсудим микроскопическую модель диссипативной квантовой механики одной частицы, предложенную Калдейрой и Леггеттом. Заметим, что каким-нибудь тривиальным образом включить трение в квантовую механику не получится — гамильтонов формализм требует сохранения энергии и фазового объема. Но оказывается, что диссипативная механика получается естественным образом в системе частица-бани, как *эффективная* теория для частицы, полученная исключением степеней свободы бани⁹. При этом неизбежно возникает и второй компонент эффективного описания — *случайная сила*, действующая на частицу, характеристики которой, как мы увидим ниже, жёстко связаны с диссипативной частью.

Гамильтониан мы запишем в следующем виде:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\hat{X})}_{\hat{H}_s} + \underbrace{\sum_n \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m_n} + \frac{m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2}{2} \right)}_{\hat{H}_e} + \underbrace{\sum_n \left(-c_n \hat{x}_n \hat{X} + \frac{c_n^2}{2m\omega_n^2} \hat{X}^2 \right)}_{\hat{V}} \quad (9.38)$$

Величины c_n играют роль констант связи с баней. Член $\propto \hat{X}^2$ был написан для того, чтобы взаимодействие с осцилляторами «собиралось» в виде полного квадрата:

$$\frac{m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2}{2} - c_n \hat{x}_n \hat{X} + \frac{c_n^2}{2m\omega_n^2} \hat{X}^2 \equiv \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \left(\hat{x}_n - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \hat{X} \right)^2 \quad (9.39)$$

Такой гамильтониан «уважает» трансляционную инвариантность в случае отсутствия потенциала $V(X) = 0$ (сдвигка $X \mapsto X + a$, сопровождаемая сдвижкой $\hat{x}_n \mapsto \hat{x}_n + \frac{c_n}{m\omega_n^2} a$, оставляет гамильтониан инвариантным) — и поэтому, когда осцилляторы находятся в равновесии, средняя сила, действующая со стороны бани, равна нулю. Отклонение же любого из осцилляторов из положения равновесия вызывает дополнительную силу, действующую на исходную частицу.

9.3.1 Приближение Борна – Маркова

Сперва обсудим, как можно было бы, по аналогии со спин-бозонной моделью, попытаться вывести кинетическое уравнение на матрицу плотности частицы, в приближении слабой связи. В предыдущей задаче мы могли явно выписать невозмущённую динамику как системы, так и бани, что позволило нам обсудить поведение системы, когда характерные частоты бани и внутренней динамики системы одного порядка.

Полностью аналогичное вычисление можно проделать для простых случаев, допускающих точное решение — к примеру, свободной частицы, осциллятора, линейного потенциала. Без указания явного вида потенциала, его проделать невозможно — мы попросту не сможем выписать представление взаимодействия для невозмущённой системы. Тем не менее,

⁹Калдейра и Леггетт исключали степени свободы бани взятием функционального интеграла; мы же будем пользоваться операторным формализмом

мы можем это сделать в **квазиклассическом** пределе, когда динамика бани гораздо быстрее динамики системы — в таком случае достаточно использовать представление взаимодействие только для бани. Уравнение на матрицу плотности в таком случае запишется в следующем виде:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i[\hat{\rho}(t), \hat{H}_s] + i[\hat{\rho}(t), \hat{V}(t)], \quad \hat{V}(t) = \hat{\Phi}(t)\hat{X}, \quad \hat{\Phi}(t) = \sum_n c_n \hat{x}_n(t) \quad (9.40)$$

Дальнейший вывод производится так же — мы интегрируем это уравнение по отрезку $[t_0, t]$; дополнительное различие заключается в том, что мы подставляем полученное выражение для $\hat{\rho}(t)$ только во второе слагаемое. Наконец, беря след по степеням свободы бани, и используя тот факт, что корреляционные функции $\hat{\Phi}(t)$ локальны во времени, мы получаем кинетическое уравнение в несколько ином виде:

$$\boxed{\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = i[\hat{\rho}_s(t), \hat{H}_s] - \int_0^\infty d\tau \text{Tr}_e \left([\hat{\rho}_s(t)\hat{\rho}_e, \hat{V}(t-\tau)], \hat{V}(t) \right)} \quad (9.41)$$

Подчеркнём различие с предыдущим случаем — и сделанное дополнительное приближение. Тут имеется член, отвечающий динамике с \hat{H}_s , поскольку мы не производили переход в представление взаимодействия с \hat{H}_s ; и в связи с этим, выражение для $\hat{V}(t)$ не содержит временную зависимость оператора координаты \hat{X} . Физически это отвечает квазиклассическому пределу — предположению о медленной динамике системы по сравнению с баней. Дальнейшее рассмотрение этого уравнения предлагается проделать в качестве домашнего упражнения.

9.3.2 Операторный формализм

Вместо этого мы будем исследовать операторные уравнения движения для частицы и осцилляторов — уравнения Гейзенберга. В действительности удобно писать уравнения на смещения $\hat{y}_n \equiv \hat{x}_n - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \hat{X}$. Они имеют следующий вид:

$$\begin{cases} d\hat{X}/dt = \hat{P}/M \\ d\hat{P}/dt = -\partial V/\partial X + \sum_n c_n \hat{y}_n \end{cases}, \quad \begin{cases} d\hat{y}_n/dt = \hat{p}_n/m_n - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \frac{d\hat{X}}{dt} \\ d\hat{p}_n/dt = -m_n\omega_n^2 \hat{y}_n \end{cases} \quad (9.42)$$

или, исключая импульсы:

$$M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial X} - \sum_n c_n \hat{y}_n = 0, \quad \frac{d^2 \hat{y}_n}{dt^2} + \omega_n^2 \hat{y}_n = -\frac{c_n}{m\omega_n^2} \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} \quad (9.43)$$

Наша задача — исключить степени свободы бани (осцилляторы) — и получить уравнения, описывающие движение только частицы. Это делается более или менее прямолинейно — уравнения движения среды линейны, и их можно решить с использованием классической функции Грина простого гармонического осциллятора $G_n(t) = \sin \omega_n t / \omega_n$, и используя интегрирование по частям:

$$\begin{aligned} \hat{y}_n(t) &= \hat{y}_n(0)\dot{G}_n(t) + \left(\frac{\hat{p}_n(0)}{m_n} - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \frac{d\hat{X}(0)}{dt} \right) G_n(t) - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \int_0^t G_n(t-\tau) \frac{d^2 \hat{X}(\tau)}{d\tau^2} d\tau \\ &= \hat{y}_n(0)\dot{G}_n(t) + \frac{\hat{p}_n(0)}{m_n} G_n(t) - \frac{c_n}{m\omega_n^2} \int_0^t \dot{G}_n(t-\tau) \frac{d\hat{X}(\tau)}{d\tau} d\tau \end{aligned} \quad (9.44)$$

Подставляя и группируя члены, мы можем записать уравнение на координату частицы в следующем виде:

$$\boxed{M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \int_0^t \gamma(t-\tau) \frac{d\hat{X}(\tau)}{d\tau} d\tau + \frac{\partial V}{\partial X} = \hat{\zeta}(t)}, \quad \gamma(t) = \sum_n \frac{c_n^2}{m\omega_n^2} \dot{G}_n(t), \quad \hat{\zeta}(t) = \sum_n c_n \left(\hat{y}_n(0)\dot{G}_n(t) + \frac{\hat{p}_n(0)}{m_n} G_n(t) \right) \quad (9.45)$$

Величина $\hat{\zeta}(t)$ выглядит как эффективная дополнительная сила, действующая на частицу и определяемая степенями свободы бани — в классической механике такого рода силы называют *Ланжевеновскими*. Член, зависящий от первой производной, несёт чисто диссипативный характер — он устроен как вязкое трение и приводит к несохранению энергии. Его нелокальность во времени отвечает «памяти» среды.

9.3.3 Спектральный вес и омическая баня

Как и ранее, всю информацию о степенях свободы бани, и о константах связи бани с частицей, можно «закодировать» в спектральной функции:

$$J(\omega) = \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m\omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \Rightarrow \gamma(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} J(\omega) \cos \omega t \quad (9.46)$$

Другой важной характеристикой является корреляционная функция ланжевеновских сил¹⁰, вычислить которую мы можем используя равновесные значения для осцилляторов

$$\langle \hat{y}_n^2 \rangle = \frac{1}{2m_n\omega_n} \coth \frac{\beta\omega_n}{2}, \quad \langle \hat{p}_n^2 \rangle = \frac{m_n\omega_n}{2} \coth \frac{\beta\omega_n}{2}, \quad (9.47)$$

$$\langle \hat{\zeta}(t) \hat{\zeta}(t') \rangle = \sum_n \frac{c_n^2}{m\omega_n} \frac{1}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2} \cos \omega(t - t') = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} \cos \omega(t - t'). \quad (9.48)$$

Рассмотрим теперь случай омической бани $J(\omega) = \eta\omega$. Тогда:

$$\gamma(t) = \frac{2\eta}{\pi} \int_0^\infty d\omega \cos \omega t = 2\eta\delta(t) \quad (9.49)$$

Стоит быть аккуратным, поскольку в интегральном члене дельта-функция попадает ровно на границу области интегрирования, поэтому интеграл требует дополнительной регуляризации. В данном случае мы понимаем, что при внесении любой ультрафиолетовой обрезки для $J(\omega)$, функция $\gamma(t)$ останется чётной функцией времени. Поскольку она будет также являться узким пиком как функции времени, ровно половина этого пика войдёт в интеграл; это соответствует регуляризации типа $\int_0^t \delta(t - \tau) d\tau = \frac{1}{2}$:

$$M \frac{d^2 \hat{X}}{dt^2} + \eta \frac{d\hat{X}}{dt} + \frac{\partial V}{\partial X} = \hat{\zeta}(t) \quad (9.50)$$

Кроме того, в высокотемпературном пределе $\coth \frac{\beta\omega}{2} \approx \frac{2T}{\omega}$, и это выражение прямо пропорционально «диссипативному ядру» и температуре: $\langle \hat{\zeta}(t) \hat{\zeta}(t') \rangle \approx T\gamma(t - t')$. В общем случае несложно видеть, что их Фурье-гармоники связаны друг с другом, что выражает собой **флуктуационно-диссипационную теорему** (ФДТ).

Данное уравнение является главным результатом семинара. Мы рассмотрели микроскопическую модель квантово-механической диссипативной системы, и получили операторное уравнение, описывающее динамику частицы. От «бани» пришли две важных части — диссипация, или трение, и флуктуирующая возмущающая коротко коррелированная сила $\hat{\zeta}(t)$, коррелятор которой специальным образом связан с трением.

¹⁰Среднее $\langle \zeta(t) \rangle$, естественно, зануляется, а всякую старшую корреляционную функцию можно будет свести к парной используя теорему Вика

Глава 10

Топологические явления

10.1 Симметрии в квантовой механике

«Обычные» преобразования симметрии (поворот, трансляция, отражение, и т.п.) в квантовой механике реализуются различными унитарными операторами \hat{U} : $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$. Тот факт, что система обладает симметрией, означает следующее: если $|\psi\rangle$ является собственным вектором $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то непременно $\hat{U}|\psi\rangle$ тоже должен обладать этим свойством: $\hat{H}\hat{U}|\psi\rangle = E\hat{U}|\psi\rangle$ — отсюда следует $\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{U}] = 0$. Наличие симметрий, как правило, позволяет упростить задачу — последнее условие означает, что гамильтониан имеет блочно-диагональный вид в базисе собственных векторов оператора \hat{U} .

10.1.1 Симметрия по отношению к обращению времени

Важную роль в топологии играет особый вид симметрии — симметрия по отношению к обращению времени. Он не сводится к описанному выше классу «обычных» симметрий, поскольку невозможно предоставить унитарный оператор, соответствующий этой симметрии — как мы увидим ниже, такая симметрия непременно включает в себя операцию комплексного сопряжения, и операция обращения времени \hat{T} в действительности представляет собой анти-унитарный оператор.

Определяется она следующим образом: если волновая функция $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шрёдингера, то $\hat{T}|\psi(t)\rangle$ должна удовлетворять такому же уравнению но «в обратном времени»:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \Rightarrow -i\frac{\partial}{\partial t}\hat{T}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\hat{T}|\psi(t)\rangle \quad (10.1)$$

По аналогии, мы будем говорить, что гамильтониан удовлетворяет этой симметрии, если $\hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{T} = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{T}] = 0$; в таком случае, мы видим, что $\hat{T}^{-1}i\hat{T} = -i$, что и показывает, что такая операция должна содержать комплексное сопряжение \hat{K} . В частности, это означает, что \hat{T} — не обычный линейный оператор, поскольку $\hat{T}(a|\psi\rangle + b|\chi\rangle) = a^*\hat{T}|\psi\rangle + b^*\hat{T}|\chi\rangle$.

В общем виде операция обращения времени может содержать ещё некоторый унитарный оператор \hat{U} , так что общий вид — следующий:

$$\hat{T} = \hat{U}\hat{K}. \quad (10.2)$$

Выбор оператора \hat{U} обусловлен физическими соображениями о том, как ведут себя различные физические величины по отношению к обращению времени:

1. Оператор координаты не меняет знака при обращении времени, $\hat{T}^{-1}\hat{x}\hat{T} = \hat{x}$ — поэтому в координатном базисе оператор \hat{T} действует тривиально.
2. Оператор импульса должен менять знак $\hat{T}^{-1}\hat{p}\hat{T} = -\hat{p}$. Это достигается уже приведённой операцией комплексного сопряжения и тем, что $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$. Поэтому если этим исчерпываются все степени свободы, то $\hat{U} = \hat{I}$.
3. Однако существенно, что если система обладает спином¹ \hat{S} , то комплексным сопряжением всё не исчерпывается — спин тоже должен менять знак при обращении времени, $\hat{T}^{-1}\hat{S}\hat{T} = -\hat{S}$. Для того, чтобы это условие выполнялось, уже необходим выбор оператора \hat{U} — в качестве него можно выбрать оператор поворота спина на угол π вокруг произвольной оси, скажем $\hat{U} = \exp(i\pi\hat{S}_y)$.

¹Это может быть как спин электронов, для которых мы пишем уравнение Шрёдингера (и волновая функция в таком случае представляет спинор, $\psi(x) = (\psi_\uparrow(x), \psi_\downarrow(x))$), так и буквально какой-то чисто спиновый гамильтониан, описывающий спиновую подсистему магнетика (тогда волновая функция описывает чисто спиновые степени свободы)

Выбор оси y при обращении времени не случаен — он связан с тем, в стандартном представлении спиновой алгебры в базисе собственных состояний \hat{S}_z , оператор \hat{S}_x всегда чисто вещественный, а \hat{S}_y — чисто мнимый; поэтому оператор \hat{U} оказывается чисто вещественным — что удобно, поскольку в таком случае $[\hat{U}, \hat{K}] = 0$. Отметим, что в частном случае спина-1/2, оператор спина выражается через матрицы Паули и $\hat{U} = \exp(i\pi\hat{\sigma}_y/2) = i\hat{\sigma}_y$.

Обычные унитарные операторы хороши тем, что для них хотя бы определены собственные вектора и собственные числа, представляющие собой фазовые множители $e^{i\varphi}$ — чего не скажешь про антиунитарные операторы. Оператор $\hat{T}^2 = \hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K}$, однако, содержит две операции комплексного сопряжения и является хорошим унитарным оператором — поэтому можно поднять вопрос о его собственных числах. Оказывается, что все собственные числа исчерпываются ± 1 — и продемонстрировать это достаточно просто, перейдя к базису, где \hat{T}^2 диагонален:

$$\hat{T}^2 = \hat{\Lambda} = \text{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2, \dots) = \hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K} = \hat{U}\hat{U}^* = \hat{U}(\hat{U}^T)^{-1} \Rightarrow \hat{U} = \hat{\Lambda}\hat{U}^T \quad (10.3)$$

Транспонируя ещё раз это тождество, и пользуясь тем, что $\hat{\Lambda}^T = \hat{\Lambda}$, мы получаем $\hat{U}^T = \hat{U}\hat{\Lambda} \Rightarrow \hat{U} = \hat{\Lambda}\hat{U}\hat{\Lambda}$. Последнее возможно только если $\Lambda_i^2 = 1 \Rightarrow \Lambda_i = \pm 1$. Наконец, заметим, что, как было обсуждено выше, для бесспиновых частиц $\hat{T} = \hat{K} \Rightarrow \hat{T}^2 = \hat{\mathbb{I}}$; а если частицы обладают спином, то $\hat{T}^2 = \exp(2\pi i\hat{S}_y) = -1$ для частиц с **полуцелым** спином², $\hat{T}^2 = -1$. Последнее утверждение имеет важные следствия, одно из которых — это теорема Крамерса, которая будет обсуждена выше.

Обсудим, наконец, случаи, когда \hat{T} -симметрия присутствует или нарушается. Как правило, нарушается при наличии каких-либо источников магнитного поля (это может быть как буквально внешнее магнитное поле, так и, скажем, «магнитные» примеси в системе) — как известно из курса теории поля и общей физики, магнитное поле при обращении времени тоже должно менять знак. В обобщённом смысле эта симметрия записывается как $\hat{T}^{-1}\hat{H}(B)\hat{T} = \hat{H}(-B)$, но буквально симметрией она является только при $B = 0$.

Теорема Крамерса Пусть имеется система частиц с полуцелым спином, так что $\hat{T}^2 = -1$, а гамильтониан обладает симметрией по отношению к обращению времени $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$. Теорема Крамерса гласит, что в таком случае все уровни энергии должны быть хотя бы двукратно вырожденными³.

Действительно, во-первых, заметим, что если $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то $\hat{H}(\hat{T}|\psi\rangle) = E(\hat{T}|\psi\rangle)$. Поэтому единственная возможность отсутствия двукратного вырождения — это если $\hat{T}|\psi\rangle = c|\psi\rangle$. Однако в таком случае, $\hat{T}^2|\psi\rangle = \hat{T}(c|\psi\rangle) = c^*\hat{T}|\psi\rangle = |c|^2|\psi\rangle$; с другой стороны, мы предположили что $\hat{T}^2 = -1 \Rightarrow |c|^2 = -1$ — получаем явное противоречие.

10.1.2 Киральная симметрия

Другой важный пример симметрии, важность которого будет обсуждена на конкретном примере модели SSH — это так называемая киральная симметрия, которая реализуется каким-то унитарным оператором $\hat{\Xi}$. Мы будем говорить, что система обладает киральной симметрией, если гамильтониан **антикоммутирует** с $\hat{\Xi}$:

$$\hat{\Xi}\hat{H}\hat{\Xi} = -\hat{H} \Leftrightarrow \{\hat{\Xi}, \hat{H}\} = 0 \quad (10.4)$$

Наличие киральной симметрии сразу же диктует определённые свойства спектра; в частности, если $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то $\hat{H}\hat{\Xi}|\psi\rangle = -E\hat{\Xi}|\psi\rangle$, то есть спектр зеркально симметричен относительно $E = 0$.

Предположим теперь, что все «обычные» симметрии мы учли, сузив гамильтониан на соответствующий блок в блочно-диагональном представлении. В таком случае можно сделать несколько дополнительных утверждений.

1. Во-первых, киральная симметрия единственная. Действительно, если их две $\hat{\Xi}_1$ и $\hat{\Xi}_2$, то несложно убедиться, что их произведение $\hat{\Xi}_1\hat{\Xi}_2$ реализует обычную симметрию $[\hat{\Xi}_1\hat{\Xi}_2, \hat{H}] = 0$, от которых мы по предположению уже избавились.
2. Отсюда же следует, что $\hat{\Xi}^2 = 1$. Действительно, ровно по тому же рассуждению, $[\hat{\Xi}^2, \hat{H}] = 0$ — поэтому единственный способ удовлетворить предположению — это потребовать чтобы $\hat{\Xi}^2$ было тривиально⁴.

²В частности, несложно видеть что для частиц со спином-1/2, $\hat{T}^2 = (i\hat{\sigma}_y)^2 = -1$

³Это утверждение тривиально, если от спина в гамильтониане зависимости нет — а для обычных электронов, как правило, она появляется только при включении магнитного поля в виде Зеемановского члена $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}$, которое нарушает симметрию по отношению к обращению времени. Тем не менее, этим всё не исчерпывается — в системе может присутствовать спин-орбитальное взаимодействие вида $\lambda_{ij}\hat{S}_i\hat{p}_j$, которое сохраняет симметрию и вводит явную зависимость от спина

⁴Разумеется, не исключён случай когда $\hat{\Xi}^2$ равно произвольному комплексному числу $e^{i\theta}$; в таком случае $\hat{\Xi}$ можно переопределить как $\hat{\Xi} \mapsto e^{-i\theta/2}\hat{\Xi}$

10.2 Цепочка Su – Schrieffer – Heeger

Перейдём теперь к обсуждению конкретной модели, на примере которой мы продемонстрируем некоторые из топологических рассуждений. Модель эта будет описывать бесспиновые фермионы, поэтому для неё роль Т-инвариантности тривиальна, и говорить о ней мы не будем; однако, модель эта обладает киральной симметрией, которая существенно будет влиять на топологические свойства модели.

Рассмотрим одномерную модель сильной связи с прыжками между ближайшими соседями — цепочку из $2N$ узлов, на которых могут находиться электроны. Прыжки же между ближайшими соседями будут чередоваться⁵ как t_1 и t_2 — которые мы будем для простоты считать вещественными:

$$\hat{H} = \sum_i (t_1 |2i-1\rangle \langle 2i| + t_2 |2i\rangle \langle 2i+1| + \text{h.c.}) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (10.5)$$

10.2.1 Свойства «объёма»

Для топологии будет важно наличие у цепочки границ; однако начнём мы обсуждение со свойств «объёма» — части системы вдали от границ. Как обычно, для этого достаточно наложить периодические граничные условия, и в таком случае достаточно просто диагонализировать этот гамильтониан, используя преобразование Фурье. Заметим, что элементарная ячейка содержит два атома, поэтому мы введём индекс n , нумерующий *элементарные ячейки* (по которому будет дальше делаться преобразование Фурье), и индекс $\alpha = 1, 2$, нумерующий атомы в элементарной ячейке: $|n, 1\rangle \equiv |2n-1\rangle$ и $|n, 2\rangle \equiv |2n\rangle$. В таком случае, гамильтониан переписывается в следующем виде:

$$\hat{H} = \sum_n (t_1 |n, 1\rangle \langle n, 2| + t_2 |n, 2\rangle \langle n+1, 1| + \text{h.c.}) \quad (10.6)$$

Проведём теперь преобразование Фурье, введя вектора

$$|k, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n |n, \alpha\rangle e^{-ikna} \Leftrightarrow |n, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k |k, \alpha\rangle e^{ikna} \quad (10.7)$$

(здесь a — длина элементарной ячейки, $L = Na$ — длина цепочки; и как обычно, импульс k пробегает первую зону Бриллюэна $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ так что $\frac{kL}{2\pi} \in \mathbb{Z}$ в силу периодических граничных условий). Непосредственной подстановкой убеждаемся, что гамильтониан принимает блочно-диагональный вид из блоков размера 2×2 :

$$\hat{H} = \sum_k (t_1 |k, 1\rangle \langle k, 2| + t_2 e^{-ika} |k, 2\rangle \langle k, 1| + \text{h.c.}) \equiv \sum_k \begin{pmatrix} |k, 1\rangle & |k, 2\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle k, 1| \\ \langle k, 2| \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

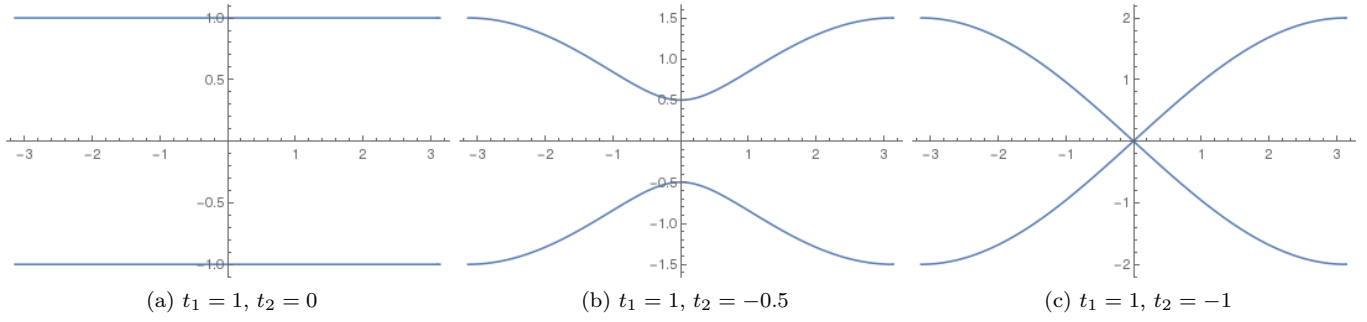
поэтому для решения задачи нам достаточно диагонализировать матрицу

$$\hat{\mathcal{H}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2 \cos ka) \hat{\sigma}_x + t_2 \sin ka \cdot \hat{\sigma}_y \equiv \mathbf{d}(k) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{d}(k) = \begin{pmatrix} t_1 + t_2 \cos ka \\ t_2 \sin ka \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

Введённые тут матрицы Паули $\hat{\sigma}_{x,y}$ не имеют никакого отношения к спину (в задаче такой степени свободы вообще нет), а действуют на пространстве **подрешётки** (которые как раз нумеруются индексом $\alpha = 1, 2$). Тем не менее, по формальной аналогии со «спином в магнитном поле» мы знаем, что спектр гамильтониана вида $\hat{H} = \mathbf{B} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ представляет собой пару чисел $\pm |\mathbf{B}|$. В нашем случае это даёт две ветви закона дисперсии квазичастиц:

$$\varepsilon(k) = \pm |\mathbf{d}(k)| = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos ka} \quad (10.10)$$

⁵Такая модель может служить для описания молекулы полиацетилена $(CH)_N$, точнее, подсистемы его π -электронов


 Рис. 10.1: Закон дисперсии $\pm\varepsilon(k)$

Такая симметрия спектра является проявлением киральной симметрии исходной задачи — несложно видеть, что $\{\hat{\sigma}_z, \hat{\mathcal{H}}\} = 0$. В свою очередь киральная симметрия тут возникает из-за того, что «прыжки» происходят только между узлами из различных подрешёток; добавление прыжков вида $t' |2i\rangle \langle 2i+2|$ её нарушат, в то время как добавление прыжков вида $t'' |2i\rangle \langle 2i+3|$ — нет. Отметим также, что киральная симметрия устойчива к беспорядку в значениях самых прыжков t_1 и t_2 — для неё вовсе не обязательно наличие трансляционной симметрии, и исходный гамильтониан антикоммутирует с $\hat{\sigma}_z$ при произвольных значениях прыжков (в таком случае оператор $\hat{\sigma}_z$ нужно воспринимать как тензорное произведение $(\hat{\sigma}_z)_{SL} \otimes \hat{\mathbb{I}} = \text{diag}(1, -1, 1, -1, \dots)$; SL тут означает SubLattices — подрешётки). Повторимся, это верно только если отсутствуют прыжки между атомами из одной подрешётки.

Между двумя ветвями спектра имеется щель, $\Delta = ||t_1| - |t_2||$, достигается при $k = \pm \frac{\pi}{a}$ если t_1 и t_2 одного знака, и при $ka = 0$ если знаки противоположны. Мы будем обсуждать многоэлектронную задачу в случае, когда химический потенциал находится в щели, так что нижняя зона полностью заполнена, а верхняя — пустая; в таком случае наличие щели делает систему изолятором. Это — пример **топологического изолятора**, поскольку, как мы увидим дальше, данная модель демонстрирует некоторые топологических свойств.

10.2.2 Топологические фазы объёмной задачи в термодинамическом пределе

Важнейшую роль в топологической науке играет понятие **адиабатической связности** на пространстве гамильтонианов — последнее параметризуется значениями прыжков (t_1, t_2) . Мы будем говорить, что точки (t_1, t_2) и (t'_1, t'_2) адиабатически связаны, если можно совершить адиабатическое изменение параметров гамильтониана, которое переводит одно в другое. В топологической науке адиабатичность важна, поскольку **топологические инварианты**, о которых мы дальше будем говорить, как правило принимают какой-то дискретный набор значений и, как следствие, не могут измениться при плавном изменении параметров гамильтониана.

Чтобы адиабатичность имела место, необходимо, чтобы система в процессе всегда оставалась изолятором — ведь в случае закрытия щели расстояние между соседними уровнями энергии многочастичной задачи ведёт себя как $\propto \frac{1}{N}$ и в термодинамическом пределе пропадает, из-за чего условию адиабатичности оказывается невозможно удовлетворить. Поэтому топологические фазы должны быть разделены поверхностями, на которых щель закрывается; в нашем случае, это линии $|t_1| = |t_2|$.

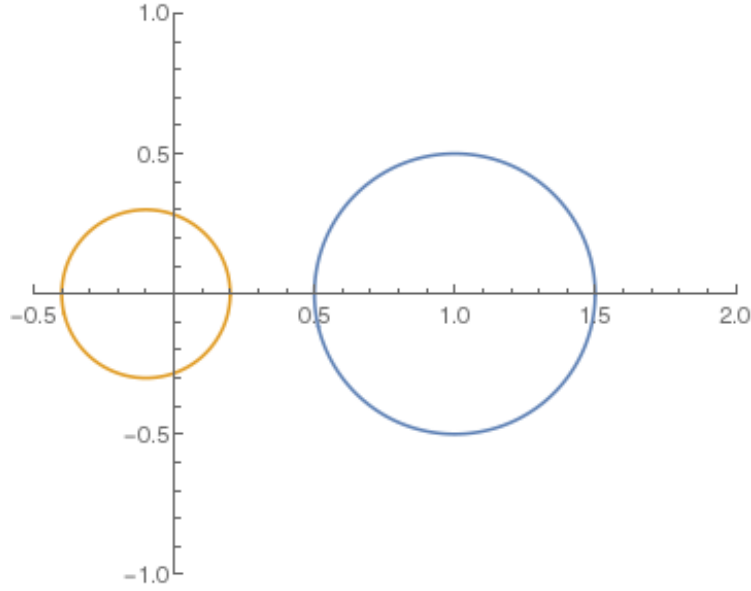


Рис. 10.2: Параметрические кривые вектора $\mathbf{d}(k)$ при $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$. Синяя — $t_1 = 1, t_2 = -0.5$; оранжевая — $t_1 = -0.1, t_2 = -0.3$

Оказывается достаточно просто увидеть, чему соответствуют топологические фазы чисто геометрически. Действительно, для гамильтониана вида $\hat{H} = \mathbf{d}(k) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ можно построить параметрическую двумерную кривую $\mathbf{d}(k)$ (см. рис.); и адиабатическое изменение параметров гамильтониана соответствует непрерывной деформации кривой⁶. Поскольку, как было сказано выше, при такой деформации мы не должны пересекать точку $(0, 0)$, то геометрически мы можем заметить, что кривые, «обхватывающие» начало координат деформировать в не обхватывающие непрерывным образом не пересекая начало координат невозможно. Сохранение киральной симметрии тут критично — её нарушение соответствует появлению компоненты d_z и «выход в трёхмерие». Разумеется, через трёхмерное пространство эти окружности можно непрерывно перевести одну через другую.

Это же условие можно сформулировать более формально. Величина $\mathbf{d}(k)$ представляет отображение зоны Бриллюэна — окружности S^1 (отрезок $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ с отождествлёнными концами) — на плоскость с выколотой точкой:

$$\mathbf{d}(k) : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^2 / \{0\} \quad (10.11)$$

Для такого вида отображений можно ввести **топологический инвариант** w — число намотки (winding number), число оборотов образа окружности вокруг нуля⁷:

$$w = \int_{BZ} \frac{dk}{2\pi} \cdot \frac{d}{dk} \arg(d_x(k) + id_y(k)) \in \mathbb{Z} \quad (10.12)$$

Все гамильтонианы разбиваются на счетное число топологических фаз, соответствующих различным значениям w , поэтому такая система называется топологическим \mathbb{Z} -изолятором. По соображениям непрерывности невозможно перевести гамильтониан из одной фазы в другую непрерывной деформацией (без закрытия щели!). В одной топологической фазе гамильтонианы друг в друга деформируются. В конкретно нашей задаче реализуются два значения чисел намотки: $w = 1$ при $|t_1| < |t_2|$ и $w = 0$ при $|t_1| > |t_2|$.

Как правило, принадлежность к одному из топологических классов проявляется в ряде физических свойств, которые устойчивы по отношению к непрерывным изменениям параметров гамильтониана, не закрывающим щель и сохраняющим симметрию. **Топологический класс** — это семейство систем с заданными симметриями. В нашем случае имеется киральная симметрия и (в случае вещественных t_1 и t_2) симметрия по отношению к обращению времени — такой класс называется по историческим причинам⁸ *BDI*. В каждом классе может существовать определённое количество топологи-

⁶Разумеется, покуда мы работаем в двухпараметрической модели (t_1, t_2) , то мы можем менять не всю кривую, а только её положение и радиус. Однако можно рассмотреть более широкий набор гамильтонианов, включающих в себя дальние прыжки (но, повторимся, сохраняющих киральную симметрию!) — и в таком случае кривую $\mathbf{d}(k)$ мы действительно можем изменять произвольным образом.

⁷Классификация отображений S^1 в целевое пространство с точностью до непрерывных деформаций называется *первой гомотопической группой* π_1 . Это действительно группа, так как отображения можно складывать (последовательное прохождение двух траекторий) и брать обратное; также имеется единичное отображение. В нашем случае $\pi_1(\mathbb{R}^2 / \{0\}) = \mathbb{Z}$.

⁸Эти названия восходят к Картановой классификации симметрических пространств, которые являются пространствами, на которых определяется эффективная теория поля (сигма-модель), описывающая соответствующие системы при наличии беспорядка.

ческих фаз. Если их количество отлично от единицы, то такой класс называется топологическим. Наконец, существует полная классификация топологических изоляторов, записанная в виде таблицы; и сейчас мы установили, что топологическая группа класса BDI в 1D есть \mathbb{Z} .

10.2.3 Краевые моды

Ко всему вышесказанному можно поставить вполне закономерный вопрос. Ведь для бесконечной цепочки выбор элементарной ячейки произволен, и в этом смысле t_1 и t_2 совершенно взаимозаменяемы. Как же мы в таком случае вообще можем отличить одну фазу от другой? Ответ на этот вопрос прост: никак. Это становится возможным в двух следующих случаях: если мы рассматриваем **границу** между двумя топологическими фазами; либо если мы рассматриваем край образца — и в таком случае выбор элементарной ячейки диктуется тем, какой из атомов располагается на границе. Вторым случаем мы сейчас и займёмся.

Оказывается, что нетривиальные топологические фазы в 1D (в нашем случае при $|t_1| < |t_2|$) характеризуются тем, что в них обязательно присутствуют **краевые состояния с нулевой энергией**⁹. Они топологически защищены: если имеется одно состояние на нулевой энергии, то киральная симметрия запрещает ему уйти с нулевой энергии: должен возникнуть «киральный двойник» с энергией $-E$. Если цепочка не полубесконечная, но имеет конечную длину, то такой «двойник» может возникнуть из второго локализованного состояния на другом краю провода. Однако для того, чтобы состояния ушли с нулевой энергии им нужно гибридизоваться (напомним, что в объёме в районе нулевой энергии состояний нет — мы имеем дело с изолятором!), что в силу экспоненциально слабого перекрытия волновых функций краевых состояний приводит только к незначительному (а в термодинамическом пределе — к нулевому) расщеплению нулевых мод.

Построим явно краевую нулевую моду в полубесконечной цепочке. Для этого нам нужно решить одночастичное уравнение Шрёдингера:

$$\begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0. \quad (10.13)$$

Для решения этого уравнения мы можем воспользоваться киральной симметрией — действительно, как мы знаем, если $|\psi\rangle$ является решением, то $\hat{\Xi}|\psi\rangle$ — тоже. Поэтому искать решение можно в виде $\frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Xi})|\psi\rangle$ — операторы $\frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Xi})$ представляют собой проекторы на одну из подрешёток, поэтому у соответствующей волновой функции половина коэффициентов (все чётные или нечётные) равны нулю. С учётом вышесказанного, получаем:

$$\begin{cases} t_1\psi_1 + t_2\psi_3 = 0 \\ t_1\psi_3 + t_2\psi_5 = 0 \\ \dots \end{cases} \Rightarrow \psi_{2k+1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right) \psi_{2k-1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^k \psi_1 \quad (10.14)$$

Полученная волновая функция экспоненциально затухает в объём при $|t_1| < |t_2|$, и тем самым действительно реализует краевое состояние в одной из топологических фаз — как раз в той, в которой топологический инвариант, число намотки $w = 1$. Приведённое тут вычисление на самом деле совершенно не чувствительно к детальной структуре границы; в частности, где-то возле края прыжковые матричные элементы могут отличаться от t_1 и t_2 — и тем не менее, если в объёме в конечном итоге они «выходят» на t_1 и t_2 , приведённая выше аргументация по-прежнему действует.

Ещё раз подчеркнём, что же сейчас произошло. Топологический инвариант и классификация топологических фаз — это свойство объёма. Это свойство, тем не менее, определяет некоторые физические свойства края образца. Это — пример так называемого «соответствие объёма и границы» (bulk-boundary correspondence), общего свойства топологических изоляторов.

Предел «плоской зоны» Есть ещё один из способов продемонстрировать наличие краевых мод, не строя их явно. Дело в том, что, как было обсуждено выше, количество краевых мод тоже является топологическим инвариантом, и в результате адиабатического изменения параметров гамильтониана, измениться не может. Поэтому чтобы выяснить, имеются ли в той или иной фазе краевые состояния, достаточно выяснить это для какой-нибудь точки, принадлежащей соответствующей фазе, и для которой это сделать проще всего.

Для нашей модели самые простые точки для обеих фаз — это точки $(t_1, t_2) = (0, t)$ (для нетривиальной фазы) и $(t_1, t_2) = (t, 0)$ (для тривиальной). При этом закон дисперсии объёма — $\varepsilon(k) = \pm|t|$ — не зависит от k , чем и вызвано

⁹Их энергия строго равна нулю лишь в пределе образца бесконечной длины; для конечного образца они имеют энергию $\sim \exp(-N/\xi)$.

название предела, вынесенное в заголовок (flat band limit). Групповая скорость возбуждений при этом $v(k) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = 0$, и возбуждения по системе не распространяются. В обоих случаях, цепочка разбивается на димеры — пары узлов, связанных туннельным матричным элементом t — для которых собственные состояния представляют собой симметричные и антисимметричные комбинации $\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle \pm |n+1\rangle)$, а собственные значения — $\pm|t|$. Однако, в нетривиальной фазе $t_1 = 0$ самый крайний атом оказывается изолированным, не связан ни с кем, и на нём существует локализованное краевое состояние с нулевой энергией.

10.2.4 Граница между двумя топологическими фазами (состояния Jackiw – Rebbi)

Рассмотрим теперь не край образца, но границу двух топологических фаз. Поучительно будет изучить этот вопрос в непрерывном пределе — вместо резкой границы мы теперь предположим, что, например, туннельный матричный элемент t_1 плавно меняются от значения $t_1(x \rightarrow -\infty) = t_1^{(L)}$ до значения $t_1(x \rightarrow +\infty) = t_1^{(R)}$, причём $|t_1^{(L)}| > |t_2|$, а $|t_1^{(R)}| < |t_2|$ — так что имеет место плавная граница между парой топологических фаз.

Зададим модельно следующую координатную зависимость:

$$\begin{cases} t_1(x) &= -t + \delta t(x) \\ t_2(x) &= t = \text{const} \end{cases}, \quad \begin{cases} \delta t(x) < 0, & x < 0 \\ \delta t(x) > 0, & x > 0 \end{cases} \quad (10.15)$$

(мы предположили, что t_1 и t_2 различных знаков, поскольку только при этом волновая функция $\psi(x)$ будет плавно меняться в пространстве — как мы выдели выше, в противном случае она будет знакопеременна на соседних узлах; однако, от заданной проблемы достаточно легко избавиться, просто сделав замену $\psi_n \mapsto (-1)^n \psi_n$). Длинноволновое разложение мы сделаем по следующему рецепту: возьмём гамильтониан в представлении Фурье для постоянных t_1, t_2 , разложим его по $ka \ll 1$; а в полученном выражении положим $k \mapsto -i\frac{\partial}{\partial x}$ и, наконец, восстановим координатную зависимость матричных элементов:

$$\hat{\mathcal{H}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2(1 - ika) \\ t_1 + t_2(1 + ika) & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2)\hat{\sigma}_x + t_2 a \cdot \hat{\sigma}_y k \quad (10.16)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \delta t(x) \cdot \hat{\sigma}_x + t a \hat{\sigma}_y (-i\partial_x) \quad (10.17)$$

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \delta t(x) - t a \partial_x \\ \delta t(x) + t a \partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \partial_x \psi_2 &= \frac{\delta t(x)}{t a} \psi_2 \\ \partial_x \psi_1 &= -\frac{\delta t(x)}{t a} \psi_1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \psi_1(x) &= \xi_1 \exp\left(-\frac{1}{t a} \int_0^x \delta t(x) dx\right) \\ \psi_2(x) &= \xi_2 \exp\left(\frac{1}{t a} \int_0^x \delta t(x) dx\right) \end{cases} \quad (10.18)$$

Поэтому для исследуемого тут случая $\delta t(+\infty) > 0$ и $\delta t(-\infty) < 0$, полученное решение будет экспоненциально затухать при $x \rightarrow \pm\infty$ при $\xi_1 = 1, \xi_2 = 0$. Напротив, если знаки будут иными, то затухающее решение опять будет существовать, но на этот раз это будет $\xi_1 = 0, \xi_2 = 1$.

Глава 11

Функциональный интеграл

11.1 Запаздывающая функция Грина

В данном семинаре мы построим представление запаздывающего пропагатора — амплитуды распространения квантomeханической частицы из точки \mathbf{x} в точку \mathbf{y} за время T через функциональный интеграл:

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, T > 0) \equiv \langle \mathbf{y} | \hat{U}(T) | \mathbf{x} \rangle \quad (11.1)$$

11.1.1 Временная дискретизация и оператор эволюции

Для удобства предположим, что в гамильтониане импульс и координата разделяются; тем самым, гамильтониан имеет вид $H(x, p) = K(p) + V(x)$ (кинетическая и потенциальные энергии)¹. Разобьём отрезок времени длины T на $N \rightarrow \infty$ одинаковых кусочков размера $\epsilon = \frac{T}{N} \rightarrow 0$, и представим оператор эволюции в виде $\hat{U}(T) = \prod_{i=1}^N \hat{U}(\epsilon)$. В свою очередь, эволюцию на бесконечно малое время ϵ можно записать в виде² $\hat{U}(\epsilon \rightarrow 0) = e^{-i\hat{H}\epsilon} \simeq e^{-i\hat{V}\epsilon} e^{-i\hat{K}\epsilon}$. Тем самым, мы получаем выражение для оператора эволюции в виде произведения $2N$ множителей. Удобно каждому из них «приписать» своё время $t_k = k\epsilon$ (оно было бы, если бы мы рассматривали гамильтониан, зависящий от времени):

$$\hat{U}(t) \underset{\epsilon \rightarrow 0}{=} \underbrace{e^{-i\hat{V}\epsilon} e^{-i\hat{K}\epsilon}}_{t=t_N=T} \cdot \dots \cdot \underbrace{e^{-i\hat{V}\epsilon} e^{-i\hat{K}\epsilon}}_{t=t_1=0}$$

Вставим после каждого члена $e^{-i\hat{K}\epsilon}$ (при $t = t_k$) единицу в виде разложения по координатному базису $\hat{\mathbb{I}} = \int d\mathbf{x}_k |\mathbf{x}_k\rangle \langle \mathbf{x}_k|$, а после членов $e^{-i\hat{V}\epsilon}$ — по импульсному $\hat{\mathbb{I}} = \int (d\mathbf{p}_k) |\mathbf{p}_k\rangle \langle \mathbf{p}_k|$

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t > 0) \underset{\epsilon \rightarrow 0}{=} \int \prod_{k=1}^{N-1} d\mathbf{x}_k \int \prod_{k=1}^N (d\mathbf{p}_k) \underbrace{\langle \mathbf{x}_N = \mathbf{y} | e^{-i\hat{V}\epsilon} | \mathbf{p}_N \rangle \langle \mathbf{p}_N | e^{-i\hat{K}\epsilon} | \mathbf{x}_{N-1} \rangle}_{t=t_N} \cdot \dots \cdot \underbrace{\langle \mathbf{x}_1 | e^{-i\hat{V}\epsilon} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | e^{-i\hat{K}\epsilon} | \mathbf{x}_0 = \mathbf{x} \rangle}_{t=t_1} \quad (11.2)$$

Поскольку операторы $e^{-i\hat{V}\epsilon}$ — собственные для координаты, а $e^{-i\hat{K}\epsilon}$ — для импульса, то блоки вычисляются согласно:

$$\langle \mathbf{x}_k | e^{-i\hat{V}\epsilon} | \mathbf{p}_k \rangle \langle \mathbf{p}_k | e^{-i\hat{K}\epsilon} | \mathbf{x}_{k-1} \rangle = e^{-iV(\mathbf{x}_k)\epsilon} e^{i\mathbf{p}_k \mathbf{x}_k} e^{-iK(\mathbf{p}_k)\epsilon} e^{-i\mathbf{p}_k \mathbf{x}_{k-1}} \quad (11.3)$$

Собирая аккуратно члены, мы приходим к выражению:

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t > 0) \underset{\epsilon \rightarrow 0}{=} \int \prod_{k=1}^{N-1} d\mathbf{x}_k \int \prod_{k=1}^N (d\mathbf{p}_k) \exp \left(i\epsilon \sum_{k=1}^N \left(\mathbf{p}_k \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\epsilon} - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \right) \right) \quad (11.4)$$

¹Случай общего положения — неразделяемый гамильтониан — обсуждается, например, в [ПШ01, глава 9.1 «Интеграл по путям в квантовой механике», стр. 277]. В этом случае всё рассказанное тоже будет верно, просто гамильтониан нужно брать упорядоченным по Вейлю

²Согласно формуле Бэйкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа (Baker-Campbell-Hausdorff formula), $e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\dots}$; тем самым поправки к этому выражению пропорциональны $[\hat{V}\epsilon, \hat{K}\epsilon] \propto \epsilon^2$, то есть вымирают в пределе $\epsilon \rightarrow 0$

11.1.2 Функциональный интеграл

В пределе $N \rightarrow \infty$ и $\epsilon \rightarrow 0$, набор величин $\{\mathbf{x}_k\}_{k=0}^N$ и $\{\mathbf{p}_k\}_{k=1}^N$ можно представлять в виде функций уже непрерывного параметра — времени t , так что $\mathbf{x}(t_k = \epsilon k) = \mathbf{x}_k$ (и аналогично с импульсом). Поскольку $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$ и $\mathbf{x}_N = \mathbf{y}$ — фиксированы, и по ним не происходит интегрирование, то для соответствующих функций это значит $\mathbf{x}(t=0) = \mathbf{x}$ и $\mathbf{x}(t=T) = \mathbf{y}$. Для импульсов никакого такого требования нет.

Забудем на время, что построенные таким образом функции $\mathbf{x}(t)$ и $\mathbf{p}(t)$, вообще говоря, чаще всего будут оказываться недифференцируемы. В таком случае в экспоненте стоит конечная аппроксимация интеграла, представляющего собой классическое действие $S[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)]$, записанное в гамильтоновом формализме:

$$S[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] = \int_0^T dt (\mathbf{p}(t) \dot{\mathbf{x}}(t) - H(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)))$$

Интегрирование по набору промежуточных координат и импульсов записывается через формальный символ “интегрирования по всем функциям”; понимать его пока нужно исключительно в смысле временной и пространственной дискретизации:

$$\int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \equiv \int \prod_{k=1}^{N-1} d\mathbf{x}_k, \quad \int \mathcal{D}[\mathbf{p}(t)] \equiv \int \prod_{k=1}^N (d\mathbf{p}_k) \quad (11.5)$$

Наконец, поскольку в нашем построении $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$ и $\mathbf{x}_N = \mathbf{y}$, то интегрирование происходит с так называемыми “закреплёнными концами” (то есть с условием $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}$ и $\mathbf{x}(T) = \mathbf{y}$). Тем самым, с учётом определения “меры функционального интеграла” (11.5), мы получаем представление запаздывающего пропагатора через функциональный интеграл:

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, T > 0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{y}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] e^{iS[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)]} \quad (11.6)$$

Взятие интеграла по импульсам Обратим внимание, для обычной нерелятивистской частицы кинетическая энергия имеет вид $K(p) = \frac{p^2}{2m}$. Это позволяет нам взять интегралы по p_k в выражении (11.4), поскольку они все гауссовы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (d\mathbf{p}_k) \exp \left(i\epsilon \left(\mathbf{p}_k \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\epsilon} - \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} \right) \right) = \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon} \right)^{d/2} \exp \left(i\epsilon \frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 \right) \quad (11.7)$$

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, T > 0) \underset{\epsilon \rightarrow 0}{=} \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon} \right)^{Nd/2} \int \prod_{k=1}^{N-1} d\mathbf{x}_k \exp \left(i\epsilon \sum_{k=1}^N \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(\mathbf{x}_k) \right) \right) \quad (11.8)$$

Если в этом случае модифицировать “меру” согласно $\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \equiv \left(\frac{m}{2\pi i\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int d\mathbf{x}_k$, и заметить, что в экспоненте стоит аппроксимация классического действия в лагранжевом формализме — $S[\mathbf{x}(t)] = \int dt \left(\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}) \right)$, то мы придём к альтернативному представлению пропагатора через другой функциональный интеграл:

$$G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, T > 0) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(T)=\mathbf{y}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{iS[\mathbf{x}(t)]} \quad (11.9)$$

Такое же выражение можно было бы получить на функциональном языке, «взяв» гауссов интеграл по импульсам согласно:

$$\int \mathcal{D}[\mathbf{p}(t)] \exp \left(-i \int dt \frac{(\mathbf{p}(t) - m\dot{\mathbf{x}}(t))^2}{2m} \right) = 1 \quad (11.10)$$

(в действительности это не единица, а некоторая бесконечная константа — которую мы «спрятали» в переопределение меры $\mathcal{D}[\mathbf{x}(t)]$). Обратим внимание на следующие вещи. Во-первых, исходное представление (через интеграл по импульсам и координатам) в каком-то смысле более фундаментально; альтернативное представление работает только в случае квадратичной зависимости кинетической энергии от импульса. Во-вторых, в исходном представлении “мера” определялась приятней, чем в альтернативном; в ней не было неприятных зависимостей от масс и дискретизации ϵ .

У выражения для амплитуды перехода (пропэгатора) через функциональный интеграл имеется прозрачный физический смысл. Квантовая частица из точки \mathbf{x} в точку \mathbf{y} может попасть каким угодно путём — по произвольной траектории, соединяющей эти две точки. При этом каждый путь имеет “вес” e^{iS} . Результирующая амплитуда складывается за счёт интерференции по всем траекториям.

Вообще говоря, каждый раз, когда пишется функциональный интеграл, нужно подразумевать, как именно следует “расшифровывать” меру $\mathcal{D}[x(t)]$; как мы видим, бывают разные варианты. Чаще, однако, это опускают. Два определения меры, которые мы тут получили, отличаются всего лишь на константу (хоть и бесконечную, и зависящую явно от дискретизации) — однако, что существенно, они совершенно не зависят от самой траектории \mathbf{x}_k (или, альтернативно, $\mathbf{x}(t)$). В практически всех приложениях мы будем иметь дело с выражениями, в которых имеется отношение двух разных функциональных интегралов, в которых эта константа благополучно сокращается и, вообще говоря, может быть выбрана произвольной. В таких (и только таких!) случаях можно себе позволить опускать “расшифровку” меры функционального интегрирования.

Свойства функционального интеграла

- Имея «кратный функциональный интеграл», можно переходить к «повторному»:

$$\int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \mathcal{D}[\mathbf{p}(t)] \dots = \int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \dots \int \mathcal{D}[\mathbf{p}(t)] \dots \quad (11.11)$$

- В функциональном интеграле можно сдвигать интеграл на константу³:

$$\int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \cdot I[\mathbf{x}(t)] = \int \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \cdot I[\mathbf{x}(t) - \mathbf{f}(t)] \quad (11.12)$$

для произвольной функции $\mathbf{f}(t)$. Якобиан такого преобразования равен единице.

- Наконец, функциональный интеграл можно «сшивать»:

$$\int d\mathbf{y} \int_{\mathbf{x}_1(t_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}_1(t)=\mathbf{y}} \mathcal{D}[\mathbf{x}_1(t)] \int_{\mathbf{x}_2(t)=\mathbf{y}}^{\mathbf{x}_2(t_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}[\mathbf{x}_2(t)] \equiv \int_{\mathbf{x}(t_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \quad (11.13)$$

Это же явно следует из определения пропэгатора: $\int d\mathbf{y} \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}(t_b, t) | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \hat{U}(t, t_a) | \mathbf{x}_a \rangle \equiv \langle \mathbf{x}_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \mathbf{x}_a \rangle$. Остальные свойства тривиально следуют из нашего определения функционального интеграла через дискретизацию.

11.2 Пример: квантовый гармонический осциллятор

Давайте вычислим функциональный интеграл для пропэгатора квантового гармонического осциллятора: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$. Изложенный тут рецепт тривиально обобщается на произвольные функциональные интегралы. Во-первых: мы не хотим иметь дело с мерой функционального интеграла, которая как правило содержит бесконечную константу, зависящую от дискретизации. Стандартный трюк для того, чтобы от неё избавиться — это рассмотреть отношение функциональных интегралов; например, пропэгатора осциллятора и пропэгатора свободной частицы, который нам известен:

$$\frac{G_\omega^R(x, y, T)}{G_0^R(x - y, T)} = \frac{\int_{x(0)=x}^{x(T)=y} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(i \frac{m}{2} \int_0^T [\dot{x}^2 - \omega^2 x^2] dt\right)}{\int_{x(0)=x}^{x(T)=y} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(i \frac{m}{2} \int_0^T \dot{x}^2 dt\right)} \quad (11.14)$$

В таком случае, покуда мера в числителе и знаменателе выбрана одинаковой, эта константа нас волновать не должна. Во-вторых: мы имеем дело с гауссовым функциональным интегралом — действие квадратично по $x(t)$, и его можно записать в виде

$$S[x(t)] = \frac{m}{2} \int x(t) \cdot \hat{L}x(t) dt \quad (11.15)$$

с линейным оператором $\hat{L} = -\partial_t^2 - \omega^2$. Этот линейный оператор определяет классические уравнения движения: $\hat{L}x_{cl}(t) = 0$. Давайте найдём классическую траекторию, которая удовлетворяет нашим граничным условиям $x_{cl}(0) = x$ и $x_{cl}(T) = y$, и

³Менее тривиальные замены координат могут потребовать вычисления якобиана соответствующего перехода. Конкретный вид якобиана можно построить, выяснив, как будет выглядеть его дискретный аналог

сделаем подстановку в функциональный интеграл $x(t) = x_{cl}(t) + z(t)$. В таком случае мы будем иметь дело с интегралом по всем функциям $z(t)$, но которые уже будут удовлетворять нулевым граничным условиям. Сдвигка же приведёт к добавке к действию (это верно только потому, что действие квадратично, а траектория x_{cl} удовлетворяет классическим уравнениям движения):

$$S[x_{cl}(t) + z(t)] = S_{cl} + S[z(t)] \quad (11.16)$$

Для действия записанного в виде $S[x(t)] = \frac{m}{2} \int x(t) \hat{L}x(t) dt$ может показаться, что $S[x_{cl}(t)] = 0$ в силу $\hat{L}x_{cl}(t) = 0$; что, конечно, не так — для того, чтобы привести действие к необходимому виду, мы проинтегрировали по частям, и для классической траектории внеинтегральный член отличен от нуля. Для траектории $z(t)$ с нулевыми граничными условиями внеинтегральный член очевидным образом равен нулю. В частности, для свободной частицы классическая траектория соответствует частице, летящей равномерно и прямолинейно $x(t) = x + \frac{y-x}{T}t$, и действие на такой траектории равно $S_{cl} = \frac{m}{2T}(x-y)^2$. Благодаря этому свойству мы можем искать только пропагатор при $x = y = 0$, что в данной задаче проще:

$$\boxed{G^R(x, y, T) = G^R(0, 0, T) \exp(iS_{cl}(x, y, T))} \quad (11.17)$$

(опять-же, для классической частицы это свойство очевидным образом выполняется). Наконец, последний шаг — произвольную функцию $z(t)$ можно разложить по базису собственных функций оператора \hat{L} , который для осциллятора выглядит следующим образом:

$$z(t) = \sum_n c_n z_n(t) \quad (11.18)$$

$$\hat{L}z_n(t) = \lambda_n z_n(t), \quad z_n(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin \frac{\pi n t}{T}, \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} - \omega^2 \quad (11.19)$$

Меру функционального интеграла можно в таком случае выбрать в следующем виде: $\int \mathcal{D}[z(t)] \equiv \mathcal{N} \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dc_n$ (с бесконечной константой \mathcal{N} , одинаковой для числителя и знаменателя). Очевидно, что при этом мы действительно учтём все функции по одному разу; менее очевидно, но тоже верно, что эта замена — просто замена базиса, она даётся ортогональной матрицей (в дискретном случае), и якобиан такого перехода будет единичным. Наконец, в силу ортонормированности набора $z_n(t)$ мы немедленно замечаем, что действие факторизуется:

$$S[\sum_n c_n z_n(t)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m}{2} \lambda_n c_n^2 \quad (11.20)$$

Поэтому мы можем записать (записывая явно бесконечную константу, связанную с мерой интегрирования):

$$G_{\omega}^R(0, 0, T) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^{\infty} dc_n \exp\left(i \frac{m}{2} \lambda_n c_n^2\right) = \mathcal{N} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi i}{m(\pi^2 n^2 / T^2 - \omega^2)}} \quad (11.21)$$

Наконец, заметив, что знаменатель равен числителю с $\omega = 0$, мы получаем, что все «лишние» константы сокращаются и остаётся следующее соотношение:

$$\frac{G_{\omega}^R(0, 0, T)}{G_0^R(0, 0, T)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}\right)^{-1/2} = \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} \quad (11.22)$$

Вычисление такого бесконечного произведения — отдельная задача; при этом оно хорошо определено, поскольку при $n \rightarrow \infty$ члены стремятся к единице. Можно, например, заметить, что функция в левой и правой части обращается в ноль при $\omega T = \pi n$, $n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, и что при $\omega T = 0$ она равна единице. Это не является доказательством этого тождества, но является мнемоническим правилом, позволяющим его запомнить. Таким образом, мы получаем:

$$\boxed{G_{\omega}^R(0, 0, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \sin \omega T}}} \quad (11.23)$$

(зависимость от координат восстанавливается добавлением классического действия).

11.2.1 Спектр

Из знания запаздывающего пропагатора можно извлечь, например, спектр гамильтониана. Для этого его можно явно вычислить в базисе собственных функций гамильтониана:

$$G^R(x, y, T) = \langle y | e^{-i\hat{H}T} | x \rangle = \sum_n \langle y | n \rangle e^{-iE_n T} \langle n | x \rangle = \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(y) e^{-iE_n T} \quad (11.24)$$

Полученный пропагатор тоже можно представить в таком виде. Действительно:

$$G^R(0, 0, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi(e^{i\omega T} - e^{-i\omega T})}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n C_{-1/2}^n e^{-i\omega T(2n+\frac{1}{2})} \quad (11.25)$$

и мы получили часть спектра — $E_{2n} = \omega(2n + \frac{1}{2})$. Можно задаться резонным вопросом — куда же делась половина спектра? Ответ прост: дело в том, что пропагатор $G^R(0, 0, T)$ пропорционален волновым функциям в нуле $\psi_n(0)$; а для функций с нечётным n это значение равно нулю, поскольку они сами нечётны. Для того, чтобы получить весь спектр, было бы правильно рассмотреть следующую величину:

$$\text{Tr} G^R(T) \equiv \int dx G^R(x, x, T) = \sum_n e^{-iE_n T} \quad (11.26)$$

Поскольку мы определяли запаздывающий пропагатор лишь при $T > 0$, то можно его доопределить до всей числовой оси, написав $G^R(\mathbf{x}, \mathbf{y}, T) = \theta(T) \cdot \langle \mathbf{y} | e^{-i\hat{H}T} | \mathbf{x} \rangle$; тогда преобразование Фурье такого пропагатора будет выглядеть:

$$\text{Tr} G^R(\omega) = \sum_n \int_0^\infty e^{i(\omega - E_n)t} dt = \sum_n \frac{i}{\omega - E_n + i0} \Rightarrow \nu(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Tr} \text{Im}(iG^R(\omega)) = \sum_n \delta(\omega - E_n) \quad (11.27)$$

11.3 Эквивалентность интеграла по траекториям и уравнения Шрёдингера

Наконец, обсудим вопрос о том, как из интеграла по траекториям можно было бы в обратную сторону вывести уравнение Шрёдингера. Для этого рассмотрим эволюцию на бесконечно малое время ϵ , и запишем:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \langle x | \hat{U}(\epsilon) | \psi(t) \rangle = \int d\eta \langle x | \hat{U}(\epsilon) | x + \eta \rangle \psi(x + \eta, t) \quad (11.28)$$

Для пропагатора на бесконечно малое время мы можем воспользоваться видом через функциональный интеграл (тут мы восстановили \hbar):

$$\langle x | \hat{U}(\epsilon) | x + \eta \rangle = \int_{x(t)=x+\eta}^{x(t+\epsilon)=x} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int dt \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x(t)) \right] \right) \approx \mathcal{N} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m\eta^2}{2\epsilon} - \epsilon V(x) \right) \right) \quad (11.29)$$

В силу малости ϵ , член с потенциальной энергией можно разложить $e^{-i\epsilon V(x)/\hbar} \approx 1 - i\epsilon V(x)/\hbar$. По η происходит интегрирование, и множитель $\exp \left(\frac{im\eta^2}{2\epsilon\hbar} \right)$ говорит, что типичные значения $\eta \propto \sqrt{\epsilon}$. Поэтому подынтегральную волновую функцию можно разложить в ряд по ϵ , оставив первые три члена:

$$\psi(x + \eta, t) \approx \psi(x, t) + \eta \partial_x \psi(x, t) + \frac{1}{2} \eta^2 \partial_x^2 \psi(x, t) \quad (11.30)$$

После такого разложения, можно явно проинтегрировать по η и получить:

$$\int d\eta \cdot e^{im\eta^2/2\epsilon\hbar} \psi(x + \eta, t) \approx \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \left[1 + i\epsilon \frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \right] \psi(x, t) \quad (11.31)$$

Поскольку при $\epsilon = 0$ очевидным образом должно иметь место тождество, мы заключаем, что $\mathcal{N} = \sqrt{m/2\pi i\hbar\epsilon}$ (что, впрочем, известно и из дискретного представления для функционального интеграла (11.8)). Собирая ведущие по ϵ члены, мы получаем:

$$\psi(x, t + \epsilon) = \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) + i\epsilon \frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \right) \psi(x, t), \quad (11.32)$$

Наконец, заменяя $\frac{\psi(x, t+\epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon} \simeq \partial_t \psi(x, t)$, мы немедленно воспроизводим уравнение Шрёдингера:

$$i\partial_t \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (11.33)$$

Данный пример был достаточно академичен, и ничего нового нам не дал. Однако, например, для диффузии (или, более общо — классической частицы, движущийся в вязкой среде под действием случайных Ланжевеновских сил) представление через функциональный интеграл строится достаточно просто и прямолинейно. Подобным преобразованием можно вывести, например, уравнение Фоккера-Планка для функции распределения $P(x, t)$.

11.4 Инстантоны: расщепление в двухъямном потенциале

11.4.1 Постановка задачи

На данном семинаре мы будем искать туннельное расщепление в двухъямном потенциале, следуя классической обзорной работе [Вай+82]. Для удобства мы положим массу частицы $m = 1$, а потенциал зададим в виде $U(x) = \lambda(x^2 - \eta^2)^2$, и тем самым Гамильтониан задачи имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \partial_x^2 + \lambda(x^2 - \eta^2)^2 \quad (11.34)$$

Потенциал имеет пару минимумов в точках $x = \pm\eta$, вблизи которых он имеет осцилляторное разложение $V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$, с частотами $\omega^2 = 8\lambda\eta^2$. Высота барьера, разделяющего эти две ямы, равна $U(0) = \lambda\eta^4$; поэтому квазиклассическому приближению соответствует $\lambda\eta^6 \gg 1 \Leftrightarrow \omega\eta^2 \gg 1$. Именно в таком приближении мы и будем решать эту задачу. На самом деле, её мы уже обсуждали в семинаре, посвящённом квазиклассическому приближению; в частности, мы вычисляли расщепление n -того осцилляторного уровня (на симметричные и антисимметричные комбинации). Квазиклассическое приближение, впрочем, работает только при $n \gg 1$; а сейчас мы сфокусируемся на расщеплении основного состояния $n = 0$. Для вычисления, мы воспользуемся слегка модифицированным аппаратом функций Грина, и функциональным интегралом.

11.4.2 Виковский поворот и Евклидово действие

Удобнее всего исследовать свойства основного состояния в мнимом времени $t = -i\tau^4$. Функцию Грина во мнимом времени мы будем обозначать следующим образом⁵:

$$G_E(x, y, \tau) \equiv G(x, y, -i\tau) = \langle x | e^{-\hat{H}\tau} | y \rangle = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-E_n \tau} \quad (11.35)$$

Обратим внимание, что чем выше возбуждение, тем меньший вклад оно даёт в эту сумму. Поэтому, в принципе, если рассмотреть $\tau = \beta \rightarrow +\infty$, то главный вклад останется только от основного (и, в нашем случае — первого возбуждённого) состояния. Именно этот случай мы и будем исследовать.

Для Евклидовой функции Грина можно вывести представление через функциональный интеграл, полностью эквивалентно тому, что мы делали на предыдущем семинаре. Ответ, в действительности, будет таким же, как если бы мы попросту в действие сделали формальную подстановку $t = -i\tau$. При этом:

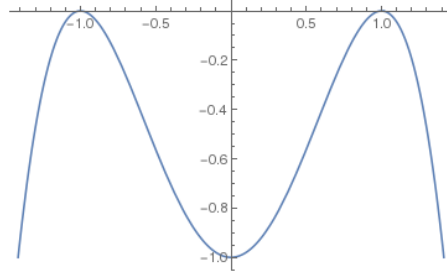
$$iS[x(t)] = i \int \left[\frac{1}{2} (\partial_t x)^2 - U(x(t)) \right] dt = - \int \left[\frac{1}{2} (\partial_\tau x)^2 + U(x(\tau)) \right] d\tau \equiv -S_E[x(\tau)] \quad (11.36)$$

$$G_E(x, y, \beta) = \int_{x(-\beta/2)=y}^{x(\beta/2)=x} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left(- \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \left[\frac{1}{2} (\partial_\tau x)^2 + U(x(\tau)) \right] \right) \quad (11.37)$$

Последнее называют «Евклидовым действием», и, как мы видим, оно отличается от обычного только изменением знака у потенциала $U(x)$ — тем самым, с классической точки зрения оно описывает движение в перевёрнутом потенциале. В дальнейшем нижний индекс «E» мы будем опускать, помня, что мы отныне работаем в мнимом времени.

⁴Такой поворот в комплексную плоскость времени называют Виковским, или «Евклидовым». Последнее чаще используется в контексте релятивистской квантовой теории поля — дело в том, что после такого поворота метрика Минковского $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$, задаваемая через интервал $ds^2 = dt^2 - d\mathbf{r}^2$, превращается в Евклидову метрику $\delta_{\mu\nu}$ (с точностью до знака) $ds^2 = -(d\tau^2 + d\mathbf{r}^2)$.

⁵Д действительности же, для мнимого времени $\tau = \beta = T^{-1}$ это попросту соответствует координатной матрице плотности

Рис. 11.1: Первёрнутый («евклидов») двухъямный потенциал $-U(x)$. Оси в единицах η (Ox) и λ (Oy)


11.4.3 Метод перевала

Поскольку $U(x)$ представляет собой полином четвёртой степени, мы имеем дело с нелинейным действием и с негауссовым функциональным интегралом. Брать этот интеграл мы будем методом перевала, который соответствует нахождению *классических* траекторий, минимизирующих действие — и квадратичному разложению вблизи них. Две тривиальных классических траектории очевидны — они соответствуют покоящимся частицам в точках $x(t) = \pm\eta$. Действие на них равно нулю, а квадратичное разложение устроено так же, как и для квантового гармонического осциллятора; и они дадут соответствующий вклад в следующие функции Грина в совпадающих точках, связанной с посчитанной на предыдущем семинаре функцией Грина квантового гармонического осциллятора $G_0(\beta)$ (с массой $m = 1$):

$$G^{(0)}(\eta, \eta, \beta) = G^{(0)}(-\eta, -\eta, \beta) \simeq G_0(\beta) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi \sinh(\beta\omega)}} \approx \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} e^{-\beta\omega/2} \quad (11.38)$$

Из этого мы действительно видим, что в ведущем приближении имеется (двукратно вырожденный) осцилляторный уровень энергии $E = \omega/2$; но это не то, что нас интересует — нас интересует туннельное расщепление! Туннелированию соответствует переход из левой ямы в правую, поэтому именно такую функцию Грина мы будем считать: $G_E(\eta, -\eta, \beta)$.

11.4.4 Логика

Давайте вспомним, как мы берём многомерные интегралы методом перевала $I = \int \exp(-f(\mathbf{x})) d^d \mathbf{x}$. Рецепт прост: мы сперва мы ищем максимум, решая седловое уравнение (или систему уравнений) $\frac{\partial f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_i} = 0$ — и находя решение, точку \mathbf{x}_0 . В ведущем приближении, значение интеграла даётся значением функции в этой точке: $I \approx \exp(-f(\mathbf{x}_0))$. Затем мы рассматриваем квадратичное разложение вблизи седловой точки: $f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{z}) \approx f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} z_i z_j$; и, наконец, берём гауссов интеграл:

$$I \approx e^{-f(\mathbf{x}_0)} \int d^d \mathbf{z} \exp\left(-\frac{1}{2} L_{ij} z_i z_j\right) = \frac{1}{\sqrt{\det \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}}} e^{-f(\mathbf{x}_0)} \quad (11.39)$$

Функциональный интеграл в этом смысле ничем не отличается — и мы применим этот рецепт и тут.

11.4.5 Седло

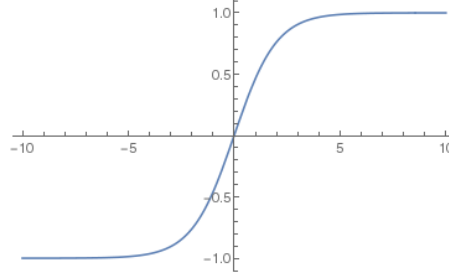
Итак, нам нужно найти классическую траекторию $x_{cl}(\tau)$, удовлетворяющую экстремуму действия с граничными условиями $x(-\beta/2) = -\eta$ и $x(\beta/2) = \eta$:

$$\frac{\delta S_E}{\delta x(\tau)} = 0 \Rightarrow \partial_\tau^2 x = U'(x(\tau)) \quad (11.40)$$

Данное уравнение можно решить в квадратурах, но проще всего решение устроено, если тут сразу взять предел $\beta \rightarrow \infty$. В таком случае, траектории соответствует перекачывающаяся за бесконечное время частица из левого «горба» перевёрнутого потенциала на правый. Чтобы найти эту траекторию, можно воспользоваться законом сохранения «энергии» $E = \frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 - U(x(\tau)) = \text{const}$ (на нашей траектории $E = 0$), благодаря чему понизить степень уравнения до первой:

$$\frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 = U(x(\tau)) \Rightarrow \frac{dx}{x^2 - \eta^2} = \sqrt{2\lambda} d\tau \Rightarrow \boxed{x_{cl}(\tau) = \eta \tanh \frac{\omega\tau}{2}} \quad (11.41)$$

Такую траекторию — нетривиальный экстремум нелинейного действия в функциональном интеграле — называют *инстантоном*.

Рис. 11.2: Инстантонная конфигурация $x_{cl}(\tau)$. Оси в единицах ω (Ox) и η (Oy)

Тут мы сталкиваемся с важной особенностью задачи. Вместо одной седловой траектории, мы, в действительности, имеем дело с целым *седловым многообразием* $x_{cl}(\tau - \tau_c)$, параметризуемым вещественным числом τ_c — положением инстантона. Наличие этой свободы, конечно, связано с трансляционной инвариантностью по времени — мы ведь взяли предел $\beta \rightarrow \infty$! Инстантон имеет характерную ширину $\sim \omega^{-1}$, которая мала (в частности, $\omega^{-1} \ll \beta$), и поэтому краевые эффекты, связанные с удержанием конечного β , будут экспоненциально малы на фоне основного результата, и в ведущем порядке они действительно не важны. Величина же τ_c с этой же точностью может пробегать все значения $\tau_c \in (-\beta/2, \beta/2)$. К этой свободе выбора центра инстантона мы ещё вернёмся, а пока давайте рассмотрим одно седло на этом многообразии, скажем, $\tau_c = 0$.

Итак, в главном порядке значение интеграла определяется действием на этом инстантоне. Давайте его вычислим (для этого удобно воспользоваться «законом сохранения энергии» и выразить член с потенциальной энергией через кинетическую):

$$S_0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau (\partial_{\tau} x_{cl})^2 = \frac{2}{3} \omega \eta^2 \gg 1 \quad (11.42)$$

Несложно убедиться, что это действие тождественно совпадает с «квазиклассическим действием» $\int_{-\eta}^{\eta} p(x) dx$, которое определяло бы расщепление в квазиклассическом приближении.

11.4.6 Квадратичное разложение

Следуя логике метода перевала, нам нужно провести квадратичное разложение вблизи инстантона:

$$S_E[x_{cl}(\tau) + z(\tau)] \approx S_0 + \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau [(\partial_{\tau} z)^2 + U''(x_{cl}(\tau)) z^2(\tau)] \equiv S_0 + S_2[z(\tau)] \quad (11.43)$$

В квадратичном разложении действия стоит линейный оператор $\hat{L} = -\partial_{\tau}^2 + U''(x_{cl}(\tau))$, спектр которого нам предстоит исследовать при взятии гауссова интеграла по квадратичным флуктуациям. Ответ тем самым с точки зрения метода перевала устроен следующим образом:

$$G(\eta, -\eta, \beta) \approx e^{-S_0} \int_{z(-\beta/2)=0}^{z(\beta/2)=0} \mathcal{D}[z(\tau)] e^{-S_2[z(\tau)]} \quad (11.44)$$

Явный вид оператора следующий:

$$U''(x_{cl}(\tau)) = \frac{\omega^2}{2} (3 \tanh^2 \frac{\omega \tau}{2} - 1) = \omega^2 \left(1 - \frac{3/2}{\cosh^2 \frac{\omega \tau}{2}} \right) \quad (11.45)$$

11.4.7 Спектр оператора

Итак, для взятия гауссова интеграла по $z(\tau)$ нам необходимо исследовать свойства (спектр) оператора $-\partial_{\tau}^2 + U''(x_{cl}(\tau))$. Задача на его собственные значения ϵ_n и собственные функции $\psi_n(\tau)$ выглядит следующим образом:

$$\left(-\partial_{\tau}^2 - \frac{3\omega^2/2}{\cosh^2 \frac{\omega \tau}{2}} \right) \psi_n(\tau) = (\epsilon_n - \omega^2) \psi_n(\tau) \quad (11.46)$$

Данное уравнение выглядит в точности как уравнение Шрёдингера в потенциале $\frac{1}{\cosh^2 x}$, решение которого нам известно — оно выражается через гипергеометрическую функцию ${}_2F_1$, и мы его обсуждали на четвёртом семинаре прошлого семестра. Воспользуемся ответами из того семинара, в которые нужно подставить следующие значения параметров:

$$m = \frac{1}{2}, \quad a = \frac{2}{\omega}, \quad U_0 = \frac{3\omega^2}{2} \quad (11.47)$$

Важным для исследования потенциала оказываются следующие два безразмерных параметра:

$$u = \frac{U_0}{1/2ma^2} = 6, \quad s = \frac{1}{2}(\sqrt{1+4u} - 1) = 2 \quad (11.48)$$

Дискретный спектр Как мы помним, число s характеризует количество связанных состояний. Для энергий $E_n \equiv \epsilon_n - \omega^2$ работает следующая формула:

$$E_n = -\frac{(s-n)^2}{2ma^2} = -\frac{\omega^2}{4}(s-n)^2 \Rightarrow \epsilon_n = \omega^2 + E_n = \begin{cases} \epsilon_0 = 0 \\ \epsilon_1 = \frac{3}{4}\omega^2 \end{cases} \quad (11.49)$$

(число $n = 0, 1, \dots$ и $n < s$). Кроме того, целые числа s соответствуют случаю *возникновению* в яме связанного состояния (что означает, что есть состояния со строго нулевой энергией $E = 0$, которое, тем не менее, уже относится к непрерывному спектру).

Нулевая мода Обратим внимание — в задаче имеется нулевая мода $\epsilon_0 = 0$, соответствующая основному состоянию на языке квантовой механики. Его «волновая функция» тоже выписывалась на семинаре, и она выглядит как (константа C_0 обеспечит нормировку на единицу; $s = 2$):

$$\psi_0(\tau) = \frac{C_0}{\cosh^s \frac{\omega\tau}{2}} \quad (11.50)$$

В действительности же, наличие нулевой моды, как мы сказали выше, связано с свободой выбора центра инстантона. Это утверждение можно формализовать: $S[x_{cl}(\tau)] \equiv S[x_{cl}(\tau + \delta\tau)]$, поэтому инфинитезимальная $\delta\tau$ соответствует «приращению» $z(\tau) = \delta\tau \frac{\partial x_{cl}(\tau)}{\partial \tau}$. С другой стороны,

$$S[x_{cl}(\tau) + z(\tau)] \approx S[x_{cl}(\tau)] + S_2[z(\tau)] = S[x_{cl}(\tau)] + \delta\tau^2 \cdot S_2 \left[\frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau} \right] \quad (11.51)$$

и тем самым мы понимаем, что $\frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau}$ (с точностью до нормировки) даёт нулевую моду действия S_2 . Несложно убедиться, что она (с точностью до константы) совпадает с выписанной тут $\psi_0(\tau)$. В дальнейшем нам приходится нормированное выражение для $\psi_0(\tau)$; это можно сделать в общем виде, используя выражения для действия на инстантоне (11.42). Тем самым, мы получаем:

$$\psi_0(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} \frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau} \quad (11.52)$$

Непрерывный спектр В том-же 4 семинаре исследовался также и непрерывный спектр оператора. В частности, имелось выражение для волновых функций задачи рассеяния (волна падает слева направо — для полного набора к ним, конечно же, нужно добавить также решения, соответствующие падению волны справа налево). Особенностью данного потенциала является то, что при целом s рассеяния оказывается *безотражательным*, и волновая функция задачи рассеяния содержит только прошедший «кусоч».

Непрерывный спектр параметризуется волновым вектором k , так что энергия $E_k = \frac{k^2}{2m} = k^2 \Rightarrow \epsilon_k = \omega^2 + k^2$; а сами волновые функции имеют следующий вид:

$$\psi_k(x) \approx \begin{cases} \frac{\Gamma(1-ika)\Gamma(-ika)}{\Gamma(-ika-s)\Gamma(-ika+s+1)} e^{ikx} \equiv e^{ikx+i\delta(k)} & x \rightarrow -\infty \\ e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (11.53)$$

(безотражательность рассеяния означает, что амплитуда прохождения сводится к чистой фазе: $t = e^{-i\delta_k}$). Аналитическое выражение для фазы тоже можно выписать (подставляя $a = \frac{2}{\omega}$ и $s = 2$)⁶:

$$e^{-i\delta(k)} = \frac{\Gamma(-ika-2)\Gamma(-ika+3)}{\Gamma(1-ika)\Gamma(-ika)} = \frac{(2-ika)(1-ika)}{(2+ika)(1+ika)} = \frac{1-\frac{ik}{\omega}}{1+\frac{ik}{\omega}} \cdot \frac{1-\frac{2ik}{\omega}}{1+\frac{2ik}{\omega}} = \exp\left(-2i\left[\arctan\frac{k}{\omega} + \arctan\frac{2k}{\omega}\right]\right) \quad (11.54)$$

$$\delta(k) = 2\left[\arctan\frac{k}{\omega} + \arctan\frac{2k}{\omega}\right] = \begin{cases} 0, & k = 0 \\ 2\pi, & k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (11.55)$$

Помимо таких состояний, имеются также и комплексно-сопряжённые решения $\psi^*(x)$, которые описывают волны, падающие справа налево; и вместе они образуют полный набор.

Дискретизация непрерывного спектра В действительности же тут пора вспомнить о том, что на языке функционального интеграла мы рассматриваем траектории на конечном, хоть и большом, интервале β с нулевыми граничными условиями. Поэтому непрерывный спектр в действительности является дискретным — нам необходимо лишь составить линейную комбинацию ψ_k и ψ_k^* , которая занулялась бы на обоих стенках. Те k , при которых это возможно, и будут давать уровни энергии $\epsilon_n = \omega^2 + k_n^2$. Итак, пусть волновая функция имеет вид $\psi_n(x) = A\psi_k(x) + B\psi_k^*(x)$. Тогда имеется пара условий:

$$\begin{cases} A\psi_k(-\beta/2) + B\psi_k^*(-\beta/2) = 0 \\ A\psi_k(\beta/2) + B\psi_k^*(\beta/2) = 0 \end{cases} \quad (11.56)$$

Такая система уравнений на A и B совместна и имеет ненулевое решение только если её определитель равен нулю:

$$\det \begin{vmatrix} \psi_k(-\beta/2) & \psi_k^*(-\beta/2) \\ \psi_k(\beta/2) & \psi_k^*(\beta/2) \end{vmatrix} = 0 \quad (11.57)$$

Используя асимптотики волновой функции на $\pm\infty$ (известные из задачи рассеяния) мы тем самым получаем:

$$\det \begin{vmatrix} e^{-ik\beta/2+i\delta(k)} & e^{ik\beta/2-i\delta(k)} \\ e^{ik\beta/2} & e^{-ik\beta/2} \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow \sin(k\beta + \delta(k)) = 0 \quad (11.58)$$

Тем самым, имеется набор k_n , которые являются решением следующего трансцендентного уравнения:

$$k_n\beta - \delta(k_n) = \pi n \quad (11.59)$$

Обратим внимание, что случаю $n = 0$ соответствует тривиальное решение этого, вообще говоря, трансцендентного уравнения: $k = 0$. Такая волновая функция — тождественный ноль, и нас не интересует. Поэтому нумерация n начинается с 1.

Давайте исследуем, как устроены решения этого уравнения. Вообще говоря, поскольку $\beta \gg 1$ — очень большое число, то при $n \ll \beta$ решения этого уравнения очень близки к $k_n \approx p_n \equiv \frac{\pi n}{\beta}$; поправки можно найти по теории возмущений. С другой стороны, при $n \gtrsim \beta$, фазы рассеяния уже выходят на константу $\delta(k_n) \approx \delta(k_n \rightarrow \infty) = 2\pi$. Поэтому решение уравнения устроено следующим образом:

$$k_n \approx p_n + \delta(p_n)/\beta, \quad p_n = \pi n/\beta \quad (11.60)$$

11.4.8 Нормировка функционального интеграла

Конечно, как мы уже обсуждали ранее, мера функционального интеграла \mathcal{D} содержит бесконечную константу \mathcal{N} , связанную с дискретизацией — и поэтому буквально выписанным выражением воспользоваться не удастся. Для того, чтобы придать этому выражению смысл, необходимо рассмотреть отношение двух функциональных интегралов, в котором эта бесконечная нормировка сократится. В качестве такого выражения удобно использовать уже сосчитанную ранее функцию Грина квантового гармонического осциллятора; удобно выбрать его с такой же частотой ω , чтобы квадратичные операторы, стоящие в действии были похожи:

⁶Существует прекрасное топологическое утверждение, которое носит название *теоремы Левинсона*. Данная теорема связывает разность фаз рассеяния с количеством связанных уровней в трёхмерной сферически симметричной яме: $\delta_l(k \rightarrow \infty) - \delta_l(0) = -\pi N$ (имеются модификации: в правой части имеется фактор $1/2$ в случае, когда в яме только возникает связанное состояние на нулевой энергии — наш случай — а также для s -канала рассеяния). Она также достаточно просто и обобщается на одномерье.

$$G_0(\beta) = \int_{z(-\beta/2)=0}^{z(\beta/2)=0} \mathcal{D}[z(\tau)] \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} [(\partial_\tau z)^2 + \omega^2 z^2] \right) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi \sinh \omega \beta}} \quad (11.61)$$

И тем самым мы, в действительности, будем работать со следующим выражением:

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = e^{-S_0} \frac{\int_{z(-\beta/2)=0}^{z(\beta/2)=0} \mathcal{D}[z(\tau)] \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau [(\partial_\tau z)^2 + U''(x_{cl}(\tau)) z^2(\tau)] \right)}{\int_{z(-\beta/2)=0}^{z(\beta/2)=0} \mathcal{D}[z(\tau)] \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau [(\partial_\tau z)^2 + \omega^2 z^2] \right)} \quad (11.62)$$

11.4.9 Спектр оператора (знаменатель)

Собственно, с функциональным интегралом, что стоит в знаменателе, мы уже работали — поэтому кратко озвучим результаты. В принципе, оператор $(-\partial_\tau^2 + \omega^2)$, который там стоит, тоже похож на уравнение Шрёдингера в константном потенциале $U(\tau) = \omega^2 = \text{const}$, и тоже обладает лишь непрерывным спектром. Однако нулевые граничные условия, как и в прошлый раз, спектр дискретизуют, волновые функции $\psi_k^{(0)}(\tau)$ представляют собой стоячие волны, а спектр получается следующий:

$$\boxed{\epsilon_p^{(0)} = \omega^2 + p^2, \quad p = p_n = \pi n / \beta} \quad (11.63)$$

11.4.10 Вычисление гауссового интеграла

Итак, мы вплотную приблизились к тому, чтобы, наконец, посчитать гауссов функциональный интеграл. Мы делаем разложение в числителе вида $z(\tau) = \sum_n c_n \psi_n(\tau)$ (учитывая дискретный спектр!) и в знаменателе $z(\tau) = \sum_n c_n \psi_n^{(0)}(\tau)$. Учитывая гауссовость обоих интегралов, мы получаем:

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = e^{-S_0} \prod_n \left(\frac{\int dc_n \exp(-\frac{1}{2} \epsilon_n c_n^2)}{\int dc_n \exp(-\frac{1}{2} \epsilon_n^{(0)} c_n^2)} \right) \quad (11.64)$$

(обратите внимание, что поскольку мы имеем дело, вообще говоря, с бесконечными произведениями *размерных* констант — после вычисления функционального интеграла — которые сами по себе плохо определены, то чтобы этот интеграл имел смысл, необходимо делить буквально почленно. Ровно этим мы и занимались, когда считали осциллятор). Если бы не было нулевой моды, то это считалось бы следующим образом:

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = e^{-S_0} \left(\prod_n \frac{\epsilon_n}{\epsilon_n^{(0)}} \right)^{-1/2} \equiv e^{-S_0} \left(\frac{\det(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right)^{-1/2} \quad (11.65)$$

Нулевая мода Итак, интеграл по dc_0 , соответствующий нулевой моде $\psi_n(\tau)$, происходит в бесконечных пределах, выглядит как $\int dc_0$ и в гауссовом приближении расходится — в таком случае, как правило, интеграл нужно брать *точно*. Наличие нулевых мод, как правило, связаны с какой-то симметрией — в данном случае, трансляционной; и в таком случае интегрирование обычно сводится к *объёму* соответствующей группы симметрии.

В нашем случае, нулевая мода напрямую связана с произвольностью выбора константы τ_c в инстантоне, который имеет вид $x_c(\tau - \tau_c)$. Заметим, что смещение вдоль нулевой моды dc_0 в точности соответствует смещению центра инстантона:

$$d(x_{cl}(\tau - \tau_c)) \equiv \psi_0(\tau) dc_0, \quad d(x_{cl}(\tau - \tau_c)) \equiv \frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau} d\tau_c \quad (11.66)$$

Приравнивая эти два выражения, и замечая, что $\psi_0(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} \frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau}$, мы получаем следующий вид интеграла по нулевой моде в числителе: $\int dc_0 \equiv \sqrt{S_0} \int d\tau_c = \beta \sqrt{S_0}$. В соответствующем выражении в знаменателе стоит следующий интеграл (там нумерация n начинается с 1, что, впрочем, не очень важно — ведь мы имеем дело с непрерывным спектром, и все собственные числа с маленькими номерами малы):

$$\int dc_1 e^{-\frac{1}{2} \epsilon_1^{(0)} c_1^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{\epsilon_1^{(0)}}} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega^2 + \pi^2 / \beta^2}} \underset{\beta \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\sqrt{2\pi}}{\omega} \quad (11.67)$$

Тем самым, если ввести условное обозначение $\det' \hat{L}$ — интеграл с исключённым наименьшим собственным числом — то бишь отщипив нулевую моду — мы получаем:

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = e^{-S_0} \cdot \left(\omega \beta \sqrt{\frac{S_0}{2\pi}} \right) \cdot \left(\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right)^{-1/2} \quad (11.68)$$

Возникновение множителя $\sqrt{S_0}$, связанного с нулевой модой — утверждение в действительности совершенно общего характера.

Дискретный спектр Помимо нулевой моды, имеется также ещё одно состояние дискретного спектра, $\epsilon_1 = \frac{3}{4}\omega^2$. Оно даст следующий вклад (отнормированный на соответствующий вклад $\epsilon_2^{(0)} = \omega^2 + (2\pi/\beta)^2 \approx \omega^2$ от осциллятора:

$$\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2^{(0)}} \underset{\beta \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\frac{3}{4}\omega^2}{\omega^2} = \frac{3}{4} \quad (11.69)$$

Непрерывный спектр Итак, самое сложное — вычисление состояния непрерывного спектра, бесконечного произведения (обратите внимание, нумерация в числителе начинается с $n = 1$, а в знаменателе — с $n = 3$, поскольку первых два состояния мы уже «отщипили» при работе с дискретным спектром). Для вычисления, это бесконечное произведение удобно прологарифмировать, а также воспользоваться приближенным решением трансцендентного уравнения $k_n \approx p_n - \delta(p_n)/\beta$:

$$\begin{aligned} \frac{\det''}{\det''} &= \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\omega^2 + k_n^2}{\omega^2 + p_{n+2}^2} = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \ln \frac{\omega^2 + k_n^2}{\omega^2 + p_{n+2}^2} \right) = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \ln \left(1 + \frac{k_n^2 - p_{n+2}^2}{\omega^2 + p_{n+2}^2} \right) \right) \approx \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_n^2 - p_{n+2}^2}{\omega^2 + p_{n+2}^2} \right) \approx \\ &\approx \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2p_{n+2}(k_n - p_{n+2})}{\omega^2 + p_{n+2}^2} \right) = \exp \left(\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\delta(p_n) - 2\pi)2p_{n+2}}{\omega^2 + p_{n+2}^2} \right) \end{aligned} \quad (11.70)$$

Вообще говоря, тот факт, что k_n и p_n очень близки (по $\frac{1}{\beta}$) на всём промежутке произведения означает, что все члены произведения очень близки к 1, и только за счёт их большого количества ($\sim \beta$) это произведение оказывается отличным от единицы (а сумма — от нуля). Для суммирования плавной функции, удобно заменить сумму на интеграл, согласно $\sum_n = \int_0^\infty \frac{\beta dp}{\pi}$ и увидеть, что β из ответа полностью выпадает, а ответ — конечный:

$$\frac{\det''}{\det''} = \exp \left(\int_0^\infty \frac{dp}{\pi} \frac{2p(\delta(p) - 2\pi)}{\omega^2 + p^2} \right) \quad (11.71)$$

Обратим внимание, что полученный тут член 2π обеспечивает сходимость интеграла на бесконечности (ведь $\delta(p \rightarrow \infty) \rightarrow 2\pi$); в противном случае интеграл бы логарифмически расходился. Само число 2π явно связано с количеством связанных состояний; но ровно с этим же и связана фаза $\delta(p \rightarrow \infty)$! — поэтому теорема Левинсона, о которой сказано в примечании, в действительности гарантирует сходимость этого интеграла на бесконечности. Следующий шаг — интегрирование по частям:

$$\frac{\det''}{\det''} = \exp \left(-\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dp \frac{d\delta}{dp} \ln \frac{\omega^2 + p^2}{\omega^2} \right) \quad (11.72)$$

Прелесть этого выражения ещё и в том, что этот неприятный 2π -член, который «помнит» о количестве связанных состояний, в него не входит; а кроме того, фаза — вообще говоря, многозначная функция, и плохо определена (с точностью до $2\pi n$), а вот производная фазы определена уже хорошо. Поэтому, например, в инстантонной азбуке не сильно «замораживаются» с явным выражением для фазы и отделением этого 2π -члена, а приходят к этому выражению, с которым уже и работают.

Итак, оставшийся интеграл обезразмеривается подстановкой $p = \omega y$, считается явно и даёт:

$$\int_0^\infty dp \frac{d\delta}{dp} \ln \left(1 + \frac{p^2}{\omega^2} \right) = 2 \int_0^\infty dy \ln(1 + y^2) \left[\frac{1}{y^2 + 1} + \frac{2}{4y^2 + 1} \right] = 2\pi \ln 3, \quad (11.73)$$

а вклад от непрерывного спектра равен:

$$\frac{\det''}{\det''} = \frac{1}{9} \quad (11.74)$$

11.4.11 Одноинстантонный ответ

Во-первых, тем самым мы получили ответ для отношения детерминантов (с исключённой нулевой модой):

$$\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2 - \frac{3\omega^2/2}{\cosh^2(\omega\tau/2)})}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} = \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{9} = \frac{1}{12} \quad (11.75)$$

и мы получили следующий ответ (в одноинстантонном приближении):

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = e^{-S_0} \cdot \underbrace{\left(\omega\beta\sqrt{\frac{S_0}{2\pi}} \right)}_{\text{zero mode}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{4}{3}}}_{\text{bound state}} \cdot \underbrace{\sqrt{9}}_{\text{continuous spectrum}} = \sqrt{\frac{6}{\pi}} S_0 \omega \beta e^{-S_0} \quad (11.76)$$

Наличие тут явной зависимости от бесконечной величины β должно смущать — ведь мы рассматриваем предел $\beta \rightarrow \infty$. В действительности же этот ответ, как инстантонная поправка, получен в пределе, покуда он мал — $\sqrt{S_0} \omega \beta e^{-S_0} \ll 1$ — и поэтому буквально бесконечной β сделать не удастся. С другой стороны, от β он явно зависит не экспоненциальным образом, поэтому пока непонятно, как извлечь из него непосредственно туннельное расщепление.

В действительности же найденный ответ — это первый порядок разложения по e^{-S_0} . Настоящий же ответ устроен попросту как

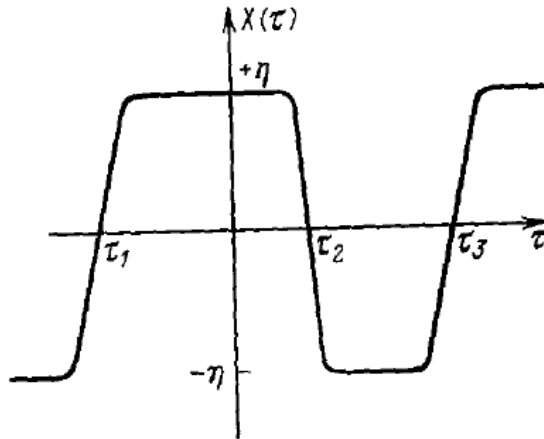
$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = \sinh(\Delta\beta), \quad \Delta = \omega \cdot \sqrt{\frac{6S_0}{\pi}} e^{-S_0} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \omega \cdot \sqrt{\omega\eta^2} e^{-2\omega\eta^2/3}. \quad (11.77)$$

То, что ответ должен быть таким, само по себе достаточно очевидно — мы знаем, что в реальном времени если посадить частицу в одну из ям, то она будет испытывать осцилляции Раби $\sin(\Delta t)$, и Δ даётся как раз туннельным расщеплением симметричного и антисимметричного состояния. В мнимом же времени, экспоненциальная зависимость восстанавливается; рассматривая разложения по собственным модам вида $G(x, y, \beta) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) e^{-\beta E_n}$, мы немедленно понимаем, что в задаче имеется пара уровней энергии $E = \frac{\omega}{2} \pm \Delta$. Тем не менее, чтобы получить этот ответ систематически, необходимо уйти за рамки одноинстантонного приближения, и рассмотреть многоинстантонные вклады.

11.4.12 Разреженный инстантонный газ

Помимо найденной единственной траектории $x_{cl}(\tau)$, при которой частица перекачивается из одного «горба» перевёрнутого потенциала на другой, имеются также и траектории, в которых она многократно катается «туда-сюда» (см. рис.).

Рис. 11.3: Многоинстантонная конфигурация



Давайте выясним, как устроен вклад от таких траекторий в приближении, что инстантоны расположены достаточно далеко друг от друга (это приближение носит название приближения разреженного инстантонного газа; ниже мы выясним, какому параметру оно соответствует). Во-первых, действие на такой траектории из n инстантонов, очевидным образом, будет равно $S_n = nS_0$, а эффективный потенциал с экспоненциальной точностью устроен как набор аналогичных ям от каждого инстантона. Интуитивно понятно, что и квадратичные флуктуации вблизи каждого инстантона факторизуются,

поскольку инстантоны достаточно хорошо разнесены в пространстве⁷; это можно показать и явно. В каждой из ям будет свой набор состояний дискретного спектра, поэтому вклад от последнего факторизуется. Непрерывный же спектр устроен безотражательно для каждого из инстантонов — поэтому полная фаза рассеяния на всех инстантонах будет попросту суммой фаз от каждого из инстантонов, $\delta^{(n)}(p) = n\delta(p)$ — из-за чего факторизуется также и вклад от непрерывного спектра. Наконец, с каждым из инстантонов будет связана своя нулевая мода — интегрирование по положению его центра; и вклад от нулевых мод будет устроен следующим образом:

$$\int_{-\beta/2 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n < \beta/2} d\tau_1 \dots d\tau_n = \frac{\beta^n}{n!} \quad (11.78)$$

Для перехода $-\eta \rightarrow \eta$, только конфигурации с нечётным количеством инстантонов дают вклад. Поэтому, суммирование разреженного инстантонного газа приводит к следующему ответу:

$$\frac{G(\eta, -\eta, \beta)}{G_0(\beta)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\sqrt{\frac{6}{\pi}} S_0 \omega \beta e^{-S_0} \right)^{2n+1} = \sinh \left(\sqrt{\frac{6}{\pi}} S_0 \omega \beta e^{-S_0} \right) \quad (11.79)$$

Точно такое же суммирование можно было бы провести и для, например, $\eta \rightarrow \eta$. В таком случае очевидным образом вклад давали бы только конфигурации с чётным количеством инстантонов, и в ответе ожидаемым образом получился бы \cosh .

Давайте выясним, по какому параметру работает наше приближение. Мы имеем дело с суммой $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\Delta\beta)^{2n+1}}{(2n+1)!}$. Члены этого ряда с n сначала возрастают (из-за, вообще говоря, большого множителя $\Delta\beta$), а затем убывают (из-за факториала в знаменателе — ряд-то сходится!). Можно убедиться, что пик приходится на $n^* \approx \Delta\beta$, и именно такие инстантонные конфигурации дают наибольший вклад в сумму, и условие разреженности должно выполняться именно для них. С другой стороны, типичная ширина каждого инстантона равна, как мы помним, ω^{-1} ; требование сводится к тому, что ширина n^* инстантонов должна быть по-прежнему маленькой по сравнению со всей длиной отрезка β . Этот критерий соответствует $\Delta \ll \omega$; тем самым, наше приближение работает только покуда инстантонная поправка является маленькой (что совершенно ожидаемо) — это, в свою очередь, соответствует туннельному пределу $S_0 \gg 1$.

11.5 Формализм Гельфанда — Яглома

На прошлом семинаре мы столкнулись с необходимостью вычисления функциональных детерминантов операторов типа Шрёдингера. Для его вычисления нам потребовалось найти собственные значения дискретного, и волновые функции непрерывного спектра, а затем вычислять бесконечные произведения. В задаче прошлого семинара мы смогли с этим справиться из-за наличия точного решения потенциала в терминах гипергеометрической функции. С другой стороны, в более сложных приложениях такого решения может не существовать, и возможно, детерминант придётся находить численно — и достаточно очевидно, что изложенный выше способ непригоден для численного анализа. В данном семинаре будет изложен альтернативный и достаточно красивый способ, который позволяет найти ответ значительно проще.

11.5.1 Дискретная формулировка и доказательство

Допустим, мы хотим найти «характеристический многочлен» $f(\lambda) = \det(\hat{H} - \lambda)$, где $\hat{H} = -\partial_x^2 + U(\hat{x})$ — какой-то квантомеханический гамильтониан (забудем пока на время о бесконечных нормировочных константа и что сам детерминант, вообще говоря, определён плохо). Чтобы определить задачу полностью, помимо оператора, нам также необходимо задать класс функций, на которых он действует — например, функции, заданные на отрезке с бесконечными стенками $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Дискретизируем пространство с шагом ϵ ; матрицу \hat{H} в таком случае можно задать совершенно явно ($x_k = k \cdot \epsilon$, $\epsilon = L/(N+1)$, $\psi_0 = 0$):

$$(\hat{H}_N \psi)_n = -\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\epsilon^2} + U(x_n)\psi_n, \quad \hat{H}_N = \frac{1}{\epsilon^2} \begin{pmatrix} 2 + \epsilon^2 U(x_1) & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 + \epsilon^2 U(x_2) & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 + \epsilon^2 U(x_3) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 2 + \epsilon^2 U(x_N) \end{pmatrix} \quad (11.80)$$

⁷Чуть более формально это можно было бы понять, наверное, следующим образом. Если между инстантонами установить бесконечные стенки, то такого рода факторизация будет совершенно очевидна — каждый из инстантонов будет «жить» в своём ящике. А дальше можно спекулировать о том, что из «термодинамических» соображений установка стенок вдали от ям слабо модифицируют задачу.

(и задача становится хорошо определённой). Обозначим $f_N(\lambda) = \det(\hat{H}_N - \lambda)$; чуть удобнее будет вынести ϵ^{-2} , как на формуле выше, вычислить определитель оставшейся матрицы $g_N(\lambda) = \epsilon^{2N} f_N(\lambda)$. Не мудрствуя лукаво, давайте распишем оставшийся определитель по последней строчке; тем самым он свяжется с определителями подматрицы на один и два размера меньше рекуррентным соотношением⁸:

$$g_{N+1} = (2 + \epsilon^2(U(x_{N+1}) - \lambda))g_N - (-1)(-1)g_{N-1} \Rightarrow -\frac{g_{N+1} - 2g_N + g_{N-1}}{\epsilon^2} + (U(x_{N+1}) - \lambda)g_N = 0 \quad (11.81)$$

Возвращаясь к непрерывному пределу $g_N(\lambda) = g(x = N\epsilon|\lambda)$, мы немедленно видим нетривиальный факт — *сам определитель удовлетворяет такому уравнению Шрёдингера!* В этом — суть теоремы Гельфанда-Яглома, и это уже хороший рецепт нахождения определителя — осталось лишь добавить начальные условия. В дискретном представлении они следующие:

$$g_1(\lambda) = 2 + \epsilon^2 U(x_1) \approx 2, \quad g_2(\lambda) = (2 + \epsilon^2 U(x_1))(2 + \epsilon^2 U(x_2)) - 1 \approx 3, \quad (11.82)$$

что означает, что в непрерывном пределе функция $\psi(x|\lambda) = \epsilon g(x|\lambda)$ имеет хорошо определённые граничные условия. Тем самым, в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ задача решается следующим образом:

$$\boxed{\det(\hat{H}_N - \lambda) = \frac{1}{\epsilon^{2N-1}} \psi(L = N\epsilon|\lambda), \quad \hat{H}\psi(x|\lambda) = \lambda\psi(x|\lambda), \quad \psi(0|\lambda) = 0, \quad \partial_x \psi(0|\lambda) = 1} \quad (11.83)$$

Вместо нахождения *всех* решений краевой задачи $\psi(0) = \psi(L) = 0$, нам необходимо решить одну единственную эволюционную задачу (как в «методе стрельбы») — это существенное упрощение. Как обычно, чтобы кроме того избавиться от всевозможных бесконечных нормировочных констант, связанных с дискретизацией, мы можем рассмотреть отношение двух детерминантов — которое уже определено хорошо:

$$\frac{\det(\hat{H}_1 - \lambda)}{\det(\hat{H}_2 - \lambda)} = \frac{\psi_1(L|\lambda)}{\psi_2(L|\lambda)} \quad (11.84)$$

Теперь давайте обсудим полученный результат. Во-первых, выбрать граничное условие $\partial_x \psi$ можно *любым* — лишь бы для обоих волновых функций $\psi_{1,2}$ оно было выбрано одинаковым. Во-вторых, полученный результат непосредственно обобщается и на более сложные операторы, например, на уравнение Шрёдингера в двух или трёх измерениях (где оператор, задающий уравнение волновую функцию устроено не буквально как $-\partial_x^2 + U(x)$). Предложенные тут правдоподобные рассуждения как вариант доказательства теоремы Гельфанда-Яглома не единственные — вообще говоря, к тому же результату можно было бы прийти иначе. А именно, можно заметить, что если $\psi(0|\lambda) = 0$, то $\psi(L|\lambda) = 0$ тогда и только тогда, когда λ является собственным числом оператора \hat{H} — а это, в свою очередь, означает, что нули функций $\det(\hat{H} - \lambda)$ и $\psi(L|\lambda)$ как функции переменной λ совпадают. Из ТФКП известно, что эти функции в таком случае могут отличаться лишь на какую-то целую функцию — и эта целая функция для числителя и знаменателя оказывается одинаковой, если выбраны одинаковые граничные условия задачи «стрельбы» $\partial_x \psi(0|\lambda)$. Поэтому полученная тут связь совершенно неувидительна, и её стоило бы ожидать.

11.5.2 Пример: осциллятор

Давайте рассмотрим в качестве примера простой гармонический осциллятор в мнимом времени, $\hat{H}_1 = -\partial_\tau^2 + \omega^2$; а в качестве знаменателя возьмём свободную частицу, $\hat{H}_2 = -\partial_\tau^2$; положим $\lambda = 0$ (такую задачу в реальном времени мы решали два семинара назад, когда только учились брать гауссовы интегралы). Решения соответствующих эволюционных задач записываются устно:

$$(-\partial_\tau^2 + \omega^2)\psi_1(x) = 0 \Rightarrow \psi_1(\tau) = \frac{\sinh \omega \tau}{\omega} \quad (11.85)$$

$$-\partial_\tau^2 \psi_2(x) = 0 \Rightarrow \psi_2(\tau) = \tau, \quad (11.86)$$

и значит, для функций, заданных на отрезке длины β , отношение определителей равно:

$$\frac{\det \hat{H}_1}{\det \hat{H}_2} = \frac{\sinh \omega \beta}{\omega \beta} \quad (11.87)$$

Тот же результат получался и ранее с нахождением спектра, что было несколько сложнее.

⁸Составлять такого рода рекуррентные соотношения — стандартный способ вычисления определителей трёхдиагональных матриц

11.5.3 Пример: флуктуации вблизи инстантона

Теперь давайте перейдём к примеру сложнее — а именно, рассмотрим оператор $\hat{H}_s = -\partial_x^2 - \frac{s(s+1)}{\cosh^2 x}$. Именно с таким оператором ($s = 2$) мы имели дело на прошлом семинаре. Обозначим также $\lambda = -\kappa^2$. Нам нужно решать задачу стрельбы; сразу заметим, что поскольку $\lambda < 0$, то уравнение Шрёдингера решается на отрицательных энергиях, поэтому решения непременно будут экспоненциально растущими. Нормировать мы будем на осциллятор — такой же оператор, но с $s = 0$. Наконец, поскольку мы рассматриваем задачу на отрезке $(-L, L)$, то удобно воспользоваться симметрией задачи относительно инверсии. Как мы знаем, эта симметрия означает, что все собственные волновые функции можно выбрать либо чётными, либо нечётными — а значит, и в определитель будет вклад как от чётных, так и от нечётных мод, и эти вклады разделяются⁹. Поэтому и мы тоже можем искать отдельно отношение определителей, вычисленных по чётным и по нечётным состояниям — для этого можно «стрелять» не из $x = -\beta/2$, а из нуля $x = 0$, и решать следующие две задачи («+» и «-» соответствуют чётным и нечётным решениям):

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(0) = 1 \\ \partial_x \psi^{(+)}(0) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \psi^{(-)}(0) = 0 \\ \partial_x \psi^{(-)}(0) = 1 \end{cases} \quad (11.88)$$

Давайте теперь решать уравнение Шрёдингера. Конечно, без гипергеометрической функции не обойтись — УШ ведь получается таким же. Для поиска чётных и нечётных решений удобно воспользоваться заменой переменных $y = \cosh^2 x$, которая приводит УШ к следующему виду:

$$y(1-y)\psi''(y) + \left(\frac{1}{2} - y\right)\psi'(y) - \left(\frac{s(s+1)}{4y} - \frac{\kappa^2}{4}\right)\psi(y) = 0 \quad (11.89)$$

Подстановка $\psi(y) = y^{(s+1)/2}\chi(y)$ приводит его к гипергеометрическому виду:

$$y(1-y)\chi''(y) + \left[\left(s + \frac{3}{2}\right) - y(s+2)\right]\chi'(y) - \left(\frac{(s+1)^2 - \kappa^2}{4}\right)\chi(y) = 0, \quad (11.90)$$

однако чуть проще оно записывается для переменной $z = 1 - y = -\sinh^2 x$:

$$z(1-z)\chi''(z) + \left[\frac{1}{2} - z(s+2)\right]\chi'(z) - \left(\frac{(s+1)^2 - \kappa^2}{4}\right)\chi(z) = 0. \quad (11.91)$$

Сравнивая полученное уравнение с уравнением для гипергеометрической функции, мы немедленно получаем следующие значения параметров:

$$a = \frac{s+1+\kappa}{2}, \quad b = \frac{s+1-\kappa}{2}, \quad c = \frac{1}{2}, \quad (11.92)$$

а также общий вид решения в виде линейной комбинации ${}_2F_1(a, b; c; z)$ и $z^{1-c} \cdot {}_2F_1(b-c+1, a-c+1; 2-c; z)$; для исходных функций решения имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(x) = \cosh^{s+1} x \cdot {}_2F_1\left(\frac{s+1+\kappa}{2}, \frac{s+1-\kappa}{2}; \frac{1}{2}; -\sinh^2 x\right) \\ \psi^{(-)}(x) = \sinh x \cdot \cosh^{s+1} x \cdot {}_2F_1\left(\frac{s-\kappa+2}{2}, \frac{s+\kappa+2}{2}; \frac{3}{2}; -\sinh^2 x\right) \end{cases} \quad (11.93)$$

Выбранные таким образом, они удовлетворяют необходимым граничным условиям: $\psi^{(+)}(x \ll 1) \approx 1$ и $\psi^{(-)}(x \ll 1) \approx x$.

Асимптотики (бесконечность)

Мы хотим найти определитель для системы со стенками, расположенными достаточно далеко $\kappa L \gg 1$, поэтому нам необходимо найти далёкие асимптотики функций $\psi^{(\pm)}(x \rightarrow \infty)$ (которые, напомним, должны быть экспоненциально возрастающими, поскольку мы имеем дело с движением на отрицательной энергии). Для того, чтобы найти асимптотику гипергеометрической функции, нам необходимо воспользоваться одной из многих формул преобразования аргумента — в данном случае, $z \mapsto \frac{1}{z}$ (который переводит ∞ в 0, а асимптотика в нуле уже хорошо известна). Преобразование имеет следующий вид:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} \frac{1}{(-z)^a} \cdot {}_2F_1(a, 1-c+a; 1-b+a; \frac{1}{z}) + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} \frac{1}{(-z)^b} \cdot {}_2F_1(b, 1-c+b; 1-a+b; \frac{1}{z}) \quad (11.94)$$

⁹Даже сама матрица гамильтониана, если уж на то пошло, в таком случае имеет блочно-диагональный вид

Сами гипергеометрические функции дают асимптотику ${}_2F_1(\dots, 0) \approx 1$; для функции $\psi^{(+)}$ значение $a > b$, из-за чего важнее оказывается второе слагаемое; а для $\psi^{(-)}$ — наоборот, первое. Асимптотики получаются следующими:

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(x) & \approx \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(\kappa)}{\Gamma((s+1+\kappa)/2)\Gamma((\kappa-s)/2)} \coth^{s+1} x \cdot \sinh^\kappa x \approx \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(\kappa)}{2^\kappa \Gamma((1+s+\kappa)/2)\Gamma((\kappa-s)/2)} e^{\kappa x} \\ \psi^{(-)}(x) & \approx \frac{\Gamma(3/2)\Gamma(\kappa)}{\Gamma((s+\kappa+2)/2)\Gamma((1-s+\kappa)/2)} \coth^{s+1} x \sinh^\kappa x = \frac{\Gamma(3/2)\Gamma(\kappa)}{2^\kappa \Gamma((s+\kappa+2)/2)\Gamma((1-s+\kappa)/2)} e^{\kappa x} \end{cases} \quad (11.95)$$

В знаменателе же стоит решение задачи в отсутствии потенциала («квантовый гармонический осциллятор» в терминах исходной задачи, или свободная частица в терминах соответствующего УШ), который мы уже выписывали ранее:

$$\begin{cases} \psi_0^{(+)}(x) & = \cosh \kappa x \approx e^{\kappa x}/2 \\ \psi_0^{(-)}(x) & = \sinh \kappa x / \kappa \approx e^{\kappa x}/2\kappa \end{cases} \quad (11.96)$$

Тем самым, отношение определителей принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\det(\hat{H}_s + \kappa^2)}{\det(\hat{H}_0 + \kappa^2)} &= \frac{2\Gamma(1/2)\Gamma(\kappa)}{2^\kappa \Gamma((1+s+\kappa)/2)\Gamma((\kappa-s)/2)} \cdot \frac{2\kappa\Gamma(3/2)\Gamma(\kappa)}{2^\kappa \Gamma((s+\kappa+2)/2)\Gamma((1-s+\kappa)/2)} \\ &= \frac{\pi\kappa\Gamma^2(\kappa)}{2^{2\kappa-1}\Gamma((1+s+\kappa)/2)\Gamma((\kappa-s)/2)\Gamma((s+\kappa+2)/2)\Gamma((1-s+\kappa)/2)} \end{aligned} \quad (11.97)$$

Полученный ответ можно ещё упростить, используя соотношение $\Gamma(x)\Gamma(x+1/2) = \sqrt{\pi}\Gamma(2x)/2^{2x-1}$. Окончательно, имеем:

$$\boxed{\frac{\det(\hat{H}_s + \kappa^2)}{\det(\hat{H}_0 + \kappa^2)} = \frac{\kappa\Gamma^2(\kappa)}{\Gamma(1+s+\kappa)\Gamma(\kappa-s)}} \quad (11.98)$$

Применение к инстантону

На прошлом семинаре мы считали следующее отношение определителей:

$$\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2 - 3\omega^2/2 \cosh^2(\omega\tau/2))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}. \quad (11.99)$$

Напомним, штрих в числителе означал, что нужно «убрать» нулевую моду, а в знаменателе — что нужно убрать наименьшую моду. Давайте вычислим его, используя нашу общую формулу. Во-первых, чтобы привести его к нужному виду, необходимо сделать замену $x = \frac{\omega\tau}{2}$:

$$\frac{\det' \left(\frac{\omega^2}{4} [-\partial_x^2 + 4 - 6/\cosh^2 x] \right)}{\det' \left(\frac{\omega^2}{4} [-\partial_x^2 + 4] \right)} = \frac{\det'(\hat{H}_2 + 4)}{\det'(\hat{H}_0 + 4)} \quad (11.100)$$

Во-вторых, поскольку оба определителя «штрихованные», то константы можно сократить (собственные числа делятся друг на друга попарно и эти константы попарно же сокращаются — в противном случае, скажем, для отношения вида \det'/\det , такая константа могла бы «выскочить» в ответ); значит, мы немедленно получаем $s = 2$ и $\kappa = 2$. Если подставить эти параметры буквально в полученную выше формулу, мы получим ноль (поскольку $\Gamma(\kappa-s)$ в знаменателе обращается в бесконечность), что ожидаемо — в формуле штрихи стоят неспроста. В формализме Гельфанда-Яглома выбросить нулевую моду можно достаточно просто: давайте чуть-чуть сместим λ и рассмотрим отношение определителей $\det(\hat{H}_0 + 4 + \epsilon)/\det(\hat{H}_0 + 4 + \epsilon)$. В таком случае, нулевая мода станет малой и равной ϵ ; остальные же моды изменятся слабо. Добавив также «выброшенную» наименьшую моду в знаменателе, чтобы убрать штрих и оттуда, мы получаем:

$$\frac{\det'(\hat{H}_2 + 4)}{\det'(\hat{H}_0 + 4)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\frac{1}{\epsilon} \det(\hat{H}_2 + 4 + \epsilon)}{\frac{1}{4} \det(\hat{H}_0 + 4 + \epsilon)} \quad (11.101)$$

Теперь мы готовы считать. Подставляем $\kappa^2 = 4 + \epsilon \Rightarrow \kappa = 2 + \epsilon/4$ и получаем:

$$\frac{\det(\hat{H}_2 + 4 + \epsilon)}{\det(\hat{H}_0 + 4 + \epsilon)} \underset{\epsilon \ll 1}{\approx} \frac{2\Gamma^2(2)}{\Gamma(5)\Gamma(\frac{\epsilon}{4})} = \frac{\epsilon}{48}, \quad (11.102)$$

и тем самым мы воспроизводим ответ, полученный ранее: $\frac{\det'(\hat{H}_2+4)}{\det'(\hat{H}_0+4)} = 1/12$.

11.6 Инстантоны: распад метастабильного состояния

На этом семинаре мы разберём ещё одну задачу квантовой механики, которая тоже решается при помощи инстантонов и которая тоже имеет туннельную природу. Речь идёт о задаче распада метастабильного состояния (см. семинар 8 прошлого семестра). Хотя технически эта задача очень похожа на задачу о туннельном расщеплении в двухъямном потенциале, в ней есть несколько крайне важных мест, которые стоит обсудить отдельно. Сама задача формулируется следующим образом. Частица массы $m = 1$ описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \lambda x^2(\eta - x) \quad (11.103)$$

В окрестности $x = 0$ имеется локальный минимум, а сам потенциал имеет вид осциллятора с частотой $\omega = \sqrt{2\lambda\eta}$. Если бы этот минимум был бы глобальным, то для низколежащих уровней имела бы серия стационарных связанных состояний $E_n = \omega(n + \frac{1}{2})$. Однако в нашей задаче никаких стационарных состояний нет, имеется только непрерывный спектр — поэтому если частицу поместить на один из этих осцилляторных уровней энергии, то рано или поздно частица протуннелирует через барьер (который мы считаем достаточно высоким, чтобы квазистационарное состояние было хорошо определённым). Как мы обсуждали ранее, такой процесс формально эквивалентен мнимой добавке к уровням энергии $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$, так что обычная унитарная эволюция для таких состояний будет приводить к экспоненциальному затуханию вероятности со временем $\psi_n \propto e^{-i(E_n - i\Gamma_n/2)t} \Rightarrow |\psi_n|^2 \propto e^{-\Gamma_n t}$.

Давайте сперва формально повторим инстантонное вычисление, пропуская важные моменты — а в самом конце обсудим их.

11.6.1 Функциональный интеграл

Итак, мы хотим исследовать функцию Грина, дающую вероятность остаться в яме, $G(0, 0, t) = \langle 0 | e^{-i\hat{H}t} | 0 \rangle$. В мнимом времени $t = -i\beta$, в эту величину будет давать основной вклад основное состояние¹⁰, и мы получим:

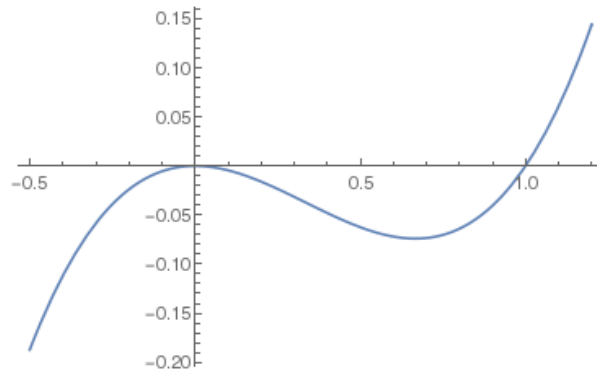
$$G_E(0, 0, \beta) \approx \sum_n |\langle 0 | n \rangle|^2 e^{-\beta E_n + i\beta \Gamma_n/2} \approx |\langle 0 | n=0 \rangle|^2 e^{-\beta E_0 + i\beta \Gamma_0/2} \quad (11.104)$$

С другой стороны, для Евклидовой функции Грина можно записать следующий функциональный интеграл:

$$G_E(0, 0, \beta) = \int_{x(-\beta/2)=0}^{x(\beta/2)=0} \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E}, \quad S_E = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \left(\frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 + U(x) \right) \quad (11.105)$$

Как обычно, Евклидово действие представляет собой обычное действие, но в перевёрнутом потенциале¹¹, имеющим вид, изображённый на рисунке.

Рис. 11.4: Перевёрнутый потенциал $-U(x)$. Оси в единицах η (Ox) и ω (Oy).



¹⁰Это первый важный момент — ведь никакого основного состояния нет, мы имеем дело с квазистационарным состоянием — с точки зрения спектральных свойств гамильтониана, в задаче есть только непрерывный спектр.

¹¹Второй существенный момент — потенциал $U(x)$ неограничен снизу, поэтому, вообще говоря, имеются траектории со сколь угодно большим отрицательным Евклидовым действием, которые дают сколь угодно большой вклад в этот функциональный интеграл. Будучи записанным так — он расходится! Исходный же интеграл, записанный в реальном времени, конечно, определён хорошо и никаких таких расходимостей не содержит — траектории с бесконечно большим положительным как и отрицательным действием сильно осциллируют (из-за того, что вес имеет вид e^{iS}), и практически не дают вклад в функциональный интеграл.

Инстантон

Следуя пройденному ранее пути, нам необходимо найти инстантон (в пределе $\beta \rightarrow \infty$) — седловую траекторию, дающую экстремум действия S_E . Как обычно, мы будем это делать, используя первый интеграл:

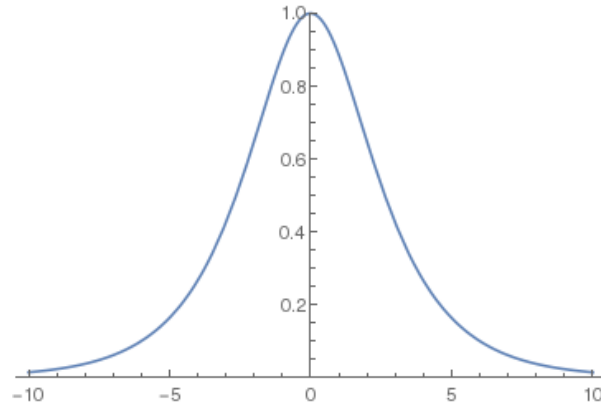
$$\partial_\tau^2 x = U'(x) = \lambda x(2\eta - 3x), \quad E = \frac{1}{2}(\partial_\tau x)^2 - U(x) = 0 \Rightarrow \partial_\tau x = \sqrt{2U(x)} \quad (11.106)$$

Имеются тривиальные траектории $x = 0$ (которая даст нам осцилляторные уровни энергии) и $x = \frac{2}{3}\eta$ (которая вообще является локальным максимумом и не интересна), а также нетривиальная траектория — инстантон:

$$\frac{dx}{\sqrt{2U(x)}} = d\tau \Rightarrow \boxed{x_{cl}(\tau) = \frac{\eta}{\cosh^2 \frac{\omega\tau}{2}}} \quad (11.107)$$

Эта траектория — «отскок» («bounce trajectory»), на ней частица «скатывается» с локального максимума $x = 0$ вправо, закатывается на точку остановки $x = \eta$, а затем скатывается обратно и опять закатывается на $x = 0$. Сама траектория изображена на рисунке:

Рис. 11.5: Инстантонная траектория $x_{cl}(\tau)$. Оси в единицах ω^{-1} (Ox) и η (Oy).



Как обычно, центр инстантона может быть выбран произвольным: $x_{cl}(\tau - \tau_c)$, $\tau_c \in (-\beta/2, \beta/2)$ — с чем, как обычно, будет связано наличие нулевой моды в этом функциональном интеграле. Действие на этом инстантоне считается тривиально, используя закон сохранения энергии:

$$S_0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\partial_\tau x_{cl})^2 d\tau = 2\omega\eta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh^2 z}{\cosh^6 z} dz = \frac{8}{15}\omega\eta^2 \gg 1 \quad (11.108)$$

Квадратичные флуктуации

Мы делаем разложение вблизи инстантона, и получаем $S_E[x_{cl}(\tau) + z(\tau)] \approx S_0 + S_2[z(\tau)]$ и

$$S_2[z(\tau)] \approx \frac{1}{2} \int z(\tau)(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))z(\tau)d\tau \quad (11.109)$$

Как обычно, мы имеем дело с оператором типа «уравнения Шрёдингера» $\hat{L} = -\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau))$. «Потенциальная энергия» этого уравнения следующая:

$$U''(x_{cl}(\tau)) = \omega^2 \left(1 - \frac{3}{\cosh^2 \frac{\omega\tau}{2}} \right) \quad (11.110)$$

Потенциал опять имеет вид Пешля-Теллера ($\sim \frac{1}{\cosh^2 x}$), поэтому для этой задачи опять можно найти аналитическое решение. Нам опять необходимо решать задачу поиска спектра оператора:

$$\hat{L}\psi_n(\tau) = \epsilon_n \psi_n(\tau) \quad (11.111)$$

У оператора имеется нулевая мода, связанная с произвольностью выбора центра инстантона, и она устроена аналогично:

$$\psi_1(\tau) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} \frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau} \quad (11.112)$$

Тут возникает третий важный момент, который отличается от рассматриваемого ранее двухъямного потенциала. Траектория $x_{cl}(\tau)$ имеет максимум, поэтому нулевая мода имеет *узел*. Она не может давать волновую функцию основного состояния — а только первого возбуждённого. Это означает, что основное состояние даёт *отрицательную моду* $\epsilon_0 = -|\epsilon_0| < 0$, и Гауссов интеграл по ней, устроенный как $\int dc_0 e^{\frac{1}{2}c_0^2|\epsilon_0|} = \text{расходится!}$ Тем не менее, давайте закроем глаза и на это, и воспользуемся стандартной формулой, говорящей, что этот интеграл равен $\sqrt{\frac{2\pi}{\epsilon_0}} = \pm i\sqrt{\frac{2\pi}{|\epsilon_0|}}$. Действительно, поскольку мы ожидаем наличие именно метастабильного состояния с комплексной энергией, мнимый вклад — это как раз то, что нам следует ожидать! (вещественный вклад означал бы лишь, что уровень энергии как-то изменился — и это не то, что нам интересно). Мистическим образом, поступая так, мы теряем двойку — и это четвёртый важный момент, который мы обсудим ниже.

Отщепляя интегрирование по нулевой моде, которое устроено точно так же и даёт $\sqrt{\frac{S_0}{2\pi}}\omega\beta$, и учитывая эту «потерянную» двойку, мы приходим к следующему ответу:

$$\frac{G_E(0, 0, \beta)}{G_0(0, 0, \beta)} = \pm i e^{-S_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{S_0}{2\pi}} \omega \beta \cdot \left(-\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right)^{-1/2} \quad (11.113)$$

Отношение определителей проще сосчитать, используя метод Гельфанда-Яглома; оно оказывается равным

$$\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + U''(x_{cl}(\tau)))}{\det'(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} = -\frac{1}{60} \quad (11.114)$$

(как и следовало ожидать, из-за отрицательной моды определитель тоже отрицателен). Наконец, суммирование разреженного инстантонного газа также тривиально — количество траекторий-отскоков может быть произвольным $n = 0, 1, \dots$, и инстантонный газ даст попросту превратит найденное нами число (вклад с $n = 1$) в экспоненту от него же $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\pm i\Gamma_0\beta/2)^n = \exp(\pm i\Gamma_0\beta/2)$. Собирая всё вместе, мы получаем следующий ответ:

$$\frac{G_E(0, 0, \beta)}{G_0(0, 0, \beta)} = \exp \left(\pm i e^{-S_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{30S_0}{\pi}} \omega \beta \right) \quad (11.115)$$

Сравнивая с ожидаемым ответом $\exp(i\Gamma_0\beta/2)$, мы понимаем, что необходимо выбрать знак «+» и ответ даётся:

$$\Gamma_0 = \omega \sqrt{\frac{30S_0}{\pi}} e^{-S_0} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \omega \cdot \sqrt{\omega\eta^2} e^{-8\omega\eta^2/15} \quad (11.116)$$

11.6.2 Обсуждение вопросов

Итак, к этому моменту у внимательного читателя могло накопиться порядочное количество вопросов, которые мы старались отмечать по ходу текста. Основной вопрос, конечно, можно сформулировать следующим образом: *как мы берём расходящийся (sic!) вещественный интеграл, и получаем конечный и мнимый (sic!) ответ?!*

Ответ кроется в процедуре аналитического продолжения. Исходный функциональный интеграл хорошо определён и является аналитической функцией на вещественной оси времени $t \in \mathbb{R}$. Мы строим его аналитическое продолжение в комплексную плоскость, и рассматриваем его на мнимой оси $t = -i\beta$. К сожалению, если буквально подставить мнимое время в функциональный интеграл, мы действительно получаем расходящийся интеграл — и это означает, что процедура такого аналитического продолжения устроена чуть сложнее; ниже мы обсудим, как именно.

С другой стороны, в мнимом времени инстантонная траектория — вещественная, что очень хорошо! Для взятия соответствующего интеграла мы можем пользоваться обычным *вещественным* методом перевала, для которого у нас имеется хорошо развитая интуиция. В терминах исходного интеграла — у него тоже, конечно, имеется седло, но оно *комплексное* — и значит, нам требуется комплексный метод перевала (для многомерного комплексного интеграла!). Более того, комплексных сёдел в действительности очень много, и задача определения тех, которые всё-таки дают вклад в интеграл — нетривиальная задача¹². Именно поэтому мы делаем Виковский поворот — он **значительно** упрощает нам жизнь. Цена,

¹²Даже в одномерном случае нужно чертить линии постоянной фазы, и т.п. — а их хоть можно нарисовать! В многомерном случае мы имеем дело с гиперповерхностями постоянной фазы в функциональном пространстве, и линии наискорейшего спуска принадлежат этим гиперповерхностям. Выбор, на какую из линий можно деформировать контур интегрирования — вообще говоря, очень сложная задача.

которую приходится заплатить за это упрощение — необходимость аналитического продолжения — в действительности невелика.

Процедура аналитического продолжения (формально) Формально такую процедуру можно устроить следующим образом. Рассмотрим функциональный интеграл как аналитическую функцию трёх параметров λ, η, t . При этом (λ, η, t) соответствует исходному функциональному интегралу, а $(\lambda, \eta, -i\beta)$ — Евклидовому, который мы считаем. Проследим, как меняется действие при вращении $t = |t|e^{-i\varphi}$:

$$iS[x(\tau), \lambda, \eta, |t|e^{-i\varphi}] = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} d\tau \left(\frac{1}{2} e^{i\frac{\pi}{2} + i\varphi} (\partial_\tau x)^2 - e^{i\frac{\pi}{2} - i\varphi} \lambda x^2 (\eta - x) \right) \quad (11.117)$$

При сопровождающем вращении $\lambda = |\lambda|e^{i\varphi}$ интеграл будет оставаться сходящимся (т.к. траектории с большими $x(\tau)$ дают осциллирующий вклад), поэтому аналитическое продолжение $(\lambda, \eta, t) \rightarrow (|\lambda|e^{i\varphi}, \eta, |t|e^{-i\varphi})$ происходит тривиально, используя исходное выражение. При таком аналитическом продолжении при $\varphi = \frac{\pi}{2}$ мы получаем Евклидово действие (в мнимом времени), но с параметром $i\lambda$: $G_E(i\lambda, \eta, \beta)$. Нетривиальной остаётся процедура аналитического продолжения $\lambda \rightarrow -i\lambda$, потому что при буквально такой подстановке в интеграл он теряет свою сходямость. То, как устроено такое аналитическое продолжение, мы продемонстрируем на модельном (обычном) интеграле.

Модельный интеграл

Конечно, для функционального интеграла процедуру аналитического продолжения в явном виде предоставить достаточно тяжело — но ключевые её моменты (включая «мистическую двойку») можно ухватить на простом модельном одномерном интеграле. Рассмотрим следующий интеграл:

$$I(g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot \exp \left(-\frac{x^2}{2} + igx^3 \right) \quad (11.118)$$

Полученная функция аналитична при $g \in \mathbb{R}$ (аналог «вещественного времени»). С другой стороны, если мы попытаемся «наивно» её продолжить в $g \rightarrow \mp ig$ (аналог нашего «мнимого времени»), мы немедленно получим расходящийся интеграл, который даже внешне похож на наш: $I(\pm ig) \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left(-\frac{x^2}{2} \pm gx^3 \right)$. Тем не менее, процедуру аналитического продолжения можно построить достаточно просто. Заметим, что при комплексном $g = |g|e^{-i\varphi}$, интеграл сходится в комплексной плоскости в следующих секторах комплексной плоскости:

$$\text{Im}(gx^3) \geq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \frac{\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \\ \frac{2\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \pi + \frac{\varphi}{3} \\ \frac{4\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} & \leq \arg x \leq \frac{5\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \end{cases} \quad (11.119)$$

При $\varphi = 0$ наш интеграл $I(g)$ проходит по контуру, который лежит в первом секторе (вещественная ось). Поэтому если при уходе g в комплексную плоскость мы будем вращать соответствующим образом контур интеграла (чтобы он оставался в первой области), то полученный интеграл будет сходиться, а также будет являться аналитической функцией g . Тем самым, аналитическое продолжения интеграла $I(g)$ строится следующим образом:

$$I(g) = \int_C dx \exp \left(-\frac{x^2}{2} + igx^3 \right), \quad C = \left\{ \arg x \in \left[\frac{\varphi}{3}; \frac{\pi}{3} + \frac{\varphi}{3} \right] \right\}, \quad \varphi = -\arg g \in (-\pi, \pi) \quad (11.120)$$

(например, мы можем попросту вращать контур так, чтобы $\arg x = \frac{1}{3}\varphi$ — и интеграл всегда оставался осциллирующим).

Теперь можно приступить к исследованию асимптотик полученной аналитической функции при $g \ll 1$, для чего можно применить метод перевала. У интеграла имеются две седловых точки:

$$\varphi(x) = -\frac{x^2}{2} + igx^3, \quad \varphi'(x) = -x + 3igx^2 \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = \frac{-i}{3g} \end{cases}, \quad \varphi(x) = \begin{cases} 0, & x = x_1 \\ \frac{1}{54g^2}, & x = x_2 \end{cases} \quad (11.121)$$

$$\varphi''(x) = -1 + 6igx = \begin{cases} -1, & x = x_1 \\ 1, & x = x_2 \end{cases} \quad (11.122)$$

1. Первая седловая точка $x = x_1$ — тривиальная, она является аналогом нашего тривиального «осцилляторного» седла — траектории $x_{cl} = 0$. Она всегда вещественная, и вклад от неё не зависит от g . Направление наискорейшего спуска

на ней соответствует действительной оси, и это седло всегда даёт вклад в интеграл. Сам вклад устроен следующим образом:

$$I_1(g) \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} dx = \sqrt{2\pi} \quad (11.123)$$

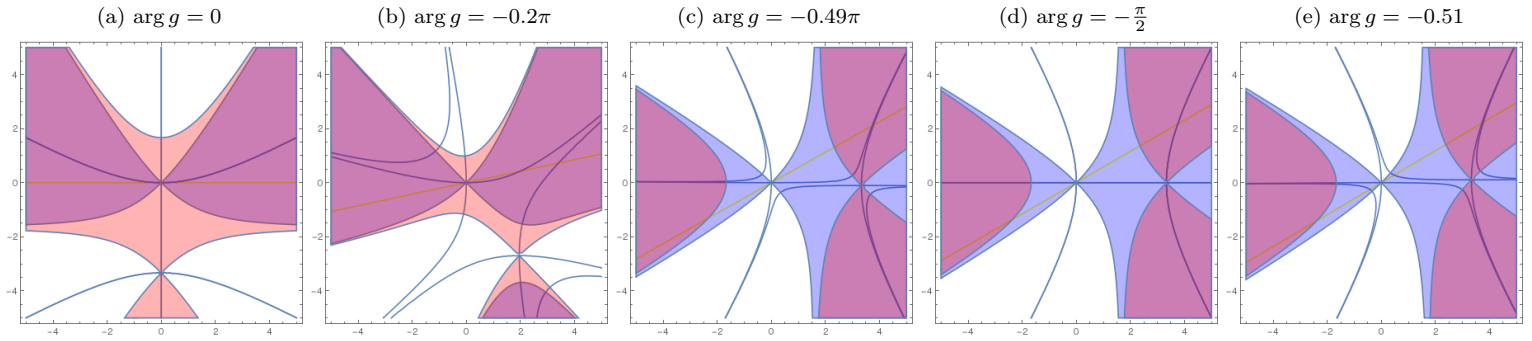
2. Вторая седловая точка — наш «инстантон». Для интеграла в «реальном времени» ($g \in \mathbb{R}$) она комплексна, и если бы мы не знали ничего о комплексных числах — мы бы её попросту упустили. Вторая производная в ней положительна — поэтому с точки зрения обычного Гауссова интегрирования, интеграл по ней расходился бы ($\sim \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{x^2}$) — впрочем, мы знаем, что в действительности это означает, что направление наискорейшего спуска на ней идёт параллельно мнимой оси. С учётом этого, вклад от второго седла оказывается следующий:

$$I_2(g) \approx \pm i \sqrt{2\pi} e^{1/54 g^2} \quad (11.124)$$

В «мнимом времени» $g = \pm i|g|$ седло становится вещественным $x_2 = \mp \frac{1}{3|g|}$, а вклад от него — экспоненциально мал $\propto \exp(-1/54|g|^2)$, а также он чисто мнимый (хотя, напомним, подынтегральное выражение выглядит чисто вещественным $\int_C e^{-x^2/2 + gx^3} dx$). Так или иначе, аналогия тут практически полная.

Для того, чтобы понять, как устроен вклад этой седловой точки, можно проследить устройство топологии комплексной плоскости при вращении $g \rightarrow ge^{-i\pi/2}$ (смотри рисунки).

Рис. 11.6: Структура комплексной плоскости x при различных значениях $\arg g$ и при $|g| = 0.1$. Синие линии — линии постоянной фазы для обоих седловых точек. Жёлтая линия — исходный контур интегрирования. Голубая область — область $\operatorname{Re}\varphi(x) < \operatorname{Re}\varphi(x_1)$. Красная область — $\operatorname{Re}\varphi(x) < \operatorname{Re}\varphi(x_2)$.



Какой вывод стоит сделать из рисунка? При $\varphi < \frac{\pi}{2}$, вклад приходит только от тривиального седла и интеграл оценивается как

$$I(|g|e^{-i\varphi}) \approx I_1(g) \approx \sqrt{2\pi}, \quad 0 \leq \varphi < \frac{\pi}{2}, \quad (11.125)$$

в то время как при $\varphi > \frac{\pi}{2}$, вклад даёт также и второе седло (причём направление наискорейшего спуска $+\frac{\pi}{2}$, поэтому знак $\operatorname{Im}I(g) > 0$) и оценка получается следующей:

$$I(|g|e^{-i\varphi}) \approx I_1(g) + I_2(g) \approx \sqrt{2\pi}(1 + ie^{1/54 g^2}), \quad \pi > \varphi > \frac{\pi}{2}. \quad (11.126)$$

В действительности мы тут имеем дело с явлением Стокса. У функции $I(g)$ мнимая ось (а именно она нас интересует!) — это линия Стокса, на которой появляется экспоненциально малый вклад $e^{-1/54|g|^2}$ на фоне «большого» вклада от основного седла. Обычно это означает, что на самой линии Стокса экспоненциально малый вклад плохо определён — ведь с «большим» вкладом $I_1(g)$ связан асимптотический ряд, погрешность которого больше экспоненциально малого вклада $I_2(g)$. Однако в данном случае (как и в функциональном интеграле) экспоненциально малый вклад выделить всё-таки возможно, потому что только он — мнимый (в этом смысле в $\operatorname{Im}I(g)$ мы сравниваем не $|I_2(g)|$ с $|I_1(g)|$, а с нулём — такое сравнение вполне законно).

Что же происходит на самой линии Стокса? Глядя на рисунок мы видим, что мы должны деформировать контур таким образом, что мы проходим по вещественной оси через первое седло, доходим до второго (но вдоль линии наискорейшего возрастания!); а затем на втором седле начинаем двигаться вдоль линии наискорейшего спуска, которая параллельна мнимой оси — тем самым, второе седло строго на линии Стокса даёт *половинный* вклад $\frac{1}{2}I_2(g)$:

$$\boxed{\operatorname{Im}I(-i|g|) \approx \frac{1}{2}I_2(g)} \quad (11.127)$$

Выводы Наш модельный интеграл оказался крайне полезным. На нём мы поняли смысл отрицательной моды, и законность нашего способа работы с ней, ровно как и происхождение множителя $\frac{1}{2}$. В функциональном интеграле мы также имеем дело с явлением Стокса (как аналитической функции амплитуды потенциала, или, что эквивалентно, туннельного действия) — асимптотический ряд, связанный с *ангармонизмом* осциллятора ($\frac{\omega}{2}$ — это лишь нулевой порядок!) имеет экспоненциально малую погрешность, которая сравнима с шириной уровня Γ . Последняя, тем не менее, хорошо определена, поскольку является чисто мнимой¹³ (на самом деле, точно такое же явление Стокса происходит и в задаче о туннельном расщеплении). Дальнейшее аналитическое продолжение $(\lambda, \eta, -i\beta) \rightarrow (\lambda, \eta, t)$ в конечном итоге сохранит эту $\frac{1}{2}$, поскольку мы всё время остаёмся на линии Стокса по переменной λ ; поэтому конечный ответ именно такой.

Метастабильные состояния Другой вопрос был связан с тем, как мы интерпретировали метастабильные состояния — в частности, раскладывались по ним, как будто они образуют базис. Разложение, конечно, правильно проводить по всем состояниям непрерывного спектра. Тем не менее, квазистационарные состояния проявляют себя как полюса амплитуды рассеяния — S -матрицы — расположенные вблизи вещественной оси. При вычислении различных интегралов по непрерывному спектру (ну, например — функции Грина) именно эти состояния будут давать наибольший (полюсной) вклад. Поэтому, хоть разложение буквально не запишется в нужном виде, но в действительности с хорошей точностью¹⁴ эта формула всё-таки работает:

$$G(0, 0, t) \simeq \sum_n |\langle 0|n \rangle|^2 e^{-iE_n t - \Gamma_n t/2}, \quad (11.128)$$

¹³Такая аналитическая связь между этими асимптотическими рядами имеет далеко идущие последствия, которые выходят за рамки курса.

¹⁴Конкретно, это зависит от времени t . А именно, экспоненциальный закон нарушается на самых маленьких временах $t \ll \frac{1}{E}$, а также на самых больших временах $t \gg \frac{1}{\Gamma} \ln \frac{E}{\Gamma}$. Обсуждение конкретных тонкостей, связанных с динамикой метастабильных состояний, а любопытного читателя мы порекомендуем дополнительную литературу (см., например, [БЗП71, глава 6 «Квазистационарные состояния», пар. 5 «закон радиоактивного распада»]).

Глава 12

Локализация Андерсона

Примерно с 60-х годов люди изучали вопрос о поведении квантовой частицы (далее электрон в металле) в присутствии случайного потенциала $U(x)$, который возникает естественным образом в физике твердого тела при учете того, что в кристаллической решетке присутствуют примеси, различного рода дислокации, и, наконец, разные изотопы атомов. После некоторых споров, общепризнанным стало понимание¹ того, что характер волновой функции в присутствии беспорядка может существенно меняться так, что она больше не распространяется на весь объем системы (как было для Блоховских волн), а локализована² в какой-то области пространства, вне которого экспоненциально затухает³.

Свойства волновой функции отражаются на транспортных свойствах системы: локализованные состояния не могут переносить ток в отсутствие неупругих процессов (нулевая температура), поэтому такое состояние системы называют *изолятором Андерсона*. При ненулевой температуре электрон-фонное взаимодействие обеспечивает⁴ так называемую *прыжковую проводимость*, которая существенно меньше металлической проводимости.

Отметим также, что пока мы не включаем в рассмотрение электрон-электронное взаимодействие и другие неупругие процессы, локализация является одночастичной задачей (упругое рассеяние на беспорядке сохраняет энергию частицы).

12.1 Одномерная локализация, метод трансфер-матрицы⁵

Задача о локализации в одномерии хороша тем, что она решается аналитически для достаточно слабого беспорядка. Рассмотрим *модель Андерсона*:

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_{i+1} + \text{h.c.} \quad (12.1)$$

Здесь написан гамильтониан сильной связи для цепочки атомов с постоянными прыжковыми амплитудами $t = 1$ для ближайших соседей, и энергиями (в единицах t) на узлах ϵ_i , которые предполагаются независимыми случайными величинами с одинаковой плотностью распределения $P(\epsilon_i)$ для каждого узла. В оригинальной модели Андерсона бралось равномерное распределение $P_A(\epsilon_i)$ на отрезке $[-W/2, W/2]$, мы же пока будем считать эту функцию произвольной с нулевым средним $\langle \epsilon_i \rangle = 0$ и малой дисперсией по сравнению с туннельной амплитудой: $\langle \epsilon_i^2 \rangle \ll t^2 = 1$.

Уравнение Шредингера для дискретной версии волновой функции ψ_i :

$$E\psi_n = \epsilon_n \psi_n - (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}). \quad (12.2)$$

Перейдем от уравнения второго порядка к уравнению первого порядка на столбец $\mathbf{x}_n = (\psi_n \ \psi_{n-1})^T$, задаваемому *трансфер-матрицей* t_n ⁶:

¹Ключевую роль в этом сыграл выдающийся американский физик-твердотельщик Phil Anderson (1923—29 марта 2020 г.).

²Это явление получило название *Андерсоновской локализации*. Имеется также термин *слабая локализация*, который используется для описания пертурбативных квантовых интерференционных поправок к проводимости в режиме хорошего металла (слабого беспорядка), которые можно интерпретировать, как зарождающуюся полноценную локализацию.

³Количественной характеристикой может служить так называемое *Inverse Participation Ratio* $\text{IPR} = \int d^d x |\psi(x)|^4$ при условии правильной нормировки $\int d^d x |\psi(x)|^2 = 1$. Для нелокализованных состояний из нормировки следует, что $\psi \sim 1/\sqrt{V}$, поэтому $\text{IPR} \rightarrow 0$ при стремлении объема системы к бесконечности. Для локализованных состояний интегралы сходятся, волновая функция и IPR не меняются при объемах системы, больших характерного размера волновой функции.

⁴Может ли такую проводимость обеспечить исключительно электрон-электронное взаимодействие — вопрос, который в настоящее время активно изучается (#многочастичная локализация, #MBL). Spoiler: видимо, не может при температуре ниже критической.

⁵Этот раздел представляет собой обработанную лекцию Дениса Баско <http://nantheory.itp.ac.ru/teaching/Basko042015/lecture2.pdf>

⁶В случае наличия прыжков на соседи, следующие за ближайшими, пришлось бы взять столбец из четырех компонент.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}_{n+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_n - E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{m_n} \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}_n}. \quad (12.3)$$

Мы знаем, что в отсутствие беспорядка ϵ_n решения представляют собой плоские волны $e^{\pm ikn}$ со спектром $E = -2 \cos k$, которым соответствуют $\mathbf{x}_n = (e^{ikn} e^{ik(n-1)})^T$ и $\mathbf{x}_n = (e^{-ikn} e^{-ik(n-1)})^T$. Если шум предполагается малым, то модификация свободного решения тоже будет мала, и следуя духу адиабатики, выделить быстрое движение (с волновым вектором k) и записать эффективные уравнения на медленное:

$$\mathbf{x}_n = \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = a_n \begin{pmatrix} e^{ikn} \\ e^{ik(n-1)} \end{pmatrix} + b_n \begin{pmatrix} e^{-ikn} \\ e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix} = R_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}, \quad R_n = \begin{pmatrix} e^{ikn} & e^{-ikn} \\ e^{ik(n-1)} & e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix}. \quad (12.4)$$

Тогда уравнение запишется так:

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} = \underbrace{R_{n+1}^{-1} m_n R_n}_{\tilde{m}_n} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}, \quad \tilde{m}_n = \mathbf{1} + \frac{\epsilon_n}{2i \sin k} \begin{pmatrix} 1 & e^{-2ikn} \\ -e^{2ikn} & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.5)$$

Рассмотрим ситуацию, когда беспорядок присутствует только в n узлах, а за пределами этого участка $\epsilon_n = 0$, $a_n = a_{L(R)}$ и $b_n = b_{L(R)}$ постоянны, волновая функция представляет собой линейную комбинацию плоских волн $\psi_n^{L(R)} = a_{L(R)} e^{ikn} + b_{L(R)} e^{-ikn}$. Тогда можно получить связь между коэффициентами слева и справа от неупорядоченного участка, перемножив трансфер-матрицы:

$$\begin{pmatrix} a_R \\ b_R \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_L \\ b_L \end{pmatrix}, \quad M = \tilde{m}_{n-1} \cdots \tilde{m}_1. \quad (12.6)$$

Это связь позволяет найти коэффициенты прохождения и отражения для частицы, налетающей слева (t, r) и справа (\tilde{t}, \tilde{r}) или, наоборот, записать через них матричные элементы M :

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \tilde{r} \\ 1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{t} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad M = \begin{pmatrix} -r\tilde{r}/\tilde{t} + t & \tilde{r}/\tilde{t} \\ -r/\tilde{t} & 1/\tilde{t} \end{pmatrix}. \quad (12.7)$$

Заметим, что $\det m_n = 1$, $\det R_n = 2i \sin k$ (не зависит от n), следовательно, $\det \tilde{m}_n = 1$, и, наконец, $\det M = 1$, откуда получается $\tilde{t} = t$, то есть коэффициент прохождения не зависит от направления падения, как и должно быть.

Имеется также симметрия $\sigma_x \tilde{m}_n \sigma_x = \tilde{m}_n^*$ («обращение времени», смена знака импульса при комплексном сопряжении компенсируется перестановкой $a \leftrightarrow b$), из которой следует $\sigma_x M \sigma_x = M^*$ и, далее, $|r|^2 + |t|^2 = 1$ и $\tilde{r} = -r^* t / t^*$ (коэффициент отражения $|r|^2$ также не зависит от направления падения, но фаза амплитуды разная).

Введем матрицу

$$M_n = M M^\dagger = \tilde{m}_{n-1} \cdots \tilde{m}_1 (\tilde{m}_{n-1} \cdots \tilde{m}_1)^\dagger. \quad (12.8)$$

Как известно из упражнения к первому семинару, такая матрица обладает свойствами эрмитовости $M_n^\dagger = M_n$, положительной определенности $M_n \geq 0$ ($a^\dagger M_n a \geq 0 \forall a$). Из написанного выше следует также, что и для M_n верно $\det M_n = 1$ и $\sigma_x M_n \sigma_x = M_n^*$. Легко показать (раскладываясь по матрицам Паули), что произвольная такая матрица может быть параметризована двумя вещественными параметрами η_n и φ_n :

$$M_n = \begin{pmatrix} \cosh \eta_n & e^{i\varphi_n} \sinh \eta_n \\ e^{-i\varphi_n} \sinh \eta_n & \cosh \eta_n \end{pmatrix}. \quad (12.9)$$

Сравнивая правый нижний матричный элемент в такой записи и выраженный через параметры формулы (12.7) находим связь $|t|^2 = 1 / \cosh^2(\eta/2)$.

Рассмотрим изменение матрицы M_n при изменении длины неупорядоченного участка на один узел:

$$\begin{aligned} M_{n+1} - M_n &= \tilde{m}_n M_n \tilde{m}_n^\dagger - M_n = -\frac{\epsilon_n}{\sin k} \begin{pmatrix} \sinh \eta_n \sin \Phi_n & i \cosh \eta_n e^{-2ikn} + i \sinh \eta_n e^{i\varphi_n} \\ -i \cosh \eta_n e^{2ikn} - i \sinh \eta_n e^{-i\varphi_n} & \sinh \eta_n \sin \Phi_n \end{pmatrix} + \\ &+ \frac{\epsilon_n^2}{2 \sin^2 k} (\cosh \eta_n + \sinh \eta_n \cos \Phi_n) \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2ikn} \\ -e^{2ikn} & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (12.10)$$

где $\Phi_n = \varphi_n + 2kn$.

Выше написано точное выражение, теперь запишем M_{n+1} в виде (12.9) и выразим η_{n+1} , φ_{n+1} с точностью до второго порядка по ϵ_n . Покажем как это делать на примере η_{n+1} . Для этого достаточно рассмотреть только левый верхний элемент матрицы и записать разложение $\eta_{n+1} = \eta_n + \alpha\epsilon_n + \beta\epsilon_n^2 + \dots$ и аккуратно разложить до второго порядка:

$$\cosh \eta_{n+1} \approx \cosh \eta_n + \alpha\epsilon_n \sinh \eta_n + \left(\frac{\alpha^2 \epsilon_n^2}{2} + \beta\epsilon_n^2 \right) \cosh \eta_n + \dots = -\frac{\epsilon_n}{\sin k} \sinh \eta_n \sin \Phi_n + \frac{\epsilon_n^2}{2 \sin^2 k} (\cosh \eta_n + \sinh \eta_n \cos \Phi_n) \quad (12.11)$$

Приравнявая коэффициенты перед степенями ϵ_n найдем α, β :

$$\eta_{n+1} = \eta_n - \frac{\epsilon_n}{\sin k} \sin \Phi_n + \frac{\epsilon_n^2 \cos \Phi_n}{2 \sin^2 k} (1 + \coth \eta_n \cos \Phi_n) + \dots \quad (12.12)$$

Если проделать такое же вычисление и для φ_{n+1} получим:

$$\varphi_{n+1} = \varphi_n - \frac{\epsilon_n}{\sin k} (1 + \coth \eta_n \cos \Phi_n) + \frac{\epsilon_n^2 \sin \Phi_n}{2 \sin^2 k} [(1 - 2 \coth^2 \eta_n) \cos \Phi_n - \coth \eta_n] + \dots \quad (12.13)$$

В присутствии беспорядка эти величины случайные и нам хотелось бы найти их функцию распределения, усреднив по беспорядку, причем физически интересная величина — это η_n , так как именно однозначно связана с коэффициентом прохождения. Она зависит от фазовых переменных Φ_n , распределение которых близко к равномерному на окружности благодаря слагаемому $2kn$, в случае, когда импульс k не соизмерим с π . Поэтому ниже будем усреднять не только по беспорядку, но и по Φ_n , считая распределение равномерным.

Пусть нам распределение P_n величины η_n , найдем распределение P_{n+1} для η_{n+1} . Плотность распределения можно найти, усреднив дельта-функцию (стандартный подход, применяемый для вывода уравнения Фоккера-Планка):

$$\begin{aligned} P_{n+1}(\eta) &= \left\langle \delta \left(\eta_n - \frac{\epsilon_n}{\sin k} \sin \Phi_n + \epsilon_n^2 F(\eta_n, \Phi_n) - \eta \right) \right\rangle_{\epsilon_n, \Phi_n, \eta_n} = \\ &= \int P(\epsilon) d\epsilon \int_0^{2\pi} d\Phi_n \int d\eta_n P_n(\eta_n) \cdot \delta \left(\eta_n - \frac{\epsilon_n}{\sin k} \sin \Phi_n + \epsilon_n^2 F(\eta_n, \Phi_n) - \eta \right), \end{aligned} \quad (12.14)$$

где было введено обозначение $F(\eta_n, \Phi_n) = \cos \Phi_n (1 + \coth \eta_n \cos \Phi_n) / (2 \sin^2 k)$.

Для начала возьмем интеграл по η_n , для этого найдем, в какой точке δ -функция обратится в бесконечность путем итерационного решения уравнения $\eta_n = \eta + \epsilon_n \sin \Phi_n / \sin k - \epsilon_n^2 F(\eta_n, \Phi_n)$. Подставляя его в себя же (в аргумент функции F), можно найти ряд по ϵ_n , из которого мы оставим члены только первого и второго порядка по ϵ_n : $\eta_n = \eta + \epsilon_n \sin \Phi_n / \sin k - \epsilon_n^2 F(\eta, \Phi_n)$. Также потребуется производная аргумента δ -функции по η_n : $\partial [\arg \delta(\dots)] / \partial \eta_n = 1 + \epsilon_n^2 \partial F(\eta_n, \Phi_n) / \partial \eta_n$.

$$P_{n+1}(\eta) = \int P(\epsilon) d\epsilon \int_0^{2\pi} d\Phi_n P_n \left(\eta + \frac{\epsilon_n \sin \Phi_n}{\sin k} - \epsilon_n^2 F(\eta, \Phi_n) \right) \cdot (1 - \epsilon_n^2 \partial F(\eta, \Phi_n) / \partial \eta) \quad (12.15)$$

Далее мы можем разложить P_n (и дополнительный множитель) по ϵ_n до второго порядка:

$$P_{n+1}(\eta) = \int P(\epsilon) d\epsilon \int_0^{2\pi} d\Phi_n \left(P_n(\eta) - \epsilon_n^2 P_n(\eta) \frac{\partial F(\eta, \Phi_n)}{\partial \eta} + \frac{\partial P_n}{\partial \eta} \left(\frac{\epsilon_n \sin \Phi_n}{\sin k} - \epsilon_n^2 F(\eta, \Phi_n) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P_n}{\partial \eta^2} \frac{\epsilon_n^2 \sin^2 \Phi_n}{\sin^2 k} \right), \quad (12.16)$$

и усреднить остаток по фазе и беспорядку на узле:

$$\langle F \rangle_\Phi = \frac{\coth \eta}{4 \sin^2 k}, \quad \left\langle \frac{\partial F}{\partial \eta} \right\rangle_\Phi = -\frac{1}{4 \sin^2 k} \frac{1}{\sinh^2 \eta}, \quad \langle \sin^2 \Phi_n \rangle = \frac{1}{2}, \quad (12.17)$$

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \epsilon_n^2 \rangle = \langle \epsilon^2 \rangle. \quad (12.18)$$

Подставим эти компоненты в уравнение:

$$P_{n+1}(\eta) = P_n(\eta) + \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{4 \sin^2 k} \left(\frac{\partial^2 P_n}{\partial \eta^2} - \frac{\partial P_n}{\partial \eta} \coth \eta + \frac{1}{\sinh^2 \eta} P_n(\eta) \right). \quad (12.19)$$

Поскольку добавка к $P_n(\eta)$ мала, то можно перейти к медленному дифференциальному уравнению: $P_{n+1}(\eta) \approx P_n(\eta) + \frac{\partial P_n}{\partial n} \cdot 1$:

$$\boxed{\frac{\partial P_n}{\partial n} = \frac{2}{L_{\text{loc}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \sinh \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{P_n}{\sinh \eta}}, \quad (12.20)$$

где мы ввели обозначение $L_{\text{loc}} = 8 \sin^2 k / \langle \epsilon^2 \rangle$. Заметим, что это эволюционное уравнение и в качестве начального условия нужно выбрать: $P(n=1, \eta) = \delta(\eta)$, поскольку в отсутствии беспорядка $|t|^2 = 1$ – полная прозрачность.

Заметим, что это уравнение сохраняет полную вероятность:

$$\frac{\partial}{\partial n} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta P_n = \frac{2}{L_{\text{loc}}} d\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \sinh \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{P_n}{\sinh \eta} = \frac{2}{L_{\text{loc}}} \left(\frac{\partial P_n}{\partial \eta} - P_n \coth \eta \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (12.21)$$

У этого уравнения имеется очевидное стационарное решение $P_n = \sinh \eta$, которое нужно отбросить в силу его ненормируемости. Тем не менее оно наводит на гипотезу о том, что распределение $P_n(\eta)$ сконцентрировано на больших η . На них можно заменить $\sinh \eta \rightarrow e^\eta/2$ и получить уравнение типа теплопроводности:

$$\frac{\partial P_n}{\partial n} = \frac{2}{L_{\text{loc}}} \left(-\frac{\partial P_n}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 P_n}{\partial \eta^2} \right). \quad (12.22)$$

Член с первой производной по η можно устранить заменой $P_n(\eta) \rightarrow \bar{P}_n(\eta - 2n/L_{\text{loc}})$, после чего можно воспользоваться функцией Грина для уравнения теплопроводности, которая дает решение, удовлетворяющее правильному начальному условию :

$$P_n(\eta) = \sqrt{\frac{L_{\text{loc}}}{8\pi n}} \exp \left[-\frac{(\eta - 2n/L_{\text{loc}})^2}{8n/L_{\text{loc}}} \right]. \quad (12.23)$$

Отсюда мы видим, что при больших значениях n типичное значение η (максимум распределения) действительно велико, что соответствует коэффициенту прохождения $T = |t|^2$, экспоненциально убывающему с расстоянием с характерным масштабом L_{loc} (*длина локализации*)

$$T_{\text{typical}} \sim e^{-2n/L_{\text{loc}}}.$$

Заменяя $T = |t|^2 = \cosh^{-2} \eta/2 \rightarrow 4e^{-\eta}$ среднюю прозрачность, считая, что вклад приходит с больших η :

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} 4e^{-\eta} P_n(\eta) d\eta = \sqrt{\frac{2L_{\text{loc}}}{\pi n}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{n}{2L_{\text{loc}}} - \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2 L_{\text{loc}}}{8n} \right) d\eta \sim e^{-n/(2L_{\text{loc}})}. \quad (12.24)$$

Здесь подынтегральное выражение — гаусс с центром в $-n/(2L_{\text{loc}})$, в область интегрирования попадает только его хвост и оценку экспоненты дает ее значение при $\eta = 0$ (точнее посчитать не получится, потому что в этой области неприменимо уравнение (12.22)).

Наивная теория возмущения. Посчитаем время и длину свободного пробега по золотому правилу Ферми, считая беспорядок возмущением. Усредненный квадрат матричного элемента (здесь для аккуратности введем в волновые функции нормировочный множитель $1/\sqrt{N}$):

$$\left\langle | \langle k' | \sum_j \epsilon_j a_j^\dagger a_j | k \rangle |^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{jj'} \frac{e^{i(k-k')j}}{N} \frac{e^{-i(k-k')j}}{N} \epsilon_j \epsilon_{j'} \right\rangle = \frac{1}{N} \langle \epsilon \rangle^2. \quad (12.25)$$

Время свободного пробега (здесь перейдем к интегрированию $\sum_k \rightarrow N \int dk/(2\pi)$):

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \langle \epsilon^2 \rangle \int \frac{dk'}{2\pi} \delta(2 \cos k - 2 \cos k') = \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{2 |\sin k|}, \quad l = v\tau = \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| \tau = \frac{4 \sin^2 k}{\langle \epsilon^2 \rangle} = \frac{L_{\text{loc}}}{2}. \quad (12.26)$$

Мы получили, что длина локализации в одноканальной задаче порядка длины свободного пробега, полученной наивным расчетом. Наивность заключается в том, что никакого уравнения Больцмана с параметром $1/\tau$ в действительности написать нельзя, так как оно опирается на отсутствие когерентности между различными актами рассеяния, а в чисто одномерном случае, как мы видели, это предположение совершенно неверно.

Список литературы

- [Ban19] Т. Banks. *Quantum Mechanics (An Introduction)*. 2019.
- [БЗП71] А. Базь, Я. Зельдович и А. Переломов. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*. Наука, 1971.
- [Вай+82] А. И. Вайнштейн и др. “Инстантонная азбука”. в: *Усп. физ. наук* 136.4 (1982), с. 553—591. DOI: 10.3367/UFNr.0136.198204a.0553. URL: <https://ufn.ru/ru/articles/1982/4/a/>.
- [Гал01] В. Галицкий. *Задачи по квантовой механике*. т. 1. Едиториал УРСС, 2001.
- [ЛЛ02] Л. Ландау и Е. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. т. 3. ФИЗМАТЛИТ, 2002.
- [ПШ01] М. Пескин и Д. Шрёдер. *Введение в квантовую теорию поля*. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.
- [ФЛС66] Р. Фейнман, Р. Лейтон и М. Сэндс. *Фейнмановские лекции по физике*. т. 8. 1966.