К 100-летию академика Л.Д. Ландау

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В.Н. Каразина**

А.М. ЕРМОЛАЕВ, Г.И. РАШБА

Л Е К Ц И И
ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ
И КИНЕТИКЕ

1. Основные понятия квантовой механики

Учебно-методическое пособие

Харьков 2007

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

Авторский знак Е74

Рекомендовано кафедрой теоретической физики имени академика И.М. Лифшица (протокол № 5 от 29 марта 2007 г.)

Утверждено Ученым советом физического факультета Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина (протокол № 5 от 18 мая 2007 г.)

Рецензенты:
А.С. Ковалев, доктор физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. ФТИНТ НАН Украины, профессор;
В.В. Ульянов, доктор физ.-мат. наук, профессор (ХНУ).

Ермолаев А.М., Рашба Г.И.
Лекции по квантовой статистике и кинетике.
1.Основные понятия квантовой механики:
Учебно-методическое пособие для студентов физических специальностей университетов. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2007. – 68 с.

В учебно-методическом пособии изложен формализм современной квантовой статистики и кинетики, основанный на методах квантовой теории поля. Основное внимание уделено применению метода квантовых функций Грина и функциональных методов в теории конденсированного состояния вещества.

Пособие является расширенным курсом лекций, которые авторы ряд лет читают студентам физического факультета Харьковского университета. Адресовано студентам физических, физико-технических и радиофизических факультетов университетов, аспирантам и научным работникам.

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

Содержание

Введение

Успехи квантовой статистики и кинетики в процессе изучения свойств конденсированного вещества в значительной степени обусловлены проникновением в эту теорию методов расчета, заимствованных из других разделов теоретической физики. Интенсивное проникновение началось в пятидесятых годах двадцатого столетия, когда метод квантовых функций Грина, первоначально разработанный в квантовой теории поля, стал привычным инструментом для изучения конденсированного состояния. Этот процесс продолжается и сейчас. Современный этап развития теории конденсированного состояния характеризуется еще более интенсивным проникновением в эту теорию методов квантовой теории поля, современной математики. Наряду с функциями Грина в работах физиков-теоретиков все чаще встречаются континуальные интегралы, поля Грассмана и другие понятия, объединенные общим названием «функциональные методы». Если в прошлом столетии физики довольствовались, в основном, стандартным матанализом, то сейчас без использования понятий и методов суперматематики физик-твердотельщик уже не может обходиться. Ясно, что эта тенденция должна найти отражение в учебной литературе для студентов.

Опыт преподавания теоретической физики студентам показывает, что основной трудностью для них является не усвоение новых идей, а овладение теорфизическими методами расчета. Одна из причин такого положения состоит в том, что среди обилия монографий и учебных пособий по квантовой статистике и кинетике лишь немногие адресованы начинающим теоретикам. Создание таких пособий для бакалавров и магистров, готовящихся к самостоятельной научной работе, – одна из задач авторов учебной литературы. Этим пособием мы вносим и свой скромный вклад в решение этой задачи.

Основная цель нашего пособия – показать, как методы квантовой теории поля используются в квантовой статистике и кинетике для расчета термодинамических величин и кинетических коэффициентов конденсированных систем. Основное внимание мы уделяем теорфизическому формализму, который в настоящее время используется для расчета характеристик электронной жидкости в проводниках. В первой главе мы напоминаем читателю основные понятия квантовой механики, необходимые для дальнейшего. Вторая глава посвящена методу вторичного квантования. В третьей главе вводятся когерентные состояния бозонов и фермионов, приводятся необходимые сведения из алгебры Грассмана. В четвертой главе рассматриваются смешанные состояния квантовых систем, излагается аппарат матрицы плотности, необходимый для их описания. Центральное место в пособии занимает пятая глава, в которой изложен метод температурных функций Грина в квантовой статистике. Здесь рассматриваются также функциональные методы. В шестой и седьмой главах функции Грина и функциональные методы используются для расчета кинетических коэффициентов электронов в проводниках. Наряду с теорией линейной реакции Кубо излагается получивший за последние годы широкое распространение метод Келдыша.

Пособие написано по материалам лекционных курсов, которые мы на протяжении ряда лет читали студентам физического факультета Харьковского университета. В конце каждой главы содержатся задачи, способствующие закреплению материала. Пособие адресовано студентам физических, физико-технических, радиофизических факультетов университетов. Оно окажется полезным аспирантам и научным работникам, использующим в своей работе методы статистической физики и кинетики.

Нам приятно выразить искреннюю благодарность рецензентам проф. Ковалеву А.С. и проф. Ульянову В.В. за стимулирующее обсуждение изложенных здесь вопросов.

1. Основные понятия квантовой механики

1.1. Формализм Дирака в квантовой механике

Объектом изучения в этом курсе теоретической физики является система многих частиц, взаимодействующих друг с другом и с внешним полем. Основное внимание будет уделено методам расчета термодинамических и кинетических характеристик электронной жидкости в нормальных проводниках.

Центральным понятием физической теории является понятие состояния системы. Если система подчиняется законам классической механики, ее состояние характеризуется набором обобщенных координат частиц $q=\left(q_1,...,q_r\right)$ и сопряженных им импульсов $p=\left(p_1,...,p_r\right)$. Здесь r – число степеней свободы системы. В случае N бесструктурных частиц $r=3N$. Временная эволюция системы описывается уравнениями движения. В формализме Гамильтона они имеют вид

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}, \tag{1.1}$$

где $H\left(q,p,t\right)$ – гамильтонова функция системы, в общем случае явно зависящая от времени t, $i=1,...,r$. Точкой обозначена производная по времени. Уравнения (1.1) позволяют найти состояние системы $\left\{q\left(t\right),p\left(t\right)\right\}$ в любой момент t, если оно известно в начальный момент t_0. Динамические переменные, характеризующие классическую систему, являются функциями состояния $\left(q,p\right)$.

В квантовой механике состояние системы задается иначе. Известно, что координата x частицы и проекция импульса p_x не могут быть измерены в одном эксперименте. Следовательно, набор $\left(q,p\right)$ не может служить характеристикой состояния квантовой системы. Ее состояние характеризуется волновой функцией ψ. В координатном представлении $\psi = \psi(q,t)$. Вся информация о системе содержится в ее волновой функции. В частности, $|\psi|^2 dq$ представляет собой вероятность того, что координаты частиц находятся в элементе объема

$$dq = \prod_{i=1}^{r} dq_i$$

конфигурационного пространства. Волновая функция удовлетворяет условию нормировки

$$\int dq |\psi|^2 = 1 . \qquad (1.2)$$

Отметим, что в случае частиц со спином ψ зависит также от спиновых переменных $\alpha_1,...,\alpha_N$, а $\int dq$ в (1.2) включает суммирование по этим переменным:

$$\int dq = \sum_{\alpha_1...\alpha_N} \prod_{a=1}^{N} \left(\int d\vec{r}_a \right),$$

где $\vec{r}_a$ – радиус-вектор частицы a.

Состояние квантовой системы может быть задано волновой функцией в любом другом представлении. В частности, в импульсном представлении волновая функция $\Phi(p,t)$ связана с $\psi(q,t)$ преобразованием Фурье. В этом случае $|\Phi|^2 dp$ представляет собой вероятность обнаружить импульсы частиц в элементе объема dp импульсного пространства.

Динамическим переменным в квантовой теории сопоставляются линейные эрмитовы операторы. Эволюция системы во времени описывается уравнением Шредингера

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi , \qquad (1.3)$$

где H – оператор Гамильтона системы, $\hbar$ – квантовая постоянная, i – мнимая единица. Здесь и ниже шляпки над операторами опущены.

Система может находиться в различных состояниях $\psi_1, \psi_2, \ldots$ Благодаря принципу суперпозиции эти функции можно умножать на комплексные числа, складывать, получая также возможные состояния. Это означает, что волновую функцию системы можно рассматривать как элемент линейного пространства. Операции умножения элементов на числа и сложения удовлетворяют известным из линейной алгебры правилам. Скалярное произведение элементов ψ_i и ψ_k обычно определяют соотношением

$$\left(\psi_i, \psi_k\right) = \left\langle \psi_i \middle| \psi_k \right\rangle = \int dq\, \psi_i^* \psi_k\,, \tag{1.4}$$

где звездочка обозначает комплексное сопряжение. Набор квадратично интегрируемых функций $\psi_1, \psi_2, \ldots$ со скалярным произведением (1.4) образует пространство Гильберта. Из определения (1.4) видно, что скалярное произведение обладает свойством:

$$\left\langle \psi_i \middle| \psi_k \right\rangle^* = \left\langle \psi_k \middle| \psi_i \right\rangle. \tag{1.5}$$

Произведение $\left\langle \psi_i \middle| \psi_i \right\rangle$ дает норму состояния ψ_i.

Существует как угодно много способов выбрать базис $\left\{\Phi_n\left(q\right)\right\}$ в пространстве состояний системы. Здесь n – набор величин, нумерующих базисные векторы. Обычно в качестве базиса выбирают собственные функции эрмитовского оператора F (или набора коммутирующих друг с другом операторов $F_1, F_2, \ldots$), относящегося к системе. Уравнение для собственных функций и собственных значений F_n оператора F имеет вид

$$F\Phi_n\left(q\right) = F_n \Phi_n\left(q\right). \tag{1.6}$$

Известно, что числа F_n вещественны. Набор $\left\{F_n\right\}$ образует спектр величины F. Спектр может быть дискретным, сплошным и смешанным. Собственная функция $\Phi_n(q)$ суть волновая функция системы в состоянии n в q-представлении. Функции Φ_n можно выбрать ортонормированными:

$$\langle \Phi_n | \Phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}. \tag{1.7}$$

В правой части соотношения (1.7) стоит произведение символов Кронекера, если набор $\{n\}$ дискретный, и произведение дельта-функций в случае непрерывно изменяющихся величин n. Набор $\{\Phi_n\}$ полный, причем условие полноты имеет вид

$$\sum_n \Phi_n(q) \Phi_n^*(q') = \delta(q - q'). \tag{1.8}$$

Здесь $\sum\limits_n$ – суммирование по дискретным значениям n и интегрирование по непрерывным, а

$$\delta(q - q') = \prod_{a=1}^{N} \delta(q_a - q_a'),$$

где $\delta(q_a - q_a') = \delta(\vec{r}_a - \vec{r}_a')\delta_{\alpha_a \alpha_a'}$. Отметим, что $\sum\limits_n$ в (1.8) включает суммирование по спиновым квантовым числам частиц.

Произвольное состояние $\psi(q,t)$ можно разложить по базисным состояниям:

$$\psi(q,t) = \sum_n C(n,t) \Phi_n(q). \tag{1.9}$$

Коэффициенты разложения $C(n,t)$ представляют собой волновую функцию системы в F-представлении, а $|C(n,t)|^2$ – вероятность обнаружить в состоянии ψ в момент t величину F_n или упомянутый выше набор $\{F_n\}$. Важную роль играет понятие полного набора физических величин системы и соответствующих им операторов. Полным набором операторов называют максимальное число коммутирующих друг с другом операторов. Все они имеют общие собственные функции. Полный набор физических величин наряду с волновой функцией используется для характеристики состояния системы.

Формула (1.9) аналогична элементарной формуле векторного анализа

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^{3} a_i \vec{e}_i , \tag{1.10}$$

дающей разложение вектора $\vec{a}$ по ортам декартовой системы координат $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$. Проекция a_i вектора $\vec{a}$ на орт $\vec{e}_i$ равна

$$a_i = \vec{e}_i \vec{a} . \tag{1.11}$$

Вектор $\vec{a}$ (1.10) в выбранном базисе $\{\vec{e}_i\}$ полностью характеризуется своими компонентами $a_i \left(i = 1,2,3\right)$. По аналогии с этим разложением состояние квантовой системы можно характеризовать вектором состояния, который Дирак назвал кет-вектором и обозначил $\left|\psi\right\rangle$. Тогда волновую функцию $\psi\left(q,t\right)$ следует рассматривать как проекцию этого кет-вектора на базисный вектор $\left|q\right\rangle$ – состояние системы с определенными координатами частиц:

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle = \int dq \psi\left(q,t\right)\left|q\right\rangle . \tag{1.12}$$

По аналогии с (1.11) имеем

$$\psi\left(q,t\right) = \left\langle q \middle| \psi\left(t\right)\right\rangle, \tag{1.13}$$

поскольку $\left\langle q \middle| q'\right\rangle = \delta\left(q - q'\right)$. Разложение (1.9) в обозначениях Дирака может быть записано так:

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle = \sum_{n} C\left(n,t\right)\left|n\right\rangle, \tag{1.14}$$

где

$$C(n,t) = \langle n | \psi(t) \rangle \tag{1.15}$$

– волновая функция в F-представлении, а $\{|n\rangle\}$ – набор базисных кет-векторов.

Используя свойство скалярного произведения (1.5), из (1.13) получаем

$$\psi^*(q,t) = \langle \psi(t) | q \rangle .$$

Это означает, что представителем сопряженной волновой функции ψ^* является вектор $\langle \psi(t) |$, который Дирак назвал бра-вектором. Кет- и бра-векторы принадлежат различным пространствам, поэтому их нельзя складывать. Однако, можно считать, что между ними установлено взаимно однозначное сооответствие, которое будем обозначать крестом:

$$\left(|\psi\rangle \right)^+ = \langle \psi | , \qquad \left(\langle \psi | \right)^+ = |\psi\rangle . \tag{1.16}$$

Кет-вектор удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle . \tag{1.17}$$

Операторы в формализме Дирака действуют на кет-векторы слева направо, а на бра-векторы – справа налево:

$$F|a\rangle , \quad \langle b|F .$$

Не останавливаясь на известных из алгебры и квантовой механики правилах обращения с операторами, напомним важные для дальнейшего операторные функции:

$$\begin{aligned} &\exp(F) = 1 + F + \frac{F^2}{2!} + \ldots , \\ &\ln(1+F) = F - \frac{F^2}{2} + \frac{F^3}{3} + \ldots , \end{aligned} \tag{1.18}$$

где 1 – единичный оператор (обычно «шляпку» над единичным оператором опускают). Введем коммутатор

$$[F,G] = FG - GF \tag{1.19}$$

и антикоммутатор

$$\{F, G\} = FG + GF \qquad (1.20)$$

двух операторов F и G.

Обратный оператор F^{-1} определяется соотношением

$$FF^{-1} = F^{-1}F = 1. \qquad (1.21)$$

Эрмитово сопряженный оператор обозначаем F^+. В случае эрмитовского оператора F имеем $F^+ = F$. Если оператор U унитарный, то

$$UU^+ = U^+U = 1, \qquad U^+ = U^{-1}. \qquad (1.22)$$

Из двух векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$ можно построить не только комплексное число $\langle a|b\rangle$, но и оператор $|a\rangle\langle b|$. Действительно, действуя этим символом на произвольный кет $|c\rangle$, получаем $|a\rangle\langle b|c\rangle$ – другой кет. Важную роль играет оператор проектирования на вектор $|a\rangle$

$$P_a = |a\rangle\langle a|. \qquad (1.23)$$

Действуя на любой вектор $|b\rangle$, он дает вектор $|a\rangle$, умноженный на комплексное число:

$$P_a|b\rangle = |a\rangle\langle a|b\rangle. \qquad (1.24)$$

Приведем полезные для дальнейшего правила нахождения сопряженных величин. Вывод этих правил читатель найдет в известной книге П. Дирака. Кроме соотношений (1.5) и (1.16) имеем также формулы:

$\left(c|a\rangle\right)^+ = c^*\langle a|$ (c – комплексное число);

$\langle a|F|b\rangle^* = \langle b|F^+|a\rangle$ – определение сопряженного оператора;

$$\langle a|F|b\rangle^* = \langle b|F|a\rangle,$$

если оператор F эрмитов;

$$\left(|a\rangle\langle b|\right)^+ = |b\rangle\langle a|; \qquad (1.25)$$

$$\langle a|F_1F_2...F_n|b\rangle^* = \langle b|F_n^+...F_2^+F_1^+|a\rangle.$$

Напомним также правила

$$
\begin{aligned}
&(F_1F_2...F_n)^+ = F_n^+...F_2^+F_1^+, \\
&(F_1F_2...F_n)^{-1} = F_n^{-1}...F_2^{-1}F_1^{-1}.
\end{aligned}
\tag{1.26}
$$

Эрмитов оператор F называется положительно определенным, если

$$\langle a|F|a\rangle \geq 0$$

для любого вектора $|a\rangle$.

Условия ортонормировки (1.7) и полноты (1.8) базиса $\{|n\rangle\}$ в обозначениях Дирака записывают так:

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \tag{1.27}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1. \tag{1.28}$$

Это означает, что сумма операторов проектирования на базисные векторы равна единичному оператору. Действительно, вставляя единичный оператор (1.28) в скалярное произведение $\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')$, получаем

$$\delta(q-q') = \langle q|q'\rangle = \sum_n \langle q|n\rangle\langle n|q'\rangle = \sum_n \Phi_n(q)\Phi_n^*(q')$$

– условие полноты (1.8).

Проиллюстрируем удобство обозначений Дирака на нескольких примерах. Разложение (1.14) произвольного состояния по базисным состояниям $\{|n\rangle\}$ получаем простым умножением оператора (1.28) на кет-вектор $|\psi(t)\rangle$. Амплитуда перехода системы $\langle b|a\rangle$ из состояния a в состояние b при помощи условия полноты базиса (1.28) может быть записана в виде суммы произведения амплитуд переходов, в которых участвуют промежуточные состояния n:

$$\langle b|a\rangle = \sum_n \langle b|n\rangle\langle n|a\rangle. \tag{1.29}$$

Известно, что оператору F в фиксированном базисе $\{|n\rangle\}$ можно сопоставить матрицу

$$F_{nn'} = \langle n|F|n'\rangle . \tag{1.30}$$

Если оператор F эрмитов, то эрмитова и матрица (1.30):

$$F^*_{nn'} = F_{n'n} . \tag{1.31}$$

При переходе от “латинского” базиса $\{|n\rangle\}$ к “греческому” базису $\{|\alpha\rangle\}$ $\left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1\right)$ матричные элементы (1.30) преобразуются по закону

$$\begin{aligned}\langle n|F|n'\rangle &= \langle n|\left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\right) F \left(\sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle\langle\alpha'|\right)|n'\rangle = \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|F|\alpha'\rangle\langle\alpha'|n'\rangle,\end{aligned} \tag{1.32}$$

где $\langle n|\alpha\rangle$ – функция преобразования – проекция базисного состояния α на состояние n. Это волновая функция состояния α в n-представлении. Любой оператор F можно записать в виде

$$F = \sum_{nn'} |n\rangle F_{nn'} \langle n'|, \tag{1.33}$$

где $\{|n\rangle\}$ – набор базисных векторов.

След оператора F определяется как сумма диагональных элементов соответствующей матрицы:

$$\mathrm{Sp}F = \sum_n F_{nn} . \tag{1.34}$$

След не зависит от выбора базиса $\{|n\rangle\}$. Действительно, вводя новый базис $\{|\alpha\rangle\}$, учитывая его ортонормированность и полноту, получаем

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Sp}F &= \sum_n \langle n|F|n\rangle = \sum_n \langle n|\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|F\sum_{\alpha'}|\alpha'\rangle\langle\alpha'|n\rangle = \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \langle\alpha'|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\alpha\rangle\langle\alpha|F|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha\alpha'}\langle\alpha'|\alpha\rangle\langle\alpha|F|\alpha'\rangle = \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \delta_{\alpha'\alpha}\langle\alpha|F|\alpha'\rangle = \sum_\alpha F_{\alpha\alpha}.
\end{aligned}
\tag{1.35}
$$

След произведения операторов не меняется при циклической перестановке сомножителей. След оператора $|a\rangle\langle b|$ равен $\langle b|a\rangle$. Действительно, в произвольном базисе $\{|n\rangle\}$ имеем

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Sp}\left(|a\rangle\langle b|\right) &= \sum_n \langle n|a\rangle\langle b|n\rangle = \\
&= \langle b|\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|a\rangle = \langle b|a\rangle.
\end{aligned}
\tag{1.36}
$$

Перечисленные здесь свойства следа будут часто использоваться в дальнейшем.

1.2. Оператор эволюции

Квантовая система причинно эволюционирует во времени от начального момента t_0 до момента t согласно уравнению Шредингера (1.17), если только между этими моментами не производилось измерение над системой. Если гамильтониан H системы не зависит явно от времени, т. е. система консервативна, формальное решение уравнения Шредингера (1.17) имеет вид

$$
|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t-t_0)\right]|\psi(t_0)\rangle. \tag{1.37}
$$

Входящий сюда оператор

$$
U(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right], \tag{1.38}
$$

переводящий начальное состояние $\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle$ в конечное $\left|\psi\left(t\right)\right\rangle$, называется оператором эволюции консервативной системы.

Если же оператор H зависит явно от времени, решение уравнения Шредингера по-прежнему можно представить в виде

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle = U\left(t,t_0\right)\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle, \tag{1.39}$$

однако оператор эволюции U теперь не равен (1.38). Из (1.39) видно, что он удовлетворяет начальному условию

$$U\left(t_0,t_0\right) = 1\,. \tag{1.40}$$

Из требования сохранения нормы вектора состояния со временем

$$\left\langle\psi\left(t\right)\middle|\psi\left(t\right)\right\rangle = \left\langle\psi\left(t_0\right)\middle|\psi\left(t_0\right)\right\rangle \tag{1.41}$$

следует унитарность оператора эволюции. Действительно, из (1.39) получаем

$$\left\langle\psi\left(t\right)\right| = \left\langle\psi\left(t_0\right)\right|U^{+}\left(t,t_0\right) \tag{1.42}$$

(см. (1.25)). Подставляя (1.39) и (1.42) в (1.41), находим

$$\left\langle\psi\left(t_0\right)\middle|U^{+}\left(t,t_0\right)U\left(t,t_0\right)\middle|\psi\left(t_0\right)\right\rangle = \left\langle\psi\left(t_0\right)\middle|\psi\left(t_0\right)\right\rangle,$$

откуда следует унитарность оператора U:

$$U^{+}\left(t,t_0\right)U\left(t,t_0\right) = 1\,. \tag{1.43}$$

Унитарность оператора (1.38) очевидна благодаря эрмитовости гамильтониана.

Подставляя вектор состояния (1.39) в уравнение Шредингера (1.17), получаем уравнение для оператора эволюции:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{d}{dt}U = HU\,. \tag{1.44}$$

Сопряженное уравнение находим по правилам (1.25):

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{d}{dt}U^{+} = U^{+}H\,, \tag{1.45}$$

где учтено $H^{+} = H$.

Интегрируя уравнение (1.44) с начальным условием (1.40) получаем интегральное уравнение для оператора эволюции:

$$U\left(t,t_0\right) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H\left(t'\right) U\left(t',t_0\right). \qquad (1.46)$$

Его удобно решать методом последовательных приближений, который будет использован ниже.

1.3. Представления Шредингера, Гейзенберга и Дирака

Термин «представление» имеет несколько толкований. С одним из них мы познакомились в разделе 1.1. В квантовой теории выбрать представление означает фиксировать базис в пространстве состояний системы. В соответствии с этим говорят о координатном, импульсном, энергетическом и других представлениях. Здесь же эт слово употребляется в другом смысле. Речь идет о трех методах описания динамики системы. Поэтому, чтобы избежать недоразумений, часто говорят о картинах Шредингера, Гейзенберга и Дирака.

В р. 1.1 предполагалось, что для описания системы можно выбрать не зависящий от времени базис (см. (1.9)). Операторы в р. 1.1 также явно не зависели от времени. Вся зависимость от времени была сосредоточена на векторе состояния. Такой метод описания системы называется представлением Шредингера. Конечно, в этом представлении операторы также могут зависеть от времени. Важный пример – динамика системы в переменном внешнем поле. Что касается базисных векторов, то они стационарны, а вектор состояния вращается, сохраняя свою норму. В дальнейшем базисные векторы в представлении Шредингера (S-представление) будем обозначать $|a\rangle_S$, а вектор состояния – $|\psi_S(t)\rangle$. Индекс S будем приписывать и операторам в этом представлении: A_S.

Существует другой способ описания динамики системы. Предполагается, что базисные векторы и операторы зависят от времени, а вектор состояния остается неизменным. Такое описание называется представлением Гейзенберга (Н-представление). Физически оно эквивалентно представлению Шредингера. Величины в представлении Гейзенберга будем снабжать индексом H.

Итак, считаем, что в картине Гейзенберга вектор состояния не зависит от времени и равен $|\psi_H(t_0)\rangle$. Требуем также, чтобы в начальный момент

$$|\psi_H(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle. \tag{1.47}$$

Тогда из (1.39) следует

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_H(t_0)\rangle. \tag{1.48}$$

Сопряженное равенство:

$$\langle\psi_S(t)| = \langle\psi_H(t_0)|U^+(t,t_0). \tag{1.49}$$

Потребуем, чтобы среднее значение величины A не зависело от способа описания, т. е.

$$\overline{A} = \langle\psi_S(t)|A_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_H(t_0)|A_H|\psi_H(t_0)\rangle. \tag{1.50}$$

Подставляя сюда (1.48) и (1.49), получаем

$$\overline{A} = \langle\psi_H(t_0)|U^+A_SU|\psi_H(t_0)\rangle. \tag{1.51}$$

Сравнивая (1.50) и (1.51), находим оператор, соответствующий величине A, в представлении Гейзенберга:

$$A_H(t) = U^+(t,t_0)\, A_S(t)\, U(t,t_0)\,. \qquad (1.52)$$

Он зависит от времени t и в том случае, когда A_S этой зависимости не имеет. Следовательно,

$$\overline{A} = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle\,. \qquad (1.53)$$

Если гамильтониан H от времени не зависит, то соотношение (1.52) принимает вид

$$A_H(t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} Ht\right) A_S \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} Ht\right), \qquad (1.54)$$

где мы положили $t_0 = 0$.

Получим уравнение движения для гейзенберговского оператора $A_H(t)$. Дифференцируя (1.52) по времени, учитывая уравнения (1.44), (1.45) и условие унитарности оператора эволюции (1.43), получаем

$$\mathrm{i}\hbar \frac{d}{dt} A_H = [A_H, H_H] + \mathrm{i}\hbar U^+ \frac{\partial A_S}{\partial t} U\,. \qquad (1.55)$$

Здесь H_H – оператор Гамильтона системы в представлении Гейзенберга. Если A_S от времени не зависит, последнее слагаемое в правой части уравнения (1.55) отсутствует. В случае

$$\frac{dA_H}{dt} = 0$$

величина A называется интегралом движения системы.

Рассмотрим частный случай $A_S = H_S$. Если система консервативна, то $\partial H_S / \partial t = 0$, а оператор эволюции равен (1.38). Из (1.18) видно, что он коммутирует с H_S. Следовательно, $H_H = H_S$. В результате из уравнения (1.55) следует

$$\frac{dH_H}{dt} = 0 .$$

Энергия системы в рассматриваемом случае – интеграл движения.

Если оператор A_S не зависит явно от времени и система консервативна, то уравнение (1.55) приводится к виду

$$\mathrm{i}\hbar \frac{d}{dt} A_H = \left[A_H , H \right], \qquad (1.56)$$

так как гамильтониан одинаков в $S-$ и $H-$представлениях.

Выясним, как базисные векторы в $H-$представлении зависят от времени. Как уже отмечалось, в $H-$представлении вектор состояния фиксирован, а базисные векторы вращаются. В $S-$представлении уравнение для собственных чисел a и векторов $\left| a \right\rangle_S$ оператора A_S имеет вид

$$A_S \left| a \right\rangle_S = a \left| a \right\rangle_S \qquad (1.57)$$

(см. (1.6)). Набор $\left\{ \left| a \right\rangle_S \right\}$ образует стационарный базис в картине Шредингера. Собственные значения a не должны зависеть от представления. Из (1.52) с учетом унитарности оператора эволюции следует

$$A_S = U A_H U^+ \qquad (1.58)$$

Подставляя это выражение в (1.57), находим

$$UA_H U^+ \left| a \right\rangle_S = a \left| a \right\rangle_S .$$

Умножим это равенство слева на U^+ и снова учтем унитарность оператора U :

$$A_H(t)\left[U^+(t,t_0)\left| a \right\rangle_S\right] = a\left[U^+(t,t_0)\left| a \right\rangle_S\right].$$

Это означает, что базисные векторы в картине Гейзенберга изменяются со временем по закону

$$\left| a,t \right\rangle_H = U^+(t,t_0)\left| a,t_0 \right\rangle_S . \tag{1.59}$$

Перестановочные соотношения имеют одинаковый вид в обоих представлениях:

$$\begin{gathered} \left[A_S, B_S\right] = C_S, \\ \left[A_H(t), B_H(t)\right] = C_H(t). \end{gathered} \tag{1.60}$$

В справедливости второго равенства (1.60) легко убедиться, если умножить первое равенство на U^+ слева, на U справа и вставить между операторами $A_S B_S$ единичный оператор $1 = UU^+$.

Если величина A является интегралом движения, то соответствующий ей оператор коммутирует с оператором Гамильтона. В таком случае собственные числа оператора A называются «хорошими» квантовыми числами.

Представление Дирака (D-представление) часто называют представлением взаимодействия. Оно используется в тех случаях, когда гамильтониан разбивается на две части – основную H_S^0 и взаимодействие V_S :

$$H_S = H_S^0 + V_S . \tag{1.61}$$

Обычно H_S^0 – гамильтониан невзаимодействующих частиц, а V_S описывает взаимодействие между ними и (или) с внешним полем. В дальнейшем величины в представлении Дирака отмечаем индексом D .

Вектор состояния в D-представлении получается из вектора в S-представлении с помощью унитарного преобразования

$$\left|\psi_D(t)\right\rangle = U_0^+(t,t_0)\left|\psi_S(t)\right\rangle, \tag{1.62}$$

где U_0 – оператор эволюции системы с гамильтонианом H_S^0. Он удовлетворяет уравнению движения

$$\mathrm{i}\hbar \frac{dU_0}{dt} = H_S^0 U_0 \tag{1.63}$$

и начальному условию

$$U_0(t_0,t_0) = 1\,. \tag{1.64}$$

Сопряженные уравнения таковы:

$$\left\langle\psi_D(t)\right| = \left\langle\psi_S(t)\right| U_0(t,t_0), \tag{1.65}$$

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{dU_0^+}{dt} = U_0^+ H_S^0, \tag{1.66}$$

так как оператор H_S^0 эрмитов.

Из требования сохранения нормы вектора состояния

$$\left\langle\psi_D(t)\middle|\psi_D(t)\right\rangle = \left\langle\psi_S(t)\middle|\psi_S(t)\right\rangle$$

следует унитарность оператора U_0:

$$U_0^+(t,t_0) = U_0^{-1}(t,t_0)\,. \tag{1.67}$$

Получим уравнение для $\left|\psi_D(t)\right\rangle$. Для этого дифференцируем соотношение (1.62) и учитываем уравнения (1.66) и

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_S(t)\right\rangle = \left(H_S^0 + V_S\right)\left|\psi_S(t)\right\rangle. \tag{1.68}$$

Получаем

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_D(t)\right\rangle = V_D(t)\left|\psi_D(t)\right\rangle, \tag{1.69}$$

где

$$V_D(t) = U_0^+(t,t_0) V_S U_0(t,t_0) \tag{1.70}$$

– оператор взаимодействия в представлении Дирака. Из уравнения (1.69) видно, что вектор $|\psi_D\rangle$ меняется со временем лишь за счет взаимодействия между частицами или с внешним полем.

Из требования

$$\left|\psi_S(t_0)\right\rangle = \left|\psi_H(t_0)\right\rangle = \left|\psi_D(t_0)\right\rangle \tag{1.71}$$

и уравнения (1.65) видно, что начальное условие к уравнению (1.63) имеет вид

$$U_0(t_0, t_0) = 1\,. \tag{1.72}$$

Получим выражение для произвольного оператора F в D-представлении. Для этого воспользуемся неизменностью среднего значения $\bar{F}$ при переходе от S-представления к D-представлению:

$$\bar{F} = \left\langle\psi_S(t)\right|F_S\left|\psi_S(t)\right\rangle = \left\langle\psi_D(t)\right|F_D\left|\psi_D(t)\right\rangle. \tag{1.73}$$

Подставляя сюда соотношения (1.62) и (1.65), получаем

$$F_D(t) = U_0^+(t, t_0)\,F_S U_0(t, t_0)\,. \tag{1.74}$$

Таким образом, оператор F_D меняется со временем так, как если бы взаимодействие отсутствовало. Если гамильтониан H_S^0 не зависит от времени, соотношение (1.74) принимает вид

$$F_D(t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_S^0 t\right)F_S \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_S^0 t\right), \tag{1.75}$$

где $t_0 = 0$.

Чтобы получить уравнение движения для оператора $F_D(t)$, необходимо продифференцировать соотношение (1.74) по времени и учесть уравнения (1.63) и (1.66). Тогда получим

$$\mathrm{i}\hbar\frac{d}{dt}F_D(t) = \left[F_D(t), H_D^0(t)\right]. \tag{1.76}$$

Зависимость оператора F_S от времени здесь не учитывается.

Получим зависимость базисных векторов $|a,t\rangle_D$ в представлении Дирака от времени. Для этого подставим в уравнение (1.57) оператор $A_S = U_0 A_D U_0^+$ и умножим это уравнение на U_0^+. Получим

$$A_D U_0^+ \left|a\right\rangle_S = a U_0^+ \left|a\right\rangle_S .$$

Это означает, что базисные векторы в D-представлении изменяются со временем по закону

$$\left|a,t\right\rangle_D = U_0^+\left(t,t_0\right)\left|a,t_0\right\rangle_S ,$$

т. е. так, как если бы взаимодействия не было.

1.4. Матрица рассеяния

Введем оператор S, переводящий начальный вектор состояния в представлении взаимодействия в конечный:

$$\left|\psi_D\left(t\right)\right\rangle = S\left(t,t_0\right)\left|\psi_D\left(t_0\right)\right\rangle . \qquad (1.77)$$

Отсюда следует начальное условие

$$S\left(t_0,t_0\right) = 1 . \qquad (1.78)$$

Из условия сохранения нормы вектора состояния

$$\left\langle\psi_D\left(t\right)\middle|\psi_D\left(t\right)\right\rangle = \left\langle\psi_D\left(t_0\right)\middle|\psi_D\left(t_0\right)\right\rangle$$

следует унитарность оператора S:

$$S^+\left(t,t_0\right) = S^{-1}\left(t,t_0\right) . \qquad (1.79)$$

Поскольку эволюцию системы от t_3 до t_1 можно рассматривать как результат последовательной эволюции сначала от t_3 до t_2, а затем от t_2 до t_1, то оператор S обладает свойством

$$S\left(t_1,t_3\right) = S\left(t_1,t_2\right) S\left(t_2,t_3\right), \qquad (1.80)$$

где $t_3 < t_2 < t_1$. Справедливо также равенство

$$S\left(t_1,t_2\right) = S^+\left(t_2,t_1\right) . \qquad (1.81)$$

Оно вытекает из условия унитарности и начального условия (1.78). Отметим, что свойствами (1.80) и (1.81) обладает и введенный в р. 1.2 оператор эволюции.

Подставляя (1.77) в (1.69), получаем дифференциальное уравнение для оператора S:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{d}{dt}S\left(t,t_0\right)=V_D\left(t\right)S\left(t,t_0\right). \tag{1.82}$$

Интегрируя это уравнение по времени и учитывая начальное условие (1.78), получаем интегральное уравнение:

$$S\left(t,t_0\right)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'V_D\left(t'\right)S\left(t',t_0\right). \tag{1.83}$$

Будем решать это уравнение методом последовательных приближений.

Представим оператор S в виде ряда по степеням взаимодействия

$$S=\sum_{n=0}^{\infty}S_n\,,\qquad S_0=1\,. \tag{1.84}$$

Подстановка этого разложения в уравнение (1.83) дает рекуррентное соотношение

$$S_n\left(t,t_0\right)=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'V_D\left(t'\right)S_{n-1}\left(t',t_0\right).$$

Оно позволяет представить ряд (1.84) в виде

$$\begin{gathered}\sum_{n=0}^{\infty}S_n\left(t,t_0\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\ldots\times\\ \times\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nV_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right)\ldots V_D\left(t_n\right).\end{gathered} \tag{1.85}$$

Операторы в этом выражении расположены в хронологическом порядке $\left(t>t_1>t_2>\ldots>t_n>t_0\right)$, т. е. их временной аргумент возрастает справа налево.

Различные верхние пределы в (1.85) делают это выражение неудобным. Однако, можно переписать его так, чтобы во всех внутренних интегралах верхний предел был равен t. Посмотрим, как это делается на примере поправки второго порядка:

$$S_2\left(t,t_0\right)=\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right). \qquad (1.86)$$

Это выражение равно

$$S_2\left(t,t_0\right)=\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right)+$$
$$+\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right). \qquad (1.87)$$

Здесь интегрирование выполняется по нижнему треугольнику на рис. 1.1. Во втором слагаемом в правой части (1.87)

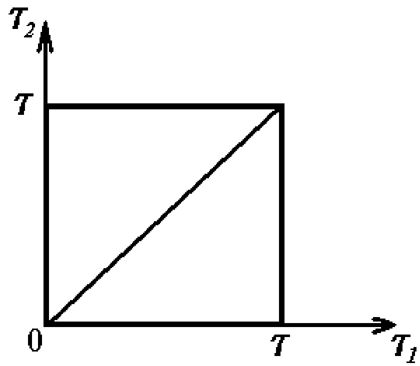

Рис. 1.1. Области интегрирования в интегралах (1.86)–(1.88)

поменяем порядок интегрирования:

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right)=\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_2\int\limits_{t_2}^{t}dt_1V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right).$$

Переобозначая переменные интегрирования $t_1 \rightleftarrows t_2$, получаем отсюда

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_1}^{t}dt_2V_D\left(t_2\right)V_D\left(t_1\right).$$

Здесь интегрирование выполняется по верхнему треугольнику на рис. 1.1. В результате поправка (1.87) равна

$$S_2\left(t,t_0\right)=\frac{1}{2}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\left[\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2\times\right.$$
$$\left.\times V_D\left(t_1\right)V_D\left(t_2\right)+\int\limits_{t_1}^{t}dt_2V_D\left(t_2\right)V_D\left(t_1\right)\right]. \tag{1.88}$$

Сумму в квадратных скобках можно объединить в один интеграл и записать (1.86) в виде интеграла по квадрату на рис. 1.1, если, следуя Дайсону, ввести понятие хронологического произведения операторов:

$$T\left[V\left(t_1\right)V\left(t_2\right)\right]=\begin{cases}V\left(t_1\right)V\left(t_2\right), & t_1>t_2,\\ V\left(t_2\right)V\left(t_1\right), & t_1<t_2.\end{cases} \tag{1.89}$$

Индекс D опущен, поскольку понятие хронологического произведения (T-произведения) относится не только к операторам в D-представлении, но и в H-представлении. Оператор хронологического упорядочения T определен так, что при действии на произведение двух зависящих от времени операторов он расставляет их в хронологическом порядке, т. е. так, чтобы временной аргумент первого сомножителя превышал аргумент второго. Отметим, что при $t_1=t_2$ перемножаемые в (1.89) операторы коммутируют. Определение хронологического произведения естественным образом обобщается на случай произведения произвольного числа операторов, зависящих от времени:

$$T\left[F_1(t_1)F_2(t_2)...F_n(t_n)\right]=F_{p_1}\left(t_{p_1}\right)F_{p_2}\left(t_{p_2}\right)...F_{p_n}\left(t_{p_n}\right),\quad t_{p_1}>t_{p_2}>...>t_{p_n}. \tag{1.90}$$

Под знаком T-произведения можно менять порядок операторов. Операторы в конечном счете будут расположены в хронологическом порядке. T-упорядочение не затрагивает взаимного расположения операторов в (1.90), отнесенных к одному моменту времени. Это расположение остается неизменным. В гл. 5 будет рассмотрено предложенное Виком уточнение определения T-произведения.

Используя определение хронологического произведения (1.89), из (1.88) получаем

$$S_2(t,t_0)=\frac{1}{2}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2T\left[V_D(t_1)V_D(t_2)\right]. \tag{1.91}$$

Поправка n-го порядка равна

$$S_n(t,t_0)=\frac{1}{n!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2...\int_{t_0}^{t}dt_n\,T\left[V_D(t_1)V_D(t_2)...V_D(t_n)\right]. \tag{1.92}$$

Следовательно,

$$S(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1...\int_{t_0}^{t}dt_n\,T\left[V_D(t_1)...V_D(t_n)\right]. \tag{1.93}$$

Используя представление экспоненты в виде ряда, записываем разложение (1.93) в символической форме:

$$S(t,t_0)=T\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'V_D(t')\right]. \tag{1.94}$$

Докажем соотношение (1.92) методом математической индукции. Для этого рассмотрим разность

$$A(t)=\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2\ldots\int\limits_{t_0}^{t_n}dt_{n+1}V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_{n+1})-$$
$$-\frac{1}{(n+1)!}\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t}dt_2\ldots\int\limits_{t_0}^{t}dt_{n+1}T\left[V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_{n+1})\right],$$

где индекс D у операторов опущен. Производная от этого оператора по времени равна

$$\frac{dA}{dt}=V(t)\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t_1}dt_2\ldots\int\limits_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nV(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)-$$
$$-\frac{1}{n!}\int\limits_{t_0}^{t}dt_1\int\limits_{t_0}^{t}dt_2\ldots\int\limits_{t_0}^{t}dt_nT\left[V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)\right]. \qquad (1.95)$$

Здесь мы использовали очевидное равенство

$$T\left[V(t_1)\ldots V(t_{i-1})V(t)V(t_{i+1})\ldots V(t_{n+1})\right]=$$
$$=V(t)T\left[V(t_1)\ldots V(t_{i-1})V(t_{i+1})\ldots V(t_{n+1})\right],$$

поскольку $t_i\le t$ $(i=1,\ldots,n+1)$. Предположим, что равенство (1.92) справедливо. Тогда из (1.95) следует, что $dA/dt=0$, т.е. A не зависит от времени. Но $A(t_0)=0$, поэтому $A=0$ при любом t. Если равенство (1.92) справедливо для n операторов, то оно справедливо и для $n+1$ операторов. Выше мы убедились в том, что (1.92) имеет место при $n=2$. Следовательно, оно справедливо при произвольном n.

В дальнейшем нас будет интересовать оператор (1.94), у которого один или оба аргумента t,t_0 бесконечны. В частности,

$$S=S(\infty,-\infty)=T\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dtV_D(t)\right]. \qquad (1.96)$$

Этот оператор называется оператором рассеяния. Как правило, несобственный интеграл в показателе экспоненты (1.96) не имеет определенного предела при $t_0 \to -\infty$, $t \to \infty$. Для придания этому интегралу определенного смысла вводят под знак интеграла множитель $\exp\left(-\delta|t|\right)$, гарантирующий сходимость. В конце полагают $\delta \to +0$.

Важную роль в квантовой теории играет матрица, соответствующая оператору (1.96). Она введена Гейзенбергом в 1943 году и называется матрицей рассеяния. Остановимся на физическом смысле матричных элементов S-матрицы. Пусть $\left\{|n\rangle\right\}$ – полный набор состояний системы частиц с определенными импульсами и проекциями спинов. В начальный момент $t_0 = -\infty$ имеем

$$\left|\psi_D\left(-\infty\right)\right\rangle = \left|n_0\right\rangle.$$

Вектор конечного состояния системы частиц равен

$$\left|\psi_D\left(\infty\right)\right\rangle = S\left|n_0\right\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|S|n_0\rangle,$$

где использовано условие полноты базиса $\left\{|n\rangle\right\}$ (1.28). Таким образом, матричный элемент $\langle n|S|n_0\rangle$ является амплитудой вероятности перехода системы из состояния $|n_0\rangle$ в состояние $|n\rangle$. Квадрат модуля амплитуды перехода дает вероятности процессов распада, упругого и неупругого рассеяния частиц.

Получим связь операторов в H- и D-представлениях. Для этого потребуем, чтобы среднее значение величины F было одинаковым в этих представлениях:

$$\bar{F}_t = \left\langle\psi_H\left(t_0\right)\right|F_H\left(t\right)\left|\psi_H\left(t_0\right)\right\rangle = \left\langle\psi_D\left(t\right)\right|F_D\left(t\right)\left|\psi_D\left(t\right)\right\rangle.$$

Учитывая соотношение (1.77), находим

$$\bar{F}_t = \left\langle\psi_H\left(t_0\right)\right|F_H\left(t\right)\left|\psi_H\left(t_0\right)\right\rangle =$$

$$= \left\langle\psi_D\left(t_0\right)\right|S^+\left(t,t_0\right)F_D\left(t\right)S\left(t,t_0\right)\left|\psi_D\left(t_0\right)\right\rangle.$$

Если учесть равенство (1.71), получим отсюда формулу

$$F_H\left(t\right) = S^+\left(t,t_0\right)F_D\left(t\right)S\left(t,t_0\right), \qquad (1.97)$$

связывающую операторы в H - и D-представлениях.

1.5. Континуальные интегралы

Понятие континуального интеграла ввел в математике Н. Винер в 1924 году. А в 1948 году Р. Фейнман предложил новую формулировку квантовой механики, основанную на представлении амплитуды перехода системы из начального состояния в конечное в виде континуального интеграла. Этот интеграл называется также функциональным или интегралом по траекториям. Метод континуального интегрирования излагается в учебниках по квантовой механике (см., например, известные курсы квантовой механики Р. Фейнмана и А. Хибса, И.А. Вакарчука, И.Р. Юхновского, курс теоретической физики А.В. Свидзинского). Он широко используется в квантовой теории поля, в статистической физике и кинетике. Здесь мы кратко на примере частицы, совершающей одномерное движение в потенциальном поле $V(x)$, напомним, как амплитуда перехода выражается через континуальный интеграл.

Из квантовой механики известно, что вектор состояния $|\psi(t)\rangle$ частицы в момент $t>0$ может быть получен из состояния $|\psi(0)\rangle$ в результате действия унитарного оператора $U(t)$, который называется оператором эволюции (см. р. 1.2):

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle. \qquad (1.98)$$

Если гамильтониан H частицы не зависит от времени, оператор эволюции равен

$$U(t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht\right). \qquad (1.99)$$

Умножая равенство (1.98) слева на бра-вектор $\langle x|$ состояния частицы с определенной координатой x и учитывая условие полноты этих состояний

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = 1, \qquad (1.100)$$

получим

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \langle x|U(t)|x_0\rangle\langle x_0|\psi(0)\rangle.$$

Здесь $\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t)$ – волновая функция частицы в координатном представлении, а $\langle x|U(t)|x_0\rangle$ – ее амплитуда перехода из точки x_0 в точку x за время t. Квадрат модуля этой величины равен вероятности соответствующего перехода.

Для представления амплитуды перехода в виде континуального интеграла разбиваем промежуток t на n малых частей $\Delta t = t/n$. Тогда оператор эволюции равен (см. замечание после (1.80) и (1.81))

$$U(t) = \lim_{n\to\infty}\left[U(\Delta t)\right]^n. \qquad (1.101)$$

Здесь $n \to \infty$, $\Delta t \to 0$ так, что t остается конечным. Ограничиваясь членами порядка Δt, имеем приближенно

$$U(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\Delta t\right) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\Delta t\right] \approx$$

$$\approx \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t\right)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Delta t\right),$$

поскольку ошибка, связанная с некоммутативностью операторов кинетической и потенциальной энергий частицы, порядка $(\Delta t)^2$. Здесь m – масса частицы, p – оператор импульса. Вставим между n множителями в (1.101) $n-1$ раз единичный оператор (1.100). Тогда амплитуда перехода частицы из точки

x_0 в точку x окажется равной

$$U(x, x_0, t) = \langle x | U(t) | x_0 \rangle =$$

$$= \lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \langle x | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t \right) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} V \Delta t \right) | x_{n-1} \rangle \dots \times$$

$$\times \langle x_1 | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t \right) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} V \Delta t \right) | x_0 \rangle .$$

Поскольку

$$V | x \rangle = V(x) | x \rangle ,$$

это выражение можно переписать в виде

$$U(x, x_0, t) = \lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \times$$

$$\times \langle x | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t \right) | x_{n-1} \rangle \dots \times \tag{1.102}$$

$$\times \langle x_1 | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t \right) | x_0 \rangle \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{l=1}^{n} V(x_{l-1}) \Delta t \right].$$

Входящая в соотношение (1.102) амплитуда перехода свободной частицы

$$U_0(x, x_0, t) = \langle x | \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right) | x_0 \rangle , \tag{1.103}$$

легко вычисляется. Действительно, используя условие полноты состояний частицы $| p \rangle$ с определенным импульсом,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp | p \rangle \langle p | = 1,$$

запишем амплитуду (1.103) в виде

$$U_0(x,x_0,t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp'\langle x|p'\rangle\times$$
$$\times\langle p'|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)|p\rangle\langle p|x_0\rangle. \tag{1.104}$$

Здесь

$$\langle x|p\rangle=(2\pi\hbar)^{-1/2}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right)$$

– плоская волна де Бройля. Она нормирована условием

$$\langle p'|p\rangle=\delta(p'-p).$$

Поэтому

$$\langle p'|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)|p\rangle=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\delta(p'-p).$$

В результате амплитуда перехода (1.104) равна

$$U_0(x,x_0,t)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}(x-x_0)^2\right]. \tag{1.105}$$

При выводе (1.105) мы выделили полный квадрат в показателе экспоненты в интеграле $\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp$ (1.104) и воспользовались значениями интегралов Френеля

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\sin x^2=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\cos x^2=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\,.$$

В трехмерном случае

$$U_0(\vec{r},\vec{r}_0,t)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}(\vec{r}-\vec{r}_0)^2\right]. \tag{1.106}$$

Подставляя выражение (1.105) в амплитуду (1.102), находим

$$
\begin{aligned}
U(x, x_0, t) &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{n/2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \times \\
&\times \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left[\frac{m}{2\Delta t}(x_l - x_{l-1})^2 - V(x_{l-1})\Delta t\right]\right\},
\end{aligned}
\tag{1.107}
$$

где мы положили $x_n = x$. Поскольку

$$
\left(\frac{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}{m}\right)^{1/2} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar\Delta t}\right),
$$

выражение (1.107) можно записать в виде

$$
\begin{aligned}
U(x, x_0, t) &= \lim_{n\to\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \times \\
&\times \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_l - x_{l-1}}{\Delta t}\right)^2 - V(x_{l-1})\right]\Delta t\right\} \times \\
&\times \left\{\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_n \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\frac{m}{2}\left(\frac{x_l - x_{l-1}}{\Delta t}\right)^2 \Delta t\right]\right\}^{-1}.
\end{aligned}
\tag{1.108}
$$

В показателях экспонент содержатся интегральные суммы, которые в пределе $n \to \infty$ превращаются в интегралы от классических функций Лагранжа:

$$S\left[x(t)\right]=\int_0^t dt'\left\{\frac{m}{2}\left[\dot{x}(t')\right]^2-V\left[x(t')\right]\right\} \tag{1.109}$$

в числителе,

$$S_0\left[x(t)\right]=\int_0^t dt'\frac{m}{2}\left[\dot{x}(t')\right]^2 \tag{1.110}$$

в знаменателе. Точкой отмечены производные по времени. Интеграл (1.109) представляет собой действие, вычисленное для движения частицы в поле V по классической траектории $x(t)$, соединяющей точки x_0 и x, а (1.110) – действие свободной частицы. В пределе $n\to\infty$ амплитуда (1.108) содержит бесконечнократные интегралы по всем траекториям, соединяющим точки x_0 и x. Эти интегралы называются континуальными. Амплитуду (1.108) принято записывать в виде

$$U\left(x,x_0,t\right)=\int Dx\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right)\left[\int D'x\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_0\right)\right]^{-1}. \tag{1.111}$$

Следует помнить о том, что в знаменателе (1.111) выполняется интегрирование и по x_n. Это отмечено штрихом у символа D.

Если учесть равенство

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}m\dot{x}^2}{2\hbar}\Delta t\right)=\int_{-\infty}^{\infty}dp\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\dot{x}p-\frac{p^2}{2m}\right)\Delta t\right]\times$$
$$\times\left[\int_{-\infty}^{\infty}dp\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t\right)\right]^{-1},$$

выражение (1.111) можно переписать так:

$$U\left(x,x_0,t\right)=\int Dx\int Dp\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t dt'\left[p\left(t'\right)\dot{x}\left(t'\right)-\frac{p^2\left(t'\right)}{2m}-V\left(x\left(t'\right)\right)\right]\right\}\times \qquad (1.112)$$
$$\times\left\{\int D'x\int Dp\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^t dt'\left(p\left(t'\right)\dot{x}\left(t'\right)-\frac{p^2\left(t'\right)}{2m}\right)\right]\right\}^{-1}.$$

Здесь $\int Dp=\lim\limits_{n\to\infty}\prod\limits_{l=1}^{n}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dp_l\right)$. Амплитуда перехода выражена через континуальные интегралы в фазовом пространстве, а показатели экспонент содержат гамильтонову функцию частицы.

Убедимся в том, что использование амплитуды перехода в форме (1.107) эквивалентно уравнению Шредингера для волновой функции частицы. Для этого воспользуемся формулой, связывающей волновую функцию с амплитудой перехода:

$$\psi\left(x,t\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx_0K\left(xt,x_0t_0\right)\psi\left(x_0,t_0\right). \qquad (1.113)$$

Здесь мы, следуя Фейнману, обозначили амплитуду перехода $\left(x_0,t_0\right)\to\left(x,t\right)$ буквой K: $U\left(x,x_0,t\right)=K\left(xt,x_00\right)$. Из условия ортонормировки базиса $\left\{\left|x\right\rangle\right\}$

$$\left\langle x\middle|x'\right\rangle=\delta\left(x-x'\right)$$

следует начальное условие для амплитуды:

$$\lim_{t\to t_0+0}K\left(xt,x_0t_0\right)=\delta\left(x-x_0\right). \qquad (1.114)$$

Пусть точки $\left(x_0,t_0\right)$ и $\left(x,t\right)$ бесконечно близкие. Тогда из (1.107) следует, что амплитуда перехода между этими точками равна

$$K\left(xt, x_0 t_0\right) = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{m}{2\Delta t}\left(x - x_0\right)^2 - V\left(x\right)\Delta t\right]\right\}, \quad (1.115)$$

где $\Delta t = t - t_0$. Левую часть уравнения (1.113) разложим в ряд Тейлора:

$$\psi\left(x, t_0 + \Delta t\right) = \psi\left(x, t_0\right) + \frac{\partial \psi\left(x, t_0\right)}{\partial t_0}\Delta t + \ldots \quad (1.116)$$

После аналогичного разложения $\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Delta t\right)$ в правой части (1.115) из (1.113) получаем

$$\begin{aligned} \psi\left(x, t_0\right) + \frac{\partial \psi\left(x, t_0\right)}{\partial t_0}\Delta t = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}\right)^{1/2}\left[1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta t V\left(x\right)\right] \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp\left[\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\Delta t}\left(x - x_0\right)^2\right]\psi\left(x_0, t_0\right). \end{aligned} \quad (1.117)$$

Поскольку $x - x_0 = y$ – малая величина, имеем для начальной волновой функции разложение

$$\psi\left(x_0, t_0\right) = \psi\left(x - y, t_0\right) = \psi\left(x, t_0\right) - y\frac{\partial \psi\left(x, t_0\right)}{\partial x} + \frac{y^2}{2}\frac{\partial^2 \psi\left(x, t_0\right)}{\partial x^2} + \ldots$$

Подставляем это разложение в правую часть уравнения (1.117) и выполняем интегрирование по y:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\Delta t}y^2\right) = \sqrt{\frac{2\pi \mathrm{i}\hbar\Delta t}{m}},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, y^2 \exp\left(-\alpha y^2\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\alpha^{-3/2},$$

где $\alpha = m/2\mathrm{i}\hbar\Delta t$. Ограничиваясь в разложении (1.117) линейными по Δt членами, получаем уравнение Шредингера

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x,t) \qquad (1.118)$$

для частицы в поле V.

Континуальный интеграл (1.107) позволяет получить спектр энергии частицы. Ее уровни энергии ε_n и соответствующие волновые функции ψ_n удовлетворяют уравнению

$$H\psi_n = \varepsilon_n \psi_n . \qquad (1.119)$$

Следовательно, с учетом условия полноты

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1 ,$$

получаем

$$K(xt, x_0 t_0) = \sum_n \langle x|\psi_n\rangle \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_n (t - t_0) \right] \langle\psi_n|x_0\rangle .$$

След этой матрицы равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, K(xt, xt_0) = \sum_n \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_n (t - t_0) \right], \qquad (1.120)$$

так как

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \langle x|\psi_n\rangle \right|^2 = 1 .$$

Вычисляя левую часть (1.120) и сравнивая ее с правой, находим уровни энергии ε_n.

Получим уравнение движения для амплитуды перехода. Функция $K(xt, x_0 t_0)$, если ее рассматривать как интеграл по траекториям, определена лишь при $t > t_0$. Из (1.113) следует, что она удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(xt, x_0 t_0) = H\, K(xt, x_0 t_0) \quad (t > t_0), \qquad (1.121)$$

где H – гамильтониан частицы в поле V. Он действует только на x. При $t < t_0$ функция K остается неопределенной. Удобно считать

$$K\left(xt, x_0 t_0\right) = 0 \qquad \left(t < t_0\right). \qquad (1.122)$$

Это выражение является решением уравнения (1.121) в области $t < t_0$. Но уравнение (1.121) в точке $t = t_0$ не выполняется, так как амплитуда в этой точке терпит разрыв. Однако, из условия (1.114) следует, что при любом t амплитуда удовлетворяет уравнению движения:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} K\left(xt, x_0 t_0\right) - H\, K\left(x_0, t_0\right) = \mathrm{i}\hbar \delta\left(x - x_0\right) \delta\left(t - t_0\right). \qquad (1.123)$$

Это означает, что амплитуда K является одной из функций Грина для уравнения Шредингера. Поэтому ее часто называют функцией распространения или пропагатором.

1.6. Амплитуда перехода осциллятора

Проиллюстрируем изложенную в предыдущем разделе теорию на примере осциллятора.

Функция Лагранжа одномерного гармонического осциллятора равна

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2} x^2, \qquad (1.124)$$

где m и ω – масса и частота осциллятора. Из формул (1.109) и (1.111) следует, что амплитуда перехода $\left(x_0, t_0\right) \to \left(x, t\right)$ может быть записана в виде

$$K\left(xt, x_0 t_0\right) = \int D\left[x\right] \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}m}{2\hbar} \int\limits_{t_0}^{t} dt' \left[\dot{x}^2\left(t'\right) - \omega^2 x^2\left(t'\right) \right] \right\}, \qquad (1.125)$$

где $\int D\left[x\right]$ обозначает суммирование вклада в амплитуду всех классических траекторий, соединяющих точки $\left(x_0, t_0\right)$ и $\left(x, t\right)$.

Уравнение произвольной траектории на плоскости (t, x) запишем в виде

$$x(t) = \overline{x}(t) + y(t), \tag{1.126}$$

где $\overline{x}(t)$ – классическая траектория, а $y(t)$ – отклонение рассматриваемой траектории от классической. Классическая траектория находится из условия обращения вариации действия в нуль

$$\frac{\delta S}{\delta x} = 0, \tag{1.127}$$

а отклонение y удовлетворяет условиям

$$y(t_0) = y(t) = 0. \tag{1.128}$$

Подставляя (1.126) в действие (1.109), получаем

$$S[x(t)] = S_{cl}[\tilde{x}(t)] + \frac{m}{2}\int_{t_0}^{t} dt\left(\dot{y}^2 - \omega^2 y^2\right), \tag{1.129}$$

где

$$S_{cl}[\overline{x}(t)] = \frac{m}{2}\int_{t_0}^{t} dt\left(\dot{\overline{x}}^2 - \omega^2 \overline{x}^2\right) \tag{1.130}$$

– действие на классической траектории. При выводе этого соотношения мы выполнили интегрирование по частям в интеграле

$$\int_{t_0}^{t} dt\left(\dot{\overline{x}}\dot{y} - \omega^2 \overline{x} y\right),$$

учли условия (1.128) и уравнение движения вдоль классической траектории

$$\ddot{\overline{x}} + \omega^2 \overline{x} = 0. \tag{1.131}$$

Решение этого уравнения при фиксированных $\overline{x}(t_0) = x_0$, $\overline{x}(t) = x$ известно:

$$\overline{x}(t') = x_0 \frac{\sin\omega(t'-t)}{\sin\omega(t_0-t)} - x\frac{\sin\omega(t'-t_0)}{\sin\omega(t_0-t)}. \qquad (1.132)$$

Следовательно, действие на классической траектории равно

$$S_{cl}\left[\overline{x}(t)\right] = \frac{m\omega}{2\sin\omega(t-t_0)}\left[\left(x^2+x_0^2\right)\cos\omega(t-t_0)-2x_0x\right]. \quad (1.133)$$

Функция распространения K принимает вид

$$K(xt, x_0t_0) = A(t,t_0)\times$$

$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega(t-t_0)}\left[\left(x^2+x_0^2\right)\cos\omega(t-t_0)-2x_0x\right]\right\}, \qquad (1.134)$$

где

$$A(t,t_0) = \int D[y]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' y(t')B(t')y(t')\right\} \qquad (1.135)$$

– гауссовский интеграл, а

$$B(t) = -\frac{d^2}{dt^2}-\omega^2 \qquad (1.136)$$

– оператор, действующий на $y(t)$. В интеграле

$$\int_{t_0}^{t} dt\dot{y}^2,$$

входящем в $A(t,t_0)$, мы снова выполнили интегрирование по частям и учли (1.128).

Функцию $y(t')$, заданную на промежутке $[t_0,t]$ и удовлетворяющую условиям (1.128), разложим в ряд Фурье:

$$y(t') = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sin\frac{\pi k(t'-t_0)}{t-t_0}, \qquad (1.137)$$

где $\{a_k\}$ – коэффициенты Фурье. Входящий в показатель экспоненты в (1.135) интеграл равен

$$\int_{t_0}^{t} dt' y(t') B(t') y(t') = \frac{t-t_0}{2} \sum_{k=1}^{\infty} a_k^2 \left[\left(\frac{\pi k}{t-t_0} \right)^2 - \omega^2 \right]. \qquad (1.138)$$

Из формулы (1.137) видно, что вместо того, чтобы в каждый момент t «нумеровать» траектории величиной y, мы можем отличать их коэффициентами a_k. Другими словами, интеграл $\int D[y]$ можно заменить интегралом по коэффициентам Фурье:

$$\lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} da_1 ... \int_{-\infty}^{\infty} da_n .$$

Преобразование (1.137) линейное и можно найти его якобиан. Он не зависит от m, ω и $\hbar$. Мы избежим вычисления якобиана, собрав множители, включая якобиан, в интеграле (1.135) в нормировочную константу, которая будет найдена позже. Подставляя (1.138) в (1.135), получаем

$$A(t, t_0) = C \prod_{k=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega^2 (t-t_0)^2}{\pi^2 k^2} \right]^{-1/2}, \qquad (1.139)$$

где C – константа. Входящее сюда бесконечное произведение равно

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\omega^2 (t-t_0)^2}{\pi^2 k^2} \right]^{-1/2} = \left[\frac{\omega(t-t_0)}{\sin \omega (t-t_0)} \right]^{1/2}. \qquad (1.140)$$

Следовательно,

$$A(t, t_0) = C \left[\frac{\omega(t-t_0)}{\sin \omega (t-t_0)} \right]^{1/2}. \qquad (1.141)$$

После подстановки этого выражения в формулу (1.134) получаем

$$K\left(xt,x_0t_0\right)=C\left[\frac{\omega\left(t-t_0\right)}{\sin\omega\left(t-t_0\right)}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega\left(t-t_0\right)}\left[\left(x^2+x_0^2\right)\cos\omega\left(t-t_0\right)-2xx_0\right]\right\}.$$

В пределе $\omega=0$ отсюда следует функция распространения свободной частицы:

$$K\left(xt,x_0t_0\right)=C\exp\left[\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\left(x-x_0\right)^2\right].$$

Требуя, чтобы она совпала с (1.105), находим

$$C=\left[\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\left(t-t_0\right)}\right]^{1/2}.$$

Выражение для амплитуды перехода $\left(x_0,t_0\right)\to\left(x,t\right)$ осциллятора принимает окончательный вид

$$K\left(xt,x_0t_0\right)=\left[\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega\left(t-t_0\right)}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}m\omega}{2\hbar\sin\omega\left(t-t_0\right)}\left[\left(x^2+x_0^2\right)\cos\omega\left(t-t_0\right)-2xx_0\right]\right\}. \tag{1.142}$$

Это выражение будет использовано в дальнейшем.

След матрицы (1.142) равен

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,K\left(xt,xt_0\right)=\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\frac{\omega}{2}\left(t-t_0\right)}.$$

Записывая его в виде

$$\frac{1}{2\mathrm{i}\sin\frac{\omega}{2}\left(t-t_0\right)}=\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(t-t_0\right)}$$

и сравнивая результат с формулой (1.120), получаем уровни энергии осциллятора:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{1.143}$$

где $n = 0,1,...$ – осцилляторное квантовое число.

1.7. Заряд в магнитном поле

Задача о квантовом движении заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле $\vec{H}$ решена, в частности, Л.Ландау в 1930 году. Гамильтониан нерелятивистской частицы равен

$$H = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2, \tag{1.144}$$

где m и e – ее масса и заряд, $\vec{A}$ – векторный потенциал магнитного поля $\vec{H} = \operatorname{rot}\vec{A}$, c – скорость света в пустоте. Волновые функции $\varphi(\vec{r})$ стационарных состояний частицы и уровни энергии ε удовлетворяют уравнению Шредингера:

$$H\varphi = \varepsilon\varphi. \tag{1.145}$$

Решение этого уравнения для электрона в калибровке $\vec{A} = (0, Hx, 0)$, когда вектор $\vec{H}$ ориентирован вдоль оси z, имеет вид

$$\varphi_{nk_yk_z}(x,y,z) = u_{nk_y}(x)\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(ik_yy)\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(ik_zz), \tag{1.146}$$

$$\varepsilon_{nk_z\sigma} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m} + \sigma\mu H, \tag{1.147}$$

где

$$u_{nk_y}(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,2^n n!\,l}}\exp\left[-\frac{1}{2l^2}(x - x_0)^2\right]\mathrm{H}_n\left(\frac{x - x_0}{l}\right),$$

n – осцилляторное квантовое число, k_y и k_z проекции волнового вектора электрона,

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \tag{1.148}$$

– циклотронная частота (e – величина заряда электрона), μ – магнетон Бора, $\sigma = \pm 1$ – спиновое квантовое число, $x_0 = -l^2 k_y$, $l = \left(c\hbar / eH \right)^{1/2}$ – магнитная длина, H_n – полиномы Эрмита, $V = L^3$ – нормировочный объем. Из формулы (1.147) видно, что уровни энергии электрона вырождены по квантовому числу k_y. Кратность вырождения равна

$$\frac{S}{2\pi l^2}, \tag{1.149}$$

где $S = L^2$.

Рассмотрим решение этой задачи методом континуального интегрирования. Получим амплитуду перехода частицы $\left(\vec{r}_a\, t_a\right) \to \left(\vec{r}_b\, t_b\right)$ (см. H.Kleinert, Path integrals, 2003).

Функция Лагранжа заряда e в магнитном поле равна

$$L = \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} + \frac{e}{c}\vec{A}\dot{\vec{r}}, \tag{1.150}$$

а действие на траектории $\vec{r}(t)$ имеет вид

$$S\left[\vec{r}(t)\right] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2(t) + \frac{e}{c}\vec{A}\left(\vec{r}(t)\right)\dot{\vec{r}}(t) \right]. \tag{1.151}$$

Известно, что выбор векторного потенциала в виде

$$\vec{A} = \left(0, Hx, 0\right) \tag{1.152}$$

не единственный. Его можно подвергнуть калибровочному преобразованию

$$\vec{A}\left(\vec{r}\right) \to \vec{A}\left(\vec{r}\right) + \nabla f\left(\vec{r}\right), \tag{1.153}$$

где $f\left(\vec{r}\right)$ – произвольная функция. Поэтому часто используют калибровку

$$\vec{A}' = \frac{1}{2}\left[\vec{H}\vec{r}\right]. \tag{1.154}$$

Легко показать, что

$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla f$, где $f = -\frac{1}{2}Hxy$.

Если воспользоваться континуальным интегрированием в фазовом пространстве (см. р. 1.5), действие примет вид

$$S[\vec{r},\vec{p}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \dot{\vec{r}}\vec{p} - \frac{1}{2m}\left[\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right]^2 \right\}. \tag{1.155}$$

Дискретная форма амплитуды перехода $(\vec{r}_a\, t_a) \to (\vec{r}_b\, t_b)$ равна

$$K(\vec{r}_b t_b, \vec{r}_a t_a) = \langle \vec{r}_b t_b | \vec{r}_a t_a \rangle =$$

$$= \lim_{N\to\infty} \prod_{n=1}^{N}\left[\int d\vec{r}_n\right] \prod_{n=1}^{N+1}\left[\int \frac{d\vec{p}_n}{(2\pi\hbar)^3}\right] \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_N\right). \tag{1.156}$$

Здесь мы разделили промежуток $[t_a, t_b]$ на $N+1$ равных частей и учли $t_{N+1} = t_b$. Отметим, что в формуле (1.112) этот промежуток разбит на N частей. Действие S_N с учетом (1.152) и (1.155) равно

$$S_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \vec{p}_n(\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1}) - \frac{1}{2m}\left[p_{xn}^2 + \left(p_{yn} - Hx_n\right)^2 + p_{zn}^2 \right] \right\}, \tag{1.157}$$

где $\vec{r}_0 = \vec{r}_a$, $\vec{r}_{N+1} = \vec{r}_b$. По этим величинам интегрирования в (1.156) нет.

Отметим, что амплитуда (1.156) не является калибровочно инвариантной. Действительно, если использовать векторный потенциал в форме

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla f ,$$

то в действии появится «поверхностный» вклад

$$\Delta S = \frac{e}{c}\int_{t_a}^{t_b} dt\, \dot{\vec{r}} \nabla f(\vec{r}) = \frac{e}{c}\left[f(\vec{r}_b) - f(\vec{r}_a) \right].$$

Тогда амплитуда (1.156) приобретает не равный единице фазовый множитель:

$$\left\langle \vec{r}_b t_b \middle| \vec{r}_a t_a \right\rangle_A \to \left\langle \vec{r}_b t_b \middle| \vec{r}_a t_a \right\rangle_{A'} = \exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{c\hbar} f\left(\vec{r}_b\right) \right] \times$$

$$\times \left\langle \vec{r}_b t_b \middle| \vec{r}_a t_a \right\rangle_A \exp\left[-\frac{\mathrm{i}e}{c\hbar} f\left(\vec{r}_a\right) \right].$$

Только амплитуда $\left\langle \vec{r} t_b \middle| \vec{r} t_a \right\rangle$ остается инвариантной.

Действие (1.157) содержит переменные y_n и z_n только в сумме

$$\sum_{n=1}^{N+1} \vec{p}_n \left(\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} \right).$$

Поэтому интегрирование по этим переменным можно выполнить при помощи формулы

$$\int d\vec{r} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(\vec{p} - \vec{p}\,' \right) \vec{r} \right] = \left(2\pi\hbar \right)^3 \delta\left(\vec{p} - \vec{p}\,' \right). \tag{1.158}$$

Получаем в амплитуде (1.156) N множителей

$$\left(2\pi\hbar\right)^2 \delta\left(\vec{p}_2' - \vec{p}_1' \right) \ldots \left(2\pi\hbar\right)^2 \delta\left(\vec{p}_{N+1}' - \vec{p}_N' \right),$$

где штрихом отмечена проекция импульса на плоскость (y, z). В результате выполняется интегрирование по N переменным p_{yn}, p_{zn}, кроме одной пары $\left(p_y, p_z\right)$:

$$\left\langle \vec{r}_b t_b \middle| \vec{r}_a t_a \right\rangle = \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_y dp_z}{\left(2\pi\hbar\right)^2} \prod_{n=1}^{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \times$$

$$\times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_{xn}}{2\pi\hbar} \right] \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[p_y \left(y_b - y_a \right) + p_z \left(z_b - z_a \right) - \right.\right. \tag{1.159}$$

$$\left.\left. - \left(t_b - t_a \right) \frac{p_z^2}{2m} \right] \right\} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_N^x \right),$$

где

$$S_N^x = \sum_{n=1}^{N+1}\left[p_{xn}\left(x_n - x_{n-1}\right) - \frac{p_{xn}^2}{2m} - \frac{1}{2m}\left(p_{yn} - \frac{e}{c}Hx_n \right)^2 \right] \qquad (1.160)$$

– действие для одномерного гармонического осциллятора с частотой

$$\omega_c = \frac{eH}{mc}$$

и положением центра

$$x_0 = \frac{p_y}{m\omega_c}. \qquad (1.161)$$

В этом легко убедиться, переходя в (1.160) к пределу $N \to \infty$ и сравнивая возникающий при этом интеграл с интегралом в показателе экспоненты (1.125). Учитывая (1.142), получаем для амплитуды перехода $\left(x_a t_a\right) \to \left(x_b t_b\right)$ этого осциллятора выражение

$$\begin{gathered}\left\langle x_b t_b \middle| x_a t_a \right\rangle = \left[\frac{m\omega_c}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin \omega_c\left(t_b - t_a\right)} \right]^{1/2} \times \\ \times \exp\left\{ \frac{\mathrm{i}m\omega_c}{2\hbar \sin \omega_c\left(t_b - t_a\right)} \left[\left(\left(x_b - x_0\right)^2 + \left(x_a - x_0\right)^2 \right) \times \right.\right. \\ \left.\left. \times \cos \omega_c\left(t_b - t_a\right) - 2\left(x_b - x_0\right)\left(x_a - x_0\right) \right] \right\}. \end{gathered} \qquad (1.162)$$

В результате амплитуда (1.159) становится равной

$$\begin{gathered}\left\langle \vec{r}_b t_b \middle| \vec{r}_a t_a \right\rangle = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar\left(t_b - t_a\right)} \right)^{1/2} \times \\ \times \exp\left[\frac{\mathrm{i}m\left(z_b - z_a\right)^2}{2\hbar\left(t_b - t_a\right)} \right] \left\langle \vec{\rho}_b t_b \middle| \vec{\rho}_a t_a \right\rangle, \end{gathered} \qquad (1.163)$$

где

$$\left\langle \vec{\rho}_b t_b \,\middle|\, \vec{\rho}_a t_a \right\rangle = \frac{m\omega_c}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_0 \times$$
$$\times \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} m\omega_c x_0 \left(y_b - y_a \right) \right] \left\langle x_b t_b \,\middle|\, x_a t_a \right\rangle \qquad (1.164)$$

– амплитуда перехода в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, $\vec{\rho}$ – радиус-вектор в этой плоскости. Входящий в (1.159) интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_z \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_z \left(z_b - z_a \right) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p_z^2}{2m} \left(t_b - t_a \right) \right] =$$
$$= \left[\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar \left(t_b - t_a \right)} \right]^{1/2} \exp\left[\frac{\mathrm{i}m \left(z_b - z_a \right)^2}{2\hbar \left(t_b - t_a \right)} \right] \qquad (1.165)$$

равен амплитуде свободного движения частицы вдоль вектора напряженности магнитного поля (см.(1.105)). В интеграле по p_y мы перешли к переменной интегрирования x_0 (1.161).

Интеграл по x_0 в (1.164) вычисляется путем выделения полного квадрата

$$\left[x_0 - \frac{x_b + x_a}{2} - \frac{y_b - y_a}{2\operatorname{tg} \frac{\omega_c}{2} \left(t_b - t_a \right)} \right]^2$$

в показателе экспоненты. В результате амплитуда (1.163) принимает окончательный вид

$$\left\langle \vec{r}_b t_b \,\middle|\, \vec{r}_a t_a \right\rangle = \left[\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar \left(t_b - t_a \right)} \right]^{3/2} \frac{\frac{\omega_c}{2} \left(t_b - t_a \right)}{\sin \frac{\omega_c}{2} \left(t_b - t_a \right)} \times$$
$$\times \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(S_{cl} + S_{sf} \right) \right], \qquad (1.166)$$

где

$$S_{cl} = \frac{m}{2}\left\{\frac{\left(z_b - z_a\right)^2}{t_b - t_a} + \frac{\omega_c}{2}\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}\left(t_b - t_a\right)\times\right.$$
$$\left.\times\left[\left(x_b - x_a\right)^2 + \left(y_b - y_a\right)^2\right] + \omega_c\left(x_a y_b - x_b y_a\right)\right\} \tag{1.167}$$

– действие для классической траектории,

$$S_{sf} = \frac{m\omega_c}{2}\left(x_b y_b - x_a y_a\right) \tag{1.168}$$

– «поверхностный» вклад, зависящий от выбора калибровки векторного потенциала. В частности, в случае калибровки (1.152) имеем для электрона

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S_{sf} = -\frac{\mathrm{i}}{2l^2}\left(x_a + x_b\right)\left(y_b - y_a\right), \tag{1.169}$$

где l – магнитная длина.

Сравнивая выражения для амплитуды, полученные в разных калибровках, заключаем, что «поверхностный» вклад S_{sf} исчезает, если воспользоваться аксиальной калибровкой (1.154). Следовательно, в этой калибровке в показателе экспоненты в (1.166) остается только действие на классической траектории.

Действие (1.167) можно найти, решая уравнения движения заряда в магнитном поле:

$$\ddot{x} = \omega_c \dot{y},\ \ddot{y} = -\omega_c \dot{x},\ \ddot{z} = 0 \quad . \tag{1.170}$$

Отсюда следует

$$\dddot{x} + \omega_c^2 \dot{x} = 0, \quad \dddot{y} + \omega_c^2 \dot{y} = 0\,. \tag{1.171}$$

Решение этих уравнений, удовлетворяющее условиям

$$\vec{r}\left(t_a\right) = \vec{r}_a\,, \qquad \vec{r}\left(t_b\right) = \vec{r}_b\,, \tag{1.172}$$

имеет вид

$$x(t)=\frac{1}{\sin\omega_c(t_b-t_a)}\Big[(x_b-x_0)\sin\omega_c(t-t_a)-$$
$$-(x_a-x_0)\sin\omega_c(t-t_b)\Big]+x_0,$$
$$y(t)=\frac{1}{\sin\omega_c(t_b-t_a)}\Big[(y_b-y_0)\sin\omega_c(t-t_a)- \qquad (1.173)$$
$$-(y_a-y_0)\sin\omega_c(t-t_b)\Big]+y_0,$$
$$z(t)=z_a\frac{t_b-t}{t_b-t_a}+z_b\frac{t-t_a}{t_b-t_a},$$

$$x_0=\frac{1}{2}\left[(x_b+x_a)+(y_b-y_a)\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}(t_b-t_a)\right],$$
$$y_0=\frac{1}{2}\left[(y_b+y_a)-(x_b-x_a)\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}(t_b-t_a)\right]. \qquad (1.174)$$

Поперечная часть действия в калибровке (1.154) равна

$$A\left[\vec{\rho}(t)\right]=\int_{t_a}^{t_b}\left\{\frac{m}{2}\frac{d}{dt}(x\dot{x}+y\dot{y})+\frac{m}{2}\left[x(-\ddot{x}+\omega_c\dot{y})+y(-\ddot{y}-\omega_c\dot{x})\right]\right\}. \quad (1.175)$$

Убедимся в том, что на классической траектории действие (1.175) совпадает с (1.167) (без продольной части). Для этого подставим (1.173) и (1.174) в (1.175) и выполним интегрирование. На классической траектории первое слагаемое в (1.175) равно

$$\frac{m}{2}(x\dot{x}+y\dot{y})\Big|_{t_a}^{t_b},$$

а второе в силу (1.170) отсутствует. Учитывая

$$x_b\dot{x}_b-x_a\dot{x}_a=\frac{\omega_c}{2}\left[(x_b-x_a)^2\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}(t_b-t_a)+(x_b+x_a)(y_b-y_a)\right],$$

$$y_b\dot{y}_b-y_a\dot{y}_a=\frac{\omega_c}{2}\left[(y_b-y_a)^2\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}(t_b-t_a)-(x_b-x_a)(y_b+y_a)\right],$$

находим

$$A=\frac{m}{2}\left\{\frac{\omega_c}{2}\operatorname{ctg}\frac{\omega_c}{2}\left(t_b-t_a\right)\left[\left(x_b-x_a\right)^2+\left(y_b-y_a\right)^2\right]+\omega_c\left(x_a y_b-x_b y_a\right)\right\}.$$

Это выражение действительно совпадает с поперечной частью классического действия (1.167).

1.8. Квазиклассическое приближение

Рассмотренные в pp. 1.5, 1.6, 1.7 задачи о движении свободной частицы, осциллятора, заряда в магнитном поле решаются точно. Ясно, что большинство задач физики к этому классу не принадлежит. Поэтому необходимо развить приближенные методы вычисления континуальных интегралов. Один из этих методов – метод стационарной фазы. Он используется в квазиклассическом приближении. В этом приближении действие, входящее в показатель экспоненты (1.111), велико по сравнению с $\hbar$. В результате экспонента сильно осциллирует. Поэтому вклад в интеграл (1.111) дает лишь интегрирование по малой окрестности классической траектории, которая находится из условия экстремальности действия (1.127). Получим выражение для амплитуды перехода в этом приближении.

Нас интересует основной вклад в интеграл

$$F\left(\alpha\right)=\int\limits_{x_1}^{x_2} dx\, f\left(x\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\varphi\left(x\right)}, \qquad (1.176)$$

в котором x_1 и x_2 – точки на оси x, $f\left(x\right)$ и $\varphi\left(x\right)$ – некоторые функции, а вещественный параметр α велик. Функцию $\varphi\left(x\right)$ также будем считать вещественной. При большом α основной вклад в этот интеграл дает окрестность стационарной точки, которую находим из условия

$$\frac{d\varphi\left(x\right)}{dx}=0. \qquad (1.177)$$

Будем предполагать, что $\varphi'' \neq 0$ в стационарной точке. Штрихом обозначена производная по x.

Разложим $\varphi(x)$ в ряд Тейлора в окрестности стационарной точки x_0:

$$\varphi(x) = \varphi(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 \varphi''(x_0) + \ldots \qquad (1.178)$$

Первая производная $\varphi'(x_0)$ равна нулю в силу (1.177). В разложении $f(x)$ ограничимся первым членом. Тогда

$$F(\alpha) = f(x_0)\exp\left[\mathrm{i}\alpha\varphi(x_0)\right]\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx'\exp\left(\mathrm{i}\alpha\frac{1}{2}\varphi'' x'^2\right). \qquad (1.179)$$

Здесь мы ограничились квадратичным членом разложения (1.178) и распространили интегрирование по переменной $x' = x - x_0$ на всю ось x ввиду быстрой сходимости интеграла. Интегралы Френеля в (1.170) известны:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx'\exp\left(\mathrm{i}\frac{\alpha}{2}\varphi'' x'^2\right) = \left(\frac{2\pi}{\alpha\left|\varphi''(x_0)\right|}\right)^{1/2} \times$$
$$\times f(x_0)\exp\left[\mathrm{i}\alpha\varphi(x_0) + \frac{\mathrm{i}\pi}{4}\operatorname{sign}\varphi''(x_0)\right]. \qquad (1.180)$$

Рассмотрим случай нескольких переменных $x_1,\ldots,x_n$, от которых зависят функции f и φ. Тогда

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right)_0 = 0, \qquad (1.181)$$

где производные берутся в стационарной точке $x_{01},\ldots,x_{0n}$. Разложение (1.178) принимает вид

$$\varphi(x_1,\ldots,x_n) = \varphi(x_{01},\ldots,x_{0n}) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{ik}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_i \partial x_k}\right)_0 (x_i - x_{0i})(x_k - x_{0k}) + \ldots \qquad (1.182)$$

Матрица

$$\lambda_{ik} = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} \right)_0$$

вещественная и симметричная.

Интеграл, аналогичный (1.176), теперь равен

$$F(\alpha) = f(x_{01},...,x_{0n}) \exp\left[\mathrm{i}\alpha\varphi(x_{01},...,x_{0n}) \right] \times$$
$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dx_1' ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_n' \exp\left[\mathrm{i}\alpha \frac{1}{2} \sum_{ik} \lambda_{ik} x_i' x_k' \right]. \qquad (1.183)$$

Входящий сюда интеграл вычисляется путем перехода к новым переменным, линейно связанным с переменными x_i', диагонализующем квадратичную форму в показателе экспоненты. Он равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1' ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_n' \exp\left[\mathrm{i}\alpha \frac{1}{2} \sum_{ik} \lambda_{ik} x_i' x_k' \right] =$$
$$= \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{n/2} \left| \det \lambda \right|^{-1/2} \exp\left[\frac{\mathrm{i}\pi}{4} (p_+ - p_-) \right],$$

где $p_\pm$ – число положительных и отрицательных собственных чисел матрицы λ. Следовательно, интеграл (1.183) приближенно равен

$$F(\alpha) = f(x_{01},...,x_{0n}) \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^{n/2} \left| \det \lambda \right|^{-1/2} \times$$
$$\times \exp\left[i\alpha\varphi(x_{01},...,x_{0n}) + \frac{\mathrm{i}\pi}{4} (p_+ - p_-) \right]. \qquad (1.184)$$

Применим этот метод к расчету континуального интеграла (1.111). Действие S разложим в ряд по отклонению от классической траектории $y = x - \overline{x}$:

$$S=\int_{t_1}^{t_2} dt\left(\frac{m\dot{\bar{x}}^2}{2}-V(\bar{x})\right)+\int_{t_1}^{t_2} dt\left[\frac{m\dot{y}^2}{2}-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2}y^2\right]+$$
$$+\int_{t_1}^{t_2} dt\left[m\dot{\bar{x}}\dot{y}-\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}y\right]. \tag{1.185}$$

После интегрирования по частям получаем

$$\int_{t_1}^{t_2} dt\, m\dot{\bar{x}}\dot{y}=m\dot{\bar{x}}\, y\Big|_{t_1}^{t_2}-\int_{t_1}^{t_2} dt\, m\ddot{\bar{x}}y=-\int_{t_1}^{t_2} dt\, m\ddot{\bar{x}}y\,,$$

поскольку $y(t_1)=y(t_2)=0$. Интеграл

$$\int_{t_1}^{t_2} dt\left(m\ddot{\bar{x}}+\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right)y$$

равен нулю в силу уравнения движения частицы по классической траектории:

$$m\ddot{\bar{x}}=-\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}.$$

Следовательно, действие (1.185) равно

$$S=S_{cl}+\frac{m}{2}\int_{t_1}^{t_2} dt\, y(t)D(t)y(t), \tag{1.186}$$

где введен оператор

$$D(t)=-\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{1}{m}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\Big|_{x(t)=\bar{x}(t)}.$$

Входящий в (1.111) интеграл по траекториям в квазиклассическом приближении равен

$$\int Dx\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)=A(\det D)^{-1/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right), \tag{1.187}$$

где A – константа.

1.9. Функция Грина для одночастичного уравнения Шредингера

К основным понятиям квантовой механики относятся и многочисленные функции Грина, которые будут рассмотрены в гл. 5. Здесь же мы на примере функции Грина для уравнения Шредингера ограничимся лишь кратким введением в теорию этих функций. С определением функции Грина для уравнения Шредингера мы уже встречались в р. 1.5. Временное уравнение Шредингера для одной частицы в поле $V(\vec{r},t)$ имеет вид

$$\left[H_0 + V(\vec{r},t) - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\psi(\vec{r},t) = 0, \qquad (1.188)$$

где

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

– гамильтониан свободной частицы. Запишем это уравнение в виде

$$\left(H_0 - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(\vec{r},t) = -V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t). \qquad (1.189)$$

Функция Грина G_0 этого уравнения определяется как решение уравнения

$$\left(H_0 - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)G_0(\vec{r},t;\vec{r}',t') = -\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t'), \qquad (1.190)$$

которое удовлетворяет граничным условиям, наложенным на волновую функцию. Функция G_0 называется свободной временной функцией Грина. Оператор в левой части уравнения (1.190) не меняется при трансляции в пространстве и вдоль временной оси, поэтому

$$G_0(\vec{r},t;\vec{r}',t') = G_0(\vec{r}-\vec{r}',t-t'), \qquad (1.191)$$

Дифференциальное уравнение (1.189) можно преобразовать в интегральное:

$$\psi(\vec{r},t)=\varphi(\vec{r},t)+\int d\vec{r}'\int_{-\infty}^{\infty} dt' G_0(\vec{r}-\vec{r}',t-t')V(\vec{r}',t')\psi(\vec{r}',t'), \quad (1.192)$$

где φ – произвольное решение однородного уравнения

$$\left(H_0-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\varphi(\vec{r},t)=0. \quad (1.193)$$

Чтобы убедиться в справедливости уравнения (1.192), достаточно подействовать на него оператором

$$H_0-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

Решение $\varphi(\vec{r},t)$ зависит от постановки физической задачи. Например, в теории рассеяния функцию φ часто выбирают в виде монохроматической плоской волны

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\vec{k}\vec{r}-\frac{\varepsilon_k}{\hbar}t\right)\right],$$

где $\vec{k}$ – волновой вектор, а $\varepsilon_k=\hbar^2k^2\big/2m$ – энергия частицы. Тогда функция $\psi(\vec{r},t)$ будет возмущенной полем V волной. Другими словами, ψ описывает состояние рассеяния первоначально свободной частицы, обладающей импульсом $\vec{p}=\hbar\vec{k}$.

Функцию G_0 можно подвергнуть фурье-преобразованию по одной из переменных $\vec{r}-\vec{r}'$, $t-t'$ или по обеим сразу:

$$G_0(\vec{r},t)=\int\frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar}G_0(\vec{p},\varepsilon)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t)\right],$$

$$G_0(\vec{p},\varepsilon)=\int d\vec{r}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,G_0(\vec{r},t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t)\right], \quad (1.194)$$

где $G_0\left(\vec{p},\varepsilon\right)$ – амплитуда Фурье. Подставляя первое выражение (1.194) в уравнение (1.190) и учитывая фурье-разложение дельта-функции

$$\delta\left(\vec{r}\right)\delta\left(t\right)=\int\frac{d\vec{p}}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t\right)\right], \qquad (1.195)$$

получаем

$$\left(\varepsilon-\frac{p^2}{2m}\right)G_0\left(\vec{p},\varepsilon\right)=1,$$

откуда

$$G_0\left(\vec{p},\varepsilon\right)=\left(\varepsilon-\frac{p^2}{2m}\right)^{-1}. \qquad (1.196)$$

При $\varepsilon=p^2/2m$ это выражение теряет смысл. Процедура придания смысла этому выражению при произвольном ε связана с граничными условиями к уравнению (1.188). В частности, требуя, чтобы в задаче рассеяния вдали от силового центра волновая функция ψ имела вид суперпозиции падающей и уходящей волн, получаем

$$G_0\left(\vec{p},\varepsilon\right)=\lim_{\delta\to+0}\left(\varepsilon+\mathrm{i}\delta-\frac{p^2}{2m}\right)^{-1}. \qquad (1.197)$$

Тогда

$$G_0\left(\vec{r},t\right)=\lim_{\delta\to+0}\int\frac{d\vec{p}}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar}\frac{\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t\right)\right]}{\varepsilon-\frac{p^2}{2m}+\mathrm{i}\delta}. \qquad (1.198)$$

Полюс функции (1.197) расположен в точке $p^2/2m-\mathrm{i}\delta$, в нижней полуплоскости комплексной энергии ε. Замыкая там контур интегрирования по ε, получаем из (1.198) при $t > 0$ выражение

$$G_0(\vec{r},t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\vec{p}\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)\right].$$

Если же $t < 0$, контур в интеграле по ε в (1.198) следует замкнуть в верхней полуплоскости, где функция (1.197) регулярна. Следовательно,

$$G_0(\vec{r},t<0) = 0\,.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} G_0(\vec{r},t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Theta(t)\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\vec{p}\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t\right)\right] = \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Theta(t)\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}r^2\right), \end{aligned} \qquad (1.199)$$

где

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases} \qquad (1.200)$$

– функция Хевисайда. Выражение (1.199) представляет собой запаздывающую функцию Грина свободной частицы. Она лишь множителем $\mathrm{i}\hbar$ отличается от (1.106). Мы вернемся к ней в гл. 5.

Задачи

1. Показать, что если F – положительно определенный эрмитов оператор, то справедливо обобщенное неравенство Шварца $\left|\langle a|F|b\rangle\right|^2 \le \langle a|F|a\rangle\langle b|F|b\rangle$ при любых векторах $|a\rangle$ и $|b\rangle$.

2. Проверить равенство $[A_1A_2, A_3] = [A_1, A_3]A_2 + A_1[A_2, A_3]$, где A_1, A_2, A_3 – операторы.

3. Пусть A, B и C – операторы, причем $[A, B] = C$, $[A, C] = 0$, $[B, C] = 0$. Доказать, что

$$\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)\exp\left(-\frac{C}{2}\right) = \exp(B)\exp(A)\exp\left(\frac{C}{2}\right).$$

4. Убедитесь в том, что в случае смешанного спектра оператора F разложение единицы (1.28) имеет вид

$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int_{F_1}^{F_2} |F\rangle dF \langle F| = 1$, где $[F_1, F_2]$ – промежуток сплошного спектра оператора F.

5. Доказать обобщенное равенство Парсеваля

$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n \left|\langle n|\psi\rangle\right|^2 + \int_{F_1}^{F_2} dF \left|\langle F|\psi\rangle\right|^2$, где $\left[\langle\psi|\psi\rangle\right]^{1/2}$ – норма вектора $|\psi\rangle$.

6. Показать, что для того, чтобы существовал n-мерный вектор-столбец u, удовлетворяющий уравнению

$$Fu = \lambda u,$$

где F – матрица типа $n \times n$, необходимо и достаточно, чтобы постоянная λ являлась решением алгебраического уравнения

$$\det\left(F - \lambda \mathrm{I}\right) = 0$$

(I – единичная матрица $n \times n$).

7. Найти собственные значения и собственные функции оператора проектирования (см. А.Мессиа, Квантовая механика, Т. 1, 1978).

8. Решить задачу о движении квантового осциллятора в представлении Гейзенберга (см. У.Люиселл, Излучение и шумы в квантовой электронике, 1972).

9. Убедиться в том, что разность

$$\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\left(x\right)\Delta t\right] - \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t\right]\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\left(x\right)\Delta t\right]$$

пропорциональна $\left(\Delta t\right)^2$ (см. р. 1.5).

10. Из формул (1.105) и (1.113) найти $\psi\left(x_2, t_2\right)$, если

$$\psi\left(x_1, t_1\right) = \left(2\pi\hbar\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p x_1 - \frac{p^2}{2m} t_1\right)\right].$$

11. Вычислить якобиан преобразования (1.137).

12. Получить волновую функцию электрона в магнитном поле в импульсном представлении. Использовать векторный потенциал в виде (1.152), (1.154) и $\vec{A} = \left(-Hy, 0, 0\right)$.

13. Вычислить интеграл $\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_0$ в формуле (1.164).

14. Найти амплитуду перехода $(\vec{r}_a t_a) \to (\vec{r}_b t_b)$ электрона в однородном электрическом поле.

15. Найти временную компоненту Фурье $G_0(\vec{r}, \varepsilon)$ функции Грина частицы (1.199), совершающей
а) одномерное движение,
б) двумерное движение,
в) трехмерное движение.

16. Получить запаздывающую функцию Грина $G_0(\vec{r}, \vec{r}', t)$ (и ее временную фурье-компоненту $G_0(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon)$) электрона в магнитном поле.

17. Найти функцию Грина электрона в скрещенных электрическом и магнитном полях.

Єрмолаєв Олександр Михайлович

Рашба Георгій Ілліч

Лекції з квантової статистики і кінетики
1. Основні поняття квантової механіки

Російською мовою
Друкується в авторській редакції
Відповідальний за випуск О.І. Любімов
Макет обкладинки І.М. Дончик

Підп. до друку 21.05.07. Формат 60x84 1/16. Папір офсетний.
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 3.95. Обл.-вид. арк. 4.25.
Наклад 50 прим. Ціна договірна.

61077, Харків, майдан Свободи, 4
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Організаційно-видавничий відділ НМЦ

Надруковано ФОП "Петрова І.В."
61144, Харків-144, вул. Гв. Широнінців 79-в, к. 137
Свідоцтво про державну реєстрацію ВОО № 948011
від 03.01.03

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73
Авторский знак Е74

Утверждено Ученым советом физического факультета
Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина