ГЛАВА 1

Математическое введение

Ниже для удобства дана сводка некоторых определений и результатов, которые будут использоваться в ходе изложения в основном тексте книги.

Обратная решетка. Напомним несколько важных свойств обратной решетки. Базисные векторы обратной решетки $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ связаны с базисными векторами элементарных трансляций прямой решетки $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ соотношениями

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}. \quad (1.1)$$

Это определение содержит множитель 2π, который в учебниках кристаллографии при введении понятия обратной решетки обычно отсутствует. При рассмотрении процессов взаимодействия волн с периодической решеткой часто приходится сталкиваться с записью закона сохранения волнового вектора, в которой появляется добавочный член в виде произведения 2π на вектор обратной решетки в кристаллографическом его определении. В связи с этим нам представляется удобным сразу включить множитель 2π в определение вектора обратной решетки. Во всех прочих отношениях наши обозначения совпадают с общепринятыми, только звездочка, разумеется, не означает комплексного сопряжения. Все базисные векторы — вещественные величины. Заметим, что $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = 2\pi$, $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = 0$ и т. д.

Из основ векторного исчисления и определения (1.1) сразу следует, что

$$V_c^* = \frac{(2\pi)^3}{V_c}, \quad (1.2)$$

где V_c^* — объем элементарной ячейки обратной решетки, а $V_c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ — объем элементарной ячейки прямой решетки. Укажем также, что переход от сумм по волновым векторам к соответствующим интегралам производится по следующему правилу:

$$\boxed{\sum_{\mathbf{k}} \to \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{N}{V_c^*} \int d^3k,}$$

где объем Ω содержит N элементарных ячеек.

Теорема. Вектор $\mathbf{r}^*(hkl)$ точки hkl обратн перпендикулярен плоскости (hkl) прямой решетки.

Доказательство. Заметим, что

$$\frac{1}{h}\mathbf{a} - \frac{1}{k}\mathbf{b}$$

есть вектор, лежащий в плоскости (hkl) прямой определению индексов hkl). Но произведение

$$\mathbf{r}^* \cdot \left(\frac{1}{h}\mathbf{a} - \frac{1}{k}\mathbf{b}\right) = (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)\left(\frac{1}{h}\mathbf{a} - \frac{1}{k}\mathbf{b}\right) =$$
$$= \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} - \mathbf{b}^* \cdot \mathrm{l}$$

следовательно, вектор $\mathbf{r}^*$ перпендикулярен к однс лежащему в плоскости (hkl). Тем же путем мож: что вектор $\mathbf{r}^*$ перпендикулярен второму вектору

$$\frac{1}{h}\mathbf{a} - \frac{1}{l}\mathbf{b},$$

лежащему в той же плоскости. Таким образом, ве пендикулярен плоскости (hkl) прямой решетки.

Теорема. Длина вектора $\mathbf{r}^*(hkl)$ равна прои: на обратную величину межплоскостного расстояни мейства плоскостей (hkl) в прямой решетке.

Доказательство. Пусть $\mathbf{n}$ — единичный вектс к данной плоскости. Тогда межплоскостное расст $h^{-1}\mathbf{a}\cdot\mathbf{n}$. Поскольку

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}^*}{|\mathbf{r}^*|},$$

то для $d(hkl)$ имеем

$$d(hkl) = \frac{1}{h}\mathbf{n}\cdot\mathbf{a} = \frac{\mathbf{r}^*\cdot\mathbf{a}}{h\,|\mathbf{r}^*|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{r}^*|}.$$

Теперь перейдем к доказательству двух теорем нии периодических функций.

Теорема. Функцию $f(\mathbf{x})$ — периодическую с і шетки можно разложить в ряд Фурье по векторам решетки, *Доказательство.* Рассмотрим ряд

$$f(\mathbf{x})=\sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}}. \tag{1.7}$$

Покажем, что ряд (1.7) периодичен с периодом решетки, для этого прибавим к вектору $\mathbf{x}$ вектор решетки:

$$\mathbf{x}=\mathbf{x}+m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c}, \tag{1.8}$$

где m, n, p — целые числа. Тогда

$$f(\mathbf{x}+m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})=$$
$$=\sum a_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}) \exp[i\mathbf{G}(m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})]. \tag{1.9}$$

Поскольку $\mathbf{G}$ — вектор обратной решетки, имеем

$$\mathbf{G}(m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})=(h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*)(m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})=$$
$$=2\pi(hm+kn+lp); \tag{1.10}$$

таким образом, показатель степени второй экспоненты в (1.9) — целое число, умноженное на 2π. По определению

$$f(\mathbf{x}+m\mathbf{a}+n\mathbf{b}+p\mathbf{c})=f(\mathbf{x}), \tag{1.11}$$

и, следовательно, представление (1.7) обладает требуемой периодичностью.

Теорема. Если функция $f(\mathbf{x})$ периодическая с периодом решетки, то

$$\int d^3x f(\mathbf{x})\, e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}=0, \tag{1.12}$$

если $\mathbf{K}$ не является вектором обратной решетки.

Доказательство. Этот результат есть прямое следствие предыдущей теоремы и представляет собой, в сущности, правило отбора для переходов внутри полосы ($\mathbf{G}\neq 0$) и вне ее ($\mathbf{G}=0$). В силу (1.7)

$$f(\mathbf{x})=\sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{x}} \tag{1.13}$$

и

$$\int d^3\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x})=\sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} \int d^3\mathbf{x} \exp[i(\mathbf{K}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}]=$$
$$=\Omega\sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}}\Delta(\mathbf{K}+\mathbf{G}), \tag{1.14}$$

где Δ — символ Кронекера, Ω — объем образца. Величину $\Delta(\mathbf{K}+\mathbf{G})$ можно также записать в виде $\delta_{\mathbf{K},-\mathbf{G}}$.

Разложения в ряды Фурье по решетке. Рассмотрим ряд

$$q_r = N^{-1/2} \sum_k Q_k e^{ikr} \tag{1.15}$$

Допустимые значения k обычно определяют из периодических граничных условий

$$q_{r+N} = q_r,$$

считая $e^{ikN}=1$. Эти условия удовлетворяются для $k=2\pi n/N$, где n — произвольное целое число. Среди всех возможных n имеется лишь N значений, дающих N независимых координат q_r. Удобно считать число N четным и пользоваться следующими N значениями n: $0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm\left(\frac{1}{2}N-1\right), \frac{1}{2}N$. Заметим, что числа $\frac{1}{2}N$ и $-\frac{1}{2}N$ приводят к одинаковым значениям e^{ikr} для всех r. По этой причине последним n в нашем наборе надо взять $\frac{1}{2}N$. Значение $n=0$, соответствующее $k=0$, отвечает так называемому *нормальному колебанию*, когда все q_r равны и поэтому не зависят от индекса r.

Теорема. Если имеет место (1.15), то

$$Q_k = N^{-1/2} \sum_s q_s e^{-iks}. \tag{1.16}$$

Доказательство. Подставим (1.16) в (1.15):

$$q_r = N^{-1} \sum_{ks} q_s \exp[ik(r-s)]. \tag{1.17}$$

Если положить $s=r$, то сумма по k дает Nq_r, т. е. требуемый результат. Если же разность $r-s=\sigma$, где σ — некоторое целое число, то при $\sigma \neq 0$

$$\sum_n \exp(ik\sigma) = \sum_n \exp(i2\pi n\sigma/N) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\frac{1}{2}N} \exp(i2\pi n\sigma/N) + \sum_{n=1}^{\frac{1}{2}N-1} \exp(-i2\pi n\sigma/N) =$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} \exp(i2\pi n\sigma/N) = \frac{1-\exp(i2\pi\sigma)}{1-\exp(i2\pi\sigma/N)} = 0. \tag{1.18}$$

Итак, мы имеем соотношение ортогональности

$$\sum_k \exp[ik(r-s)] = N\delta_{sr}. \tag{1.19}$$

Аналогом таких дискретных сумм является представление дельта-функции в виде интеграла

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\, dk = 2\pi\delta(x). \qquad (1.20)$$

Рассмотрим ряд для значений x в интервале $-\frac{1}{2}L < x < \frac{1}{2}L$, а именно ряд

$$q(x) = \frac{1}{L^{1/2}} \sum Q_k e^{ikx}, \qquad (1.21)$$

где k — произвольное целое число, умноженное на $2\pi/L$.

Теорема. Если имеет место (1.21), то

$$Q_k = L^{-1/2} \int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L} d\xi\, q(\xi)\, e^{-ik\xi}. \qquad (1.22)$$

Доказательство. Подставляя (1.21) в (1.22), получим

$$Q_k = L^{-1} \sum_{k'} Q_{k'} \int d\xi \exp[ik(k'-k)\xi] = \sum_{k'} Q_{k'}\delta_{kk'} = Q_k, \qquad (1.23)$$

поскольку для всех $k \neq k'$

$$\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L} d\xi \exp[i(k'-k)\xi] = \frac{2\sin\frac{1}{2}(k'-k)L}{i(k'-k)}.$$

Теорема. Потенциал $1/|\mathbf{x}|$ можно разложить в ряд Фурье вида

$$\frac{1}{|\mathbf{x}|} = \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}, \qquad (1.24)$$

где Ω — объем кристалла.

Доказательство. Имея в виду (1.22), положим $r = |\mathbf{x}|$. Тогда

$$\int d^3x \frac{\exp(-\alpha r)\exp(-i\mathbf{q}'\mathbf{x})}{r} =$$

$$= 2\pi \int r\, dr \int_{-1}^{+1} d\mu \exp(-iq'r\mu)\exp(-\alpha r) \approx$$

$$\approx \frac{2\pi}{iq'} \int_0^{\infty} dr\, (\exp[-i(q'-i\alpha)r] - \exp[i(q'+i\alpha)r]) = \frac{4\pi}{q'^2 + \alpha^2}. \qquad (1.25)$$

Выражение (1.24) получим, переходя к пределу при $\alpha \to +0$.

Сводка основных соотношений квантовой механики ($\hbar=1$).

Уравнение Шредингера:

$$i\dot{\psi}=H\psi. \tag{1.26}$$

Уравнение движения для некоторого оператора F:

$$i\dot{F}=[F,\ H]. \tag{1.27}$$

Перестановочные соотношения для координатных функций $f(\mathbf{x})$ (рассматриваемых как операторы) и оператора импульса $\mathbf{p}$:

$$[f(\mathbf{x}),\ \mathbf{p}]=i\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}f(\mathbf{x}),\quad \mathbf{p}=-i\,\mathrm{grad}-\frac{e}{c}\mathbf{A}, \tag{1.28}$$

$$[f(\mathbf{x}),\ p_x^2]=2i\frac{\partial f}{\partial x}p_x+\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}. \tag{1.29}$$

Спиновые матрицы:

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \tag{1.30}$$

$$\sigma^+=\begin{pmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma^-=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 2 & 0\end{pmatrix}. \tag{1.31}$$

Для гармонического осциллятора:

$$\left.\begin{aligned}\langle n|x|n+1\rangle&=(2m\omega)^{-1/2}(n+1)^{1/2},\\ \langle n|p|n+1\rangle&=-i(m\omega/2)^{1/2}(n+1)^{1/2}.\end{aligned}\right\} \tag{1.32}$$

Свойства шпуров произведений операторов:

$$\mathrm{Sp}\{A[B,\ C]\}=\mathrm{Sp}\{[A,\ B]C\},\quad \mathrm{Sp}\{ABC\}=\mathrm{Sp}\{CAB\}. \tag{1.33}$$

Полезное соотношение из теории функций комплексного переменного:

$$\lim_{s\to+0}\frac{1}{x\pm is}=\mathcal{P}\frac{1}{x}\mp\pi i\delta(x), \tag{1.34}$$

где $\mathcal{P}$ — символ главного значения.

Вероятность перехода:

$$W(n\to m)=2\pi|\langle m|H'|n\rangle|^2\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_n). \tag{1.35}$$

Плотность уровней на единицу длины интервала энергий в случае свободного электрона:

$$\rho_E=\frac{\Omega}{2\pi^2}(2m)^{3/2}\varepsilon^{1/2}. \tag{1.36}$$

Свойства δ-функции:

$$\int dx\, f(x)\,\delta(ax-y)=\frac{1}{|a|}f\left(\frac{y}{a}\right), \tag{1.37}$$

$$\delta(g(x))=\sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|}\,\delta(x-x_i), \tag{1.38}$$

где x_i — корни уравнения $g(x)=0$, и, наконец,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ixy}=2\pi\delta(y). \tag{1.39}$$

Для невырожденных состояний:

$$\left.\begin{aligned} |m\rangle^{(1)} &= |m\rangle+\sum_k{}' \frac{|k\rangle\langle k|H'|m\rangle}{\varepsilon_m-\varepsilon_k}, \\ \varepsilon_m^{(2)} &= \varepsilon_m^{(0)}+\langle m|H'|m\rangle+\sum_{k'}{}' \frac{|\langle m|H'|k\rangle|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_k} \end{aligned}\right\} \tag{1.40}$$

Тождество для операторов:

$$[AB,\ C]=A[B,\ C]+[A,\ C]B. \tag{1.41}$$

Общая теория возмущений, зависящих от времени

Рассмотрим гамильтониан

$$H=H_0+V, \tag{1.42}$$

где V — назовем возмущением. Даже когда H_0 и V не зависят от времени, наиболее важные результаты теории возмущений более естественно получаются из рассмотрения общего случая (с учетом зависимости от времени), чем из обычной теории не зависящих от времени возмущений. Предположим, что собственную функцию Φ оператора H, соответствующую состоянию наинизшей энергии, можно получить из невозмущенной собственной функции Φ_0 оператора H_0 при адиабатическом включении взаимодействия V в интервале времени от $-\infty$ до 0. Это предположение не обязательно справедливо во всех случаях, и, в частности, оно неверно, если возмущение приводит к возникновению одного или нескольких связанных состояний ниже непрерывного спектра. Такое предположение называют *адиабатической гипотезой*. Для собственных функций оператора H мы будем пользоваться (только здесь) обозначением $|)$, а для собственных функций оператора H_0 — обозначением $|\rangle$. Тогда невозмущенное основное состояние будет описываться функцией $|0\rangle$, а «точное» основное состояние (возмущенное) — функцией $|0)$. Те же обозначения будут применяться лишь в гл. 6 для аналогичной ситуации.

Теорема. Если энергия E_0 определяется уравнением

$$H_0|0\rangle = E_0|0\rangle, \tag{1.43}$$

а ее изменение ΔE — уравнением

$$(H_0+V)\,|0) = (E_0+\Delta E)\,|0), \tag{1.44}$$

то точное смещение энергетического уровня основного состояния, вызванное возмущением, выражается формулой

$$\boxed{\Delta E = \frac{\langle 0\,|\,V\,|\,0)}{\langle 0\,|\,0)}\,.} \tag{1.45}$$

Доказательство. Результат (1.45) получится в результате вычитания

$$\langle 0|H_0|0) = E_0\langle 0|0) \tag{1.46}$$

из

$$\langle 0|H_0+V|0) = (E_0+\Delta E)\,\langle 0|0). \tag{1.47}$$

Действительно, сразу находим

$$\langle 0|V|0) = \Delta E\langle 0|0), \tag{1.48}$$

что и следовало доказать.

Теперь приступим к вычислению $|0)$. Запишем возмущение V в следующем виде:

$$\lim_{s\to+0} e^{-s|t|}V, \qquad s>0. \tag{1.49}$$

Такая запись в явном виде отражает процесс адиабатического включения возмущения, при котором взаимодействие медленно включается в интервале времени от $t=-\infty$ до $t=0$; в интервале от $t=0$ до $t=\infty$ взаимодействие медленно выключается. В дальнейшем, говоря о возмущении, мы всегда будем подразумевать осуществление предельного перехода $s\to+0$.

Мы будем пользоваться оператором возмущения в представлении взаимодействия

$$V(t) = \exp[iH_0t]\,V\exp[-iH_0t]\exp[-s|t|], \tag{1.50}$$

и соответственно зависящим от времени уравнением Шредингера вида

$$i\,\frac{\partial\Phi}{\partial t} = V(t)\,\Phi, \tag{1.51}$$

с граничным условием $\Phi(-\infty)=\Phi_0$. В представлении взаимодействия

$$\Phi(t)=\exp(iH_0t)\,\Phi_s(t), \tag{1.52}$$

где Φ_s — волновая функция в шредингеровском представлении Легко убедиться в том, что уравнение (1.51) эквивалентно обычному уравнению Шредингера. Составим выражение

$$i\dot{\Phi}=-H_0\exp(iH_0t)\,\Phi_s+i\exp(iH_0t)\,\dot{\Phi}_s=V\exp(iH_0t)\,\Phi_s. \tag{1.53}$$

Тогда

$$i\dot{\Phi}_s=(H_0+V)\,\Phi_s, \tag{1.54}$$

т. е. получается обычное уравнение Шредингера.

Введем оператор $U(t, t')$, определив его соотношением

$$\boxed{U(t, t')\equiv\sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_{t'}^{t}\ldots\int_{t'}^{t_{n-2}}\int_{t'}^{t_{n-1}}dt_1\ldots dt_n V(t_1)\ldots V(t_n),} \tag{1.55}$$

которое можно также переписать в виде

$$U(t, t')\equiv\sum_{n}\frac{(-i)^n}{n!}\int_{t'}^{t}\ldots\int_{t'}^{t}dt_1\ldots dt_n P\{V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)\}, \tag{1.56}$$

где P — оператор упорядочения по времени, т. е. хронологический оператор Дайсона, который располагает все величины, стоящие справа от него, в последовательности, соответствующей возрастанию значений времени в их аргументах. Здесь оператор $V(t)$ записан в представлении взаимодействия. Оператор $U(t, t')$ можно также представить в ином виде, а именно

$$U(t, t')\equiv P\left\{\exp\left[-i\int_{t'}^{t}dt\,V(t)\right]\right\}. \tag{1.57}$$

Теорема. Если мы составили оператор $U(t, t')$ так, как он был определен выше, то точная волновая функция основного состояния $|0)$ определяется через волновую функцию невозмущенного основного состояния $|0\rangle$ следующим образом:

$$\boxed{|0)=\frac{U(0, -\infty)\,|0\rangle}{\langle 0|\,U(0, -\infty)\,|0\rangle}\,.} \tag{1.58}$$

При этом все волновые функции записаны в представлении взаимодействия.

Доказательство. Если имеет место формула (1.58), то уравнение

$$\Phi_s(t) = e^{-iH_0t} U(t, -\infty)\Phi_0 \tag{1.59}$$

должно быть эквивалентно уравнению Шредингера в обычной записи (1.54). Перепишем (1.59), воспользовавшись (1.57), и затем для $V(t)$ — представлением (1.50); тогда

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Phi_s(t) = H_0\Phi_s(t) + \exp(-iH_0t)V(t)U\Phi_0 =$$
$$= (H_0 + V\exp(-s|t|))\exp(-iH_0t)U(t, -\infty)\Phi_0 = H\Phi_s(t), \tag{1.60}$$

что и требовалось доказать. Итак, при $t=0$ имеем $\Phi_s = U(0, -\infty)\Phi_0$. Знаменатель в (1.58) мы получим, нормируя на единицу смешанное произведение

$$\langle 0|0\rangle = 1. \tag{1.61}$$

Связь полученных результатов с теорией возмущений, не зависящих от времени. Из формул (1.50) и (1.56) получим член наинизшего порядка в выражении для матричного элемента $\langle f|U(0, -\infty)|0\rangle$.

Поскольку

$$U(0, -\infty) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!}\int_{-\infty}^{0}\dots\int_{-\infty}^{0} dt_1\dots dt_n P\{V(t_1)\dots V(t_n)\}, \tag{1.62}$$

то

$$\langle f|U_1(0, -\infty)|0\rangle = -i\int_{-\infty}^{0} dt_1 \langle f|V|0\rangle \exp[i(E_f - E_0 - is)t_1] =$$
$$= -\frac{\langle f|V|0\rangle}{E_f - E_0 - is}, \tag{1.63}$$

т. е. имеем точно то же выражение, что и выражение, получающееся из обычной теории возмущений, не зависящих от времени. Аналогичным путем находим член второго порядка:

$$\langle f|U_2(0, -\infty)|0\rangle = (-i)^2\int_{-\infty}^{0} dt_1\int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \times$$
$$\times \sum_p \langle f|V|p\rangle \exp[i(E_f - E_p - is)t_1]\langle p|V|0\rangle \exp[i(E_p - E_0 - is)t_2] =$$

$$= i \int_{-\infty}^{0} dt_1 \sum_p \langle f | V | p \rangle \exp [i (E_f - E_p - is) t_1] \langle p | V | 0 \rangle \times$$
$$\times \frac{\exp [i (E_p - E_0 - is) t_1]}{E_p - E_0 - is} = \sum_p \frac{\langle f | V | p \rangle \langle p | V | 0 \rangle}{(E_f - E_0 - 2is)(E_p - E_0 - is)}. \qquad (1.64)$$

Важное преимущество формулировки теории возмущений, зависящих от времени, состоит в том, что известное соотношение

$$\lim_{s \to +0} \frac{1}{x - is} = \mathscr{P} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x), \qquad (1.65)$$

где $\mathscr{P}$ — символ главного значения, сразу указывает нам способ нахождения полюсов, которые получаются из обычной теории возмущений довольно сложным путем.

Интересные следствия можно получить также из анализа диаграмм для вкладов в оператор U (этот вопрос затронут в гл. 6).

Другое важное преимущество теории возмущений, зависящих от времени, состоит в том, что она позволяет сразу выделить ту часть рассматриваемой проблемы, которая связана с отдельными частями системы. В обычной же теории возмущений факторизацию можно осуществить лишь в конце расчета. Пусть индексы a и b относятся к различным областям пространства, физически никак не связанным между собой. Предположим, что гамильтониан системы можно записать в виде

$$H = H_a^0 + H_b^0 + V_a + V_b. \qquad (1.66)$$

Составим оператор $U(0, -\infty)$ для этого случая, помня, что коммутаторы должны содержать δ_{ab}:

$$U(0, -\infty) = P \left\{ \exp \left[-i \int_{-\infty}^{0} dt V(t) \right] \right\} =$$
$$= P \left\{ \exp \left[-i \int_{-\infty}^{0} dt \exp (iH_a^0 t) \exp (iH_b^0 t) (V_a + V_b) \times \right. \right.$$
$$\left. \left. \times \exp (-iH_a^0 t) \exp (-iH_b^0 t) \right] \right\} =$$
$$= P \left\{ \exp \left[-i \int_{-\infty}^{0} dt \exp (iH_a^0 t) V_a \exp (-iH_a^0 t) \right] \times \right.$$
$$\left. \times \exp \left[-i \int_{-\infty}^{0} dt \exp (iH_b^0 t) V_b \exp (-iH_b^0 t) \right] \right\} =$$
$$= U_a(0, -\infty) U_b(0, -\infty). \qquad (1.67)$$

Этот результат очень полезен; он относится к числу тех, которые трудно получить в обычной теории возмущений.

ЗАДАЧИ

1.1. Показать, что

$$\int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = 4\pi\left(\frac{\sin k_F r - k_F r\cos k_F r}{r^3}\right), \tag{1.68}$$

где интеграл берется по сфере $0 < k < k_F$.

1.2. Показать, что

$$\int d^3x e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} \frac{x_\mathbf{K}}{r^3} = \frac{4\pi i}{|\mathbf{K}|}, \tag{1.69}$$

где $x_\mathbf{K}$ — проекция $\mathbf{x}$ на $\mathbf{K}$.

1.3. Показать, что

$$\theta(t) = \lim_{s\to+0}\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\frac{e^{-ixt}}{x+is}, \tag{1.70}$$

где

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases} \tag{1.71}$$

1.4. а. Показать, что коммутатор

$$[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \mathbf{p}] = \mathbf{k}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}. \tag{1.72}$$

б. Показать, что

$$[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, p^2] = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + k^2). \tag{1.73}$$