и вместо (42,2) пишем

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} V_{fi}(t)\,dt = -F_{fi}\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t+\lambda t}}{\hbar(\omega_{fi}-\omega-i\lambda)}. \tag{42,7}$$

Отсюда

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\frac{e^{2\lambda t}}{(\omega_{fi}-\omega)^2+\lambda^2}.$$

Вероятность же перехода в единицу времени определяется производной

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2 = 2\lambda\,|a_{fi}|^2.$$

Теперь замечаем, что имеет место формула

$$\lim_{\lambda\to 0}\frac{\lambda}{\pi(\alpha^2+\lambda^2)} = \delta(\alpha), \tag{42,8}$$

справедливая в том же смысле, что и (42,4). С ее помощью находим, переходя к пределу $\lambda \to 0$:

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2 \to \frac{2\pi}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\delta(\omega_{fi}-\omega),$$

и мы вновь возвращаемся к формуле (42,5).

§ 43. Переходы в непрерывном спектре

Одним из важнейших применений теории возмущений является вычисление вероятности перехода в непрерывном спектре под влиянием постоянного (не зависящего от времени) возмущения. Мы уже упоминали, что состояния непрерывного спектра практически всегда вырождены. Выбрав определенным образом совокупность невозмущенных волновых функций, соответствующих некоторому данному уровню энергии, мы можем поставить задачу следующим образом: известно, что в начальный момент времени система находилась в одном из этих состояний; требуется определить вероятность перехода в другое состояние той же энергии. Для переходов из начального состояния i в состояния в интервале между ν_f и $\nu_f + d\nu_f$ имеем непосредственно из (42,5) (полагая $\omega = 0$ и меняя обозначения)

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\delta(E_f - E_i)\,d\nu_f. \tag{43,1}$$

Это выражение, как и следовало, отлично от нуля лишь при $E_f = E_i$: под влиянием постоянного возмущения переходы происходят лишь между состояниями с одинаковой энергией. Необходимо отметить, что для переходов из состояний непрерывного спектра величина dw_{fi} не может рассматриваться непосредственно как вероятность перехода; она даже не обладает соответствующей размерностью (1/c). Выражение (43,1) изображает число переходов в единицу времени, причем его размерность зависит от выбранного способа нормировки волновых функций непрерывного спектра [1]).

Вычислим возмущенную волновую функцию, которая до начала действия возмущения совпадает с исходной невозмущенной функцией $\psi_i^{(0)}$. Следуя указанному в конце предыдущего параграфа способу, будем рассматривать возмущение как включаемое адиабатически по закону $e^{\lambda t}$ с $\lambda \to 0$. Согласно формуле (42,7) (в которой полагаем $\omega = 0$ и меняем обозначения) имеем

$$a_{fi}^{(1)} = V_{fi}\frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)\,t + \lambda t\right\}}{E_i - E_f + i\lambda}. \tag{43,2}$$

Возмущенная волновая функция имеет вид

$$\Psi_i = \Psi_i^{(0)} + \int a_{fi}^{(1)}\Psi_f^{(0)}\,d\nu_f,$$

где интегрирование производится по всему непрерывному спектру [2]). Подставив сюда (43,2), находим

$$\Psi_i = \left[\psi_i^{(0)} + \int V_{fi}\psi_f^{(0)}\frac{d\nu_f}{E_i - E_f + i0}\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_i t\right). \tag{43,3}$$

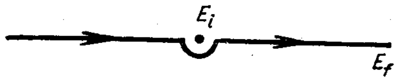
В пределе $\lambda \to 0$ множитель $e^{\lambda t}$ заменен единицей. Член же $+i0$ (означающий предел $i\lambda$ при стремлении к нулю положительной величины λ) определяет способ интегрирования по переменной E_f, дифференциал которой входит как множитель в $d\nu_f$ (наряду с дифференциалами других величин, характеризующих состояния непрерывного спектра). Без члена $i\lambda$ подынтегральное выражение в (43,3) имело бы полюс при $E_f = E_i$, вблизи которого интеграл расходился бы. Член $i\lambda$ смещает этот полюс в верхнюю полуплоскость комплексного переменного E_f. После перехода к пределу $\lambda \to 0$ полюс снова возвращается на вещественную ось,

---

[1]) К категории явлений, обнимаемых излагаемой теорией, относятся, например, различные столкновения; при этом система в начальном и конечном состояниях представляет собой совокупность свободных частиц, а роль возмущения играет взаимодействие между ними. При надлежащей нормировке волновых функций величина (43,1) может оказаться при этом сечением столкновений (см. § 126).

[2]) Если имеется также и дискретный спектр, то в этой и следующих формулах к интегралу надо добавить соответствующую сумму по состояниям дискретного спектра.

но мы знаем теперь, что путь интегрирования должен обходить полюс снизу:



(43,4)

Временной множитель в (43,3) показывает, что эта функция относится, как и следовало, к той же энергии E_i, что и начальная невозмущенная функция. Другими словами, функция

$$\psi_i = \psi_i^{(0)} + \int \frac{V_{fi}}{E_i - E_f + i0}\,\psi_f^{(0)}\,d\nu_f \tag{43,5}$$

удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\,\psi_i = E_i\psi_i.$$

В связи с этим естественно, что это выражение в точности соответствует формуле (38,8) [1]).

Произведенные выше вычисления соответствуют первому приближению теории возмущений. Нетрудно вычислить и второе приближение. Для этого надо вывести формулу следующего приближения для Ψ_i, что легко сделать, воспользовавшись методом § 38 (зная теперь способ, которым должны браться «расходящиеся» интегралы). Простое вычисление приводит к формуле

$$\Psi_i = \left\{\psi_i^{(0)} + \int\left[V_{fi} + \int \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu + i0}\,d\nu\right]\frac{\psi_f^{(0)}\,d\nu_f}{E_i - E_f + i0}\right\} e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}.$$

Сравнивая это выражение с формулой (43,3), мы можем написать соответствующую формулу для вероятности (точнее, для числа переходов) непосредственно по аналогии с (43,1):

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi} + \int \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu + i0}\,d\nu\right|^2 \delta(E_i - E_f)\,d\nu_f. \tag{43,6}$$

Может оказаться, что матричный элемент V_{fi} для рассматриваемого перехода обращается в нуль. Тогда эффект первого приближения вообще отсутствует и выражение (43,6) сводится к

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\int \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu}\,d\nu\right|^2 \delta(E_f - E_i)\,d\nu_f \tag{43,7}$$

при применениях этой формулы точка $E_\nu = E_i$ не является обычно полюсом подынтегрального выражения; тогда способ

[1]) Способ взятия интеграла в (43,5) можно установить, исходя из требования, чтобы асимптотическое выражение для ψ_i на больших расстояниях содержало лишь расходящуюся, но не сходящуюся волну (см. § 136).

интегрирования по dE_ν вообще не существен и его можно производить непосредственно вдоль вещественной оси).

О состояниях ν, для которых $V_{f\nu}$ и $V_{\nu i}$ отличны от нуля, часто говорят, как о *промежуточных* для перехода $i \to f$. Наглядно можно сказать, что этот переход осуществляется как бы в два этапа: $i \to \nu$ и $\nu \to f$ (разумеется, однако, такому описанию не следует придавать буквального смысла). Может оказаться, что переход $i \to f$ возможен не через одно, а лишь через несколько последовательных промежуточных состояний. Формула (43,7) непосредственно обобщается на такие случаи. Так, если необходимы два промежуточных состояния, то

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \frac{V_{f\nu'} V_{\nu'\nu} V_{\nu i}}{(E_i - E_{\nu'})(E_i - E_\nu)} d\nu\, d\nu' \right|^2 \delta(E_f - E_i)\, d\nu_f. \qquad (43,8)$$

Наконец, для уяснения математического смысла интегралов взятых по пути вида (43,4), укажем формулу

$$\int \frac{f(x)\, dx}{x - a - i0} = \fint \frac{f(x)\, dx}{x - a} + i\pi f(a), \qquad (43,9)$$

где интегрирование производится по отрезку вещественной оси, включающему в себя точку $x = a$. Действительно, производя обход полюса $x = a$ по полуокружности (радиуса ρ), найдем, что весь интеграл равен сумме интегралов по вещественной оси от нижнего предела до $a - \rho$ и от $a + \rho$ до верхнего предела и (умноженного на $i\pi$) вычета подынтегрального выражения в полюсе. В пределе $\rho \to 0$ интегралы по вещественной оси складываются в интеграл по всему отрезку, понимаемый в смысле главного значения (что и отмечено перечеркнутым знаком интегрирования), и мы приходим к (43,9). Эту формулу записывают также и в символическом виде

$$\frac{1}{x - a - i0} = P\, \frac{1}{x - a} + i\pi\delta(x - a); \qquad (43,10)$$

символ P означает, что при интегрировании функции $f(x)/(x - a)$ должно быть взято главное значение интеграла.

§ 44. Соотношение неопределенности для энергии

Рассмотрим систему, состоящую из двух слабо взаимодействующих частей. Предположим, что в некоторый момент времени известно, что эти части обладают определенными значениями энергии, которые мы обозначим соответственно как E и ε. Пусть через некоторый интервал времени Δt производится снова измерение энергии; оно дает некоторые значения E', ε', вообще говоря, отличные от E, ε. Легко определить, каков порядок величины