

Раздел I. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 2. Определение и вычисление по теории возмущений вероятностей переходов

Приведенные выше рассуждения можно использовать, в частности, тогда, когда $H^{(0)}$ не зависит от времени. В этом случае оператор эволюции $U^{(0)}(t, t_0)$ имеет простой вид

$$U^{(0)}(t, t_0) = \exp[-iH^{(0)}(t - t_0)/\hbar]. \quad (19)$$

Предположим, что собственные значения $H^{(0)}$ известны и, если не оговорено противное, спектр $H^{(0)}$ будем считать для простоты дискретным. Обозначим $|a\rangle, |b\rangle, \dots, |k\rangle \dots$ полный набор собственных векторов оператора $H^{(0)}$, а $E_a^0, E_b^0, \dots, E_k^0, \dots$ — отвечающие им собственные значения. Будем использовать также обозначения

$$\omega_{kl} = (E_k^0 - E_l^0)/\hbar, \quad (20)$$

$$V_{kl}(t) = \langle k | V(t) | l \rangle, \quad (21)$$

где ω_{kl} — частота Бора, отвечающая переходу $l \rightarrow k$, а $V_{kl}(t)$ — соответствующий матричный элемент $V(t)$.

Предположим, что в момент времени t_0 система находилась в состоянии, собственном для $H^{(0)}$, например, в состоянии a . Мы хотим вычислить вероятность того, что при измерении в момент времени t система будет находиться в другом собственном состоянии оператора $H^{(0)}$, например, в состоянии b . Эту величину, которую, по определению, будем называть *вероятностью перехода из a в b*, обозначим через $W_{a \rightarrow b}$. Ясно, что

$$W_{a \rightarrow b} = |\langle b | U(t, t_0) | a \rangle|^2. \quad (22)$$

Если бы V равнялось нулю, то вектор, представляющий состояние системы в момент времени t , отличался бы от вектора начального состояния $|a\rangle$ только фазовым множителем $\exp[-iE_a^0(t - t_0)/\hbar]$ и вероятность перехода $W_{a \rightarrow b}$ была бы равна нулю. Разложение амплитуды вероятности $\langle b | U(t, t_0) | a \rangle$ в ряд по степеням V получается подстановкой вместо $U(t, t_0)$ разложения (17)

$$\langle b | U(t, t_0) | a \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle b | U^{(n)} | a \rangle, \quad (23)$$

где $U^{(n)}$ определяется формулой (18).

В представлении $\{H^{(0)}\}$ вклады низших порядков в амплитуду равны

$$\langle b | U^{(1)} | a \rangle = -i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t d\tau [e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar} V_{ba}(\tau) e^{-iE_a^0(\tau-t_0)/\hbar}], \quad (24^1)$$

$$\begin{aligned} \langle b | U^{(2)} | a \rangle &= \\ &= (i\hbar)^2 \sum_k \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' [e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar} V_{bk}(\tau) e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar} \times \\ &\quad \times V_{ka}(\tau') e^{-iE_a^0(\tau'-t_0)/\hbar}], \end{aligned} \quad (24^2)$$

$$\begin{aligned} \langle b | U^{(3)} | a \rangle &= \\ &= (i\hbar)^3 \sum_k \sum_l \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' \int_{t_0}^{\tau'} d\tau'' [e^{-iE_b^0(t-\tau)/\hbar} V_{bk}(\tau) \times \\ &\quad \times e^{-iE_k^0(\tau-\tau')/\hbar} V_{kl}(\tau') e^{-iE_l^0(\tau'-\tau'')/\hbar} V_{la}(\tau'') e^{-iE_a^0(\tau''-t_0)/\hbar}], \end{aligned} \quad (24^3)$$

В приведенных равенствах суммирование происходит по всем базисным векторам представления $\{H^{(0)}\}$.

Вклады различных порядков можно схематически изобразить посредством диаграмм рис. 10.

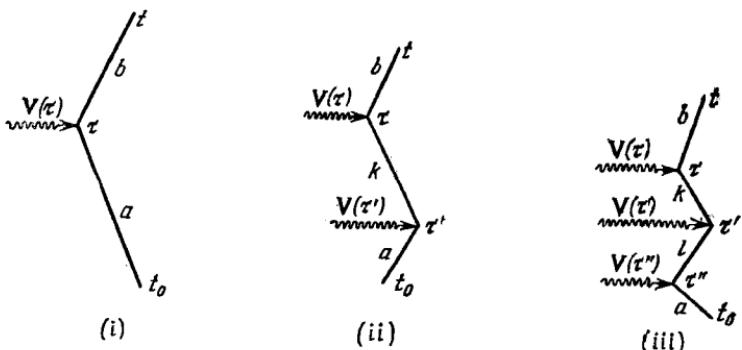


Рис. 10. Диаграммы, изображающие вклады различных порядков в амплитуду вероятности перехода из a в b : (i) первого порядка, (ii) второго порядка, (iii) третьего порядка.

Диаграмма (i) представляет вклад первого порядка или, более точно, произведение, стоящее в скобках в правой части (24¹). Непрерывная линия отвечает эволюции системы во времени. От t_0 до τ эволюция определяется невозмущенным гамильтонианом $H^{(0)}$ и система, следовательно, остается в состоянии a , вектор состояния умножается просто на множитель

$\exp[-iE_a^0(\tau - t_0)/\hbar]$. В момент времени τ система под действием возмущения переходит из a и b , что выражается матричным элементом перехода $V_{ba}(\tau)$. От τ до t эволюция вновь определяется $H^{(0)}$, и система остается в состоянии b , а вектор состояния умножается на $\exp[-iE_b^0(t - \tau)/\hbar]$. Следуя по диаграмме снизу вверх, получаем три множителя, которые расположены в скобках справа налево. Вклад первого порядка получается после интегрирования этого произведения по τ .

Точно так же диаграмма (ii) представляет поправку второго порядка. Эволюция системы от t_0 до τ' определяется $H^{(0)}$, затем под влиянием $V(\tau')$ система переходит из состояния a в промежуточное состояние k , эволюция от τ' до t определяется $H^{(0)}$, в момент времени τ под влиянием $V(\tau)$ система переходит из состояния k в конечное состояние b , после чего ее развитие во времени от τ до t вновь определяется оператором $H^{(0)}$. Таким образом, мы получаем пять множителей, расположенных в скобках правой части (24²) справа налево. Вклад второго порядка получается интегрированием по τ' и τ ($t_0 < \tau' < \tau < t$) и суммированием по всем промежуточным состояниям. Имея в виду такой способ описания развития во времени переходов второго порядка, состояние k часто называют *виртуальным состоянием*, в отличие от состояний a и b , и говорят, что переход второго порядка происходит через виртуальное состояние.

Таким же образом, переходы третьего порядка, представленные диаграммой (iii), происходят через два виртуальных состояния k и l . Возмущающий потенциал появляется последовательно три раза в моменты времени τ'' , τ' и τ , переводя систему из состояния a в l , из l в k и из k в b . Аналогично переходы n -го порядка происходят через $(n-1)$ виртуальных состояний.

Взяв n первых членов разложения (23), получаем искомую амплитуду вероятности с точностью до порядка n . Квадрат модуля этой амплитуды дает, по определению, вероятность перехода¹⁾ порядка n :

$$W_{a \rightarrow b} \approx |\langle b | U^{(1)} | a \rangle + \langle b | U^{(2)} | a \rangle + \dots + \langle b | U^{(n)} | a \rangle|^2.$$

В частности, вероятность перехода в первом порядке дается формулой

$$W_{a \rightarrow b} \approx |\langle b | U^{(1)} | a \rangle|^2 = \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^t e^{i\omega_b a \tau} V_{ba}(\tau) d\tau \right|^2. \quad (25)$$

¹⁾ Полученное выражение представляет разложение $W_{a \rightarrow b}$ по степеням V по меньшей мере с точностью до $(n+1)$ -го порядка. Полученная точность будет выше $(n+1)$ -го порядка, если $\langle b | U^{(1)} | a \rangle = 0$.

Отметим, что в этом приближении

$$W_{a \rightarrow b} \approx W_{b \rightarrow a}.$$

Последнее соотношение, вообще говоря, перестает выполняться в высших порядках. Его не следует смешивать со свойством микрообратимости, т. е. с равенством $W_{Kb \rightarrow Ka} = W_{a \rightarrow b}$, которое выполняется только, когда гамильтониан инвариантен относительно обращения времени; в этом случае равенство выполняется во всех порядках (§ XV. 20).

§ 3. Полуклассическая теория кулоновского возбуждения ядер

В качестве приложения рассмотрим кулоновское возбуждение ядра заряженной частицей, например, протоном¹⁾.

Предположим, что монохроматический пучок протонов сталкивается с ядерной мишенью. В результате столкновений ядра мишени совершают переходы из основного состояния α в возбужденные состояния. Вычислим сечение перехода в данное возбужденное состояние β .

Обозначим Ze заряд ядра, R — его радиус, J_α и J_β , E_α и E_β — спины и энергии состояний α и β соответственно. Имеется $(2J_\alpha + 1)$ линейно независимых состояний α , которые можно отличать друг от друга по величине компоненты M_α спина по направлению данной оси квантования; этим состояниям соответствуют векторы $|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$. Если H_N — гамильтониан ядра, то

$$\begin{aligned} H_N |\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle &= E_\alpha |\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle \quad (M_\alpha = -J_\alpha, \dots, J_\alpha), \\ H_N |\beta J_\beta M_\beta\rangle &= E_\beta |\beta J_\beta M_\beta\rangle \quad (M_\beta = -J_\beta, \dots, J_\beta). \end{aligned}$$

Обозначим $E = Mv^2/2$ энергию столкновения в системе центра масс протона и ядра, $\Delta E = E_\beta - E_\alpha$ — энергию возбуждения ядра, Ω_α — направление налетающего протона, Ω_β — направление неупругого рассеянного протона и θ — угол между этими направлениями. Нам нужно вычислить величину

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\Omega_\alpha M_\alpha \rightarrow \Omega_\beta M_\beta},$$

т. е. сечение процесса, в котором протон неупруго рассеивается в направлении Ω_β , а ядро переходит из состояния $(\alpha J_\alpha M_\alpha)$ в состояние $(\beta J_\beta M_\beta)$.

Рассмотрим взаимодействие протона и ядра. Для больших расстояний r между протоном и ядром ($r \gg R$) оно сводится

¹⁾ О кулоновском возбуждении и его приложении к изучению структуры ядра см.: Adler *et al.* Rev. Mod. Phys. 22, 432 (1956); приведенное здесь полуклассическое рассмотрение следует работе К. А. Тер-Мартirosяна. ЖЭТФ, 28 284 (1952).

к чисто кулоновскому взаимодействию Ze^2/r . С уменьшением r вид потенциала начинает отличаться от этой простой формы. Пока $r > R$, отличие имеет чисто электромагнитное происхождение и сводится в основном к разности между точным кулоновским взаимодействием и членом Ze^2/r

$$V = e^2 \sum_{i=1}^Z \left(\frac{1}{|r - r_i|} - \frac{1}{r} \right), \quad (26)$$

где r_i — координата i -го протона в ядре.

Как только протон «проникнет» в ядро ($r < R$), особо важную роль приобретут ядерные взаимодействия, которые будут значительно превышать электромагнитные взаимодействия.

Если энергия E достаточно мала, то кулоновское отталкивание Ze^2/r не позволяет протону приблизиться к ядру и, следовательно, остается доминирующим взаимодействием в течение всего процесса столкновения. Движение протона и ядра определяется тогда в первом приближении гамильтонианом

$$H^{(0)} = H_N + \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{Ze^2}{r} \right),$$

где $p^2/2M$ — кинетическая энергия протона. Движения протона и ядра полностью разделяются. Последнее остается в своем основном состоянии, в то время как протон упруго рассеивается, и дифференциальное сечение дается формулой Резерфорда (VI. 29)

$$d\sigma_R/d\Omega = \frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2} \theta,$$

где a — половина наименьшего расстояния между протоном и ядром при классическом рассмотрении их движения

$$a = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{E}. \quad (27)$$

Данное приближение оправдано, если

$$a \gg R. \quad (28)$$

Дополнительно будем предполагать, что

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1, \quad (29)$$

$$\gamma \gg 1, \quad (30)$$

где

$$\gamma \equiv \frac{a}{\lambda} = \frac{Ze^2}{\hbar v}. \quad (31)$$

Из-за отличия взаимодействия протона и ядра от Ze^2/r могут произойти неупругие столкновения. Так как по условию (28)

протон лишь незначительно «проникает» в ядро, отличие сводится в основном к члену V . В силу условия (30) кулоновское рассеяние можно рассматривать классически (§ VI.5). Движение протона есть движение волнового пакета пренебрежимо малых размеров, центр $\mathbf{r}(t)$ которого удовлетворяет соответствующим классическим уравнениям движения. В данном неупругом столкновении ($\Omega_\alpha M_\alpha \rightarrow \Omega_\beta M_\beta$) движение протона также можно рассматривать классически. Если пренебречь членом V , то решение классических уравнений движения известно. При этом требуется, чтобы можно было также пренебречь энергией ΔE , переданной в течение столкновения от протона ядру. Такое приближение оправдано, если выполнено условие (29). Так как траектория протона $\mathbf{r}(t)$ определена, V становится зависящим от времени возмущением, действующим на динамические переменные ядра

$$V(t) = e^2 \sum_{i=1}^z \left(\frac{1}{|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_i|} - \frac{1}{r(t)} \right)$$

и может вызвать переход $(\alpha J_\alpha M_\alpha) \rightarrow (\beta J_\beta M_\beta)$. Поскольку вероятность перехода $W_{\alpha \rightarrow \beta}$ мала (*a posteriori* можно оправдать, что $W_{\alpha \rightarrow \beta} \ll 1$), то достаточно ограничиться приближением первого порядка. Формула (25) дает

$$W_{\alpha \rightarrow \beta} = \hbar^{-2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\Delta E)t/\hbar} \langle \beta J_\beta M_\beta | V(t) | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle dt \right|^2. \quad (32)$$

Искомое сечение равно произведению этой вероятности на сечение Резерфорда

$$d\sigma|_{\Omega_\alpha M_\alpha \rightarrow \Omega_\beta M_\beta} = \left(\frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2} \theta \right) W_{\alpha \rightarrow \beta} d\Omega. \quad (33)$$

Остается вычислить $W_{\alpha \rightarrow \beta}$. Мы ограничимся только тем, что приведем схему вычислений. Обозначим (\mathbf{r}_i, Ω_i) и (\mathbf{r}, Ω) полярные координаты векторов \mathbf{r}_i и $\mathbf{r}(t)$ соответственно; (\mathbf{r}, Ω) зависят от t . Если разложить $|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_i|^{-1}$ по сферическим функциям (ур. (B. 99)), то получим

$$V(t) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Q_l^m T_l^{-m}, \quad (34)$$

где

$$Q_l^m = \sum_{i=1}^z e r_i^l Y_l^m(\Omega_i), \quad (35)$$

$$T_l^m(t) = \frac{4\pi Ze}{2l+1} \frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}}. \quad (36)$$

Разложение справедливо только при $r_i < r$, что в нашем случае всегда выполняется, поскольку протон не «проникает» в ядро. Подставляя разложение (34) в формулу (32), получаем

$$W_{\alpha \rightarrow \beta} = \left| \sum_{lm} (-1)^m S_l^{-m} \langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle \right|^2, \quad (37)$$

$$S_l^m = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\Delta E)t/\hbar} T_l^m(t) dt. \quad (38)$$

Коэффициенты S_l^m зависят только от классической траектории протона и могут быть найдены численным интегрированием.

Операторы Q_l^m ($m = -l, \dots, +l$) есть стандартные компоненты электрического 2^l -поляного момента $\mathbf{Q}^{(l)}$ (см. § XIII. 33). Следовательно, в формуле (37) отличны от нуля только те матричные элементы, которые удовлетворяют правилам отбора по моменту и четности

$$|J_\alpha - J_\beta| \leq l \leq J_\alpha + J_\beta, \quad m = M_\beta - M_\alpha, \quad (39)$$

$$\Pi_\alpha \Pi_\beta = (-1)^l$$

(Π_α, Π_β — четности состояний α и β соответственно). Кроме этого, согласно теореме Вигнера — Эккарта

$$\langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle = (2J_\beta + 1)^{-\frac{1}{2}} \langle J_\alpha l M_\alpha m | J_\beta M_\beta \rangle \langle \beta || \mathbf{Q}^{(l)} || \alpha \rangle.$$

В силу правил отбора (39) сумма в (37) ограничена конечным числом значений l определенной четности и только одним значением m . Грубая оценка показывает, что $\langle l+2 \rangle$ -вклад составляет порядка $(R/\alpha)^2$ от $\langle l \rangle$ -вклада. Таким образом, можно оставить только член, отвечающий наименьшему значению l , допустимому правилами отбора: либо $|J_\alpha - J_\beta|$, либо $|J_\alpha - J_\beta| + 1$. Обозначив это значение l_0 , имеем

$$W_{\alpha \rightarrow \beta} \approx \frac{\langle J_\alpha l_0 M_\alpha m | J_\beta M_\beta \rangle^2}{(2J_\beta + 1)} |S_{l_0}^{-m}|^2 |\langle \beta || \mathbf{Q}^{(l_0)} || \alpha \rangle|^2 \quad (m = M_\beta - M_\alpha).$$

Подставляя это выражение в формулу (33), получаем теоретическое значение для сечения, которое можно сравнить с экспериментальными данными.

В эксперименте, где ядра мишени не ориентированы и не наблюдается ориентация возбужденных ядер, измеряемое сечение получается усреднением определенного выше сечения по $2J_\alpha + 1$ возможным значениям M_α и суммированием по $2J_\beta + 1$ возможным значениям M_β . Принимая во внимание соотношения

ортогональности коэффициентов Клебша — Гордана, получаем

$$\frac{d\sigma_{\alpha \rightarrow \beta}}{d\Omega} = \frac{a^2}{4(2J_\alpha + 1)(2J_\beta + 1)} |\langle \beta || \mathbf{Q}^{(l_0)} || \alpha \rangle|^2 \left[\sin^{-4} \frac{1}{2}\theta \sum_m |S_{l_0}^m|^2 \right].$$

Зависимость сечения от углов определяется выражением, стоящим в скобках, и должна быть найдена численно. Отметим, что начальное и конечное состояние ядра входит в эту формулу только посредством таких характеристик, как спин, четность и квадрат модуля матричного элемента электрического 2^{l_0} -польного момента $\langle \beta || \mathbf{Q}^{(l_0)} || \alpha \rangle$, который фигурирует как множитель пропорциональности. Следовательно, сравнение полученной формулы с экспериментом дает непосредственный способ определения этих характеристик структуры ядра.

§ 4. Случай, когда V не зависит от времени.

Сохранение невозмущенной энергии

Когда V не зависит явно от времени, интегрирование по времени в формулах (24) легко выполняется и полученные выражения обладают рядом интересных и простых свойств. Ограничимся обсуждением переходов первого порядка.

Возьмем $t_0 = 0$, тогда по формуле (25) имеем

$$W_{a \rightarrow b} \approx |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba})/\hbar^2, \quad (40)$$

где

$$f(t, \omega) \equiv \left| \int_0^t e^{i\omega\tau} d\tau \right|^2 = \\ = 2(1 - \cos \omega t)/\omega^2. \quad (41)$$

Зависимость функции $f(t, \omega)$ от ω изображена на рис. 11. Отметим очень острый пик

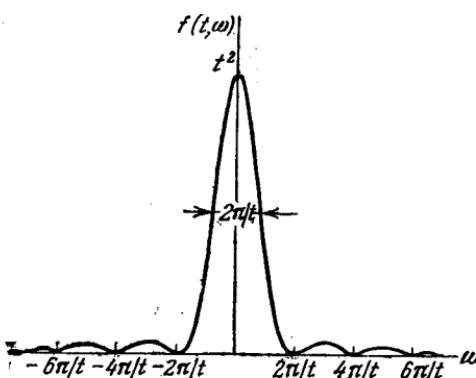


Рис. 11. Функция $f(t, \omega) = 2(1 - \cos \omega t)/\omega^2$.

в окрестности $\omega = 0$ ширины $2\pi/t$. Используя теорию вычетов, несложно показать, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t, \omega) d\omega = 2\pi t \quad (42)$$

и согласно (A.156)

$$f(t, \omega) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} 2\pi \delta(\omega). \quad (43)$$

Для данного значения t величина $W_{a \rightarrow b}$ имеет простую зависимость от конечного состояния b . С точностью до константы она равна квадрату модуля матричного элемента возмущения $\langle b | V | a \rangle$, умноженного на функцию $f(t, \omega_{ba})$, которая зависит от частоты перехода $a \rightarrow b$. Поскольку этот множитель имеет ярко выраженный пик ширины $2\pi/t$ в точке $\omega_{ba} = 0$, переход будет происходить в основном в состояния с энергией в интервале шириной

$$\delta E_0 \approx 2\pi\hbar/t,$$

центр которого совпадает с энергией начального состояния. Другими словами, *переходы сохраняют невозмущенную энергию с точностью до $2\pi\hbar/t$.*

Этот результат в некотором смысле аналогичен соотношению неопределенности для энергии — времени (§ IV. 10 и VIII. 13). Однако следует отметить, что здесь фигурирует энергия не всей системы, включая возмущение, а лишь $H^{(0)}$, и время t есть время, после которого производят измерение $H^{(0)}$, а не время, характеризующее эволюцию системы.

Для данного состояния b зависимость $W_{a \rightarrow b}$ от t также определяется множителем $f(t, \omega_{ba})$. Если при переходе невозмущенная энергия точно сохраняется ($\omega_{ba} = 0$), то этот множитель растет как t^2 . В противном случае он осциллирует между 0 и $4/\omega_{ba}^2$ с периодом $2\pi/\omega_{ba}$. Величина $W_{a \rightarrow b}$ осциллирует с тем же периодом около среднего значения $2|V_{ba}|^2/(E_b - E_a)^2$ и ведет себя как t^2 только для значений t , малых по сравнению с периодом.

Вместо того чтобы рассматривать переход в определенное состояние, можно рассматривать *переходы в группу состояний с близкими энергиями*. Именно так всегда поступают при исследовании переходов в состояния непрерывного спектра. Тогда, сделав некоторые дополнительные ограничения, которые в дальнейшем будут уточнены, можно определить *вероятность перехода в единицу времени*.

Итак, рассмотрим некоторую последовательность собственных векторов $H^{(0)}$, принадлежащих непрерывному спектру. Вектор из этой последовательности будем обозначать $|b\rangle$, а $E(b)$ — соответствующее собственное значение $H^{(0)}$.

При определении вероятностей перехода следует обратить внимание на нормировку векторов $|b\rangle$. Будем считать их нормированными так, что

$$\langle b | b' \rangle = \delta(b - b')/n(b),$$

где $n(b)$ — некоторая вещественная положительная функция. Проектор на состояния из области B переменной b есть (см.

§ VIII. 13)

$$P_B = \int_B |b\rangle n(b) db \langle b|.$$

Если выбрать $E(b)$ в качестве новой переменной и соответствующую область интегрирования обозначить $B(E)$, то получим

$$P_B = \int_{B(E)} |b\rangle \rho_b(E) dE \langle b|, \quad (44)$$

где

$$\rho_b(E) = n(b) \frac{db}{dE}, \quad (45)$$

эта величина известна как *плотность уровней* b при энергии E . Отметим, что $\rho_b(E)$ зависит от нормировки $|b\rangle$.

Вероятность перехода $W_{a \rightarrow b}$ в одно из состояний области B равна

$$W_{a \rightarrow B} = \langle a | U^\dagger(t, 0) P_B U(t, 0) | a \rangle = \int_{B(E)} W_{a \rightarrow b} \rho_b(E) dE. \quad (46)$$

Формула (46) получена после подстановки вместо P_B выражения (44) и использования равенства

$$W_{a \rightarrow b} = |\langle b | U(t, 0) | a \rangle|^2. \quad (47)$$

Здесь $W_{a \rightarrow b}$ формально представляет вероятность перехода $a \rightarrow b$, определяемую уравнением (22). Все преобразования, относящиеся к вычислению этой величины, полностью обоснованы и в данном случае. В частности, подставляя (40) в правую часть (46), получаем вероятность перехода $W_{a \rightarrow B}$ в первом порядке по возмущению

$$W_{a \rightarrow B} \approx \frac{1}{\hbar^2} \int |V_{ba}|^2 \rho_b f(t, \omega_{ba}) dE, \quad (48)$$

где на зависимость от E величины $V_{ba} \equiv \langle b | V | a \rangle$ указывает параметр b .

В качестве конкретного примера рассмотрим переходы на уровни b , лежащие внутри интервала $(E_1 - 1/2\varepsilon, E_1 + 1/2\varepsilon)$, предполагая ε достаточно малым, чтобы V_{ba} и ρ_b были почти постоянны на этом интервале и их можно было вынести за знак интеграла. Предположим также, что t достаточно велико, так что ε много больше периода колебаний функции f

$$\varepsilon \gg 2\pi\hbar/t. \quad (49)$$

В этих предположениях интеграл в правой части формулы (48) легко вычисляется. Следует рассматривать два случая:

(i) Основной пик функции f лежит вне области интегрирования (переходы не сохраняют энергию). В этом случае можно

заменить f ее значением, усредненным по некоторым колебаниям, что дает не зависящее от времени выражение

$$W_{a \rightarrow b} \approx 2\epsilon \rho_b(E_1) |V_{ba}|^2 / (E_1 - E_a)^2.$$

(ii) Основной пик f лежит в области интегрирования (переходы, сохраняющие энергию). Тогда пик дает главный вклад в интеграл и расширение области интегрирования до всей оси ведет лишь к незначительным погрешностям, после чего получаем (ур. (42))

$$W_{a \rightarrow b} \approx 2\pi\hbar^{-1} |V_{ba}(E_a)|^2 \rho_b(E_a) t.$$

В силу неравенства (49) эта вероятность превосходит сумму всех остальных.

Определим вероятность перехода в единицу времени как

$$w_{a \rightarrow b} \equiv dW_{a \rightarrow b}/dt.$$

В соответствии с предыдущими результатами можно заключить, что эта величина исчезает для переходов, не сохраняющих энергию, а для сохраняющих энергию переходов она дается важной формулой

$$w_{a \rightarrow b} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ba}|^2 \rho_b. \quad (50)$$

В этой формуле матричный элемент $V_{ba} \equiv \langle b | V | a \rangle$ и плотность уровней ρ_b относятся к состояниям b , энергия которых равна энергии начального состояния.

Для справедливости формулы (50) величина t должна быть достаточно велика для того, чтобы было выполнено условие (49) и достаточно мала для того, чтобы было оправдано приближение первого порядка ($w_{a \rightarrow b} t \ll 1$).

Приведенное доказательство обладает тем преимуществом, что демонстрирует значение формулы (50) и условия, при которых она справедлива. Эту формулу можно получить совсем просто, заменив в правой части выражения (40) функцию f ее асимптотикой (43), что дает

$$W_{a \rightarrow b} \sim 2\pi\hbar^{-1} |V_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a) t, \quad (51)$$

и подставив это в определение $W_{a \rightarrow b}$ (ур. (46)).

§ 5. Приложение к вычислению сечений в борновском приближении

Используя формулу (50), можно вывести выражение для сечений рассеяния в так называемом *борновском приближении*, т. е. в первом порядке по потенциалу взаимодействия частицы и мишени. Рассуждения будут простыми, но не совсем строгими. Строгое доказательство этой формулы будет дано в главе XIX.

Рассмотрим простейший из возможных случаев — рассеяние частицы на потенциале $V(r)$. Последний рассматривается как возмущение гамильтониана свободной частицы

$$H = H^{(0)} + V(r), \quad H^{(0)} = p^2/2m.$$

Плоские волны e^{ikr} являются собственными состояниями $H^{(0)}$. Такие волны представляют состояния частицы с импульсом $p = \hbar k$ и нормированной на единицу плотностью вероятности. Будем обозначать соответствующие кет-векторы $|k\rangle$, они удовлетворяют соотношениям ортогональности и полноты

$$\langle k | k' \rangle = (2\pi)^3 \delta(k - k'), \quad \int |k\rangle \frac{dk}{(2\pi)^3} \langle k | = 1.$$

В пространстве векторов k плотность нормированных таким образом состояний постоянна и равна $(2\pi)^{-3}$: число состояний в интервале $(k, k + dk)$ равно $dk/(2\pi)^3$. Мы интересуемся состояниями с импульсом в определенном направлении Ω и обозначим, как и в предыдущем параграфе, их плотность $\rho(E)$ (ур. (45)) (*a priori* эта функция могла бы зависеть от Ω , однако ниже мы увидим, что это не так): $\rho(E) d\Omega dE$ — число состояний с импульсами в телесном угле $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ и энергией $E = p^2/2m$ в интервале $(E, E + dE)$. Тогда имеем

$$\rho(E) d\Omega dE = \frac{dk}{(2\pi)^3} = \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

используя равенство $dp = p^2 d\Omega dp$, получаем

$$\rho(E) dE = \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

и, следовательно,

$$\rho(E) = \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE} = \frac{mp}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (52)$$

Перейдем к вычислению сечения рассеяния в заданное направление Ω_b , монохроматического пучка энергии $E = mv_a^2/2$. Пусть $\hbar k_a$ — импульс налетающих частиц, а $\hbar k_b$ — импульс, соответствующий той же энергии, но в направлении Ω_b . Мы знаем, что вероятность в единицу времени $w_{a \rightarrow b} d\Omega$ системе перейти из начального состояния $|k_a\rangle$ в одно из состояний b с импульсом в телесном угле $(\Omega_b, \Omega_b + d\Omega)$ и энергией, близкой к E , дается в первом порядке формулой (50)

$$w_{a \rightarrow b} d\Omega \approx 2\pi\hbar^{-1} |\langle k_b | V | k_a \rangle|^2 \rho(E) d\Omega. \quad (53)$$

Пусть $d\sigma_{a \rightarrow b}/d\Omega$ будет дифференциальным сечением, тогда $\sigma_{a \rightarrow b}$ равно числу частиц, рассеянных в телесный угол $(\Omega_b, \Omega_b + d\Omega)$ за единицу времени при единичном падающем

потоке. Поскольку $|k_a\rangle$ отвечает волне со скоростью потока v_a , имеем

$$d\sigma_{a \rightarrow b} = w_{a \rightarrow b}/v_a.$$

Подставляя вместо $w_{a \rightarrow b}$ приближенное выражение (53), получаем

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} \approx \frac{2\pi}{\hbar v_a} |\langle k_b | V | k_a \rangle|^2 \rho_b(E), \quad (54)$$

где $\rho_b(E)$ — плотность конечных состояний (ур. (52)), а

$$\langle k_b | V | k_a \rangle = \int e^{i(k_a - k_b)r} V(r) dr$$

есть матричный элемент потенциала, ответственного за переход.

§ 6. Периодическое возмущение. Резонансы

Вероятность $W_{a \rightarrow b}$ в первом порядке по потенциальному (формула (25)) пропорциональна квадрату модуля преобразования Фурье частоты ω_{ba} функции $V_{ba}(t)$, где мы условились считать $V_{ba} = 0$ вне интервала (t_0, t) . Если V не зависит от t , то преобразование Фурье вычисляется элементарно и в результате, как мы видели, приходим к «сохранению невозмущенной энергии». Несложно провести гармонический анализ и в том случае, когда зависимость V от времени периодическая. Здесь возникает очень важное явление — *резонанс*.

Предположим, что V зависит от t по гармоническому закону с частотой ω . Так как V — эрмитов оператор, то его можно представить в виде

$$V = A e^{i\omega t} + A^\dagger e^{-i\omega t},$$

где A — некоторый оператор, не зависящий от времени. Вероятность перехода $W_{a \rightarrow b}$ в первом порядке равна (считаем $t_0 = 0$)

$$W_{a \rightarrow b} \approx \hbar^{-2} \left| \langle b | A | a \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba} + \omega)\tau} d\tau + \langle b | A^\dagger | a \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{ba} - \omega)\tau} d\tau \right|^2,$$

что можно сравнить с выражением (40).

Амплитуда перехода здесь состоит из двух членов. Для достаточно больших t первый член мал, если только $\omega_{ba} + \omega$ не близко к 0, т. е. если только энергия не лежит в интервале (ширины $2\pi\hbar/t$) с центром в точке

$$E_b = E_a - \hbar\omega, \quad (55)$$

второй член мал вне интервала (той же ширины) с центром в точке

$$E_b = E_a + \hbar\omega. \quad (55')$$

Практически всегда t достаточно велико ($t \gg 2\pi/\omega$) и эти интервалы не перекрываются. Значит $W_{a \rightarrow b}$ мало для всех переходов кроме тех, при которых *невозмущенная система излучает или поглощает энергию $\hbar\omega$* , на что указывают уравнения (55) и (55') соответственно.

В первом случае вклад в амплитуду перехода дает только первый член и для вероятности перехода получаем выражение

$$W_{a \rightarrow b} \approx |A_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)/\hbar^2.$$

Основное отличие этого выражения от (40) состоит в замене ω_{ba} на $\omega_{ba} + \omega$. В полной аналогии с рассуждениями § 4 можно рассмотреть переходы в группу уровней с энергией в интервале ΔE ($\gg 2\pi\hbar/t$) с центром в точке $E_a - \hbar\omega$ и при подходящих условиях определить вероятность перехода в единицу времени, которая вновь дается формулой (50) с тем отличием, что теперь V_{ba} и ρ_b относятся к состояниям b , энергия которых меньше энергии начального состояния на $\hbar\omega$. Те же рассуждения применимы к переходам, при которых система поглощает энергию $\hbar\omega$ (см. задачу 2).

Рассмотрим теперь более общий случай, когда V — произвольная периодическая функция t с частотой ω . Сформулируем кратко относящиеся к этому случаю результаты, доказательство которых предоставим читателю. Имеем разложение Фурье

$$V = \sum_{s=1}^{\infty} (A_s e^{is\omega t} + A_s^* e^{-is\omega t}).$$

Если $t \gg 2\pi/\omega$, то в первом порядке вклады в вероятность перехода от различных членов этого ряда не интерферируют, поскольку каждый из них вызывает переходы, отвечающие различному изменению энергии. При « A_s -переходах» система теряет с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$; при « A_s^* -переходах» система поглощает с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$.

Раздел II. МГНОВЕННОЕ И АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИЗМЕНЕНИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

§ 7. Формулировка задачи и результаты

Часто возникает задача определения изменения состояния системы при изменении внешнего поля. Классический пример такой ситуации представляет атом, помещенный в магнитное поле. Как правило, получаемые результаты существенно зависят от времени T , в течение которого происходило изменение гамильтонiana. В этом разделе мы исследуем предельные случаи,