

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

530.145

**ФОРМА ГАМИЛЬТОНИАНА И НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ
В ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ****В. И. Быков****СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение	657
2. Преобразование электрического поля	659
3. Мгновенное возбуждение атома. Природа поля $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$	663
4. Каноническое преобразование Пауэра и Ценау	666
5. Спектры фотонов при расчетах с разными гамильтонианами. Результат Лэм-ба — Ризерфорда	668
6. Заключение	670
Цитированная литература	672

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовая электродинамика развивалась в основном как теория рассеяния, т. е. начальные условия в ней ставились при $t \rightarrow -\infty$. Однако имеется довольно широкий круг задач, в которых начальное условие необходимо поставить в некоторый определенный момент времени, например $t = 0$. Роль начальных условий в задачах об излучении атомов и молекул, или, более широко, в задачах квантовой электродинамики, изучена недостаточно. В данной статье мы обратим внимание на один из аспектов этой проблемы, который оказывается связанным с выбором гамильтониана взаимодействия атомов с полем в двух различных формах.

Первая форма гамильтониана имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{1}{8\pi} \int dV (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2); \quad (1)$$

основной (линейный по e) член взаимодействия атома с полем в кулоновской калибровке равен

$$- \frac{e}{m} \mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{r}).$$

Вторая форма гамильтониана, которую мы пока не будем выписывать полностью, имеет вид

$$H' = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{1}{8\pi} \int dV (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) - e\mathbf{r} \mathbf{E}^\perp + \dots \quad (2)$$

Как видим, в этой форме невозмущенная часть такая же, как и в первой, а член взаимодействия атома с полем равен

$$- e\mathbf{r} \mathbf{E}^\perp. \quad (3)$$

Еще в 1931 г. М. Гепшерт-Майер¹ рассмотрела каноническое преобразование гамильтониана (1), приводящее к взаимодействию атомов с полем вида (3).

Это преобразование было произведено лишь в дипольном приближении и при неквантованном поле. В дальнейшем оно рассматривалось в работе ², где отмечались преимущества второй формы, выражающиеся в устранении некоторых низкочастотных расхождений. Позже, в работе ³ уже в рамках квантовой теории было установлено унитарное преобразование, соответствующее классическому каноническому преобразованию:

$$H' = S^{-1}HS, \quad (4)$$

где S — оператор преобразования (см. ниже). Существовала полная уверенность в эквивалентности двух форм гамильтониана, базировавшаяся на существовании канонического преобразования от одной формы к другой и на том, что из обеих форм следуют уравнения Максвелла и уравнения движения электрона, когда в 1947—1948 гг. В. Лэмб в известном цикле работ ⁴, посвященных измерению лэмбовского сдвига, показал, что некоторые измеренные им спектральные распределения лучше описываются теоретически, если гамильтониан взаимодействия взять в форме (3). Тем самым было впервые показано, что две «теоретически эквивалентные» формы гамильтониана при обычных квантово-механических вычислениях, например при вычислениях формы спектральной линии, приводят к разным результатам, и лишь для одной из форм, а именно, для формы (2), эти результаты совпадают с экспериментальными. По существу возник парадокс, повлекший за собой ряд работ ⁵⁻⁸, в которых был высказан широкий спектр мнений о природе этого парадокса.

Парадокс легко раскрывается по крайней мере в том случае, когда и поля, и атомы описываются квантово-механически. Действительно, в квантовой механике гамильтониан описывает изменение состояния во времени:

$$|\Delta\psi\rangle \approx \frac{\Delta t}{i\hbar} H|\psi_0\rangle, \quad (5)$$

где $|\psi_0\rangle$ — начальное состояние системы; пока рассматривается, как в данной статье, спонтанное излучение, под $|\psi_0\rangle = |b, 0\rangle$ понимается возбужденное состояние атома $|b\rangle$ и вакуумное состояние поля, т. е. ноль фотонов $|0\rangle$. Для того чтобы соотношение (5) было справедливо на больших интервалах времени Δt , обычно как гамильтониан, так и состояния берут в представлении взаимодействия. Однако для наших целей это обстоятельство не существенно, и мы не будем обращать на него внимание.

Амплитуды вероятностей переходов получаются, если соотношение (5) умножить слева на состояния $\langle n|$, принадлежащие какому-либо полному набору ортогональных состояний:

$$M = \langle n|\Delta\psi\rangle \approx \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n|H|\psi_0\rangle. \quad (6)$$

Очевидно, амплитуды вероятностей переходов M не изменятся, если все равенство (6) подвергнуть унитарному преобразованию:

$$M = \langle n|\Delta\psi\rangle \approx \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n|SS^{-1}HSS^{-1}|\psi_0\rangle = \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n'|H'|\psi'_0\rangle.$$

Как видим, при унитарном преобразовании, описываемом оператором S , подвергать преобразованию следует не только гамильтониан (4), но и состояния

$$|\psi'_0\rangle = S^{-1}|\psi_0\rangle, \quad \langle n'| = \langle n|S. \quad (7)$$

Это и раскрывает парадокс, так как обычно состояния, в частности начальное состояние $|\psi_0\rangle$, не преобразуются согласно (7) (см. ⁴) и берутся непреобразованные состояния. Естественно, при этом унитарная эквивалентность гамильтонианов нарушается, и результаты вычислений оказываются различными.

Однако раскрытие парадокса не исчерпывает всех вопросов. Действительно, нежелание преобразовывать состояния, в частности начальное состояние, можно понять следующим образом. Так как оператор S , как далее будет видно, содержит операторы рождения и уничтожения фотонов, то преобразованные состояния соответствуют присутствию фотонов в начальном состоянии, но не вакуумному состоянию. Так как исследуется спонтанное излучение, т. е. процесс рождения фотонов, то кажется нелогичным присутствие фотонов в начальном состоянии. Наоборот, кажется естественным взять в качестве начального вакуумное состояние поля, т. е. непреобразованное начальное состояние.

Использование непреобразованных состояний с преобразованным гамильтонианом означает вычисление величины

$$M' = \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n | H' | \psi_0 \rangle = \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n | S^{-1} H S | \psi_0 \rangle = \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle n'' | H | \psi_0'' \rangle,$$

где

$$| \psi_0'' \rangle = S | \psi_0 \rangle, \quad \langle n'' | = \langle n | S^{-1}, \quad (8)$$

т. е. можно считать, что используется старый гамильтониан с новыми начальными условиями. Поэтому вопрос о представлении гамильтонианов в двух формах свелся к изменению начальных условий, и важно выяснить, что такое состояние $S | \psi_0 \rangle$ и чем оно отличается от $| \psi_0 \rangle$.

Второй вопрос, представляющий интерес, это — как интерпретировать фотоны в состоянии $| \psi_0'' \rangle$, которое эквивалентно состоянию $| \psi_0 \rangle$, не содержащему фотонов? Как мы увидим, оба эти вопроса имеют, по существу, один ответ. В гл. 2 мы исследуем состояние $| \psi_0'' \rangle$. Для этого нам придется найти среднее значение электрического поля в этом состоянии.

2. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Представителями состояний $| \psi_0'' \rangle$ и $| \psi_0 \rangle$ будем считать средние значения тех или иных наблюдаемых в этих состояниях. В частности, нас будут интересовать средние значения электрического поля E . Естественно, средние значения наблюдаемых ни в коей мере не исчерпывают состояний $| \psi_0'' \rangle$ и $| \psi_0 \rangle$. Например, знание среднего значения поля еще ничего не говорит о среднем значении квадрата поля и т. д. Однако, как мы увидим, уже средние значения поля ясно продемонстрируют различие состояний $| \psi_0'' \rangle$ и $| \psi_0 \rangle$.

Как всегда в кулоновской калибровке, электрическое поле состоит из поперечной $E^\perp(\mathbf{R})$ и продольной $E^\parallel(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ частей (продольная часть, кроме точки наблюдения $\mathbf{R}$, является также функцией координат электрона $\mathbf{r}$). Сначала рассмотрим поперечное поле в состоянии $| \psi_0'' \rangle$. Его среднее значение равно

$$\langle E^\perp(\mathbf{R}) \rangle = \langle \psi_0'' | E^\perp(\mathbf{R}) | \psi_0'' \rangle = \langle \psi_0 | S^{-1} E^\perp(\mathbf{R}) S | \psi_0 \rangle;$$

следовательно, можно сначала преобразовать поле

$$E^{\perp'} = S^{-1} E^\perp S$$

и затем усреднить его по старому состоянию $| \psi_0 \rangle$.

Унитарный оператор S имеет вид *)³

$$S = \exp \left[i e \int d\mathbf{x} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right], \quad (9)$$

где

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \mathbf{r} \left[1 - \frac{1}{2!} (\mathbf{r} \nabla) + \frac{1}{3!} (\mathbf{r} \nabla)^2 - \dots \right] \delta(\mathbf{x}) \quad (10)$$

*) В работе Пауэра и Циенау неправильно указан знак в показателе экспоненты оператора S (3, с. 450).

(дифференцирование ∇ по $\mathbf{x}$) и $A(\mathbf{x})$ — векторный потенциал. Вид оператора S получен в ³ из условия, что преобразование (4) дает тот же результат, что и каноническое преобразование Гейперт-Майер¹. Векторное поле $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ *, зависящее от радиуса-вектора электрона $\mathbf{r}$, как от параметра, можно представить в виде

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \hat{\mathbf{r}} \left[1 - \left(1 - (\mathbf{r} \nabla) + \frac{1}{2!} (\mathbf{r} \nabla)^2 - \frac{1}{3!} (\mathbf{r} \nabla)^3 + \dots \right) \right] V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \\ = \hat{\mathbf{r}} [V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) - V(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{r})], \quad (11)$$

где $\hat{\mathbf{r}}$ — единичный вектор направления $\mathbf{r}$ и $V(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ определяется условием $(\mathbf{r} \nabla) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x})$.

Для $V(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ имеют место также представления

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \frac{i\mathbf{r}}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}}{(u\mathbf{k}) + i\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0,$$

и

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) = \theta(\mathbf{x} \parallel) \delta(\mathbf{x}^\perp),$$

где

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} \parallel + \mathbf{x}^\perp, \quad \mathbf{x} \parallel \parallel \mathbf{r}, \quad \mathbf{x}^\perp \perp \mathbf{r}.$$

Последнее выражение для $V(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ позволяет дать простое физическое описание поля $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$, не встречавшееся нам в литературе, дающее возможность

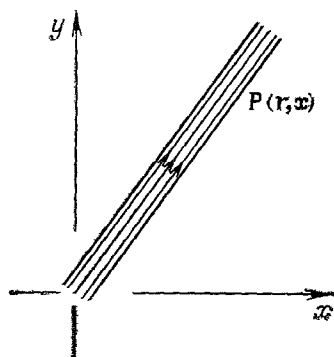


Рис. 1. Поле $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$.

производить вычисления, не прибегая к мультипольным разложениям. Поле $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ оказывается отличным от нуля (равным бесконечности) в узкой трубочке (бесконечно узкой), направленной из начала координат в точку, где расположен электрон, и направлено вдоль трубочки (рис. 1). Это поле следует понимать как обобщенную функцию $\mathbf{x}$; в окончательных выражениях оно может фигурировать лишь под знаком интеграла по $\mathbf{x}$.

Поле $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$, как и вообще всякое поле, можно разложить на вихревую и потенциальную части. Важным свойством поля $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ является то, что его потенциальная часть с точностью до множителя — 4 π е совпадает с суммарным кулоновским полем ядра и электрона,

когда первое находится в начале координат, а второй — в точке $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{E} \parallel(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -4\pi e \mathbf{P} \parallel(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (12)$$

Для выделения продольной части поля $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ воспользуемся известным соотношением

$$P_\lambda \parallel(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{x} \delta_{\lambda\mu} \parallel(\mathbf{x} - \mathbf{R}) P_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{x}),$$

где

$$\delta_{\lambda\mu} \parallel(\mathbf{x} - \mathbf{R}) = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_{\lambda R} \partial x_{\mu x}} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{R}|}$$

— так называемая продольная δ -функция. Подставляя сюда (10) и интегрируя по частям, получим

$$\mathbf{P} \parallel(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi} \text{grad}_R \frac{1}{R} + \frac{1}{4\pi} \text{grad}_R \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|},$$

* В работе Пауэра и Циенау неверно указано, что поле $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ удовлетворяет равенству $\mathbf{j} = \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$, где $\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ — ток.

что как раз и совпадает с точностью до множителя $-4\pi e$ с кулоновским полем ядра, расположенного в начале координат, и электрона, расположенного в точке $\mathbf{r}$ (рис. 2). Теперь мы имеем достаточно сведений для того, чтобы произвести преобразование поля:

$$\mathbf{E}^{\perp'} = S^{-1} \mathbf{E}^{\perp} S.$$

Для этого воспользуемся известным операторным соотношением

$$e^A B e^{-A} = B + [A; B] + \frac{1}{2!} [A; [A; B]] + \frac{1}{3!} [A; [A; [A; B]]] + \dots \quad (13)$$

и вычислим в нем первый коммутатор для рассматриваемого случая:

$$\left[-ie \int d\mathbf{x} P(\mathbf{r}, \mathbf{x}) A(\mathbf{x}); \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) \right] = ie \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_{\mu} \int d\mathbf{x} P_{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \left[A_{\lambda}(\mathbf{x}); \frac{\partial A_{\mu}(\mathbf{R})}{\partial t} \right].$$

Так как коммутатор в последнем выражении с точностью до множителя $4\pi i$ равен так называемой поперечной δ -функции $\delta_{\lambda\mu}^{\perp}(\mathbf{x} - \mathbf{R})$, то

$$\begin{aligned} -4\pi e \sum_{\lambda\mu} \int d\mathbf{x} P_{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \delta_{\lambda\mu}^{\perp}(\mathbf{x} - \mathbf{R}) = \\ = -4\pi e \mathbf{P}^{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -4\pi e [\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \mathbf{P}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R})]; \end{aligned}$$

поле $\mathbf{P}^{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ изображено на рис. 3. Отсюда видно, что все последующие коммутаторы в (13) обратятся в нуль, и преобразованное поле, следовательно, имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{\perp'} = \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) - 4\pi e [\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \\ - \mathbf{P}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R})]. \quad (14) \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь кулоновское поле. Кулоновское поле не описывается гамильтонианом. При квантовании оно исключается еще при переходе от лагранжиана описания к гамильтонуву⁹, как не являющееся настоящей гамильтоновой переменной (сопряженный кулоновскому потенциалу импульс оказывается равным нулю). Однако исключение кулоновского поля из гамильтонова аппарата вовсе не означает, что этого поля физически не существует.

Фактически уравнения, следующие из гамильтониана, должны быть дополнены независимым уравнением для скалярного потенциала

$$\Delta \varphi = 4\pi \rho \quad (15)$$

или, если электрон предполагается точечным,

$$\mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\text{grad } \varphi = e \text{grad}_{\mathbf{R}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} - e \text{grad} \frac{1}{|\mathbf{R}|},$$

где первый член представляет собой кулоновское поле электрона и второй — кулоновское поле ядра. Кулоновское поле атома (оно же среднее полное поле

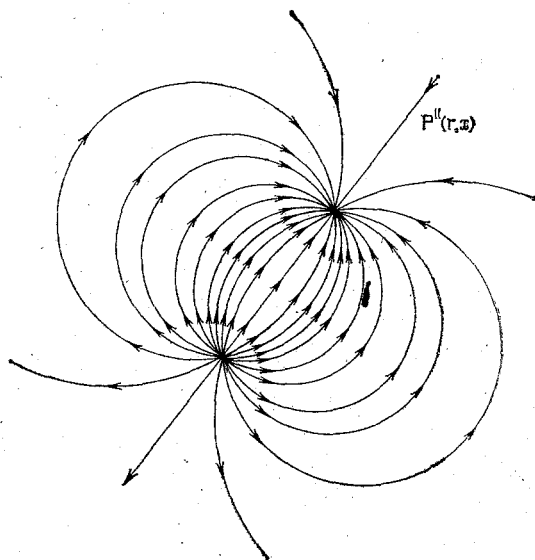


Рис. 2. Поле $\mathbf{P}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$.

в непреобразованном состоянии), находящегося в p -состоянии, показано на рис. 4, а. Так как это поле зависит лишь от координат электрона и поэтому

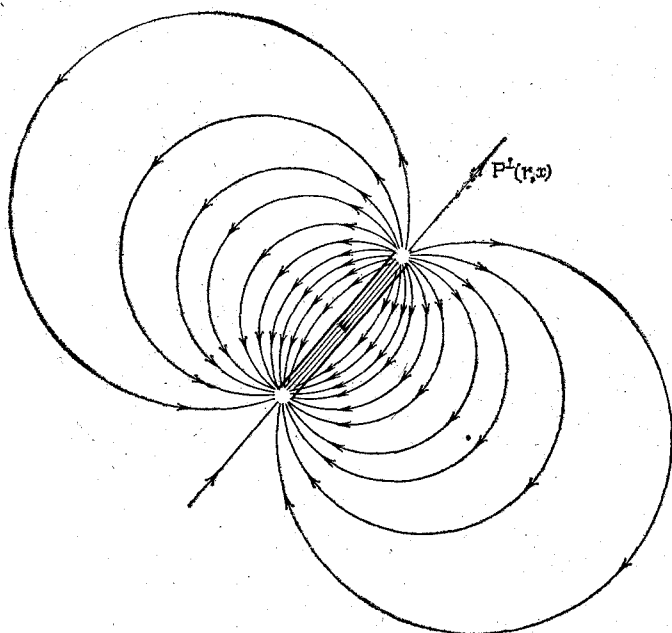


Рис. 3. Поле $P^\perp(r, x)$.

коммутирует с показателем экспоненты в (9), то при преобразовании

$$E^\parallel(r, R) = S^{-1} E^\parallel(r, R) S = E^\parallel(r, R) \quad (16)$$

оно остается неизменным. Согласно (12)

$$E^\parallel(r, R) = -4\pi e P^\parallel(r, R);$$

складывая (14) и (16), получим преобразование полного поля

$$E'(r, R) = S^{-1} E(r, R) S = E^\perp(R) - 4\pi e P(r, R). \quad (17)$$

Усредняя это поле по вакууму и по возбужденному состоянию атома (скажем, по p -состоянию), получим картину поля, показанную на рис. 4, б.

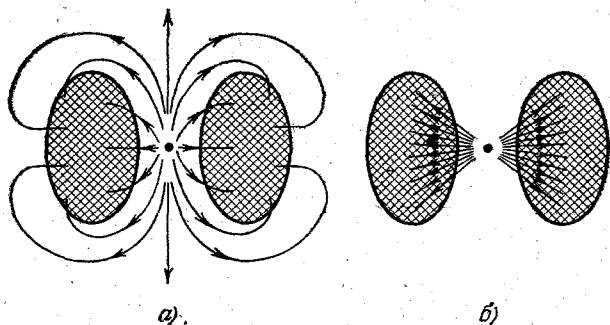


Рис. 4. Электрическое поле в состояниях $|b, 0\rangle$ (а) и $S|b, 0\rangle$ (б).

$|b\rangle$ — p -состояние возбужденного атома.

Среднее поле в непреобразованном состоянии, как уже сказано, равно кулоновскому полю (рис. 4, а), так как вследствие линейности по операторам рождения и уничтожения $\langle \bar{E}^\perp \rangle = 0$.

Таким образом, мы видим, что средние поля в состояниях $|\psi_0\rangle = |b, 0\rangle$ (рис. 4, а) и $|\psi_0'\rangle = S|b, 0\rangle$ (рис. 4, б) существенным образом

отличаются. Фактически рассматриваемое преобразование уничтожает внешнюю часть кулоновского поля, а оставшаяся часть поля трансформируется так, чтобы выполнялась теорема Гаусса. Следует отметить, что оператор S по отношению к операторам $a_{k\lambda}^+$ и $a_{k\lambda}$ имеет вид

$$e^{i(z a_{k\lambda}^+ + z^* a_{k\lambda})},$$

т. е. из вакуумного состояния он порождает когерентное состояние поля, что совершенно естественно, так как порождаемое поле должно скомпенсировать некантованное продольное поле. Следовательно, излучение при начальном состоянии $|\psi_0'\rangle = S|b, 0\rangle$ начинается с неравновесного кулоновского поля, в отличие от начального состояния $|\psi_0\rangle = |b, 0\rangle$, при котором кулоновское поле стационарно. Положение здесь такое же, как при свободном движении электрона. В. Л. Гинзбургом¹⁰ было показано, что если в качестве начального условия для свободного электрона берется равновесное поле, то электрон не излучает; при неравновесном же поле в начальный момент электрон излучает, «обрастая» равновесным полем. В рассматриваемом нами случае электрон излучает и в том и в другом случае, однако излучает по-разному, как будет показано в гл. 5.

Таким образом, основное отличие состояний $|\psi_0\rangle$ и $|\psi_0'\rangle = S|\psi_0\rangle$ выявлено, и ответ на первый вопрос, поставленный в конце гл. 1, ясен. Ясен также и ответ на второй вопрос. Действительно, состояние $|\psi_0'\rangle = S^{-1}|\psi_0\rangle$, эквивалентное состоянию $|\psi_0\rangle$, должно содержать пакет фотонов, образующий вихревое поле, которое совместно с полем $-4\pi eP$ приводит к стационарному кулоновскому полю, такому же, как в состоянии $|\psi_0\rangle$ с непреобразованными операторами.

3. МГНОВЕННОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ АТОМА. ПРИРОДА ПОЛЯ $P(r, x)$

Рассмотрим задачу о мгновенном возбуждении атома. Это исследование позволит выяснить природу поля $P(r, x)$. Пусть атом, находившийся в основном состоянии $|a\rangle$ в момент $t = 0$, испытывает сильное ударное воздействие, в результате которого он возбуждается и в дальнейшем излучает, снова переходя в состояние $|a\rangle$. Гамильтониан системы атом + поле + источник мгновенного воздействия зависит от времени:

$$\mathcal{H} = H + K(t),$$

где H — часть гамильтониана, не зависящая от времени и описывающая атом, электромагнитное поле и их взаимодействие (1), $K(r, t)$ — часть гамильтониана, описывающая воздействие внешнего поля на электрон атома. Перейдем к представлению

$$W(t) = e^{iHt} K(t) e^{-iHt}.$$

Тогда оператор эволюции имеет вид¹¹

$$G(t) = e^{-i(Y_1 + Y_2 + \dots)},$$

где

$$Y_1(t) = \int_{t'}^t dt_1 W_1, \quad Y_2(t) = -\frac{i}{2!} \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 [W_1; W_2]; \dots W_\alpha = W(t_\alpha).$$

Придадим оператору $K(t)$ конкретный вид

$$K(t) = -m(ur) \frac{d\delta(t)}{dt}, \quad \text{grad}_r K(t) = -m\mathbf{u} \frac{d\delta(r)}{dt}, \quad \mathbf{u} = \text{const.}$$

Поле, создаваемое внешним возмущением в окрестности атома, является пространственно однородным и от времени зависит как производная

по времени от $\delta(t)$ -функции (рис. 5). Величина $Y_1(t)$ легко вычисляется:

$$Y_1(t) = \int_{t'}^t dt_1 W_1 = -m \int_{t'}^t dt_1 \frac{d\delta(t_1)}{dt_1} e^{iHt_1} (\mathbf{ur}) e^{-iHt_1} = \\ = im [H; \mathbf{ur}] = \mathbf{u} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})).$$

Вычисляя Y_2 , получим бесконечно большую величину, которая, однако, является не оператором, а C -числом и дает вклад лишь в несущественную фазу состояния. Пренебрегая последующими членами, получим, что оператор эволюции, обусловленный «мгновенным» воздействием, имеет следующий вид:

$$G = e^{-iu(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))}. \quad (18)$$

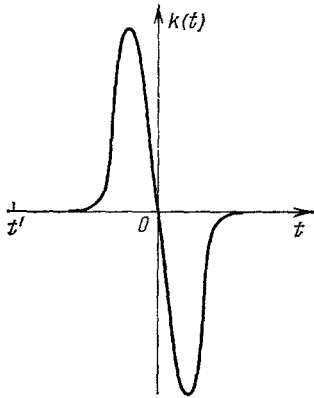


Рис. 5. Зависимость возбуждающего потенциала от времени.

Рассмотрим состояние системы после мгновенного воздействия, но до начала излучения. Как и раньше, будем характеризовать его средними значениями тех или иных величин в этом состоянии. В частности, вычислим среднее значение электрического поля. Для вычисления среднего значения величины $\hat{O}$ в состоянии

$$|\psi\rangle = G|a, 0\rangle$$

необходимо величину $\hat{O}$ преобразовать по правилу

$$\hat{O}_G = G^{-1}\hat{O}G$$

и усреднить полученное выражение по исходному состоянию

$$\langle \hat{O}_G \rangle = \langle a, 0 | G^{-1} \hat{O} G | a, 0 \rangle.$$

Рассмотрим преобразование различных операторов под действием унитарного оператора G . Сначала рассмотрим преобразование координаты электрона:

$$\mathbf{r}_G = e^{iu(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))} \mathbf{r} e^{-iu(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))} = \mathbf{r} + \mathbf{u}.$$

Это преобразование легко получается, если воспользоваться разложением (13) и учесть, что оно обрывается на втором члене, так как уже в нем получается C -числовой вектор $\mathbf{u}$:

$$[i\mathbf{u}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})); \mathbf{r}] = i \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_\mu u_\lambda [p_\lambda; r_\mu] = \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_\mu u_\lambda \delta_{\lambda\mu} = \mathbf{u},$$

обращающий в нуль все последующие коммутаторы. Таким образом, мгновенное воздействие приводит к смещению распределения зарядов на вектор $\mathbf{u}$; этим раскрывается физический смысл вектора $\mathbf{u}$. Векторный потенциал в точке наблюдения $\mathbf{R}$ не изменяется при рассматриваемом преобразовании, так как он не зависит от координат электрона и, следовательно, коммутирует как с $\mathbf{p}$, так и с $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Наиболее интересно преобразование поперечного поля $\mathbf{E}^\perp(\mathbf{R})$. Снова воспользуемся разложением (13) и рассмотрим второй его член

$$i[\mathbf{u}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})); \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R})] = -ie[\mathbf{u}\mathbf{A}(\mathbf{r}); \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R})] = ie \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_\mu u_\lambda \left[A_\lambda; \frac{\partial A_\mu}{\partial t} \right].$$

Коммутатор компонент векторного потенциала и его производной по времени известен и равен так называемой поперечной $\delta^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ -функции, умноженной на $4\pi i$. Следовательно,

$$i[\mathbf{u}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})); \mathbf{E}^\perp(\mathbf{R})] = -4\pi e \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_\mu u_\lambda \delta_{\lambda\mu}^\perp(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \\ = -4\pi e [\mathbf{u}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - \sum_{\lambda\mu} \mathbf{e}_\mu u_\lambda \delta_{\lambda\mu}^\parallel(\mathbf{r} - \mathbf{R})]. \quad (19)$$

Все последующие коммутаторы в разложении (13) теперь легко вычисляются с помощью соотношения

$$i [\mathbf{u} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})); F(\mathbf{r})] = i [\mathbf{u}\mathbf{p}; F(\mathbf{r})] = \\ = i \sum_{\lambda} u_{\lambda} [p_{\lambda}; F(\mathbf{r})] = \sum_{\lambda} u_{\lambda} \frac{\partial F}{\partial r_{\lambda}} = (\mathbf{u}\nabla) F.$$

Для первого члена из (19) все коммутаторы разложения (13) можно представить в виде

$$-4\pi e\mathbf{u} \left[1 + \frac{1}{2!} (\mathbf{u}\nabla_r) + \frac{1}{3!} (\mathbf{u}\nabla_r)^2 + \dots \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Заменяя дифференцирование по $\mathbf{r}$ дифференцированием по $\mathbf{R}$, получим

$$-4\pi e\mathbf{u} \left[1 - \frac{1}{2!} (\mathbf{u}\nabla_R) + \frac{1}{3!} (\mathbf{u}\nabla_R)^2 - \dots \right] \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) = -4\pi e\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r})$$

— знакомое уже нам поле $\mathbf{P}$. Представив это выражение в виде

$$-4\pi e\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r}) = -4\pi e\hat{\mathbf{u}} [V(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r}) - V(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r} - \mathbf{u})],$$

где $\hat{\mathbf{u}}$ — единичный вектор направления $\mathbf{u}$, легко убедиться, что поле $\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r})$ отлично от нуля в области, отмеченной штриховой линией на рис. 6.

Второй член в (19) можно выразить через кулоновское поле электрона

$$\mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\nabla_R \Phi = -e\nabla_r \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|},$$

если учесть, что

$$(\mathbf{u}\nabla_r) \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{-e}{2\pi^2} \sum_{\lambda\mu} e_{\lambda} u_{\mu} \int \frac{d\mathbf{k} k_{\lambda} k_{\mu}}{k^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ = -4\pi e \sum_{\lambda\mu} e_{\lambda} u_{\mu} \delta_{\lambda\mu}^{\parallel}(\mathbf{R} - \mathbf{r}).$$

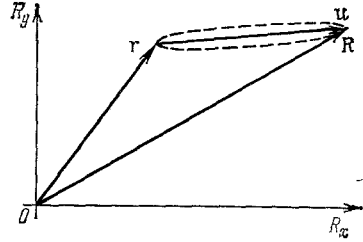


Рис. 6. Область, где поле $\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r})$ отлично от нуля.

Тогда сумма коммутаторов разложения (13) для второго члена из (19) имеет вид

$$\left[1 - (1 + (\mathbf{u}\nabla_r) + \frac{1}{2!} (\mathbf{u}\nabla_r)^2 + \frac{1}{3!} (\mathbf{u}\nabla_r)^3 + \dots) \right] \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \\ = \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r} + \mathbf{u}, \mathbf{R}).$$

Следовательно, поперечное поле преобразуется следующим образом:

$$\mathbf{E}_G^{\perp} = \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) - 4\pi e\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{R} - \mathbf{r}) - \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r} + \mathbf{u}, \mathbf{R}) + \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{R}).$$

Продольное поле преобразуется, очевидно, так:

$$(\mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \mathbf{E}_{\text{nucl}}^{\parallel}(\mathbf{R}))_G = \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r} + \mathbf{u}, \mathbf{R}) + \mathbf{E}_{\text{nucl}}^{\parallel}(\mathbf{R}).$$

Таким образом, полное поле после преобразования принимает вид

$$\mathbf{E}_G(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \mathbf{E}_{\text{nucl}}^{\parallel}(\mathbf{R}) + \mathbf{E}^{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - 4\pi e\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Усредняя это выражение по состоянию $|a, 0\rangle$, убеждаемся, что среднее поле в состоянии $G|a, 0\rangle$, получившемся из $|a, 0\rangle$ в результате мгновенного воздействия, состоит из кулоновского поля, соответствующего исходному состоянию $|a, 0\rangle$, и некоторого дополнительного поля, отличного от нуля лишь на траектории движения заряда. Физически совершенно естественно, что изменения в поле произошли лишь на траектории движения заряда, так как изменения в точки вне траектории доходят от точек траектории с конеч-

ной скоростью, а сама траектория возникает мгновенно *). В целом среднее по состоянию $G | a, 0 \rangle$ поле имеет вид, показанный на рис. 7.

Рассмотренная задача позволяет интерпретировать поле $-4\pi eP(u, R - r)$ как электрическое поле, возникающее при мгновенном перемещении заряда из точки r в точку $r + u$.

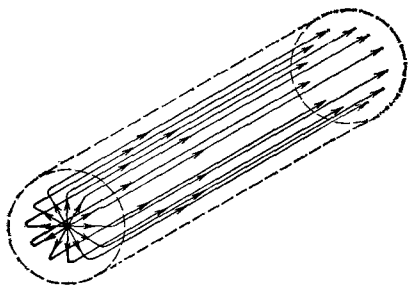


Рис. 7. Электрическое поле в возбужденном состоянии $G | a, 0 \rangle$.

$| a \rangle$ — основное s-состояние атома.

Возвращаясь теперь к состоянию $|\psi_0'\rangle = S | b, 0 \rangle$, рассмотренному в гл. 2, можно сказать, что поле в этом состоянии (17), изображенное на рис. 4, б, можно считать возникшим в результате мгновенного, с бесконечной скоростью перемещения заряда из ядра в распределение, соответствующее $| b \rangle$, так как прямолинейные силовые линии этого поля определяются как раз полем P . Естественно, такой процесс не может происходить реально, хотя бы потому, что электрон в силу принципа неопределенности не может быть сосредоточен в ядре. Поэтому

начальное состояние $|\psi_0'\rangle = S | b, 0 \rangle$ может лишь с той или иной степенью достоверности отражать практически реализуемые начальные состояния. Кроме того, такое мгновенное перемещение электрона из ядра в распределение $| b \rangle$ — не единственный способ возникновения состояния $|\psi_0'\rangle$.

4. КАНОНИЧЕСКОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПАУЭРА И ЦИЕНАУ

Найдем теперь полностью вторую форму гамильтониана **). Для этого необходимо, кроме преобразования электрического поля, выполнить также преобразование магнитного поля и оператора скорости электрона:

$$v = \frac{1}{m} [p - eA(r)].$$

Что касается магнитного поля, то следует заметить, что при рассматриваемом преобразовании векторный потенциал не меняется, так как он коммутирует с показателем экспоненты в (9); вместе с ним не изменяются и все его пространственные производные, в частности, не изменится магнитное поле

$$H = \text{rot } A.$$

Для преобразования оператора скорости электрона снова воспользуемся разложением (13) и вычислим в нем первый коммутатор, приняв во внимание, что векторные потенциалы, взятые в один и тот же момент времени, коммутируют:

$$-\frac{ie}{m} \left[\int dx P(r, x) A(x); p \right] = \frac{e}{m} \nabla_r \int dx P(r, x) A(x).$$

Так как это выражение зависит лишь от векторного потенциала и координат электрона, то все последующие коммутаторы в разложении (13) обратятся

*) Перемещение заряда со скоростью, большей скорости света в вакууме, в частности, с бесконечно большой скоростью, не противоречит теории относительности. Такое перемещение может происходить, например, при рождении на траектории совокупности электронно-позитронных пар с последующей аннигиляцией электронов и позитронов с соседними, соответственно, позитронами и электронами.

**) В работе Пауэра и Циенау каноническое преобразование произведено неверно. Электрическое поле в гамильтониане заменялось оператором $S^{-1}ES - 4\pi eP^\perp = S^{-1}E^\perp S - 4\pi eP$. Правильно электрическое поле заменять оператором

$$S^{-1}E(r, R)S = E^\perp(R) - 4\pi eP(r, R).$$

в нуль. Следовательно,

$$\mathbf{v}' = \frac{1}{m} S^{-1} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})) S = \frac{1}{m} \left[\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) + e\mathbf{\nabla}_r \int d\mathbf{x} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]. \quad (20)$$

Усреднение по состоянию $|b, 0\rangle$ как преобразованного, так и непреобразованного оператора скорости дает нуль. Аналогично можно убедиться, что средние значения преобразованного и непреобразованного операторов тока в этом состоянии одинаковы. Однако, как указывалось выше, среднее значение оператора не исчерпывает всех характеристик состояния — могут различаться средние значения степеней этих операторов. Эти различия также могут выявлять несходство состояний $|\psi_0'\rangle$ и $|\psi_0\rangle$.

Используя первые члены мультипольного разложения $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x})$ (10) и $\mathbf{A}(\mathbf{r})$,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(0) + (\mathbf{r}\mathbf{\nabla}) \mathbf{A}(0) + \dots,$$

для оператора скорости можно получить приближенное выражение

$$\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{e}{2m} [\mathbf{r}, [\mathbf{\nabla}_x, \mathbf{A}(\mathbf{x})]_{\mathbf{x}=0}] = \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{e}{2m} [\mathbf{r}, \mathbf{H}(0)].$$

Произведем теперь каноническое преобразование Пауэра и Циенау (4). Сначала преобразуем атомную часть гамильтониана. Для этого заметим, что потенциальная энергия электрона $U(\mathbf{r})$ не изменяется при преобразовании (4), а для преобразования части, содержащей импульсы, достаточно выражение (20) возвести в квадрат и умножить на $m/2$:

$$\frac{1}{2m} [\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) + e\mathbf{\nabla}_r \int d\mathbf{x} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x})]^2.$$

Для преобразования полевой части гамильтониана достаточно в ней под интегралом заменить поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ выражением (17). В результате получим

$$\begin{aligned} S^{-1} \left[\frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{R} (\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \mathbf{H}^2(\mathbf{R})) \right] S = \\ = \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{R} (\mathbf{E}^{\perp 2}(\mathbf{R}) + \mathbf{H}^2(\mathbf{R})) - e \int d\mathbf{R} \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + 2\pi e^2 \int d\mathbf{R} \mathbf{P}^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \end{aligned}$$

Средний член как раз и дает взаимодействие атомного электрона с электрическим полем в форме (3). Действительно, оставляя в (10) первые два члена, получим

$$-e \int d\mathbf{R} \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \cong -e\mathbf{r}\mathbf{E}^{\perp}(0) - \frac{1}{2}e(\mathbf{r}\mathbf{\nabla}_R)(\mathbf{r}\mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}))_{\mathbf{R}=0} + \dots$$

В целом гамильтониан принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} H' = S^{-1}HS = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) + e\mathbf{\nabla}_r \int d\mathbf{x} \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]^2 + U(\mathbf{r}) + \\ + \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{R} [\mathbf{E}^{\perp 2}(\mathbf{R}) + \mathbf{H}^2(\mathbf{R})] - e \int d\mathbf{R} \mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{R}) \mathbf{P}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \\ + 2\pi e^2 \int d\mathbf{R} \mathbf{P}^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (24) \end{aligned}$$

Приближенно же, с использованием указанных выше мультипольных разложений, гамильтониан равен

$$\begin{aligned} H' = S^{-1}HS = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{R} (\mathbf{E}^{\perp 2}(\mathbf{R}) + \mathbf{H}^2(\mathbf{R})) - e\mathbf{r}\mathbf{E}^{\perp}(0) - \\ - e \sum_{\lambda\mu} Q_{\lambda\mu} \nabla_{\lambda R} E_{\mu}^{\perp} |_{\mathbf{R}=0} - \frac{e}{2m} \mathbf{H}\mathbf{L} + \frac{e^2}{8m} [\mathbf{r}, \mathbf{H}]^2 + 2\pi e^2 \int d\mathbf{R} \mathbf{P}^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (22) \end{aligned}$$

где

$$eQ_{\lambda\mu} = \frac{1}{2} e r_{\lambda} r_{\mu}$$

— недиагонализированный квадрупольный момент электрона, и $L = [r, p]$ — орбитальный момент электрона. Такая форма гамильтониана интересна тем, что полное взаимодействие атома с полем расщепляется на взаимодействия с полем элементарных моментов: электрического дипольного, электрического квадрупольного, магнитного дипольного и т. д.

Еще раз подчеркнем, что гамильтонианы (1) и (24) эквивалентны лишь в том случае, когда все состояния подвергнуты преобразованиям (7).

5. СПЕКТРЫ ФОТОНОВ ПРИ РАСЧЕТАХ С РАЗНЫМИ ГАМИЛЬТониАНАМИ. РЕЗУЛЬТАТ ЛЭМБА — РИЗЕРФОРДА

Рассмотрим спонтанное излучение возбужденного атома, используя разные формы гамильтониана. Как явствует из предшествующего текста, физическое различие между гамильтонианами сводится к различию в начальных условиях. Сейчас нас будет интересовать, к чему приводят эти различия.

Итак, рассмотрим систему, характеризуемую гамильтонианом

$$H = H_0 + V,$$

где H_0 — невозмущенная часть гамильтониана и V — возмущение. Оператор эволюции системы можно представить в виде

$$U(t) = \frac{-1}{2\pi i} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{z - H},$$

где $R(z) = (z - H)^{-1}$ — оператор резольвенты¹², и контур проходит несколько выше действительной оси. Начальное условие возьмем в виде $|b, 0\rangle$ и будем интересоваться вероятностью возникновения фотона с волновым вектором k и поляризацией λ и перехода атома в основное состояние $|a\rangle$. Эта вероятность характеризуется амплитудой

$$M(t) = \langle a, 1_{k\lambda} | U(t) | b, 0 \rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_C dz e^{-izt} \langle a, 1_{k\lambda} | R(z) | b, 0 \rangle. \quad (23)$$

Матричный элемент $R(z)$ можно приближенно представить в виде

$$\frac{-V_{a, k\lambda; b, 0}}{(z - \hbar\omega) \left(z - \hbar\omega_0 - \sum_{\lambda k} \frac{|V_{a, k\lambda; b, 0}|^2}{z - \hbar\omega} \right)}.$$

Вторая скобка в знаменателе этого выражения приближенно равна $z - \hbar\omega_0 + \frac{1}{2} i\hbar\gamma$, где

$$\gamma = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_0^3}{c^3} |\langle r \rangle|^2,$$

и имеет, таким образом, полюс в нижней полуплоскости (лэмбовским сдвигом в данном случае пренебрегаем, считая его малым). При вычислении интеграла в (23) вычет следует взять лишь при $z = \hbar\omega$, так как вычет во втором полюсе затухает со временем. В результате получим

$$|M_{t \rightarrow \infty}|^2 = \frac{|V_{a, k\lambda; b, 0}|^2 / \hbar^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (1/4) \gamma^2}.$$

Квадрат модуля матричного элемента V принимает разные значения при гамильтонианах в формах (1) и (2). В первом случае он равен

$$|V_{a, k\lambda; b, 0}|^2 = \frac{2\pi e^2 \omega_0^3}{\omega c} |\langle r_{ba} e_{k\lambda} \rangle|^2,$$

во втором

$$|V_{a, k\lambda; b, 0}|^2 = \frac{2\pi e^2 \omega}{c} |\langle \mathbf{r}_{ba} \mathbf{e}_{k\lambda} \rangle|^2.$$

Второе выражение получается из первого, если его умножить на отношение $(\omega/\omega_0)^2$. Собственно, к этому множителю и сводится в основном различие в распределениях фотонов по частотам; есть еще пренебрежимо малое отличие в константах затухания (или вероятностях переходов), на котором мы останавливаться не будем. В окончательном виде распределения фотонов по частотам имеют вид (рис. 8):

для гамильтониана (1)

$$P(\omega) d\omega = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{c^4} \frac{\omega_0^2 \omega |\langle \mathbf{r} \rangle|^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (1/4)\gamma^2} d\omega, \quad (24)$$

для гамильтониана (2)

$$P(\omega) d\omega = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{c^4} \frac{\omega^3 |\langle \mathbf{r} \rangle|^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (1/4)\gamma^2} d\omega. \quad (25)$$

Легко видеть, что последнее выражение (25) не убывает при $\omega \rightarrow \infty$. Это не должно нас удивлять; ведь начальное условие в этом случае соответствует такому невероятному процессу, как внезапное, с бесконечно большой скоростью появление распределения $|b\rangle$ из ядра. Тот или иной реальный физический процесс может лишь приближенно соответствовать такому начальному состоянию. Поэтому распределение (25) следует обрезать при частотах, несколько больших ω_0 , и ввести соответствующий нормировочный множитель.

Следует отметить, что распределения (24) и (25) приведены в работе Пауэра и Циенау³; причем первое из них характеризовалось как неправильное, второе — как правильное. Как видно из изложенного, эти утверждения Пауэра и Циенау неверны; оба распределения правильные — они лишь соответствуют различным начальным условиям. Можно сказать, что первое распределение соответствует излучению из состояния с установившимся кулоновским полем; второе — излучению из состояния с неустановившимся кулоновским полем.

Выбор гамильтониана или соответствующего начального условия в той или иной конкретной физической ситуации может быть произведен лишь посредством анализа процесса возбуждения атомов. Если начальное условие требуется знать точно, то процесс возбуждения следует включить в рассматриваемую квантово-механическую задачу; это вернет, нас, разумеется, к теории рассеяния. Во многих экспериментальных ситуациях это сделать довольно трудно.

Следует отметить, что при узких спектральных линиях вопрос о форме гамильтониана вообще несуществен. Действительно, при узких линиях (в подавляющем большинстве случаев естественная ширина линий в относительных единицах меньше 10^{-7} — 10^{-8}) множитель $(\omega/\omega_0)^2$ с высокой степенью точности равен единице. Однако могут быть и исключения. В этом плане интересно рассмотреть эксперимент Лэмба — Ризерфорда⁴.

К сожалению, проведенное нами исследование непосредственно к анализу эксперимента Лэмба — Ризерфорда неприменимо. Действительно, выше принималась в расчет лишь двухуровневая система, в то время как в эксперименте Лэмба — Ризерфорда использовалась трехуровневая система. Они работали с индуцированным, а не спонтанным излучением. Наконец,

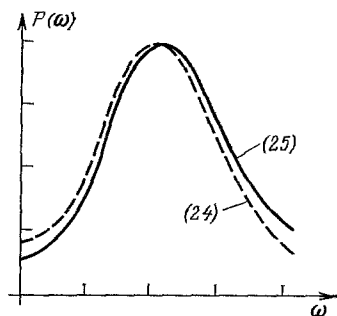


Рис. 8. Распределения по частотам фотонов, излученных при различных начальных условиях, описываемые соотношениями (24) и (25).

в исследованной ими схеме существенную роль играл спин. Поэтому из нашего исследования можно извлечь лишь намеки на то, почему теоретическое объяснение их результатов требует использования гамильтониана в форме (2).

Во-первых, почему вообще их эксперимент оказался чувствительным к форме гамильтониана? Это легко понять, если учесть, что они исследовали низкочастотный переход $3 \rightarrow 2$ (рис. 9), ширина которого определяется малым временем жизни уровня 2, так как переход $2 \rightarrow 1$ разрешенный. Оказывается, что относительная ширина перехода $3 \rightarrow 2$ порядка 0,1 (рис. 8). Естественно, что множитель $(\omega/\omega_0)^2$ может давать в этом случае поправки до 20%, что в аккуратном эксперименте Лэмба — Ризерфорда было уже заметной величиной.

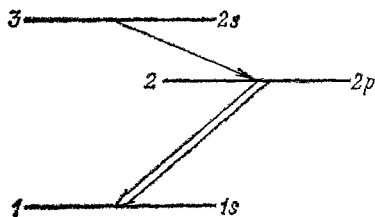


Рис. 9. Схема уровней в эксперименте Лэмба — Ризерфорда.

Во-вторых, можно думать, что при возбуждении состояния 3 электронным ударом в их эксперименте кулоновское поле могло не успевать устанавливаться. Действительно, время электронного удара порядка 10^{-15} — 10^{-16} , что много меньше интересующего нас периода 10^{-9} с (соответственно в кулоновском поле существенны компоненты длиной в десятки сантиметров). В-третьих, возбуждение состояния 3 происходит из основного $1s$ -состояния, тесно прилегающего к ядру. При образовании распределения, соответствующего возбужденному состоянию 3, атомный электрон как бы из ядра выбивается внешним электроном. Эти обстоятельства указывают на преимущества гамильтониана в форме (2) при описании эксперимента Лэмба — Ризерфорда. Напомним, что эти авторы как раз и отметили, что гамильтониан (2) лучше подходит для описания экспериментальных результатов. Вот, собственно, и все, что можно сказать про эксперимент Лэмба — Ризерфорда. Разумеется, было бы желательным исследовать его подробнее; может быть, это удастся сделать в дальнейшем.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье исследована роль начальных условий в излучательных задачах, когда и атомы, и электромагнитное поле описываются квантовомеханически. При этом исследована та сторона вопроса, которая оказывается связанной с двумя формами гамильтониана взаимодействия атомов с электромагнитным полем, наиболее часто используемыми в теоретических расчетах.

Показано, что переход от одной формы гамильтониана к другой не меняет характера физического процесса лишь в том случае, когда такой переход сопровождается соответствующим изменением состояний, и, в частности, начального состояния. Стоит подчеркнуть, что это изменение лишь формы начального состояния, — физическое содержание его остается неизменным. Использование разных форм гамильтониана с одним и тем же по форме начальным состоянием эквивалентно рассмотрению процесса излучения с физически различными начальными условиями.

Показано, что при начальном состоянии $|b, 0\rangle$ гамильтониан (1) описывает излучение из состояния с равновесным кулоновским полем; при том же по форме начальном состоянии гамильтониан (2) описывает излучение из состояния с неравновесным кулоновским полем. Положение дел здесь совершенно эквивалентно тому, которое имеет место при свободном движении электрона и которое было впервые рассмотрено В. Л. Гинзбургом¹⁰. Вообще говоря, оба состояния с той или иной степенью точности могут реализовываться на практике. Выбор между этими состояниями может быть произве-

ден лишь в результате физического анализа условий возбуждения. При узких линиях излучения различия в форме гамильтониана мало сказываются на их форме.

Не следует думать, что состояние с установившимся кулоновским полем чем либо выделено. Само возбужденное состояние атома не является стационарным, и требование, чтобы оно сопровождалось установившимся кулоновским полем, не имеет логических оснований.

Следует отметить, что имеется бесконечное число унитарных операторов, преобразующих гамильтониан к той или иной форме. Среди них оператор Пауэра и Циенау выделяется лишь простотой истолкования соответствующего начального условия.

Вообще говоря, возможны случаи, когда результаты расчетов с разными гамильтонианами не зависят от того, изменены или нет используемые состояния. Это имеет место для тех величин, для которых несущественна ширина уровня или которые относятся к центру линии. Для этих величин входящую в них частоту фотона можно заменить частотой перехода атома или молекулы. Пример такой величины имеется и в данной работе — это вероятность перехода из возбужденного состояния в невозбужденное или постоянная затухания верхнего уровня. Существование величин, нечувствительных к изменению состояний, не является случайным — оно обусловлено тем, что матричные элементы обоих гамильтонианов совпадают, если частота фотона равна частоте перехода. Один из таких важных частных случаев рассмотрен в работе Ф. В. Бункина¹³. Им показано, что вероятность двухквантового распада возбужденного состояния может быть вычислена в дипольном приближении с помощью любого из гамильтонианов без изменения состояний (использование гамильтониана (2) имеет в этом случае лишь вычислительные преимущества). Для выявления подобных частных случаев существенны как полнота системы невозмущенных состояний, так и учет в ряде случаев квадратичного члена $e^2 A^2$ в гамильтониане (1). Имеются и другие работы, посвященные аналогичным частным случаям, но их разбор выходит за рамки данной статьи. Это именно частные случаи; в общем случае использование неизменных состояний при разных гамильтонианах будет приводить к разным результатам — на это и обращает внимание данная статья.

Различие форм гамильтониана может привести к различным физическим результатам и в классике, если преобразование формы гамильтониана не сопровождать преобразованием формы начального условия. Например, пусть при одной форме гамильтониана начальный импульс системы равен нулю. При каноническом преобразовании меняются также импульсы, и новый импульс не обязательно равняется нулю в том же состоянии. Следовательно, форма начального условия при каноническом преобразовании должна быть изменена.

Разумеется, те же соображения о начальном состоянии системы справедливы и при рассмотрении индуцированного излучения, т. е. изменение гамильтониана без изменения начального состояния и в этом случае эквивалентно физическому изменению начальных условий. Однако в этом случае имеется вопрос, который мы не затрагивали и который заслуживает особого рассмотрения, — это вопрос о представлении взаимодействия атомов с не-квантованным и соответственно макроскопическим электромагнитным полем. Этому вопросу посвящен ряд недавно опубликованных работ⁶⁻⁸. По нашему мнению, этот вопрос может быть разрешен на основе предельного перехода от квантованного поля к не-квантованному, а какие-либо искусственные рецепты или догадки вряд ли приведут к цели.

Автор признателен В. Л. Гинзбургу, Ф. В. Бункину, Л. П. Питаевскому, С. М. Рытову, В. И. Татарскому, Б. М. Болотовскому, С. Н. Столярову и др. за заинтересованное обсуждение статьи.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Goeppert-Mayer M.—Ann. d. Phys., 1931, Bd. 9, S. 273.
2. Richards P. I.—Phys. Rev., 1948, v. 73, p. 254.
3. Power E. A., Zienau S.—Phil. Trans. Roy. Soc., 1959, v. 251, p. 427.
4. Lamb W. E., Retherford R. C.—Phys. Rev., 1950, v. 79, p. 549.
Lamb W. E.—Ibid., 1952, v. 85, p. 259.
5. Fried Z.—Ibid., Ser. A, 1973, v. 8, p. 2835.
Yang K. H.—Ann. Phys., 1976, v. 101, p. 62.
Forney J. J., Quattropani A., Bassani F.—Nuovo Cimento, Ser. B, 1977, v. 37, p. 78.
Olariu S., Popescu I., Collins C. B.—Phys. Rev., Ser. D, 1979, v. 20, p. 3095.
Lai C. S., Lo S. Y.—Phys. Lett., Ser. A, 1981, v. 87, p. 5.
6. Kobe D. H., Smirl A. L.—Amer. J. Phys., 1978, v. 46, p. 625.
Kobe D. H.—Phys. Rev. Lett., 1978, v. 40, p. 538.
Kobe D. H., Wen E. C. T.—Phys. Lett., Ser. A, 1980, v. 80, p. 121.
7. Агаонов Ю., Ау С. К.—Phys. Rev., Ser. A, 1979, v. 20, p. 1553; Phys. Lett., Ser. A, 1981, v. 86, p. 269.
8. Широков М. И.—ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 1210.
9. Шифф Л. Квантовая механика.—М.: ИЛ, 1959, с. 423.
10. Гинзбург В. Л.—ДАН СССР, 1939, т. 23, с. 773.
11. Magnus W.—Comm. Pure and Appl. Math, 1954, v. 7, p. 649.
Дыхне А. М., Юдин Г. Л.—УФН, 1978, т. 125, с. 377.
12. Кролль Н.—В кн. Квантовая оптика и квантовая радиофизика.—М.: Мир, 1966.
13. Букин Ф. В.—ЖЭТФ, 1966, т. 50, с. 1685.