

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

530.145.7

**ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ РЕЗОЛЬВЕНТЫ  
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ ТЕОРИИ ИЗЛУЧЕНИЯ**

***В. П. Быков, В. И. Татарский***

(Институт общей физики АН СССР,  
Физический институт им. П. Н. Лебедева АН СССР)

**СОДЕРЖАНИЕ**

Введение . . . . .	125
1. Дискретный спектр . . . . .	126
1.1. Оператор эволюции. 1.2. Теория возмущений для оператора эволюции.	
2. Непрерывный спектр. Излучательные задачи . . . . .	136
2.1. Квантование электромагнитных волн в волноводе. 2.2. Распад возбужденного состояния атома в волноводе. 2.3. Предельный переход от дискретного спектра к непрерывному. 2.4. Распад возбужденного состояния атома в свободном пространстве	
Заключение . . . . .	160
Список литературы . . . . .	160

**Введение.** В настоящее время круг задач, стоящих перед так называемой нерелятивистской квантовой электродинамикой (изучающей квантовые процессы излучения нерелятивистскими системами электронов — атомами, молекулами и др.), сильно расширился, что вызвано, несомненно, бурным развитием различных лазерных направлений исследования. Среди этих задач можно выделить настационарные задачи квантовой электродинамики, для которых важен процесс развития состояния системы во времени. Один из методов решения таких задач — метод резольвенты — рассматривается в данной работе.

Как известно, подавляющая часть задач квантовой электродинамики решается методами теории возмущений, наиболее известный вариант которой — это теория переходов между дискретными уровнями квантовых систем. Первые порядки такой теории возмущений описывают поведение системы лишь на малом интервале времени, много меньшем характерных времен переходов; учет же высших порядков весьма трудоемок. Поэтому уже на ранних этапах развития квантовой электродинамики предлагались различные альтернативные методы, предназначенные для описания развития состояния системы на значительных отрезках времени, такие, например, как метод Вигнера — Вайскопфа [1]. В дальнейшем этот метод развился и принял форму так называемой теории затухания. Однако метод Вигнера — Вайскопфа имеет тот недостаток, что решение в нем не отыскивается, а фактически угадывается на основании тех или иных физических соображений; это обычно определяют словами —

эвристический метод. Тот же недостаток, хотя и в более завуалированной форме, сохранился в теории затухания.

Как и другие «эвристические» подходы этот метод обладает тем недостатком, что он не является первым шагом какой-либо последовательной процедуры получения решения в виде разложения по малому параметру. Поэтому трудно оценить погрешности такого подхода или получить, в случае необходимости, поправки к нему.

В данной работе, носящей методический характер, мы хотим привлечь внимание к методу резольвенты — методу, который по своим возможностям значительно превосходит метод Вигнера — Вайскопфа, оставаясь в то же время последовательным методом теории возмущений. Сведения об этом методе разбросаны по разным источникам, а единственное известное нам изложение в учебнике [2] представляется не совсем удачным. Видимо, широкому использованию этого метода препятствует укрепившаяся за ним репутация излишней сложности. Однако ему можно придать форму, в которой он будет не сложнее обычной теории возмущений. Мы надеемся, что предлагаемая статья является шагом в этом направлении.

**1. Дискретный спектр.** Метод резольвенты разовьем сначала для квантомеханических систем, обладающих полным бесконечным набором дискретных уровней с тем, чтобы позже обобщить его на системы с непрерывным спектром.

**1.1. Оператор эволюции.** Важным элементом метода резольвенты является оператор эволюции — оператор, который выражает состояние  $|\Psi(t)\rangle$  в произвольный момент времени  $t$  через состояние  $|\Psi_0\rangle$  в начальный момент времени

$$|\Psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\Psi_0\rangle. \quad (1.1)$$

Тривиальной формой оператора эволюции является

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right], \quad (1.2)$$

что легко проверить прямой подстановкой  $|\Psi(t)\rangle$  в уравнение Шрёдингера. Отметим, что выражение (1.2) носит формальный характер, так как само по себе не позволяет обычно вычислить оператор  $\mathcal{U}$  в явном виде. То же относится и к следующей ниже формуле (1.3). По существу, все дальнейшее содержание статьи посвящено построению пригодной для практического использования формы оператора  $\mathcal{U}$ .

Другой, более важной для нас в дальнейшем, формой оператора эволюции является (считаем  $t_0 = 0$ )

$$\mathcal{U}(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{e^{-itz/\hbar}}{z - \hat{H}}, \quad (1.3)$$

где интегрирование производится по контуру  $C$ , изображеному на рис. 1. (Выражение  $z - \hat{H}$  следовало бы писать в виде  $z\hat{I} - \hat{H}$ , где  $\hat{I}$  — тождественный оператор. Однако в большинстве случаев оператор  $\hat{I}$  может быть опущен без каких-либо недоразумений.) То, что это действительно оператор эволюции, покажем чуть ниже, после нескольких замечаний. Оператор

$$\hat{R}(z) = \frac{1}{z - \hat{H}} \quad (1.4)$$

называется оператором резольвенты. Он является обратным по отношению к оператору  $z - \hat{H}$ , т. е.

$$(z - \hat{H}) \hat{R}(z) = \hat{R}(z)(z - \hat{H}) = \hat{I}, \quad (1.5)$$

где  $\hat{I}$  — тождественный оператор (операторная «единица»). Как будет видно далее, оператор  $\hat{R}(z)$  определен при всех значениях  $z$ , в том числе комплексных, кроме значений, равных собственным значениям гамильтониана  $\hat{H}$ .

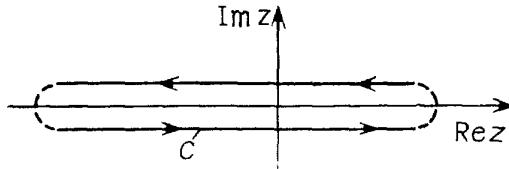


Рис. 1

Отметим связь оператора резольвенты с функцией Грина. В координатном представлении с использованием разложения тождественного оператора  $\hat{I} = \int |x'\rangle dx' \langle x'|$  очевидно имеем

$$\langle x | \Psi(t) \rangle \equiv \Psi(x, t) = \langle x | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \Psi_0 \rangle = \int \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle dx' \langle x' | \Psi_0 \rangle, \\ \text{т. е.}$$

$$\Psi(x, t) = \int dx' G(x, t; x', 0) \Psi(x', 0). \quad (1.6)$$

Здесь функция Грина

$$G(x, t; x', 0) = \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle \quad (1.7)$$

представляет собой ядро оператора эволюции. В соответствии с (1.3) получаем таким образом

$$G(x, t; x', 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz e^{-izt/\hbar} \langle x | \hat{R}(z) | x' \rangle; \quad (1.8)$$

следовательно, функция Грина и оператор резольвенты по полноте описания эквивалентны.

Ниже широко используется представление о функции от оператора. При этом функция, как обычно, определяется своим рядом, в результате чего вычисление функции сводится к умножению и сложению операторов. Процедура особенно упрощается, если известна полная ортонормированная система собственных векторов оператора, являющегося аргументом функции.

Действительно, пусть

$$\hat{A} |n\rangle = A_n |n\rangle, \quad (1.9a)$$

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n', n}, \quad (1.9b)$$

$$\hat{I} = \sum_n |n\rangle \langle n|, \quad (1.9c)$$

где  $\hat{A}$  — аргумент некоторой функции  $f(\hat{A})$  и  $|n\rangle$  его собственные векторы (состояния). Умножая (1.9c) слева на  $\hat{A}$  и используя (1.9a), получим

$$\hat{A} = \sum_n |n\rangle A_n \langle n|.$$

Возводя это соотношение во вторую, третью и т. д. степени, получаем, используя (1.96)

$$\hat{A}^2 = \sum_n |n\rangle A_n^2 \langle n|, \quad \hat{A}^3 = \sum_n |n\rangle A_n^3 \langle n|, \dots,$$

откуда для произвольной аналитической функции  $f(z)$  получаем формулу

$$f(\hat{A}) = \sum_n |n\rangle f(A_n) \langle n|. \quad (1.10)$$

Пусть теперь  $|n\rangle$  — собственные функции, а  $E_n$  — собственные значения гамильтониана  $\hat{H}$  (т. е.  $\hat{A} = \hat{H}$ ); тогда согласно (1.10) имеем при  $f(z - \hat{H}) = (z - \hat{H})^{-1}$

$$\hat{R}(z) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{z - E_n}. \quad (1.11)$$

Подставим разложение (1.11) в правую часть (1.3)

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C dz e^{-itz/\hbar} \hat{R}(z) = \sum_n |n\rangle \left( \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \frac{e^{-itz/\hbar}}{z - E_n} \right) \langle n|; \quad (1.12)$$

так как полюс  $z = E_n$  всегда лежит внутри контура интегрирования, то выражение в квадратных скобках равно  $e^{-iE_n t/\hbar}$ , и тогда согласно (1.10) правая часть (1.12) равна

$$\sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n| = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \sum_n |n\rangle \langle n| = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{U}(t)$$

и, следовательно, показана справедливость выражения (3) для оператора резольвенты.

**1.2. Теория возмущений для оператора эволюции.** Если собственные состояния и соответствующие им собственные значения гамильтониана известны, то соотношение (1.1), (1.3) совместно с (1.11) решает поставленную выше задачу о развитии состояния во времени. Однако обычно гамильтониан состоит из невозмущенной части и возмущения

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V \quad (1.13)$$

и известны лишь собственные состояния и соответствующие им собственные значения невозмущенного гамильтониана. В этом случае можно воспользоваться теорией возмущений.

Однако прежде, чем развивать эту теорию, отметим одно существенное обстоятельство. До сих пор использовались операторы, действующие в гильбертовом пространстве состояний той или иной квантовой системы. Эти операторы были абстрактными в том смысле, что не имели отношения ни к какой конкретной реперной системе (базису). Дальше будет использоваться реперная система состояний, образованная собственными состояниями невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$  исследуемой квантовой системы. При этом операторы могут быть представлены в виде матриц, кет-векторы состояний — в виде векторных столбцов и бра-векторы — в виде векторных строк; переход от абстрактных операторов и состояний к такому конкретному представлению описывается равенствами

$$O_{mn} = \langle m | O | n \rangle, \quad \Psi_m = \langle m | \Psi \rangle; \quad \Psi_n^* = \langle \Psi | n \rangle,$$

где  $\langle m |$  и  $| n \rangle$  — собственные бра- и кет-состояния невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ . Предполагается, что эти состояния образуют полную ортонормированную систему, т. е. удовлетворяют соотношениям (1.9б), (1.9в). При вырождении два и несколько собственных векторов, относящихся к одному значению  $E_\alpha$ , также предполагаются ортогональными друг другу и всем остальным собственным векторам. При таком представлении сохраняют свою силу операторные соотношения (1.1), (1.2), (1.3), (1.5), (1.11), (1.12), т. е. в этих соотношениях операторы могут быть заменены соответствующими матрицами конкретного представления. В частности, матрица оператора, обратного некоторому заданному оператору  $\hat{O}$ , есть просто матрица, обратная матрице  $\| O_{mn} \|$ .

Далее мы не будем различать в обозначениях оператор и соответствующую ему матрицу, имея в виду, что эта матрица отнесена к реперной системе, образованной собственными состояниями невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ .

Итак, оператор  $z - \hat{H}$  в матричном виде равен

$$z - \hat{H} = \begin{vmatrix} z - H_{00} & -V_{01} & -V_{02} & -V_{03} & \dots \\ -V_{10} & z - H_{11} & -V_{12} & -V_{13} & \dots \\ -V_{20} & -V_{21} & z - H_{22} & -V_{23} & \dots \\ -V_{30} & -V_{31} & -V_{32} & z - H_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (1.14)$$

Матрица, обратная  $z - \hat{H}$ , строится по известным правилам построения обратных матриц

$$(z - \hat{H})^{-1} = \Delta^{-1} \begin{vmatrix} D_{00} & D_{01} & D_{02} & D_{03} & \dots \\ D_{10} & D_{10} & D_{12} & D_{13} & \dots \\ D_{20} & D_{21} & D_{22} & D_{23} & \dots \\ D_{30} & D_{31} & D_{32} & D_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \quad (1.15)$$

где  $\Delta$  — детерминант матрицы  $z - \hat{H}$  и  $D_{jk}$  — алгебраическое дополнение к элементам  $(z - \hat{H})_{kj}$  этой матрицы (обратим внимание, что порядок индексов в  $D_{jk}$  обратен порядку индексов в том элементе  $(z - \hat{H})_{kj}$ , к которому  $D_{jk}$  служит алгебраическим дополнением).

Так как детерминант  $\Delta$  входит в знаменатель выражения (1.15), то матрица  $(z - \hat{H})^{-1}$  оказывается определенной лишь при тех значениях  $z$ , когда  $\Delta \neq 0$ . Детерминант  $\Delta$  может быть представлен в виде произведения

$$\Delta = \prod_m (z - E_m),$$

где  $E_m$  — собственные значения полного гамильтониана  $\hat{H}$ ; следовательно, комплексная переменная  $z$  может принимать любые значения, кроме собственных значений гамильтониана  $\hat{H}$ . Заметим, что собственные значения  $E_m$  не зависят от того или иного представления, поэтому не только матрица (1.15), но и вообще оператор резольвенты (1.4) оказывается определенным при всех значениях  $z$ , кроме собственных значений  $E_m$ , что и было отмечено в предыдущем разделе.

Алгебраические дополнения  $D_{jk}$ , как известно, также являются детерминантами, но на единицу более низкого порядка, нежели  $\Delta$ ; из  $\Delta$  они получаются вычеркиванием  $k$ -й строки и  $j$ -го столбца и умножением полученного детерминанта на  $(-1)^{k+j}$ . Как видим, для любого матричного элемента резольвенты полюса одинаковы, так как они определяются ну-

лями детерминанта  $\Delta$ ; о них обычно говорят, как о полюсах резольвенты. Однако вычеты в этих полюсах для разных матричных элементов могут быть различны, так как зависят от  $D_{jk}$ . Например, нули тех или иных  $D_{jk}$  могут быть близки к каким-либо полюсам резольвенты; тогда вклад этих полюсов в полную амплитуду будет невелик.

Обратим внимание на то, что все собственные значения полного гамильтониана  $E_m$  вещественны. Поэтому резольвента является однозначной функцией  $z$  и имеет лишь полюса, лежащие на вещественной оси,— это характерная черта дискретного спектра.

Матричный элемент оператора резольвенты

$$R_{jk} = \frac{D_{jk}}{\Delta} \quad (1.16)$$

представляет собой отношение алгебраического дополнения  $D_{jk}$  к детерминанту  $\Delta$ . Следует обратить внимание на то, что числитель и знаменатель  $R_{jk}$  разлагаются ниже в ряды теории возмущений независимо друг от друга. Эти разложения можно и даже следует делать с разной точностью, так как их результаты оказывают влияние на разные стороны изучаемого процесса. Корни знаменателя определяют собой показатели экспонент в вычетах, в то время как числители дают лишь предэкспоненциальные множители. Следовательно, для того чтобы интервал времени, в течение которого полученное решение близко к точному, был более широким, нужно определять корни знаменателя с *большей* точностью. Часто достаточная точность получается, если корни знаменателя вычислять во втором порядке теории возмущений, а алгебраические дополнения — в первом или даже нулевом порядке теории возмущений.

Прежде, чем перейти к отысканию упомянутых выше рядов теории возмущений, отметим, что достаточно найти подобный ряд лишь для детерминанта  $\Delta$ . Действительно, разложение  $\Delta$  по элементам какой-либо строки имеет вид ( $n$  — номер строки)

$$\Delta = \text{Det}(z - \hat{H}) = \sum_m (z - \hat{H})_{nm} D_{mn}$$

и  $D_{mn}$  не содержит матричного элемента  $(z - \hat{H})_{nm}$  (при написании детерминанта  $D_{mn}$  элемент  $(z - \hat{H})_{nm}$  вычеркивается).

Поэтому имеет место соотношение

$$\frac{\partial \Delta(z)}{\partial (z - \hat{H})_{nm}} = \frac{\partial \text{Det}(z - \hat{H})}{\partial (z - \hat{H})_{nm}} = D_{mn}. \quad (1.17)$$

Таким образом, если  $\Delta(z)$  известен как функция своих матричных элементов, то  $D_{mn}$  можно получить из  $\Delta(z)$  посредством дифференцирования. Заметим, что так как  $H_{nm} = H_{nm}^0 + V_{nm}$ , то (1.17) можно записать в более удобном для дальнейшего виде

$$D_{mn} = -\frac{\partial \Delta(z)}{\partial V_{nm}}. \quad (1.18)$$

Тогда с учетом (4) будем иметь

$$R_{jk} = -\frac{1}{\Delta(z)} \frac{\partial \Delta(z)}{\partial V_{kj}} = -\frac{\partial \ln \Delta(z)}{\partial V_{kj}}. \quad (1.19)$$

Таким образом, в операторе эволюции  $U(t)$  детерминант матрицы  $(z - \hat{H})$ , представленный в виде функции ее элементов, является главной величи-

ной, полностью определяющей процесс развития состояния во времени. Наша дальнейшая задача — представить  $\Delta(z)$  в виде ряда по степеням  $V_{kj}$ ; после этого формула (1.19) позволит нам найти и  $R_{jk}$ .

Выведем вспомогательное соотношение, связывающее детерминант матрицы со следом ее логарифма:

$$\text{Det } \hat{A} = \exp(\text{Sp } \ln \hat{A}). \quad (1.20)$$

Матрица (оператор)  $\ln \hat{A}$  определена общей формулой (1.10) — она легко может быть вычислена в базисе, состоящем из собственных функций оператора  $\hat{A}$  (для этого такой базис должен существовать; если  $\hat{A}$  — эрмитов оператор, то он всегда существует). Для доказательства (1.20) заметим, что детерминант и след матрицы не зависят от выбора базиса — они являются инвариантами матрицы. Поэтому, если соотношение (1.20) справедливо в каком-либо базисе, то оно справедливо и в других базисах. Рассмотрим базис, в котором  $\hat{A}$  диагональна. В этом случае  $\text{Det } \hat{A} = \prod_k A_k$ , где  $A_k \equiv A_{kk}$  — диагональные элементы  $\hat{A}$  в этом базисе. Согласно (1.10), матрица  $\ln \hat{A}$  также диагональна, и ее матричные элементы равны  $\ln A_k$ . Тогда

$$\text{Sp } \ln \hat{A} = \sum_k \ln A_k \text{ и } \exp(\text{Sp } \ln \hat{A}) = \prod_k A_k = \text{Det } \hat{A}.$$

Таким образом справедливость соотношения (1.20) установлена.

Далее, для целей теории возмущений удобнее оператор  $\hat{A}$  представить в виде

$$\hat{A} = \hat{I} - \hat{B},$$

а логарифм  $\hat{A}$  в виде ряда по степеням  $\hat{B}$ . Очевидно, что матрица  $\hat{B}$  диагональна, если диагональна матрица  $\hat{A}$  и из последнего равенства следует

$$A_k = 1 - B_k.$$

Если все  $B_k$  по модулю меньше единицы, то можно для логарифма написать ряд Тейлора

$$\ln A_k = \ln(1 - B_k) = - \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N} (B_k)^N. \quad (1.21)$$

Так как  $(B_k)^N = (\hat{B}^N)_{kk}$  — диагональный элемент матрицы  $\hat{B}^N$ , то имеет место равенство

$$\ln \hat{A} = \ln(\hat{I} - \hat{B}) = - \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N} \hat{B}^N, \quad (1.22)$$

которое в силу своего матричного характера выполняется уже в любом базисе, не обязательно при диагональных  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  (сохраняется, однако, условие, что все собственные значения  $B$  по модулю меньше единицы).

Обратимся теперь к отысканию ряда теории возмущений для  $\Delta(z) = \text{Det}(z - \hat{H})$ . Представив  $\hat{H}$  как сумму невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$  и возмущения  $\hat{V}$ , запишем оператор  $z - \hat{H}$  в виде

$$z - \hat{H} = z - \hat{H}_0 - \hat{V} = (z - \hat{H}_0) [\hat{I} - (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}]. \quad (1.23)$$

Детерминант матрицы этого оператора очевидно равен

$$\Delta(z) = \text{Det}(z - \hat{H}) = \text{Det}(z - \hat{H}_0) \text{Det}[\hat{I} - (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}]. \quad (1.24)$$

Если собственные значения невозмущенного гамильтониана известны, т. е.  $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$ , то

$$D_0(z) \equiv \text{Det}(z - \hat{H}_0) = \prod_n (z - E_n^0). \quad (1.25)$$

Что касается второго сомножителя в (1.24), то для его вычисления используем формулы (1.20) и (1.22), положив

$$\hat{A} = \hat{I} - (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}, \quad \hat{B} = (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}.$$

Тогда

$$\text{Det}[\hat{I} - (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}] = \exp\left(-\sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N} \text{Sp} \hat{B}^N\right). \quad (1.26)$$

Введем обозначение

$$S_N = \text{Sp} \hat{B}^N = \text{Sp} [(z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}]^N. \quad (1.27)$$

Тогда для  $\text{Det}(z - \hat{H}) = \Delta(z)$  получаем

$$\Delta(z) = D_0(z) \exp\left(-\sum_{N=1}^{\infty} \frac{S_N}{N}\right). \quad (1.28)$$

Матричные элементы оператора  $\hat{B} = (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}$  в базисе, образованном собственными состояниями невозмущенного гамильтониана, легко вычисляются; вставляя между операторами  $(z - \hat{H}_0)^{-1}$  и  $\hat{V}$  тождественный оператор  $\hat{I} = \sum_k |k\rangle \langle k|$ , имеем

$$\begin{aligned} B_{lm} &= \langle l | (z - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V} | m \rangle = \sum_k \langle l | (z - \hat{H}_0)^{-1} | k \rangle \langle k | \hat{V} | m \rangle = \\ &= \sum_k (z - E_k^0)^{-1} \delta_{lk} V_{km} = \frac{V_{lm}}{z - E_l^0}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Отсюда находим

$$S_1 = \text{Sp} \hat{B} = \sum_{l=0}^{\infty} B_{ll} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{V_{ll}}{z - E_l^0}. \quad (1.30)$$

Для  $(\hat{B}^2)_{lm}$  при помощи (1.29) получаем

$$(\hat{B}^2)_{lm} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{V_{lk}}{z - E_l^0} \frac{V_{km}}{z - E_k^0},$$

откуда

$$S_2 = \text{Sp} \hat{B}^2 = \sum_{k,l} \frac{V_{lk} V_{kl}}{(z - E_l^0)(z - E_k^0)}. \quad (1.31)$$

Точно так же

$$\begin{aligned} (\hat{B}^3)_{lm} &= \sum_{k,j} \frac{V_{lk} V_{kj} V_{jm}}{(z - E_l^0)(z - E_k^0)(z - E_j^0)}, \\ S_3 &= \sum_{k,j,l} \frac{V_{lk} V_{kj} V_{jl}}{(z - E_l^0)(z - E_k^0)(z - E_j^0)}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Из этих формул ясен закон, по которому конструируется  $S_N$  при любом  $N$ .

Теперь мы можем обратиться к формуле (1.19) и с ее помощью записать выражение для матричного элемента резольвенты  $R_{jk}$ . Здесь открываются два пути. На первом из них можно использовать формулу

$$R_{jk} = -\frac{\partial \ln \Delta(z)}{\partial V_{kj}}.$$

Подставляя в нее (1.28) и учитывая, что  $D_0(z)$  от  $V_{kj}$  не зависит, получим

$$R_{jk} = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N} \frac{\partial S_N}{\partial V_{kj}}.$$

Из формул (1.30)–(1.32) видно, что  $S_N$  представляет собой полином  $N$ -й степени по  $V$ . С учетом этого заключаем, что последняя формула дает разложение резольвенты по степеням возмущения, т. е. борновское разложение.

Второй путь связан с использованием формулы (1.19) в виде

$$R_{jk} = -\frac{1}{\Delta(z)} \frac{\partial \Delta(z)}{\partial V_{kj}}, \quad (1.33)$$

куда подставляется выражение для  $\Delta(z)$ , разложенное по степеням  $V$ . Разлагая в (1.18) экспоненту в ряд и группируя слагаемые одинакового порядка по  $V$ , получим

$$\begin{aligned} \Delta(z) = D_0(z) &\left[ 1 - S_1 + \frac{1}{2!} (S_1^2 - S_2) - \frac{1}{3!} (S_1^3 - 3S_1 S_2 + 2S_3) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{4!} (S_1^4 - 6S_1^2 S_2 + 8S_1 S_3 + 3S_2^2 - 6S_4) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Подставляя сюда (1.25), (1.30)–(1.32), получим разложение знаменателя резольвенты

$$\Delta(z) = \prod_l (z - E_l) - \sum_k \Delta_k \prod_l (z - E_l) + \frac{1}{2!} \sum_{k,j} \Delta_{kj} \prod_{l \neq k, j} (z - E_l) - \dots, \quad (1.35)$$

где

$$\Delta_k = V_{kk}, \quad \Delta_{kj} = V_{kk} V_{jj} - V_{kj} V_{jk}, \dots \quad (1.36)$$

— главные миноры матрицы возмущения  $\tilde{V}$ , т. е. детерминанты матриц, получаемых из матриц  $\tilde{V}$  посредством вычеркивания в них нескольких строк и симметричных им столбцов (индексы при  $\Delta$  указывают, какими строками и столбцами матрицы  $\tilde{V}$  образован данный главный минор); произведения и суммы в этом разложении берутся по всем возможным значениям индексов от нуля до бесконечности, кроме тех, которые специально отмечены, штрих при знаке суммы означает, что индексы, по

которым производится суммирование, обязательно различны. Знаменатель (1.35) можно представить в виде

$$\Delta(z) = \prod_l (z - E_l) \left[ 1 - \sum_k \frac{\Delta_k}{z - E_k} + \frac{1}{2!} \sum'_{k, j} \frac{\Delta_{kj}}{(z - E_k)(z - E_j)} - \frac{1}{3!} \sum'_{k, j, m} \frac{\Delta_{kjm}}{(z - E_k)(z - E_j)(z - E_m)} + \dots \right]; \quad (1.37)$$

если также использовать тождество

$$\begin{aligned} [(z - E_1)(z - E_2) \dots (z - E_n)]^{-1} &= [(z - E_1)(E_2 - E_1) \dots \\ &\dots (E_n - E_1)]^{-1} + \dots + [(z - E_i)(E_1 - E_i) \dots (E_n - E_i)]^{-1} + \dots \\ &\dots + [(z - E_n)(E_1 - E_n) \dots (E_{n-1} - E_n)]^{-1}, \end{aligned} \quad (1.38)$$

то  $\Delta(z)$  приводится к виду

$$\Delta(z) = \prod_l (z - E_l) [1 - F(z)], \quad (1.39)$$

где

$$F(z) = \sum_k A_k (z - E_k)^{-1}, \quad (1.40)$$

$$A_k = \Delta_k - \sum_{j \neq k} \frac{\Delta_{jk}}{(E_k - E_j)} + \frac{1}{2!} \sum'_{j, m \neq k} \frac{\Delta_{jmk}}{(E_k - E_j)(E_k - E_m)} - \dots \quad (1.41)$$

— коэффициенты, не зависящие от  $z$ . Таким образом, полюса  $\Delta(z)$  расположены в точках  $z = E_k$ . По крайней мере в общем виде коэффициенты  $A_k$  (т. е. вычеты в полюсах  $\Delta(z)$ ) все первого порядка малости по возмущению  $V$ , хотя в тех или иных частных случаях отдельные  $\Delta_k$  и

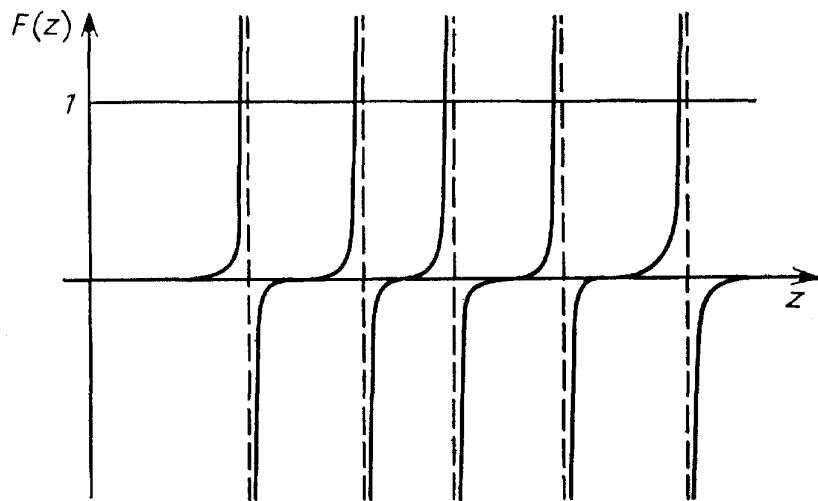


Рис. 2

другие миноры могут в силу каких-то обстоятельств стать особенно малыми или даже равными нулю.

Функцию  $1 - F(z)$  удобно исследовать, предполагая, что взаимодействие  $V$  стремится к нулю. Тогда функция  $F(z)$  практически везде будет равна нулю, кроме малых (порядка  $V$ ) окрестностей полюсов  $E_k$ . Соответственно и нули функции  $1 - F(z)$  лежат вблизи этих полюсов, как это видно из рис. 2. Восстановление  $V$  до нормального, конечного

(хотя и малого) значения несколько сдвинет положение нулей  $\Delta(z)$ , но оставит их в малой (порядка  $\mathcal{V}$ ) окрестности  $E_k$  и не изменит их числа. Более полное исследование знаменателя  $1 - F(z)$  в общем виде вряд ли возможно. Действительно, в нем фактически заключена информация обо всех возможных процессах в исследуемой системе при всех возможных начальных условиях. В частности, применительно к излучательным задачам, рассматриваемым далее, полное исследование  $1 - F(z)$  означало бы полное знание всех возможных процессов спонтанного и индуцированного излучения, поглощения, рассеяния и т. д. В общем виде это вряд ли возможно.

Согласно (1.19) и (1.39),  $n, k$  — матричный элемент оператора резольвенты равен

$$R_{n, k} = \frac{\partial F(z)/\partial V_{k, n}}{1 - F(z)} . \quad (1.42)$$

Структура функций  $\partial F(z)/\partial V_{kn}$  примерно такая же, как у функции  $F(z)$ . Так они имеют полюса в тех же точках  $E_k$ , как и функция  $F(z)$ . Из-за этого, в частности, полюса  $\partial F(z)/\partial V_{kn}$  не являются полюсами подынтегрального выражения в целом. Но вычеты в этих полюсах оказываются разного порядка по возмущению. Так как полюса числителя расположены рядом с нулями знаменателя, то величина вычета оказывается на амплитуде соответствующего вклада в матричный элемент оператора резольвенты.

Дифференцирование  $F(z)$  по  $V_{kn}$  включает в себя дифференцирование миноров  $\Delta_{j \dots t}$  по  $V_{kn}$ . При этом если  $k$  или  $n$  не совпадают с индексами минора, то производная равна нулю. Если же оба индекса  $V$  совпадают с какими-то индексами минора, то производная равна алгебраическому дополнению этого минора к  $V_{kn}$ , умноженному на  $V_{nk}$ . Аналогично дифференцирование минора по  $V_{nn}$  дает минор на единицу меньшей размерности (с вычеркнутым индексом  $n$ ), если  $n$  совпадает с каким-то индексом минора. Если же среди индексов минора нет  $n$ , то производная его по  $V_{nn}$  равна нулю. Учитывая это, нетрудно дать оценку старших членов производной  $F(z)$

$$\frac{\partial F(z)}{\partial V_{nm}} \approx \frac{V_{mn}}{(E_n - E_m)(z - E_n)} , \quad \frac{\partial F(z)}{\partial V_{nn}} \approx \frac{1}{z - E_n} . \quad (1.43)$$

Эти оценки показывают, что при вычислении, например, диагонального элемента  $U_{n,n}(t)$  важнейшими являются нули знаменателя  $z_i$ , ближайшие к  $E_n$ , поскольку они умножаются на большую величину

$$\partial F(z)/\partial V_{nn} |_{z=z_i} . \quad (1.43)$$

Дополнительные возможности классифицировать особенности элементов оператора эволюции появляются после перехода к непрерывному спектру (см. раздел 2). Здесь же отметим, что сама возможность качественного обзора этих особенностей является сильной стороной метода резольвенты.

Разложение (1.42) можно рассматривать и как паде-аппроксимацию [3] матричных элементов резольвенты. Отметим также некоторую аналогию разложения (1.42) с разложениями Фредгольма в теории интегральных уравнений. Эту аналогию можно превратить во взаимнооднозначное соответствие, если для отдельных элементов формулы (1.41) ввести такие же диаграммы Феймана, как это сделано в книге Мэтьюза и Уокера [4] для разложений Фредгольма. Как известно, фредгольмовские разложе-

ния в отличие от ряда Неймана сходятся везде. Таким образом, разложение (1.42) оказывается предпочтительнее, чем борновское разложение.

**2. Непрерывный спектр. Излучательные задачи.** Как уже упоминалось, некоторые динамические системы, в частности, электромагнитное поле в свободном пространстве, обладают непрерывным спектром. Дальнейшее изложение будет посвящено исключительно электромагнитному полю, его взаимодействию с атомами, молекулами, ионами и, вообще, квантовыми объектами.

Непрерывный спектр часто рассматривают как предельный случай дискретного спектра. Для того чтобы спектр электромагнитного поля стал дискретным, его, т. е. поле, мысленно помещают в некоторый большой резонатор, где находятся также и излучающие объекты. Тогда можно воспользоваться выведенными выше формулами для дискретного спектра и затем в них объем резонатора устремить к бесконечности. Полученные пределы, в частности, для матричных элементов (1.42) дадут соответствующие выражения для непрерывного спектра.

Не следует думать, что непрерывный спектр приводит только к усложнениям; в вычислительном отношении дело даже упрощается, поскольку многие суммы заменяются интегралами. К вычислению последних, как будет видно в дальнейшем, можно применить теорию функций комплексного переменного.

Сначала будет рассмотрен один из простейших примеров излучательной задачи — излучение двухуровневого атома в волноводе. На этом примере можно хорошо проследить за предельным переходом от дискретного спектра к непрерывному и понять все его особенности.

Затем будет построена теория собственной ширины спектральной линии спонтанного излучения, свободная от той непоследовательности, которая присуща теории Вигнера — Вайскопфа и теории затухания.

**2.1. (Квантование электромагнитных волн в волноводе.** Будем считать, что в рассматриваемом волноводе в интересующем нас диапазоне распространяется лишь один основной тип волн. Если взять в качестве примера волновод прямоугольного сечения (рис. 3), то в нем критические частоты волн основного и следующего

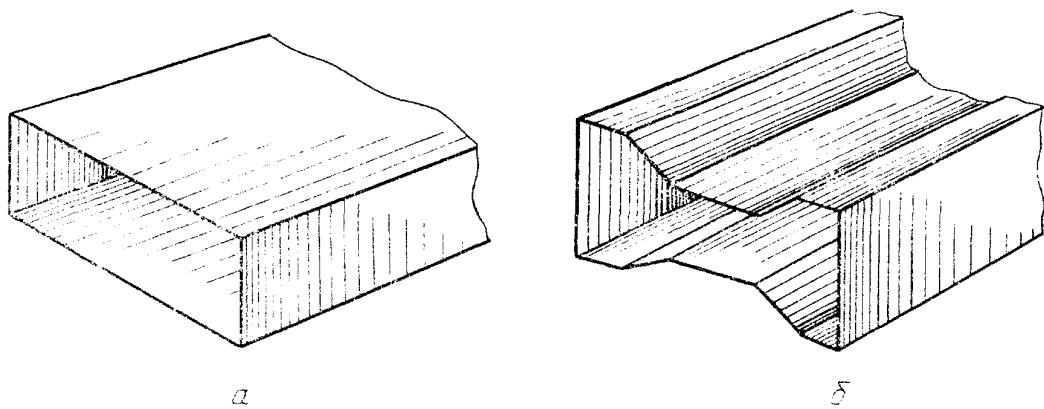


Рис. 3

за ним типа отличаются не очень сильно — всего лишь вдвое. Однако в СВЧ-технике известны приемы, посредством которых критическая частота волн основного типа может быть значительно понижена. Например,

если волновод взять такого вида, как показанный на рис. 3, б и при этом поперечные размеры его сделать много меньше длины волны, то критическая частота волны основного типа может быть сделана много меньше частоты перехода излучающей системы, а критические частоты волн высших типов будут много больше частоты перехода. Волновод при этом еще сохранит свой макроскопический характер, поскольку даже в оптике длина волны излучения на четыре порядка превосходит атомные размеры. Для простоты мы отвлекаемся, разумеется, от дисперсии и поглощения материала, из которого изготовлен волновод.

Волну основного ТЕ-типа в волноводе будем описывать векторным потенциалом

$$\mathbf{A} = G (a^+ e^{i\kappa z} + a e^{-i\kappa z}) \mathbf{\epsilon}(x, y), \quad (2.1)$$

где  $a^+$  и  $a$  — операторы рождения и уничтожения фотонов в рассматриваемой волне. Так как векторный потенциал при калибровке  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$  должен удовлетворять уравнению

$$\Delta \mathbf{A} + k^2 \mathbf{A} = 0 \quad (2.2)$$

( $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$ ), то для вектора поляризации  $\mathbf{\epsilon}(x, y) \perp \mathbf{e}_z$  получается уравнение

$$\Delta_{\perp} \bar{\mathbf{\epsilon}} + (k^2 - \kappa^2) \bar{\mathbf{\epsilon}} = 0, \quad (2.3)$$

при условии  $\operatorname{div}_{\perp} \mathbf{\epsilon} = 0$ . Кроме того, вектор  $\mathbf{\epsilon}$  (так же, как и векторный потенциал  $\mathbf{A}$ ) должен удовлетворять граничному условию

$$\mathbf{\epsilon}_{\text{рас}} = 0 \quad (2.4)$$

на поверхности волновода. Такая задача имеет решения лишь при дискретном наборе положительных значений круглой скобки в (2.3) [5]. Наименьшее из этих значений обозначим  $\kappa_c^2$  — поле  $\mathbf{\epsilon}$ , соответствующее этому значению  $\kappa_c^2$ , описывает поперечное распределение основной ТЕ-типа волны в волноводе. Имеем, следовательно, соотношение

$$k^2 = \kappa^2 + \kappa_c^2 \quad (2.5)$$

которое определяет зависимость частоты  $\omega = ck$  основной волны от параметра ее распространения  $\kappa = 2\pi/\lambda_{\text{волны}}$ , обратно пропорционального волноводной длине волны. Условие  $\kappa = 0$  определяет критическую частоту волны

$$\omega_c = c\kappa_c. \quad (2.6)$$

Так как уравнение (2.3) линейно относительно вектора  $\mathbf{\epsilon}$ , то этот вектор можно подчинить условию

$$\int d\mathbf{s} \mathbf{\epsilon}^2 = S, \quad (2.7)$$

где интегрирование производится по поперечному сечению волновода; тем самым считается, что среднее по сечению волновода значение квадрата вектора  $\mathbf{\epsilon}$  равно единице. Тогда нормировочная постоянная в векторном потенциале  $G$  определяется из условия, что полная энергия волны равна  $\hbar\omega a^+ a$ ,

$$G = \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega S L} \right)^{1/2}. \quad (2.8)$$

Как уже говорилось, для того чтобы начать исследование излучения с дискретного спектра, необходимо ограничить объем, занимаемый полем. Будем считать, что длина рассматриваемого волновода конечна и равна  $L$ , поля на концах волновода подчиним периодическим граничным условиям. Тогда параметр распространения принимает следующие значения

$$\kappa_n = \frac{2\pi}{L} n, \quad (2.9)$$

где  $n$  — целое число, принимающее значения  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Очевидно, соседние значения  $\kappa_n$  отличаются на  $\Delta\kappa = 2\pi/L$ , т. е. имеет место равенство

$$\frac{L}{2\pi} \Delta\kappa = 1. \quad (2.10)$$

Наложение периодических граничных условий превращает волновод в резонатор с дискретным спектром и это еще будет обсуждаться нами ниже (п. 2.3); однако, учитывая, что в дальнейшем длина  $L$  будет устремлена к бесконечности, имеет смысл сохранить термин волновод. Учитывая все сказанное, приходим к выводу, что поле в волноводе описывается векторным потенциалом

$$\mathbf{A}(x, y, z) = \epsilon \sum_j \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_j S L} \right)^{1/2} (a_j^+ e^{i\kappa_j z} + a_j^- e^{-i\kappa_j z}). \quad (2.11)$$

Этим исчерпываются основные, необходимые в дальнейшем сведения о распространении квантованных волн в волноводе.

**2.2. Распад возбужденного состояния атома в волноводе.** Обратимся теперь к интересующей нас задаче об излучении атома. Будем считать, что в начальный момент атом находится в возбужденном состоянии  $|b\rangle$  и фотоны отсутствуют, т. е. все собственные волны или осцилляторы находятся в основном, вакуумном состоянии  $|0\rangle$ . Все остальные состояния атома предполагаются лежащими выше по энергии состояния  $|b\rangle$ . Гамильтониан взаимодействия

$$V = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} \quad (2.12)$$

связывает исходное состояние  $|b, 0\rangle$  с набором состояний  $\langle a, j |$ , в которых атом находится в основном состоянии, и в  $j$ -м осцилляторе имеется один фотон. Можно вычислить разные характеристики процесса излучения; остановимся на законе распада, определяемом квадратом модуля диагонального матричного элемента оператора эволюции (см. соотношения (1.3) и (1.37))

$$U_{b0, b0} = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz e^{-izt/\hbar} R_{b0, b0}. \quad (2.13)$$

Как показано во втором параграфе первой части, при вычислении диагонального матричного элемента наибольшими по амплитуде являются вычеты в полюсе  $E_{b0}$  и соседние с ним (отстоящие от него на расстояние порядка  $\hbar$ ). Нетрудно понять, что в рассматриваемом случае все такие полюса будут учтены, если кроме полюса в  $E_{b0}$  в  $F(z)$  будут оставлены также полюса в  $E_{aj}$ , соответствующие по энергии состояниям  $|a, j\rangle$ , в которых атом находится в основном состоянии и в  $j$ -м осцилляторе

имеется один фотон. Таким образом, функцию  $1 - F(z)$  следует записать в виде

$$1 - F(z) = 1 - \frac{A_{b0}}{z - E_{b0}} - \sum_j \frac{A_{aj}}{z - E_{aj}}, \quad (2.14)$$

где

$$A_{b0} = \sum_j \frac{|V_{b0, aj}|^2}{E_{b0} - E_{aj}} + \dots, \quad A_{aj} = - \frac{|V_{b0, aj}|^2}{E_{b0} - E_{aj}}, \quad (2.15)$$

$$E_{b0} = E_b, \quad E_{aj} = E_a + \hbar\omega_j. \quad (2.16)$$

Таким образом, (2.14) приводим к виду

$$1 - F(z) = 1 - \sum_j \frac{|V_{b0, aj}|^2}{(z - E_{b0})(z - E_{aj})}. \quad (2.17)$$

Согласно (1.43)

$$\frac{\partial F(z)}{\partial V_{b0, b0}} \approx \frac{1}{z - E_{b0}}. \quad (2.18)$$

В разложениях (2.15) и (2.16) учтены только члены, дающие главный вклад в оператор эволюции, и именно эти члены учитываются эвристически в методе Вигнера — Вайскопфа. В методе резольвенты при необходимости эти разложения могут быть уточнены и даже все ряды могут быть выписаны полностью (раздел 1.2, (1.39)–(1.41)).

Итак, в рассматриваемом случае получаем

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz e^{-izt/\hbar} \left[ (z - E_b) - \sum_j \frac{|V_{b0, aj}|^2}{z - \hbar\omega_j} \right]^{-1}, \quad (2.19)$$

где положено  $E_a = 0$ .

В гамильтониан взаимодействия  $V$  входит оператор импульса атомного электрона. Диагональные элементы этого оператора, соответствующие переходам без изменения энергии, равны нулю, поэтому для двухуровневого атома он имеет вид

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 \hat{\sigma}, \quad \hat{\sigma} = |b\rangle\langle a| + |a\rangle\langle b|. \quad (2.20)$$

Для простоты принято, что параметр  $\mathbf{p}_0$  — веществен, направлен вдоль  $\mathbf{e}$  в месте расположения атома и равен по модулю  $m\Omega r$ , где  $r$  — модуль матричного элемента координаты для перехода  $b \rightarrow a$  и  $\Omega$  — частота перехода  $(E_b - E_a)/\hbar$ . Тогда учитывая (2.12), (2.11) и (2.16), получим

$$V = -g \sum_j (\omega_j L_c)^{-1/2} (a_j^+ e^{i\omega_j z} + a_j e^{-i\omega_j z}) \hat{\sigma}, \quad (2.21)$$

где

$$g = \epsilon \hbar \Omega \left( 2\pi \alpha \frac{r^2}{S} \right)^{1/2} \quad \left( \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \right). \quad (2.22)$$

Следовательно, для матричного элемента, связывающего состояния  $|b, 0\rangle$  и  $|a, j\rangle$  в дипольном приближении, при котором пренебрегается изменением поля в пределах атома, получаем выражение

$$V_{a, j; b, 0} = \langle a, j | V | b, 0 \rangle = -g \left( \omega_j \frac{L}{c} \right)^{-1/2}. \quad (2.23)$$

При предельном переходе  $L \rightarrow \infty$  сумма в подынтегральном выражении (2.19) с учетом формулы (2.10) переходит в интеграл

$$\sum_j \frac{|V_{a, j; b_0}|^2}{z - \hbar\omega_j} \Rightarrow I = \int_0^\infty d\kappa \frac{L}{2\pi} \frac{g^2 c / \omega L}{z - \hbar\omega} ; \quad (2.24)$$

как видим, зависимость интеграла от длины волновода  $L$  пропадает и тем самым предельное значение интеграла при  $L \rightarrow \infty$  получается автоматически

$$I = \frac{g^2 c}{2\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{1}{\omega(z - \hbar\omega)} . \quad (2.24)'$$

Этот интеграл описывает взаимодействие атома с осцилляторами. Вклад каждого осциллятора, пропорциональный  $|V_{a, j; b_0}|^2$ , уменьшается с ростом  $L$ , но число осцилляторов на единичном интервале  $\kappa$ , соответственно увеличивается так, что суммарное взаимодействие остается конечным.

Учтем зависимость  $\omega$  от  $\kappa$  (2.5)

$$\kappa = c^{-1}(\omega^2 - \omega_c^2)^{1/2}, \quad \omega_c = c\kappa_c, \quad d\kappa = d\omega \cdot \omega [c(\omega^2 - \omega_c^2)^{1/2}]^{-1} \quad (2.25)$$

и введем безразмерные частоты

$$v = \frac{\omega}{\Omega}, \quad v_c = \frac{\omega_c}{\Omega}, \quad dv = \frac{d\omega}{\Omega}, \quad \zeta = \frac{z}{\hbar\Omega}, \quad (2.26)$$

где  $\Omega$  — частота перехода атома; тогда интеграл (2.24) примет вид

$$I = \frac{g^2}{2\pi\hbar\Omega} \int_{v_c}^\infty \frac{dv}{(\zeta - v)(v^2 - v_c^2)^{1/2}} . \quad (2.27)$$

При вычислении этого интеграла следует учитывать, что  $\zeta$  не есть вещественное число, так как оно лежит на контуре  $C$  (см. рис. 1). Интеграл (2.27) вычисляется стандартными методами

$$I = \frac{g^2}{2\pi\hbar\Omega} \frac{1}{(\zeta^2 - v_c^2)^{1/2}} \ln \frac{(\zeta - v_c)^{1/2} + (\zeta + v_c)^{1/2}}{(\zeta - v_c)^{1/2} - (\zeta + v_c)^{1/2}} . \quad (2.28)$$

Можно убедиться, что выражение, стоящее под знаком логарифма при  $v_c \neq 0$ , ни при каких конечных  $\zeta$  не обращается в нуль или бесконечность; следовательно, точки ветвления логарифма не играют никакой роли. Точки ветвления корней существенны; правильный выбор листа римановой поверхности для корней определяется условием, вытекающим из вида интеграла (2.27), а именно, при вещественных  $\zeta < v_c$  интеграл должен быть вещественным, отрицательным и должен убывать по модулю при  $\zeta \rightarrow -\infty$ . Исследование показывает, что выражение (2.28) имеет лишь одну точку ветвления при  $\zeta = v_c$  и разрез при вещественных  $\zeta > v_c$ . Выявление этих обстоятельств из выражения (2.28) представляет собой довольно громоздкое дело, но они сравнительно легко вытекают из формы интеграла (2.27); действительно, этот интеграл представляет собой интеграл типа Коши, а римановы поверхности этих интегралов, как известно [6], имеют разрез вдоль контура интегрирования, а концы этого контура являются точками ветвления интеграла, рассматриваемого как функция комплексного переменного  $\zeta$ .

Действительно, интеграл (2.27) не имеет особенностей при вещественных  $\zeta < v_c$  и при комплексных  $\zeta$ , если  $\operatorname{Im} \zeta \neq 0$ . Следовательно, он представляет собой аналитическую функцию  $\zeta$  на всей плоскости за исключением разреза от  $\zeta = v_0$  до  $\zeta \rightarrow \infty$  вдоль вещественной оси.

На верхнем берегу разреза ( $\operatorname{Im} \zeta \downarrow 0$ ) интеграл принимает следующее значение ( $\operatorname{Re} \zeta > v_c$ )

$$I = \frac{g^2}{2\pi\hbar\Omega} \frac{1}{(\zeta^2 - v_c^2)^{1/2}} \left[ \ln \frac{(\zeta + v_c)^{1/2} + (\zeta - v_c)^{1/2}}{(\zeta + v_c)^{1/2} - (\zeta - v_c)^{1/2}} - i\pi \right]; \quad (2.29)$$

если в этом выражении знак перед  $i$  поменять на обратный, то получится значение интеграла на нижнем берегу разреза ( $\operatorname{Im} \zeta \uparrow 0$ ). Соотношение (2.29) представляет собой частный случай формул Сохоцкого — Племеля [6] для интегралов типа Коши. Во многих излучательных задачах, в частности в рассматриваемой нами, интеграл  $I$  может быть аналитически продолжен за разрез. Это позволяет широко применять в вычислениях теорию функций комплексного переменного.

При вещественных  $\zeta < v_c$  интеграл принимает следующие значения:

$$I = \frac{g^2}{2\pi\hbar\Omega} \frac{-2}{(v_c^2 - \zeta^2)^{1/2}} \operatorname{arctg} \left( \frac{v_c + \zeta}{v_c - \zeta} \right)^{1/2}, \quad -v_c < \zeta < v_c, \quad (2.30)$$

$$= \frac{g^2}{2\pi\hbar\Omega} \frac{-1}{(|\zeta|^2 - v_c^2)^{1/2}} \ln \frac{(|\zeta| + v_c)^{1/2} + (|\zeta| - v_c)^{1/2}}{(|\zeta| + v_c)^{1/2} - (|\zeta| - v_c)^{1/2}}, \quad \zeta < -v_c. \quad (2.31)$$

Вернемся к исследованию матричного элемента оператора эволюции (2.13); представим его в виде

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C d\zeta e^{-i\Omega\zeta t} F^{-1}(\zeta) \quad (2.32)$$

и напомним, что интегрирование производится по контуру  $C$  (см. рис. 1).

Как установлено выше, интеграл  $I$ , а вместе с ним и подынтегральное выражение в (2.32) имеет разрез от  $v_c$  до  $\infty$  вдоль вещественной оси. Этот разрез охватывается контуром  $C$ . Разделяя интегрирование в (2.32) по верхней (u) и нижней (d) частям контура  $C$ , получим

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\hbar\omega_c}^{\infty} dz \frac{e^{-izt/\hbar}}{\Delta_{b0}^{(d)}} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\hbar\omega_c}^{\infty} dz \frac{e^{-izt/\hbar}}{\Delta_{b0}^{(u)}}.$$

Знаменатели  $\Delta_{b0}^{(d)}$  и  $\Delta_{b0}^{(u)}$ , согласно (2.29), можно представить в виде

$$\Delta_{b0}^{(d, u)} = z - E_b - \Delta E_b(z) \pm i\Gamma(z),$$

где

$$\Delta E_b(z) = \frac{g^2}{4\pi} \frac{\ln \frac{(z + \hbar\omega_c)^{1/2} + (z - \hbar\omega_c)^{1/2}}{(z + \hbar\omega_c)^{1/2} - (z - \hbar\omega_c)^{1/2}}}{(z^2 - \hbar^2\omega_c^2)^{1/2}},$$

$$\Gamma(z) = \frac{g^2}{4(z^2 - \hbar^2\omega_c^2)^{1/2}}.$$

Следовательно, матричный элемент  $U_{b0, b0}(t)$  можно представить в виде

$$U_{b0, b0}(t) = -\frac{1}{\pi} \int_{\hbar\omega_C}^{\infty} dz \frac{\Gamma(z) e^{-izt/\hbar}}{[z - E_b - \Delta E_b(z)]^2 + \Gamma_b^2(z)} ; \quad (2.33)$$

в такой форме хорошо выявляется спектральная структура матричного элемента. В частности видно, что закон распада не является строго экспоненциальным; если бы  $\Delta E_b$  и  $\Gamma_b$  не зависели от  $z$ , а нижний предел равнялся бы  $-\infty$ , то закон распада был бы строго экспоненциальным. Как, однако, будет видно далее, отклонения закона распада от экспоненциального малы.

Контур интегрирования  $C$  может быть разными способами деформирован на римановской поверхности подынтегрального выражения; благодаря этому матричный элемент  $U_{bo,bo}(t)$  может быть представлен в разных формах. Один из способов такой деформации заключается в следующем.

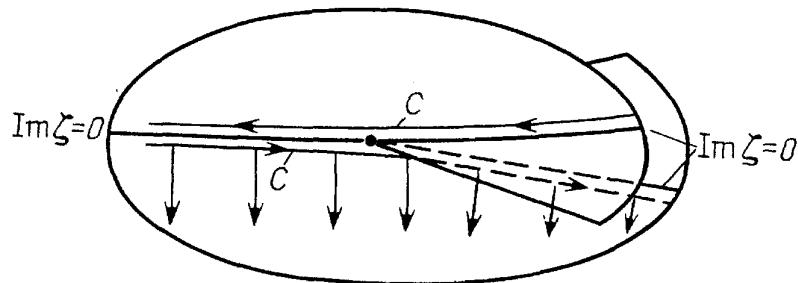


Рис. 4

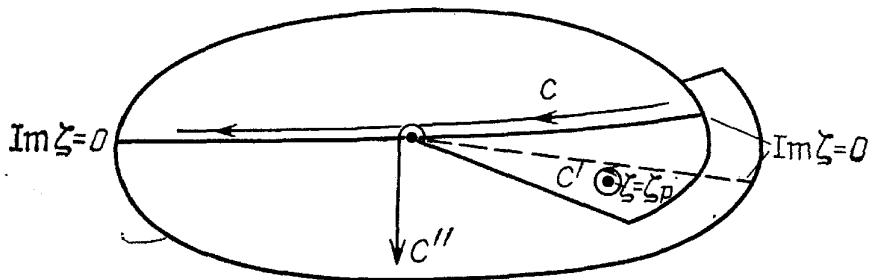


Рис. 5

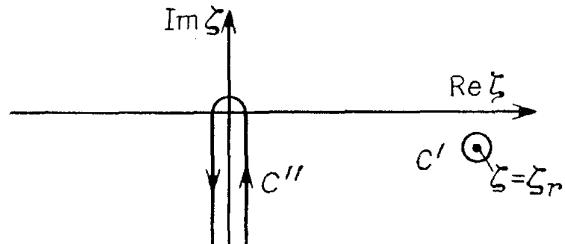


Рис. 6

Так как функция  $F(\zeta)$  не имеет нулей в нижней полуплоскости и экспонента  $e^{-i\zeta t}$  быстро убывает при  $\operatorname{Im} \zeta \rightarrow -\infty$  ( $t > 0$ ), то перемещая нижнюю часть контура  $C$  вниз (рис. 4) можно убедиться, что интеграл по этой части контура равен нулю. Попытка так же перемещать верхнюю часть контура  $C$  не приводит к успеху, так как при  $\operatorname{Re} \zeta > v_c$  контур будет двигаться по другому листу римановой поверхности функции  $F(\zeta)$ .

(рис. 5); эта функция так же, как и входящий в нее интеграл  $I$ , имеет точку ветвления при  $\zeta = v_c$ . Верхнюю часть контура  $C$  можно деформировать лишь к контуру, состоящему из двух частей (рис. 6); контуру  $C'$ , охватывающему нуль функции  $F(\zeta)$ , т. е. полюс подынтегрального выражения в (2.13), и контуру  $C''$ , охватывающему точку ветвления функции  $F(\zeta)$  при  $\zeta = v_c$ . Следует подчеркнуть, что полюс подынтегрального выражения в (2.33) (или нуль  $F(\zeta)$ ) лежит на другом листе римановой поверхности, нежели нижняя часть контура  $C$ ; поэтому нижнюю часть контура  $C$  можно было переместить вниз, не «задев» за полюс при  $\zeta = \zeta_p$ .

То, что функция  $F(\zeta)$  имеет нуль, лежащий несколько ниже вещественной оси, легко увидеть, если эту функцию представить в виде

$$F(\zeta) = (\zeta - 1) - \frac{g^2}{4\pi(\hbar\Omega)^2} \frac{1}{(\zeta^2 - v_c^2)^{1/2}} \left[ \ln \frac{(\zeta + v_c)^{1/2} + (\zeta - v_c)^{1/2}}{(\zeta + v_c)^{1/2} - (\zeta - v_c)^{1/2}} - i\pi \right]. \quad (2.34)$$

Второе слагаемое в этом выражении будем рассматривать как возмущение, тогда невозмущенное значение  $\zeta$ , при котором  $F(\zeta) = 0$ , равно единице а в первом порядке по возмущению значение  $\zeta$  можно искать в виде

$$\zeta_p = 1 + \Delta\zeta + i\gamma,$$

где  $\Delta\zeta$  и  $\gamma$  — малые величины. Подставим это значение  $\zeta$  в уравнение  $F(\zeta) = 0$ ; причем в член с круглой скобкой, являющийся возмущением, можно подставлять невозмущенное значение  $\zeta$ , т. е. единицу:

$$\Delta\zeta + i\gamma - \frac{R}{(1 - v_c^2)^{1/2}} \left[ \ln \frac{(1 + v_c)^{1/2} + (1 - v_c)^{1/2}}{(1 + v_c)^{1/2} - (1 - v_c)^{1/2}} - i\pi \right] = 0, \quad (2.35)$$

$$R = \frac{g^2}{4\pi(\hbar\Omega)^2} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{r^2}{2S}. \quad (2.36)$$

Отсюда получаем

$$\Delta\zeta \approx -R \ln v_c, \quad \gamma \approx -\pi R. \quad (2.37)$$

Обратим внимание, что величина  $\gamma$  — отрицательна, т. е. корень  $F(\zeta)$  лежит ниже вещественной оси. Однако этот корень лежит на другом листе римановой поверхности функции  $F(\zeta)$ , нежели нижняя часть контура  $C$ , так как при его отыскании использовалось выражение  $F(\zeta)$  для верхнего берега разреза — оно аналитически продолжалось за разрез. В данном случае, так как применялась теория возмущений, аналитическое продолжение заключалось в том, что возмущение в (2.33) считалось таким же, как на верхнем берегу, т. е. считалось, что возмущение практически не меняется при смещении  $\zeta$  вниз на малую величину  $\gamma$ .

Для оценок положим

$$\frac{e^2}{\hbar c} \approx 10^{-2}, \quad r^2 \approx 10^{-16} \text{ см}^2, \quad S \approx \lambda^2 \approx 10^{-8} \text{ см}^2, \quad v_c \approx 10^{-3}, \quad \bar{\varepsilon}^2 \approx 1;$$

тогда

$$R = 0,5 \cdot 10^{-10}, \quad \Delta\zeta = 3,5 \cdot 10^{-10}, \quad \gamma = -1,6 \cdot 10^{-10}.$$

Как будет видно в дальнейшем, интеграл по контуру  $C''$ , охватывающему точку ветвления, описывает малые отклонения закона распада от экспоненциального; однако эти отклонения малы, много меньше того, что доступно экспериментальному наблюдению. Основной вклад в

$U_{b0, b0}(t)$  дает таким образом вычет в точке  $\zeta = \zeta_p$

$$U_{b0, b0}(t) \approx \exp [\gamma \Omega t + i(1 + \Delta \zeta) \Omega t], \quad (2.38)$$

т. е. закон распада возбужденного состояния атома оказывается с высокой точностью экспоненциальным.

Задача о распаде возбужденного состояния атома, расположенного в волноводе, тем самым решена. Следует обратить внимание на важную черту этого решения, ради которого оно и приведено. Эта черта заключается в том, что теперь резольвента, представленная функцией  $F^{-1}(\zeta)$ , имеет более сложные особенности, чем в случае дискретного спектра; теперь резольвента является многозначной функцией  $\zeta$  (или  $z$ ), имеет точки ветвления и полюса, лежащие не на вещественной оси. В следующем параграфе возникновение этих особенностей будет прослежено более детально.

**2.3. Пределный переход от дискретного спектра к непрерывному.** Проследим на разобранном примере, как возникают более сложные особенности резольвенты, в частности, ее многозначность при переходе от дискретного спектра к непрерывному. Для этого снова рассмотрим знаменатель подынтегрального выражения в (2.19) для случая, когда волновод предполагается ограниченным по длине, а спектр всей системы, соответственно, дискретным.

Знаменатель подынтегрального выражения в (2.19) представим в виде

$$\begin{aligned} \hbar \Omega Y(\zeta) &= \hbar \Omega \left[ (\zeta - 1) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{g^2/v_j L}{\hbar^2 \Omega^3 (\zeta - v_j)} \right] = \\ &= \hbar \Omega \left[ (\zeta - 1) - D \sum_j \frac{1}{v_j (\zeta - v_j)} \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

где  $D = R \lambda L^{-1}$ . На рис. 6 показаны графики первого и второго слагаемого из квадратной скобки (2.19). Пересечения этих графиков соответствуют корням функции  $Y(\zeta)$

$$Y(\zeta_n) = 0. \quad (2.40)$$

Как видим, корни функции  $Y(\zeta)$  расположены исключительно на вещественной оси, а сама функция  $Y(\zeta)$  однозначна. Следовательно, подынтегральное выражение в (2.19) также является однозначной функцией  $\zeta$  и имеет только полюса, все расположенные на вещественной оси.

Риманова поверхность зависимости  $Y(\zeta)$ , как у всякой однозначной функции, однолистна; причем эта однолистность сохраняется на любом этапе предельного перехода  $L \rightarrow \infty$ , т. е. при любой густоте спектра собственных частот волновода и «частокола» полюсов подынтегрального выражения в (2.13) на вещественной оси. Выше мы видели, что при бесконечной длине волновода функция  $F(\zeta)$ , являющаяся предельным значением  $Y(\zeta)$ , многозначна, а ее риманова поверхность многолистна; следовательно, многозначность  $F(\zeta)$  и многолистность ее римановой поверхности возникают скачком «в конце» предельного перехода  $L \rightarrow \infty$ . Обычно тот лист римановой поверхности функции  $F(\zeta)$ , который получается после предельного перехода из единственного листа римановой поверхности функции  $Y(\zeta)$ , называют физическим листом. Дополнительные же листы, которые можно получить после предельного перехода, аналитически продолжая функцию  $F(\zeta)$  за разрез, называют нефизическими листами. Таким образом можно сказать, что нефизические листы римановой

поверхности возникают при предельном переходе скачком; соответственно и полюс на одном из нефизических листов при  $\zeta = \zeta_p$  возникает скачком.

Скачкообразные изменения в процессе предельного перехода в физике исключительны; обычно для таких изменений имеются специальные основания, что относится и к рассматриваемому нами случаю. Мы покажем, что физические величины в рассматриваемом нами случае без скачков переходят в свои предельные значения. Скачок происходит лишь в вычислительной части, в математическом аппарате.

Итак, снова обратимся к матричному элементу (2.19). Основной вклад в него дают вычеты в корнях, близких к  $\zeta = 1$ . Действительно, величина вычета определяется производной  $\partial Y / \partial \zeta$ , взятой в соответствующем корне знаменателя; производная  $\partial Y / \partial \zeta$  представляет собой сумму производных первого и второго слагаемых в (2.39). Производная первого слагаемого равна единице; производная второго слагаемого в корне  $Y(\zeta)$  стремится к бесконечности по мере удаления корня от  $\zeta = 1$ , как

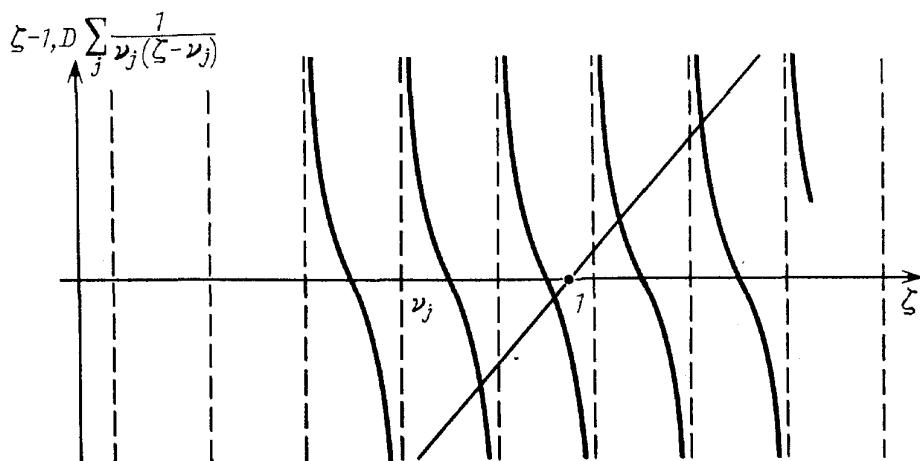


Рис. 7

видно из рис. 7. Следовательно, вычеты, взятые в корнях  $Y(\zeta)$ , значительно удаленных от  $\zeta = 1$ , будут малыми и не дадут заметного вклада в результат.

Первый сомножитель под знаком суммы в (2.39), частота  $\nu_j$ , мало меняется при изменении  $j$  в той области  $\nu_j \sim \zeta = 1$ , которая дает основной вклад; поэтому положим его равным единице. Функция  $Y(\zeta)$  примет следующий вид

$$Y(\zeta) = (\zeta - 1) - D \sum_j \frac{1}{\zeta - \nu_j}. \quad (2.41)$$

В области  $\nu_j \sim \zeta = 1$  резонансные частоты волновода расположены практически равномерно, так что можно принять

$$\nu_j = 1 + \lambda L^{-1} \left( j + \frac{1}{2} \right), \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.42)$$

соответственно для  $Y(\zeta)$  получаем выражение

$$Y(\zeta) = (\zeta - 1) - D \sum_j \left[ (\zeta - 1) - \lambda L^{-1} \left( j + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1}. \quad (2.43)$$

Складывая попарно члены, соответствующие  $j$  и  $-j-1$ , получим

$$Y(\zeta) = (\zeta - 1) - D \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2(\zeta - 1)}{(\zeta - 1)^2 - (\lambda L^{-1})^2 (j + (1/2))^2} = \\ = (\zeta - 1) + \pi R \operatorname{tg} [\pi \lambda^{-1} L (\zeta - 1)], \quad (2.44)$$

так как [7]

$$\operatorname{tg} x = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2x}{\{\pi[j + (1/2)]\}^2 - x^2}.$$

Вычислим производную  $Y'(\zeta)$  — как указывалось, она определяет величину вычета в корне  $Y(\zeta)$  в интеграле (2.19)

$$\frac{\partial Y}{\partial \zeta} = 1 + \pi^2 R \lambda^{-1} L \operatorname{tg}' [\pi \lambda^{-1} L (\zeta - 1)] = \\ = 1 + \pi^2 R \lambda^{-1} L \{1 + \operatorname{tg}^2 [\pi \lambda^{-1} L (\zeta - 1)]\};$$

так как второй член пропорционален  $L$ , то при  $L \rightarrow \infty$  первой единицей в этом выражении можно пренебречь. Окончательно, таким образом, получаем

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=\zeta_n} \approx \pi^2 R \lambda^{-1} L \{1 + \operatorname{tg}^2 [\pi \lambda^{-1} L (\zeta - 1)]\} = \\ = (R \lambda)^{-1} L [(\zeta_n - 1)^2 + (\pi R)^2], \quad (2.45)$$

так как в корнях, согласно (2.40), (2.44) имеет место равенство

$$\operatorname{tg} [\pi \lambda^{-1} L (\zeta_n - 1)] = -(\pi R)^{-1} (\zeta_n - 1),$$

где  $n$  — номер корня.

Следовательно, после интегрирования в (2.19) по контуру  $C$  получим

$$U_{b0, b0}(t) \approx (\hbar \Omega)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i \Omega \zeta_n t}}{(\partial Y / \partial \zeta)_{\zeta=\zeta_n}} = \\ = R \lambda L^{-1} (\hbar \Omega)^{-1} \sum_n \frac{e^{-i \Omega \zeta_n t}}{(\zeta_n - 1)^2 + (\pi R)^2}; \quad (2.46)$$

как видим, спектр матричного элемента  $U_{b0, b0}(t)$  имеет лоренцеву форму. Точнее сказать, лоренцову форму имеет подынтегральное выражение в интеграле

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta \frac{dn}{d\zeta} \frac{e^{-i \Omega \zeta t}}{(\zeta - 1)^2 + (\pi R)^2},$$

для которого сумма в (2.46) является интегральной суммой и которому она, следовательно, приближенно равна при больших  $L$ .

Обратимся снова к рис. 7 и рассмотрим положение корней  $Y(\zeta)$ , т. е. пересечений двух графиков на этом рисунке. Если корень расположен далеко от  $\zeta = 1$ , то он близок к соответствующему резонансу волновода  $\nu_j$ ; это имеет место при  $|j| \geq \pi R \lambda^{-1} L$ . Соответственно, в этих областях расположение корней почти строго эквидистантно. При приближении корней к  $\zeta = 1$  расстояние между ними постепенно уменьшается и становится минимальным, когда корни близки к  $\zeta = 1$ . При этом, как нетруд-

но видеть, в области

$$-\pi R \lambda^{-1} L \leq j \leq \pi R \lambda^{-1} L$$

набегает один лишний корень по сравнению с числом резонансов волновода  $v_j$  в этой области; поэтому среднее расстояние между корнями в этой области отличается от расстояния между корнями вне этой области примерно на

$$\frac{\lambda^2}{2\pi R L^2}$$

— величину второго порядка малости по параметру  $\lambda/L$ . Это наводит на мысль, что матричный элемент  $U_{b0, b0}$  можно вычислить, считая корни  $\zeta_n$  эквидистантными, а малые отклонения от эквидистантности учесть как возмущение.

Итак, пусть корни эквидистантны

$$\zeta_n = \zeta_n^0 = 1 + n\lambda L^{-1}; \quad (2.47)$$

очевидно, нулевой корень соответствует  $\zeta_0 = 1$ . Тогда имеем

$$\begin{aligned} U_{b0, b0}(t) &= R\lambda L^{-1}(\hbar\Omega)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-i\Omega(1+n\lambda L^{-1})t]}{n^2(\lambda L^{-1})^2 + (\pi R)^2} = \\ &= \frac{\pi R L e^{-i\Omega t}}{2c\hbar} \sum_n \frac{\exp[-2\pi i n c t / L]}{(n\pi)^2 + (\pi^2 R \lambda^{-1} L)^2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Можно убедиться, что сумма

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i n \pi T^{-1} t}}{(n\pi)^2 + (\Gamma T)^2} = \frac{1}{\Gamma T} \frac{e^{-\Gamma(t-T)} + e^{\Gamma(t-T)}}{e^{\Gamma T} - e^{-\Gamma T}} \quad \text{при } 0 \leq t \leq 2T, \quad (2.49)$$

т. е. является разложением в ряд Фурье периодической функции, совпадающей на периоде  $2T$  с цепной линией (рис. 8). Следовательно, для

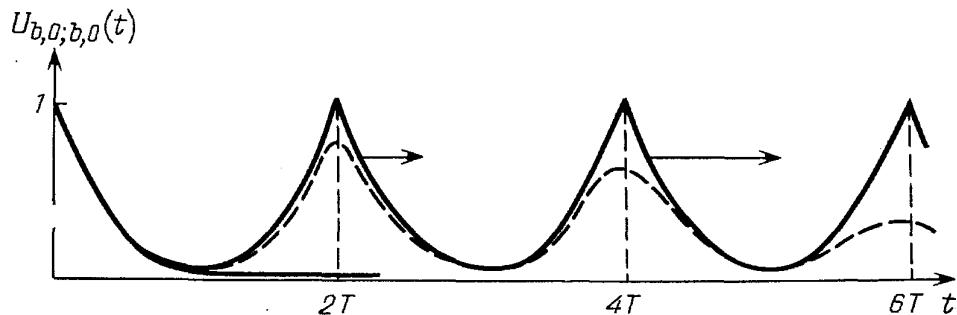


Рис. 8

$U_{b0, b0}(t)$  при  $0 \leq t \leq 2T$  получаем выражение

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{e^{-i\Omega t}}{\hbar\Omega} \frac{e^{-\Gamma(t-T)} + e^{\Gamma(t-T)}}{e^{\Gamma T} - e^{-\Gamma T}} = \frac{e^{-i\Omega t}}{\hbar\Omega} \frac{e^{-\Gamma t} + e^{\Gamma t-2\Gamma T}}{1 - e^{-2\Gamma T}}, \quad (2.50)$$

где

$$T = L/2c, \quad \Gamma = \pi\Omega R. \quad (2.51)$$

В пределе  $T \rightarrow \infty$  ( $L \rightarrow \infty$ ), при конечном  $t$  получаем

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{\hbar\Omega} e^{-\Gamma t - i\Omega t}, \quad (2.52)$$

как и раньше, экспоненциальный распад.

Дадим теперь оценку тех поправок, к которым приводит небольшое отклонение расположения корней  $Y(\zeta)$  от эквидистантного. Рассмотрим разность между точным и приближенным выражениями (2.46)

$$\Delta U_{b0, b0}(t) = D(\hbar\Omega)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{e^{-i\Omega\zeta_n t}}{(\zeta_n - 1)^2 + (\pi R)^2} - \frac{e^{-i\Omega\zeta_n^{(0)} t}}{(\zeta_n^{(0)} - 1)^2 + (\pi R)^2} \right]. \quad (2.53)$$

Предэкспоненциальный множитель в первом слагаемом разложим в ряд по малым отклонениям корней от эквидистантного расположения и ограничимся первым приближением

$$\Delta U_{b0, b0}(t) = D(\hbar\Omega)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\Omega\zeta_n^{(0)} t} \left\{ \frac{e^{-i\Omega\Delta\zeta_n t} - 1}{(\zeta_n^{(0)} - 1)^2 + (\pi R)^2} - \frac{2e^{-i\Omega\Delta\zeta_n t} (\zeta_n^{(0)} - 1) \Delta\zeta_n}{[(\zeta_n^{(0)} - 1)^2 + (\pi R)^2]^2} \right\}. \quad (2.54)$$

Числитель первого слагаемого можно привести к виду

$$-2ie^{(i/2)\Omega\Delta\zeta_n t} \sin\left(\frac{1}{2}\Omega\Delta\zeta_n t\right).$$

Так как

$$\max |\Delta\zeta_n| \approx R^{-1} \left( \frac{\lambda}{\pi L} \right)^2,$$

то при конечном  $t$  числитель первого слагаемого оказывается величиной порядка  $(\lambda/L)^2$ . Так как числитель второго слагаемого пропорционален величине того же порядка малости  $\Delta\zeta_n$ , то оба слагаемых являются величинами второго порядка малости относительно параметра  $\lambda/L$ .

Так как в сумме (2.53) число существенных слагаемых примерно равно

$$2\pi R \lambda^{-1} L,$$

то эта сумма оказывается порядка  $\lambda/L$ . Следовательно, поправки к экспоненциальному закону (2.52), обусловленные неэквидистантностью спектра, убывают обратно пропорционально  $L$  при увеличении длины волновода.

Таким образом, особенности функции  $F^{-1}(\zeta)$ , приводящие к экспоненциальному распаду, такие, как существование нефизических листов римановой поверхности, полюс на этой поверхности и др., проявляют себя еще до конца предельного перехода  $L \rightarrow \infty$ , когда спектр уже очень частый, но как и исходно, дискретный, а функция  $Y^{-1}(\zeta)$  однозначна. Действительно, как мы видим, в процессе предельного перехода закон распада постепенно приближается к экспоненциальному, а спектр его становится лоренцевым. Лоренцев спектр ведь и означает, что рядом с вещественной осью лежит полюс. Выражаясь figurально, «частокол» полюсов функции  $Y^{-1}(\zeta)$  по мере его сгущения в процессе предельного пе-

рехода  $L \rightarrow \infty$  становится постепенно прозрачным и за ним проявляется нефизический лист римановой поверхности функции  $F^{-1}(\zeta)$  с лежащими на нем особенностями этой функции.

Вместе с тем следует отметить, что допредельное и послепредельное поведение матричного элемента  $U_{b0, b0}(t)$  качественно различны. До перехода к пределу  $U_{b0, b0}(t)$  ведет себя квазипериодически, т. е. в частности, приблизительно периодически повторяет свое начальное значение, равное единице, с любой наперед заданной точностью. Это означает, что возбуждение квазипериодически сосредотачивается в атоме, в его возбужденном состоянии. Такое квазипериодическое поведение системы есть проявление известного цикла Пуанкаре для квантовых систем. При сгущении спектра длительность цикла Пуанкаре возрастает и в пределе  $L = \infty$  становится бесконечной — возбуждение никогда уже не возвращается на атом. Иными словами, при  $L \rightarrow \infty$  исчезает «обратимость», которая имеется при любом конечном  $L$ . Это характерная черта непрерывного спектра, качественно отличающая его от дискретного спектра. Естественно поэтому, что математическое описание допредельного и послепредельного поведения  $U_{b0, b0}(t)$  сильно отличаются.

**2.4. Распад возбужденного состояния атома в свободном пространстве.** Как уже отмечалось, электромагнитное поле в свободном пространстве обладает непрерывным частотным спектром, т. е. в его спектре могут присутствовать волны любых частот. Системы с непрерывным спектром рассматриваются в данной работе как предельный случай систем с дискретным спектром, в которых спектр в зависимости от того или иного параметра становится все более частым. Поэтому будем считать, что в излучательных задачах электромагнитное поле и излучающий объект (в данном случае — излучающий атом) помещены в некоторую полость (резонатор), достаточно большого объема, имеющую резонансные свойства, т. е. обладающую дискретным спектром. Используя затем соотношения для дискретного спектра, устремим объем полости к бесконечности, переходя таким образом к непрерывному спектру. Взаимодействие поля каждой отдельной моды (резонанса) с атомом при этом уменьшается, так как падает доля этого поля, находящаяся в объеме атома, но число мод, с которыми атом взаимодействует, увеличивается так, что взаимодействие с полем в целом остается конечным.

Наиболее прост резонатор, имеющий форму куба, собственные поля которого подчиняются так называемым периодическим граничным условиям. Такой резонатор неоднократно описан в литературе, где рассматриваются излучательные задачи [8], и, в частности, при описании излучения абсолютно черного тела [9], поэтому напомним кратко лишь основные факты, связанные с описанием такого резонатора.

Оператор векторного потенциала квантованного электромагнитного поля кубической полости со стороной  $L$  имеет вид ( $V = L^3$ )

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_s \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_s V} \right)^{1/2} (a_s^+ e^{-i\mathbf{k}_s \mathbf{r}} + a_s^- e^{i\mathbf{k}_s \mathbf{r}}) \mathbf{e}_s, \quad (2.54)$$

где индексом  $s$  нумеруются собственные колебания (или осцилляторы) полости, волновые векторы которых принимают значения

$$\mathbf{k}_s = \left\{ \frac{2\pi l_s}{L}, \frac{2\pi m_s}{L}, \frac{2\pi n_s}{L} \right\} \quad (2.55)$$

при целочисленных  $l_s$ ,  $m_s$  и  $n_s$  частота собственных волн определяется условием

$$\omega_s = \frac{2\pi c}{L} (l_s^2 + m_s^2 + n_s^2)^{1/2}. \quad (2.56)$$

Собственные волны могут отличаться друг от друга не только частотой и направлением волнового вектора  $\mathbf{k}$ , но и поляризацией. Каждой частоте и волновому вектору соответствуют две поперечные и взаимоортогональные поляризации (кулонова калибровка)

$$\mathbf{e}_{1,2}\mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 = 0. \quad (2.57)$$

По всем таким осцилляторам и производится суммирование в соотношении (1).

Операторы рождения и уничтожения фотонов  $a_s^+$  и  $a_s$  подчиняются коммутационному соотношению

$$[a_s; a_{s'}^+] = \delta_{ss'}; \quad (2.58)$$

нормировочная константа в векторном потенциале выбрана так, чтобы энергия поля равнялась

$$H_f = \sum_s \hbar \omega_s a_s^+ a_s. \quad (2.59)$$

Состояния атомного гамильтониана  $H_a$  будем считать известными и, не конкретизируя их, примем для них буквенное обозначение  $|g\rangle$ . Таким образом стационарные состояния невозмущенного гамильтониана полной системы атом + электромагнитное поле можно представить в виде

$$|j\rangle = |g_j; n_j^{(1)}, n_j^{(2)}, n_j^{(3)} \dots\rangle, \quad (2.60)$$

где первый буквенный индекс  $g_j$  указывает состояние, атома, и целое число  $n_j^{(k)}$  равно числу фотонов в  $k$ -м осцилляторе; энергия такого состояния равна

$$E_j = E_{gj} + \sum_k n_j^{(k)} \hbar \omega_k. \quad (2.61)$$

Процессу спонтанного излучения соответствует начальное состояние

$$|i\rangle \equiv |b; 0, 0, 0, \dots\rangle \equiv |b, 0\rangle, \quad (2.62)$$

т. е. в начальный момент времени атом находится в возбужденном состоянии  $|b\rangle$ , и фотоны во всех осцилляторах отсутствуют  $|0\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle$ .

Возмущение в гамильтониане состоит из двух слагаемых

$$H' = V + W. \quad (2.63)$$

Первое слагаемое определяет взаимодействие квантовой системы (в данном случае — атома) с электромагнитным полем и имеет вид

$$V = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m^2 c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}); \quad (2.64)$$

ниже основная роль принадлежит первому члену в этом слагаемом, второй же будет опускаться (обсуждение роли второго члена можно найти, например, в [10]).

Второе слагаемое в возмущении (10) представляет собой так называемый контрчлен перенормировки и имеет вид

$$W = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2, \quad (2.65)$$

т. е. имеет ту же самую структуру, что и кинетическая энергия электрона. Включение такого слагаемого в (2.63) есть начальный этап процесса перенормировки массы. Необходимость этого процесса возникает из-за того, что взаимодействие атома с поперечным электромагнитным полем (2.64) приводит к большим поправкам к энергии состояний атомов, которые, однако, имеют структуру кинетической энергии и поэтому могут быть интерпретированы как изменение массы электрона. Часто применяют такую терминологию. Величину  $M$ , определяемую соотношением

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{m} + \frac{1}{\mu}, \quad (2.66)$$

называют затравочной массой электрона, а массу  $m$  — истинной или наблюданной массой электрона. Какой следует выбрать величину  $\mu$  будет ясно далее.

Полная программа перенормировок включает также перенормировку заряда и может быть последовательно выполнена лишь в рамках релятивистской квантовой электродинамики. Здесь мы ограничиваемся лишь начальным этапом перенормировки массы в рамках нерелятивистской теории; к счастью, для этого необходимо заимствовать из релятивистской теории лишь один параметр, а именно, параметр обрезания или предельную частоту, до которой электрон эффективно взаимодействует с электромагнитным полем. Впервые такая нерелятивистская перенормировка была проведена в работе Бете [11].

Теперь имеются все необходимые сведения для исследования процесса спонтанного излучения атома в свободном пространстве. Закон распада состояния (2.62) описывается матричным элементом

$$U_{b0, b0}(t) = \langle b, 0 | \mathcal{U}(t) | b, 0 \rangle, \quad (2.67)$$

где  $\mathcal{U}(t)$  — оператор эволюции системы. Для этого матричного элемента согласно (2.13) имеем выражение

$$U_{b0, b0}(t) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz e^{-i\omega t/\hbar} R_{b0, b0}(z), \quad (2.68)$$

где, согласно (1.19),

$$R_{b0, b0} = -\frac{\partial \Delta / \partial V_{b0, b0}}{\Delta}. \quad (2.69)$$

Исследуем сначала знаменатель этого выражения, равный, согласно (1.35),

$$\begin{aligned} \Delta(z) = \prod_l (z - E_l^0) - \sum_k V_{kk} \prod_{l \neq k} (z - E_l) + \\ + \frac{1}{2!} \sum_{k, j} (V_{kk} V_{jj} - V_{kj} V_{jk}) \prod_{l \neq k, j} (z - E_l^0) + \dots \end{aligned} \quad (2.70)$$

Как уже говорилось, возмущение в гамильтониане состоит из двух слагаемых. Далее будет показано, что возмущение  $V$  имеет недиагональные

матричные элементы, пропорциональные константе взаимодействия (равной корню квадратному из постоянной тонкой структуры  $e^2/\hbar c$ ), а возмущение  $W$  имеет диагональные матричные элементы, пропорциональные квадрату константы взаимодействия ( $1/\mu \sim e^2/\hbar c$ ). Если в выражении (2.70) ограничиться членами второго порядка по константе взаимодействия, то оно примет следующий вид

$$\Delta(z) = \prod_l (z - E_l^0) - \sum_k \left( V_{kk} + \sum_j \frac{V_{kj} V_{jk}}{z - E_j^0} \right) \prod_{l \neq k} (z - E_l^0) \dots,$$

где первый член нулевого порядка по константе взаимодействия, а второй представляет собой сумму двух слагаемых второго порядка по той же константе. Таким образом, знаменатель выражения (2.69) может быть представлен в виде

$$\Delta(z) = \prod_l \Delta_l(z) \equiv \prod_l \left[ z - E_l^0 - \left( V_{ll} + \sum_j \frac{V_{lj} V_{jl}}{z - E_j^0} \right) \right]. \quad (2.71)$$

Для числителя в  $R_{b0, b0}$ , согласно (1.18) имеем выражение

$$D_{b0, b0} = -\frac{\partial \Delta(z)}{\partial V_{b0, b0}} = \prod_{l \neq b_0} \left[ z - E_l^0 - \left( V_{ll} + \sum_j \frac{V_{lj} V_{jl}}{z - E_j^0} \right) \right]. \quad (2.72)$$

Следовательно, матричный элемент (2.68) оказывается равным

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \frac{e^{-izt/\hbar}}{\Delta_{b0}(z)}, \quad (2.73)$$

где

$$\Delta_{b0} = z - E_{b0} - \left( V_{b0, b0} + \sum_j \frac{V_{b0, j} V_{j, b0}}{z - E_j^0} \right). \quad (2.74)$$

Как видим, все сомножители знаменателя (2.71), кроме одного, сократились с соответствующими сомножителями числителя. По этому поводу необходимо сделать два замечания. Во-первых, это сокращение является приближенным, так как в числите имеются, строго говоря, другие члены, более высокого порядка по константе взаимодействия. Если бы они были учтены, то сокращены не были бы и нужно было бы учесть полюса подынтегрального выражения (2.68), обусловленные другими сомножителями в  $\Delta(z)$ ; однако вычеты в этих полюсах были бы малыми, так как главный член числителя (2.72) равен нулю ввиду наличия в нем таких же сомножителей, как в знаменателе. Это и оправдывает произведенное выше сокращение.

Во-вторых, заметим, что оставшийся после сокращений сомножитель  $\Delta_{b0}(z)$  характерен именно для задачи о спонтанном излучении; при другой задаче, например, при исследовании индуцированного излучения основную роль играли бы другие сомножители в  $\Delta(z)$ .

Обратимся теперь к вычислению и исследованию знаменателя (2.74) в подынтегральном выражении (2.73). Первый член в круглой скобке в (2.74) представляет собой диагональный матричный элемент второго слагаемого в возмущении (2.63). Учитывая (2.65), получим

$$V_{b0, b0} = \langle b, 0 | W | b, 0 \rangle = \frac{1}{2\mu} \langle b | p^2 | b \rangle; \quad (2.75)$$

заметим, что этот матричный элемент не зависит от состояния поля. Матричный элемент квадрата импульса представим в виде

$$\langle b | p^2 | b \rangle = \sum_g \langle b | p | g \rangle \langle g | p | b \rangle = \sum_g | p_{bg} |^2$$

и для  $V_{b0, b0}$  получим выражение

$$V_{b0, b0} = \frac{1}{2\mu} \sum_g | p_{bg} |^2. \quad (2.76)$$

Для отыскания второго слагаемого в круглой скобке в (2.74) необходимо знать недиагональные матричные элементы оператора

$$V = -\frac{e}{mc} pA(\mathbf{r}). \quad (2.77)$$

Для матричного элемента  $V_{b0, gj}$  получаем выражение

$$V_{b0, gj} = \langle b, 0 | V | g, j \rangle = -\frac{e}{m} \left( \frac{2\pi\hbar}{\omega_j V} \right)^{1/2} ((p e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}})_{bg} \mathbf{e}_j); \quad (2.78)$$

легко видеть, что эти матричные элементы отличны от нуля лишь в том случае, когда в кет-состояний в одном из осцилляторов (в  $j$ -м) содержится один фотон, так как взаимодействие линейно по операторам рождения и уничтожения фотонов.

Обсудим вопрос о дипольном приближении. На первый взгляд кажется, что в сумме

$$S = \frac{1}{2!} \sum_{g, j} \frac{V_{b0, gj} V_{gj, b0}}{z - E_{gj}^0} = \frac{\pi e^2 \hbar}{m V} \sum_{g, j} \frac{((p \mathbf{e}_j) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}})_{bg} (e^{-i\mathbf{k}_j \mathbf{r}} (p \mathbf{e}_j))_{gb}}{\omega_j (z - E_g - \hbar\omega_j)} \quad (2.79)$$

экспонента становится существенной при увеличении частоты, начиная с длин волн, сравнимых с боровским радиусом ( $\sim 10^{-8}$  см). Иными словами, представляется, что дипольное приближение, при котором экспонента в выражении (2.78) заменяется единицей, становится непригодным при длинах волн, короче боровского радиуса. Однако по отношению к выражению (2.79) это не так.

Действительно, во-первых, заметим, что в (2.79) существенны лишь те значения  $g$ , для которых близки энергии  $E_b$  и  $E_g$ , так как по мере увеличения  $E_g$  по сравнению с  $E_b$  матричные элементы (2.78) довольно быстро убывают, поскольку состояния  $|g\rangle$  становятся все более широко распределенными. Тем самым  $E_g$  не может принимать слишком больших значений.

Во-вторых, так как частоты, соответствующие длинам волн, меньшим боровского радиуса, столь велики, что  $\hbar\omega$  примерно в  $10^4$  раз больше, чем  $E_g$ , то в знаменателе выражения (2.80) можно пренебречь слагаемым  $E_g$  по сравнению с  $\hbar\omega$ ; следовательно, знаменатель становится независимым от индекса  $g$  и в числителе получается выражение

$$\sigma = \sum_g |((p \mathbf{e}_j) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}})_{bg}|^2 = \sum_g \langle b | (p \mathbf{e}_j) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{r}} | g \rangle \langle g | e^{-i\mathbf{k}_j \mathbf{r}} (p \mathbf{e}_j) | b \rangle.$$

Так как суммирование по  $g$  дает тождественный оператор, то для  $\sigma$  получаем выражение

$$\sigma = \langle b | (p\mathbf{e}_j) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} (p\mathbf{e}_j) | b \rangle = \sum_g \langle b | p\mathbf{e}_j | g \rangle \langle g | p\mathbf{e}_j | b \rangle = \sum_g |(p\mathbf{e}_j)_{bg}|^2.$$

Следовательно, при всех значениях  $\omega$  экспонента в выражении (2.79) может быть опущена и это выражение оказывается равным

$$S = \frac{\pi e^2 \hbar}{4mV} \sum_{g, j} \frac{|(p\mathbf{e}_j)_{bg}|^2}{\omega_j(z - E_g - \hbar\omega_j)} \quad (2.80)$$

В этом выражении предполагается суммирование по всем осцилляторам поля, в том числе по тем, которые не отличаются по энергиям  $E_{gj}^0$ , а только по направлению распространения соответствующих волн и по их поляризациям. Поэтому просуммируем квадраты модулей (2.78) по поляризациям и направлениям

$$\sum_{\substack{\text{поляриз.}, \\ \text{направл.}}} |V_{b0, gj}|^2 \Rightarrow \frac{2e^2 \hbar}{3\pi c m^2} |\mathbf{p}_{bg}|^2 k dk = \frac{2e^2 \hbar}{3\pi c^3 m^2} |\mathbf{p}_{bg}|^2 \omega d\omega.$$

Учитывая, что энергия состояния  $E_{gj}^0$  равна  $E_{gj}^0 = E_g + \hbar\omega_j$ , получаем для слагаемого  $S$  выражение

$$S = \frac{e^2 \hbar}{3\pi c^3 m^2} \sum_g |\mathbf{p}_{bg}|^2 \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega d\omega}{z - E_g - \hbar\omega}. \quad (2.81)$$

Как уже упоминалось, взаимодействие электрона с полем описывается матричным элементом (2.78) лишь до некоторой предельной частоты  $\omega_{\max}$ , а далее быстро уменьшается; поэтому интегрирование в (2.81) проводится до частоты  $\omega_{\max}$ . В работе Бете [11] показано, что эта частота соответствует комптоновской длине волны

$$\omega_{\max} = \frac{mc^2}{\hbar} (\sim 10^{21} \text{ с}^{-1}); \quad (2.82)$$

при энергиях

$$\hbar\omega_{\max} = mc^2$$

электрон становится релятивистской частицей, так что естественно, что нерелятивистские соотношения делаются непригодными. Параметр  $\omega_{\max}$  единственный, который нужно заимствовать из последовательной релятивистской теории для того, чтобы в нерелятивистской теории получать разумные результаты.

Объединим теперь  $S$  и  $V_{b0, b0}$ , полагая в последнем

$$\frac{1}{\mu} = \frac{2e^2}{3\pi c^3 m^2} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega. \quad (2.83)$$

В результате получим

$$V_{b0, b0} + S = \frac{\alpha}{3\pi} \frac{\hbar}{m^2 c^2} \sum_g |\mathbf{p}_{bg}|^2 \left( \int_0^{\omega_{\max}} d\omega + \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{\omega}{\xi - \Omega_g - \omega} \right),$$

где  $\alpha = e^2/\hbar c$  — постоянная тонкой структуры,  $\zeta = z/\hbar$  и  $\Omega_g = E_g/\hbar$ . Объединяя интегралы в скобках, получим для этой суммы выражение

$$V_{b_0, b_0} + S = \frac{\alpha}{3\pi} \frac{\hbar}{m^2 c^2} \sum_g |\mathbf{p}_{bg}|^2 (\zeta - \Omega_g) \int_0^{\omega_{\max}} \frac{d\omega}{\zeta - \Omega_g - \omega}. \quad (2.84)$$

Нетрудно видеть, что интеграл в (2.84) логарифмически расходится при  $\omega_{\max} \rightarrow \infty$ , в то время, как интеграл в (2.81) при том же условии расходится линейно, т. е. более сильно. Это обстоятельство, а также предположение, впоследствии оправдавшееся, что в релятивистской теории интеграл в (2.84) станет сходящимся, послужили для Бете побудительным мотивом для введения в возмущение члена  $W$  (2.65) при  $\mu$ , определяемом соотношением (2.83), что явилось первым шагом перенормировки массы.

Поскольку далее свойства интеграла в соотношении (2.84) играют важную роль, приведем основные, относящиеся к нему математические факты.

В математике интеграл вида

$$I(\zeta) = \int_a^b d\omega \frac{F(\omega)}{\omega - \zeta} \quad (2.85)$$

называют интегралом типа Коши [6]. Этот интеграл определяет аналитическую функцию комплексного переменного  $\zeta$ , не имеющую особенностей и однозначную по всей комплексной плоскости этой переменной и убывающую при  $|\zeta| \rightarrow \infty$ . При приближении  $\zeta$  к отрезку  $(a, b)$  сверху или

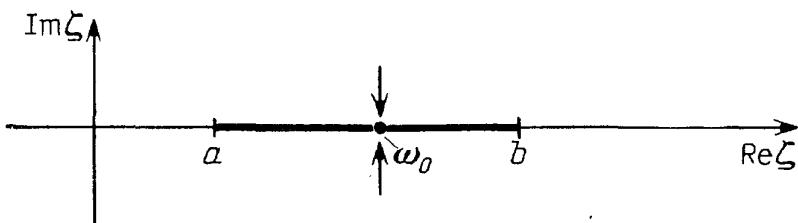


Рис. 9

снизу (рис. 9) функция  $I(\zeta)$  стремится к определенным предельным значениям, для которых существуют очень полезные соотношения, известные как соотношения Сохоцкого — Племеля,

$$\lim_{\substack{\zeta \rightarrow \omega_0, \\ a < \omega_0 < b, \\ \text{Im } \zeta > 0}} \int_a^b d\omega \frac{F(\omega)}{\omega - \zeta} = i\pi F(\omega_0) + \int_a^b d\omega \frac{F(\omega)}{i\omega - \omega_0}, \quad (2.86)$$

где  $\omega_0$  принадлежит отрезку  $(a, b)$ , лежащему на вещественной оси, и интеграл в правой части понимается в смысле главного значения. При стремлении  $\zeta$  к тому же значению  $\omega_0$  снизу ( $\text{Im } \zeta < 0$ ) предельное значение интеграла будет иным — знак перед мнимой единицей станет отрицательным.

Таким образом, функция  $I(\zeta)$  имеет разрез вдоль отрезка  $(a, b)$ , по которому производится интегрирование. Строго говоря, для выполнения соотношений Сохоцкого — Племеля необходимо, чтобы функция  $F(\omega)$  удовлетворяла специальному условию [6]; однако для всех функций, встречающихся в излучательных задачах, это условие выполняется

с избытком. Для многих простых функций  $F(\omega)$  интеграл (2.85) может быть вычислен в явном виде (например, при  $F(\omega) = 1$ , см. также случай, рассмотренный в п. 2); в подобных случаях функция  $I(\zeta)$  может быть аналитически продолжена за разрез. Следовательно, функция  $I(\zeta)$  может быть многозначной; тот лист римановой поверхности этой функции, на котором она стремится к нулю при  $|\zeta| \rightarrow \infty$ , называют физическим листом, остальные — нефизическими.

Вернемся к исследованию интеграла в (2.84)

$$I_g(\zeta) = \int_0^{\omega_m} d\omega \frac{1}{\omega - (\zeta - \Omega_g)}. \quad (2.87)$$

Этот интеграл как функция комплексного переменного  $\zeta$ , имеет разрез вдоль отрезка  $(\Omega_g, \Omega_g + \omega_m)$ , лежащего на вещественной оси. При вещественных  $\zeta < \Omega_g$  эта функция равна

$$I_g = \ln \left( 1 - \frac{\omega_m}{\zeta - \Omega_g} \right) \quad (2.88)$$

и при больших по модулю и отрицательных  $\zeta$  убывает приближенно, как

$$I_g(\zeta) \sim -\frac{\omega_m}{\Omega_g - \zeta} \quad (\zeta \rightarrow -\infty).$$

В интервале  $\Omega_g < \zeta < \Omega_g + \omega_m$ , на верхнем берегу разреза ( $\text{Im } \zeta = +0$ ), эта функция равна

$$I_g(\zeta) = i\pi + \ln \left( \frac{\omega_m}{\zeta - \Omega_g} - 1 \right); \quad (2.89)$$

ее значение на нижнем берегу отличается от (2.89) лишь знаком при минимой единице. При  $\zeta > \Omega_g + \omega_m$  функция (2.87) равна

$$I_g(\zeta) = \ln \left( 1 - \frac{\omega_m}{\zeta - \Omega_g} \right) \quad (2.90)$$

и при больших  $\zeta$  убывает по модулю примерно как

$$I_g(\zeta) \sim -\frac{\omega_m}{\zeta - \Omega_g}.$$

Таким образом, учитывая (2.89), получаем для  $\Delta_{b0}$  в интервале  $0 < z < \hbar \omega_m$  следующее выражение

$$\begin{aligned} \Delta_{b0} = z - E_{b0} - \frac{\alpha}{3\pi} \sum_g \frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2}{m^2 c^2} (z - E_g) \left[ i\pi \theta(E_b - E_g) + \right. \\ \left. + \ln \left| \frac{\hbar \omega_m}{z - E_g} - 1 \right| \right]. \quad (2.91) \end{aligned}$$

Покажем теперь, что это выражение обращается в нуль при некотором значении  $z$ , лежащем на нефизическом листе римановой поверхности  $\Delta_{b0}(z)$  вблизи значения  $z = E_{b0}$ . Искомое значение  $z$  положим равным

$$z_b = E_{b0} + \Delta E_b - i\Gamma_b, \quad (2.92)$$

где  $\Delta E_b$  и  $\Gamma_b$  — малые величины, подлежащие определению. Подставим это значение  $z$  в  $\Delta_{b0}$  и приравняем его нулю, при этом в первом слагаемом в  $\Delta_{b0}$  удержим поправки  $\Delta E_b$  и  $\Gamma_b$ , а во втором слагаемом (второго по-

рядка по константе взаимодействия) достаточно положить  $z_b = E_{b0}$ . Тогда, приравнивая отдельно нулю вещественную и мнимую части, получим

$$\Delta E_b = -\frac{\alpha}{3\pi} \sum_g \frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2}{m^2 c^2} (E_b - E_g) \ln \left| \frac{\hbar\omega_m}{E_b - E_g} - 1 \right|, \quad (2.93)$$

$$\Gamma_b = \frac{\alpha}{3} \sum_g' \frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2 (E_b - E_g)}{m^2 c^2}, \quad (2.94)$$

причем в последнем соотношении суммирование производится лишь по тем состояниям  $|g\rangle$ , для которых  $E_b - E_g > 0$ , т. е. лежащим ниже состояния  $|b\rangle$  по энергии, так как для остальных состояний  $I_g(\xi)$  не содержит мнимой части (см. (2.88)).

Величина  $\Delta E_b$  определяет смещение по энергии состояния  $|b, 0\rangle$  и обычно называется лэмбовским сдвигом; исходя из соотношения (2.93), Бете получил следующее приближенное выражение для лэмбовского сдвига уровня  $E_b$

$$\Delta E_b = -\frac{2e^4 \hbar \Psi_b^2(0)}{3m^2 c^3} \left( \ln \frac{mc^2}{|E_g - E_b|_{cp}} \right), \quad (2.95)$$

где  $\Psi_b(0)$  — амплитуда волновой функции на ядре и

$$\left( \ln \frac{mc^2}{|E_g - E_b|} \right)_{cp}$$

— среднее по всем состояниям  $|g\rangle$  значение логарифма. Из этого выражения следует, что в принятом приближении лэмбовский сдвиг отличен от нуля лишь для S-состояний, у которых волновая функция не обращается в нуль на ядре.

Для 2S-состояния атома водорода

$$\Psi_{2S}^2(0) = \frac{m^3 e^6}{8\pi\hbar^6}$$

и среднее значение логарифма по определению Бете равно

$$\left( \ln \frac{mc^2}{|E_g - E_{2S}|} \right)_{cp} \approx 7,63;$$

соответственно, для лэмбовского сдвига 2S-состояния получается выражение

$$\Delta E_{2S} = -\frac{7,63}{12\pi} \frac{e^{10} m}{c^3 \hbar^5}. \quad (2.96)$$

Будучи выраженным в частотных единицах, этот лэмбовский сдвиг оказывается равным примерно 1040 МГц, что очень близко к экспериментальному значению.

Коэффициент затухания  $2\Gamma/\hbar$  (он имеет смысл также вероятности перехода в единицу времени) можно представить в виде

$$\frac{2\Gamma}{\hbar} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \Omega_{ba}^3 |\mathbf{r}_{ba}|^2}{\hbar c^3} = \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{|\mathbf{r}_{ba}|^2}{\lambda^2} \Omega_{ba}, \quad (2.97)$$

где использовано известное соотношение

$$\mathbf{p}_{ba} = \langle b | \mathbf{p} | a \rangle = im\Omega_{ba} \langle b | \mathbf{r} | a \rangle = im\Omega_{ba} \mathbf{r}_{ba}$$

и предполагается, что ниже состояния  $|b\rangle$  лежит лишь одно состояние  $|a\rangle$ . Величина  $\hbar/2\Gamma$  есть не что иное, как период полураспада возбуждения.

Итак, установлено, что подынтегральное выражение в (2.74) имеет полюс при некотором  $z = z_b$ . Обратим внимание, что этот полюс лежит на нефизическом листе римановой поверхности функции:  $\Delta_{b0}(z)$ . Действительно,  $\text{Im } z_b = -i\Gamma_b < 0$ , в то время как при составлении уравнения  $\Delta_{b0}(z) = 0$  использовалось значение  $I_g(\zeta)$ , относящееся к верхнему бегрежу разреза; это означает, что функция  $\Delta_{b0}(z)$  аналитически продолжалась за разрез, т. е. на нефизический лист.

Полюс при  $z = z_b$  — не единственная особенность подынтегрального выражения в (2.74); оно имеет кроме этого точки ветвления там же, где такие точки имеются у интегралов  $I_g(z/\hbar)$ .

Возвращаясь к матричному элементу (2.73)

$$U_{b0, b0}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz e^{-izt/\hbar} \Delta_{b0}^{-1}, \quad (2.98)$$

обратим внимание прежде всего на то, что нижняя часть контура  $C$  может быть перемещена вниз по комплексной плоскости, где из-за наличия экспоненты подынтегральное выражение быстро убывает, и, следовательно, интегрально нижней части контура  $C$  просто равен нулю. Верхняя

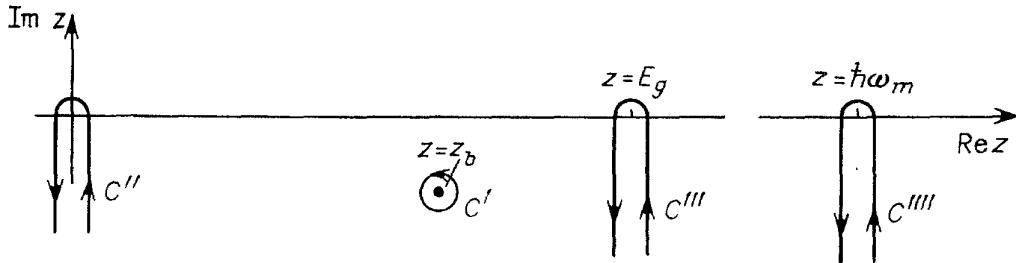


Рис. 10

часть контура  $C$  может быть деформирована лишь к виду, показанному на рис. 10, так как при перемещении вниз она встречает точки ветвления, между которыми движется уже по нефизическому листу римановой поверхности, где встречается также полюс при  $z = z_b$ .

Основной вклад в матричный элемент  $U_{b0, b0}(t)$  дает вычет в полюсе при  $z = z_b$

$$U'_{b0, b0}(t) = \frac{\exp \{-i[(E_{b0} + \Delta E_b)t] - \Gamma_b t \hbar^{-1}\}}{(\partial \Delta_{b0} / \partial z)_{z=z_b}}. \quad (2.99)$$

Как видим, этой частью матричного элемента описывается экспоненциальный распад возбуждения. Производная

$$\left( \frac{\partial \Delta_{b0}}{\partial z} \right)_{z=z_b} = 1 - \frac{\alpha}{3\pi} \sum_g \frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2}{m^2 c^2} \left[ i\pi + \ln \left( \frac{\hbar\omega_m}{E_b - E_g} - 1 \right) + \frac{\hbar\omega_m}{\hbar\omega_m - (E_b - E_g)} \right]$$

близка к единице. Не вычисляя ее подробно, отметим лишь, что во втором члене кроме малого параметра  $\alpha$  (постоянной тонкой структуры) присут-

ствует малый параметр

$$\frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2}{m^2 c^2} \sim \frac{(2\pi a)^2}{\lambda^2} (\sim 3 \cdot 10^{-7}),$$

приближенно равный квадрату отношения боровского радиуса к длине излучаемой волны. Отсюда ясно, что вклады от интегралов по контурам  $C''$  и  $C'''$  невелики.

Интеграл по контуру  $C''$  представляет собой то небольшое отклонение закона распада от экспоненциального, которое впервые было отмечено Л. А. Халфином [12] и которое неоднократно обсуждалось в литературе [13]. Хотя эта часть мала по сравнению с единицей, при больших  $t$  она убывает медленно, по степенному закону и становится больше части  $U_+$ , убывающей экспоненциально.

Интеграл по контуру  $C''$  можно представить в виде разности

$$U''_{b0, b0}(t) = \frac{-\hbar}{2\pi} \left( \int_0^\infty d\rho \frac{e^{-\rho t}}{\Delta_{b0}^{(l)}(\rho)} - \int_0^\infty d\rho \frac{e^{-\rho t}}{\Delta_{b0}^{(r)}(\rho)} \right), \quad (2.100)$$

где  $\rho$  — модуль  $\zeta$  ( $\rho = -i\zeta$ ) на контуре  $C''$ ,  $\Delta_{b0}^{(l)}(\rho)$  — значение  $\Delta_{b0}^{(l)}(z)$  на левой части контура  $C''$  и  $\Delta_{b0}^{(r)}(\rho)$  — значение той же функции на правой части этого контура. При больших  $t$  в этих интегралах достаточно учесть лишь значения  $\Delta_{b0}^{(l)}(\rho)$  и  $\Delta_{b0}^{(r)}(\rho)$  при малых  $\rho$ . В этом случае разность

$$\Delta_{b0}^{(r)}(\rho) - \Delta_{b0}^{(l)}(\rho) = \frac{2\alpha}{3\pi} \frac{|\mathbf{p}_{ba}|^2}{m^2 c^2} \hbar \rho$$

пропорциональна  $\rho$ , а произведение  $\Delta_{b0}^{(r)}(\rho) \Delta_{b0}^{(l)}(\rho)$  стремится при  $z \rightarrow 0$  к постоянной  $E_{b0}'^2$ , равной

$$E_{b0}' = E_{b0} + \frac{\alpha}{3\pi} \sum_{g \neq a} \frac{|\mathbf{p}_{bg}|^2}{m^2 c^2} E_g \left[ i\pi\theta(E_b - E_g) + \ln \left| \frac{\hbar\omega_m}{E_g} + 1 \right| \right];$$

индексом  $a$  выделено основное состояние атома, энергия которого равна нулю.

Следовательно, часть матричного элемента  $U''_{b0, b0}$  (2.73), обусловленная контуром  $C''$

$$U''_{b0, b0}(t) = \frac{\alpha}{3\pi} \frac{|\mathbf{p}_{ba}|^2}{m^2 c^2} \frac{\hbar\omega}{E_{b0}'^2 t^2}, \quad (2.101)$$

действительно при больших  $t$  убывает по степенному закону.

Контур  $C''$  обходит точку ветвления слагаемого в  $\Delta_{b0}$ , соответствующего  $g = a$ . Другие слагаемые, соответствующие другим  $g$ , также имеют точки ветвления при  $z = E_g$ . Одна такая точка ветвления при  $z = E_g$  вместе с контуром  $C'''$ , охватывающим ее, показана на рис. 9. В большинстве случаев интеграл по контуру  $C'''$  мал. Он может стать существенным, когда  $E_g$  близко к  $E_b$ , т. е. при пересечении уровней; однако этот случай, хотя может быть легко рассмотрен методом резольвенты, все же является частным случаем и в данной статье рассматриваться не будет.

Интегралы, входящие в  $\Delta_{b0}$ , берутся по конечному отрезку вещественной оси, от  $E_g$  до  $E_g + \hbar\omega_m$ ; соответственно, как функции  $z$  они имеют точки ветвления не только на левом конце отрезка интегрирования, но

и на правом его конце. Одна такая точка ветвления и охватывающий ее контур интегрирования  $C'''$  показаны на рис. 9. Интегралы по этим контурам практически во всех случаях пренебрежимо малы; что еще существеннее, учет этих интегралов выходит за пределы применимости нерелятивистской теории. Действительно, правый конец отрезка интегрирования соответствует таким энергиям, при которых движение электрона становится релятивистским, и требует для своего описания квантовой электродинамики в полном объеме. К счастью, эти поправки в интересующих нас в данной статье оптических вопросах невелики.

Хотя в этом разделе уделено много внимания вычислению лэмбовского сдвига (в основном это сделано для того, чтобы показать, что в этом вопросе нет ничего сложного), лишь в редких случаях знание этого сдвига бывает существенным; в большинстве оптических задач лэмбовский сдвиг может быть положен равным нулю.

**Заключение.** Рассмотренные в работе задачи об излучении в волноводе и свободном пространстве показывают, что метод резольвенты весьма эффективен для решения излучательных задач, особенно в сочетании с методами теории функций комплексного переменного. Он может быть применен к задаче о пересечении уровней с учетом затухания, к задаче об открывании новых каналов распада, к исследованию индуцированного излучения в сложных случаях, к задаче о взаимодействии излучающих атомов и другим. По нашему мнению метод резольвенты является самым эффективным методом решения нестационарных задач квантовой электродинамики из тех, которые основаны на теории возмущений.

Одной из насущных задач развития самого метода является включение в него последовательной процедуры перенормировок.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Weisskopf V., Wigner E. // Zs. Phys. 1930. Bd. 63. S. 54, Bd. 65. S. 18.  
Гайтлер В. Квантовая теория излучения.— М.: ИЛ, 1956.
2. Мессиа А. Квантовая механика.— М.: Мир, 1979. Т. 2. С. 206.
3. Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П. Аппроксимация Паде.— М.: Мир, 1986.
4. Мэтьюз Д., Уокер Р. Математические методы физики.— М.: Атомиздат, 1972.
5. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т. 1, 2.— М.: Гос-техиздат; 1951.
6. Мусхелишвили Н. И. Сингулярные интегральные уравнения.— М.: Наука, 1968.
7. Градштейн И. С., Рыжик Л. М. Таблицы интегралов... — 2-е изд.— М.: Физ-матлит, 1962.
8. Люисем У. Излучение и шумы в квантовой электронике.— М.: Наука, 1972.— С. 400.
9. Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. 1.— М.: Наука, 1974.
10. Гайтлер В. Квантовая теория излучения.— М.: ИЛ, 1956.
- [11] Bethe H. A. // Phys. Rev. 1947. Bd. 72. S. 339.
12. Халфин Л. А. // ДАН СССР. 1957. Т. 115. С. 339; ЖЭТФ. 1958. Т. 33. С. 1371.
13. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.— М.: Наука, 1971.— С. 317.

Статья поступила 19.10.90 г.