Дамы и господа, решим первую и единственную задачу по КЭД, которая есть в общем курсе квантовой теории - задача об излучении.

У нас электрон в некоем потенциале с ВФ $|\Psi_1>$ и энергией E1. Она переходим в $|\Psi_2>$ с энергией E2, ***излучая фотон (sic!)*** Найти скорость такого перехода.

Отметим разницу этой задачи с той, которая была у нас раньше. У нас был спонтанный переход наверх

и покидание электроном ямы

Но нигде у нас не было рождения фотона! А тут есть. Поэтому это уже задача по КЭД, где мы вволю применим аппарат вторичного квантования.

Будем использовать золотое правило Ферми:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{h} \sum_{\text{по всем конечным состояниям}} < \widehat{\Psi}_f \widehat{H}^I \widehat{\Psi}_i > б(E_f + h\omega - E_i)$$

Где $h\omega$ – энергия излучённого фотона. Обратите внимание, что ВФ уже стали операторами.

Чуть уточним «по всем конечным состояниям» - по всем возможным волновым векторам **k** и поляризациям p:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{h} \sum_{\text{по всем } \boldsymbol{k},p} < \widehat{\Psi}_f \widehat{H}^I \widehat{\Psi}_i > б(E_f + h\omega - E_i)$$

Сперва разберёмся с ВФ. Они будут уже операторами:

	Электрон	Фотон	Суммарная ВФ
Было	$\|\Psi_i>$	$\|0>$	$\widehat{\Psi}_i\|0>$

Стало	$\lvert\Psi_f >$	$\widehat{a^+_{kp}}\lvert 0 >$	$\widehat{a^+_{kp}}\widehat{\Psi_f}\lvert 0 >$

Запись $\widehat{a^+_{kp}}\widehat{\Psi_f}\lvert 0 >$ следует читать так: мы к вакууму добавили электрон с состоянием $\widehat{\Psi_f}$ и после этого фотон $\widehat{a^+_{kp}}$ с волновым вектором **k** и поляризацией p. (р здесь поляризация, а не импульс! Неудачное обозначение, но именно такое у Силаева). Мы могли бы поменять местами операторы, родив сначала фотон, а потом электрон: $\widehat{\Psi_f}\widehat{a^+_{kp}}\lvert 0 >$ - т.к. частицы разные, операторы коммутируют.

Теперь разберёмся с гамильтонианом взаимодействия.

В классике

$$H = -\frac{e}{mc}\vec{p}\vec{A}$$

(напомним, что $\vec{p}$ и $\vec{A}$ - 4-векторы импульса и потенциала).

Квантуем, ставя крышечки:

$$\widehat{\boldsymbol{H}}_I = -\frac{e}{mc}\hat{p}\widehat{\boldsymbol{A}}$$

Наибольшую сложность представляет 4-вектор потенциала. Выражение для него мы получали ранее:

$$\widehat{\vec{\boldsymbol{A}}}_{\Gamma.}(\overline{x},t) = \sum_{\overline{k},p}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}}\overline{e}_{\overline{k}p}\cdot\left(e^{i\overline{k}\overline{x}}\widehat{a}_{\overline{k}p}e^{-i\omega_k t} + e^{-i\overline{k}\overline{x}}\widehat{a}^+_{\overline{k}p}e^{i\omega_k t}\right)$$

Ну вот этот ужас надо подставить в $\widehat{\boldsymbol{H}}_I = -\frac{e}{mc}\hat{p}\widehat{\boldsymbol{A}}$ и получить полный гамильтониан взаимодействия:

$$\widehat{\boldsymbol{H}}_I = -\frac{e}{mc}\hat{p}\sum_{\overline{k},p}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}}\overline{e}_{\overline{k}p}\cdot\left(e^{i\overline{k}\overline{x}}\widehat{a}_{\overline{k}p}e^{-i\omega_k t} + e^{-i\overline{k}\overline{x}}\widehat{a}^+_{\overline{k}p}e^{i\omega_k t}\right)$$

Итак, у нас есть все слагаемые успеха: ВФ $\widehat{\Psi_f}$ и $\widehat{\Psi_i}$, гамильтониан взаимодействия $\widehat{H}^I$. Подставляем в ЗПФ:

$$\frac{1}{\tau}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\overline{k},p}\Bigg|\langle\psi_2|\langle 0|\underline{\hat{a}_{\overline{k}p}}\cdot\Big(-\frac{e}{mc}\overline{p}\Big)\cdot\sum_{\overline{k}',p'}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2L^3\omega_{k'}}}\overline{e}_{\overline{k}'p'}\cdot$$

$$\Big[\cancel{e^{i\overline{k}'\overline{x}}\hat{a}_{\overline{k}'p'}}+e^{-i\overline{k}'\overline{x}}\underline{\hat{a}^{+}_{\overline{k}'p'}}\Big]\cdot|\psi_1\rangle|0\rangle\Bigg|^2\cdot\delta(E_2+\hbar\omega_k-E_1),$$

Одно слагаемое Силаев сразу выкинул, потому что ему предстоит действовать на вакуум:

$$\frac{1}{\tau}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\overline{k},p}\Bigg|\langle\psi_2|\langle 0|\underline{\hat{a}_{\overline{k}p}}\cdot\Big(-\frac{e}{mc}\overline{p}\Big)\cdot\sum_{\overline{k}',p'}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2L^3\omega_{k'}}}\overline{e}_{\overline{k}'p'}\cdot$$

$$\boxed{\Big[\cancel{e^{i\overline{k}'\overline{x}}\hat{a}_{\overline{k}'p'}}}+e^{-i\overline{k}'\overline{x}}\underline{\hat{a}^{+}_{\overline{k}'p'}}\Big]\cdot|\psi_1\rangle|0\rangle\Bigg|^2\cdot\delta(E_2+\hbar\omega_k-E_1)$$

А действие оператора уничтожения на вакуум даст ноль.

Далее заметим, что $\langle 0|\hat{a}_{\overline{k}p}\hat{a}^{+}_{\overline{k}'p'}|0\rangle=\delta_{\overline{kk}'}\delta_{pp'}$, что позволит нам избавиться от штрихов:

$$\frac{1}{\tau}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\overline{k},p}\Bigg|\langle\psi_2|\langle 0|\underline{\hat{a}_{\overline{k}p}}\cdot\Big(-\frac{e}{mc}\overline{p}\Big)\cdot\sum_{\overline{k},p}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2L^3\omega_{k}}}\overline{e}_{\overline{k}p}\cdot e^{-i\overline{k}'\overline{x}}\hat{a}^{+}_{\overline{k}p}\Big]\cdot|\psi_1\rangle|0\rangle\Bigg|^2\cdot\delta(E_2+\hbar\omega_k-E_1)$$

Далее начинаются танцы с бубном насчёт коэфа пропорциональности, связанные с тем, что мы заменяем сумму на интеграл. Постараюсь описать, что происходит. В конечном объёме L^3 у нас могут быть не все возможные волновые вектора **k,** а такие, что

$$k_x=\frac{\pi n_x}{L},k_y=\frac{\pi n_x}{L},k_z=\frac{\pi n_x}{L}$$

Естественно устремить $L\to+\infty$, чтобы были возможны все **k.** Вот только у нас ещё L в знаменателе:

$$\frac{1}{\tau}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\overline{k},p}\Bigg|\langle\psi_2|\langle 0|\underline{\hat{a}_{\overline{k}p}}\cdot\Big(-\frac{e}{mc}\overline{p}\Big)\cdot\sum_{\overline{k},p}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2L^3\omega_{k}}}\overline{e}_{\overline{k}p}\cdot e^{-i\overline{k}'\overline{x}}\hat{a}^{+}_{\overline{k}p}\Big]\cdot|\psi_1\rangle|0\rangle\Bigg|^2\cdot\delta(E_2+\hbar\omega_k-E_1)$$

И мы получим неопределённость вида $\sum_{n=0}^{\infty}0$.

Не будем аккуратно считать предел: получится

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{k^2}{\hbar c} d\Omega_k \sum_p \cdot \left| \left\langle \psi_2 \middle| \left(-\frac{e}{m}\right) \overline{p} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \cdot \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot e^{-i\overline{k}\overline{x}} \middle| \psi_1 \right\rangle \right|^2$$

Где мы от этого «нефизичного» параметра L избавились.

Используя
$$\hbar\omega_k = E_1 - E_2; \quad k^2 = \frac{\omega_k^2}{c^2}$$
упростим выражение до

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2\omega_k}{2\pi\hbar c^3} \cdot \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \middle| \frac{\widehat{\overline{p}}}{m} \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot e^{-i\overline{k}\overline{x}} \middle| \psi_1 \right\rangle \right|^2$$

Через интеграл по телесным углам $d\Omega_k$. Ведь модуль **k** жёстко определяется ЗСЭ, а вот направление произвольное и определяется матричным элементом.

Дифференциальное сечение интенсивности:

$$\frac{dI_p}{d\Omega} = \frac{e^2\omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \left| \left\langle \psi_2 \middle| \frac{\widehat{\overline{p}}}{m} \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot e^{-i\overline{k}\widehat{\overline{x}}} \middle| \psi_1 \right\rangle \right|^2$$

Полная интенсивность:

$$I_p = \frac{e^2\omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \middle| \frac{\widehat{\overline{p}}}{m} \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot e^{-i\overline{k}\widehat{\overline{x}}} \middle| \psi_1 \right\rangle \right|^2$$

Как мы видим, основная сложность в матричном эксперименте, где в операторе сидит экспонента.
Давайте вспомним электродинамику 5-го семестра, где у нас было разложение излучения на
E1: электрическое дипольное
M1: магнитное дипольное
E2: электрическое квадрупольное
и так далее.

Проверим, что это приближение можно применить. Условие его применения – ka<<1, где a – характерный масштаб колебаний заряженной частицы. Возьмём, например, атом водорода, у которого a – это боровский радиус.

Раскладываем экспоненту в ряд:

$$e^{-i\overline{k}\widehat{\overline{x}}} = \underbrace{1}_{E_1} - \underbrace{i\overline{k}\widehat{\overline{x}}}_{E_2, M_1} + \dots$$

«Дальше –ikx мы ни за какие коврижки не пойдём, потому что в 99,9% задач хватает E1, которое нам даёт первое слагаемое 1, и E2 и M1, которые нам даёт второе - -ikx» © Силаев

А мы вообще ограничимся E1 – электрическим дипольным. E2 и M1 можете посмотреть у Силаева, там выкладки сложнее, а ничего особого нет.

Итак, мнимая экспонента уходит и матричный элемент упрощается до вида

$$\left\langle \psi_1 \left| \frac{\widehat{\overline{p}}}{m} \cdot \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot 1 \right| \psi_1 \right\rangle$$

Можно записать иначе

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \widehat{V}(x) \Rightarrow \left[\widehat{x}, \widehat{H}\right] = \left[\widehat{x}, \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \cancel{\widehat{V}(x)}\right] = i\hbar\frac{\widehat{\overline{p}}}{m}$$

$$\left\langle \psi_2 \left| \frac{\widehat{\overline{p}}}{m} \right| \psi_1 \right\rangle \overline{e}_{\overline{k}p} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_2 | \left[\widehat{x}, \widehat{H}\right] | \psi_1 \rangle \overline{e}_{\overline{k}p} = \left\langle \underline{\underline{\psi_2}} \middle| \widehat{\overline{x}}\underline{\widehat{H}} - \underline{\underline{\widehat{H}}}\widehat{\overline{x}} \middle| \underline{\psi_1} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{i\cancel{\hbar}} \langle \psi_2 | \widehat{\overline{x}} | \psi_1 \rangle \underbrace{(E_1 - E_2)}_{\omega_k} \overline{e}_{\overline{k}p}$$

Таким образом для электрического дипольного приближения получим:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \langle \psi_2 | \widehat{\overline{x}} | \psi_1 \rangle \cdot \overline{e}_{\overline{k}p} \right|^2$$

Вот теперь становится понятно, почему это дипольное приближение: $< \Psi_2|\hat{x}|\Psi_1 >$ - это аналог дипольного момента $\boldsymbol{d} = \iiint \rho\,(\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}dV(\boldsymbol{r})$

Цитата Силаева: «В учебниках, где признают вторичное квантование, к этой формуле приходят так: берут формулу из классической электродинамики и говорят - а как бы нам построить аналог дипольного момента в квантах. А вот так - $< \Psi_2|\hat{\boldsymbol{x}}|\Psi_1 >$! Ну, это хорошая иллюстрация, но настоящую науку не тянет».

Посмотрим, как эта формула работает!

1) Обратите внимание на то, что матричный элемент векторный: $< \Psi_2|\hat{\boldsymbol{x}}|\Psi_1 >$. Я даже так напишу: $< \Psi_2|\hat{\boldsymbol{r}}|\Psi_1 >$. И он скалярно умножается на направление вылета фотона $\boldsymbol{e_k}$.

$$< \Psi_2|\hat{\boldsymbol{r}}|\Psi_1 > \boldsymbol{e_k} =< \Psi_2|\hat{x}|\Psi_1 > e_{x\boldsymbol{k}}+=< \Psi_2|\hat{y}|\Psi_1 > e_{y\boldsymbol{k}}+=< \Psi_2|\hat{z}|\Psi_1 > e_{z\boldsymbol{k}}$$

2) Пример 1: Пусть у нас одномерный случай, т.е. $\Psi_1(x,y,z) = \Psi_1(z)\text{б}(y)\text{б}(x)$ и $\Psi_2(x,y,z) = \Psi_2(z)\text{б}(y)\text{б}(x)$. Можно представить, что потенциал устроен в виде ущелья

: при x или y !=0 он равен бесконечности. Тогда частица будет находиться только на оси аппликат.

Тогда

$$< \Psi_2|\hat{\boldsymbol{r}}|\Psi_1 > \boldsymbol{e_k} =< \Psi_2|\hat{z}|\Psi_1 > e_{z\boldsymbol{k}} =< \Psi_2|\hat{z}|\Psi_1 >$$

И частица гарантированно летит вдоль оси z.

Пример: гармонический осциллятор.

$$\Psi_1(z) = \frac{1}{\sqrt{2a\sqrt{\pi}}} 2\mathrm{z} * \exp(-z^2)$$

$$\Psi_2(z) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp(-z^2)$$

Тогда матричный элемент будет равен

$$< \Psi_2|\hat{z}|\Psi_1 > = \frac{1}{2a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2) * z * 2z \exp(-z^2)\, dz$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2\left(\frac{z}{a}\right)^2) * (z/a)^2 d\left(\frac{z}{a}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} * \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{4} = \frac{1}{4\sqrt{2}}$$

(наверняка я ошибся при вычислении интеграла… ну да пофиг).

Подставляем его сюда

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \langle \psi_2|\widehat{\overline{x}}|\psi_1 \rangle \cdot \overline{e}_{\overline{kp}} \right|^2$$

и получаем ответ.

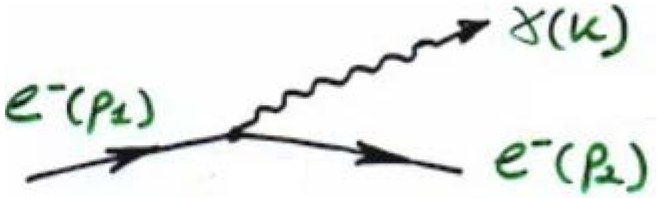
3) Пусть Ψ_1 и Ψ_2 сферически симметричны. Например, это 1s, т.е. $\exp(-\frac{r}{a})$.
Вернёмся к общей, более точной формуле, пока мы ещё не перешли к мультипольному разложению:

$$I_p = \frac{e^2\omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{\overline{p}}}{m} \overline{e}_{\overline{k}p} \cdot e^{-i\overline{k}\hat{\overline{x}}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2$$

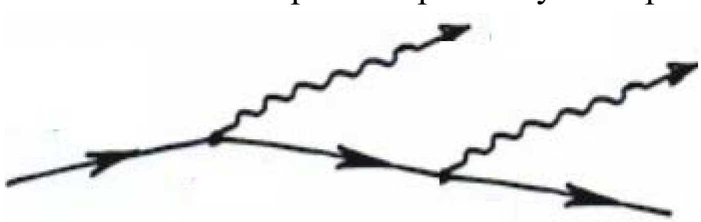
И попробуем в качестве Ψ_1 и Ψ_2 подставить $\exp(-\frac{r}{a})$. Матричный элемент тогда занулится! Силаеву это очевидно. Ну, надо проделать аккуратную выкладку: доказать, что

$$\iiint \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \Delta(e^{-i\boldsymbol{kr}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)) dV(\boldsymbol{r}) = 0$$

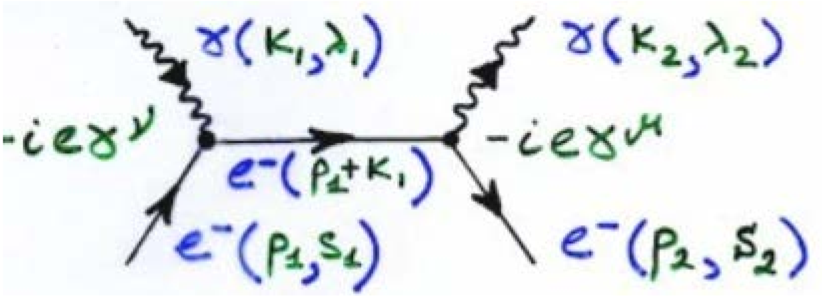
Это такое доказательство, что запрещён переход 1s->1s (что было на атомке).
Вопрос: он ВООБЩЕ невозможен или очень сильно подавлен?
Кажется, что вообще невозможен, ведь мы пользовались формулой ещё до мультипольного разложения. Оказывается, ещё до мультипольного разложения у нас было другое разложение ☺ Мы ведь с самого начала стартовали с ЗПФ, а оно работает в 1 порядке ТВ. А есть и 2-й порядок ТВ, и 3-й… Порядок ТВ – это количество узлов на диаграмме Фейнмана. У нас в задаче он один:



А вот если бы мы рассмотрели случай с рождением двух фотонов

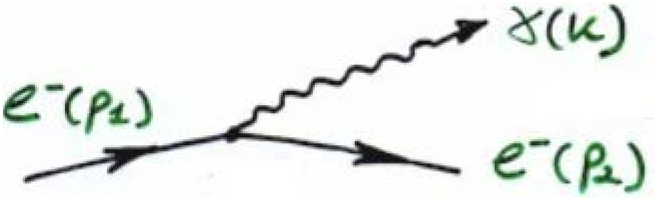


то тут бы ЗПФ… А оно было бы вообще неприменимо, потому что ЗПФ работает только в первом порядке. Во втором пришлось бы строить его аналог ☺
А вот рассеяние фотона электроне – Комптон эффект:



тут два узла и второй порядок ТВ.

Собственно, всякие КЭДные реакции – это, как правило, 2-й порядок ТВ. Более того, такая реакция, как сегодня, в первом порядке



невозможна, если электрон свободный (если связанный, как у нас в задаче – то без проблема), поэтому КЭДникам обычно задача излучения неинтересна, они по свободным частицам упарываются.