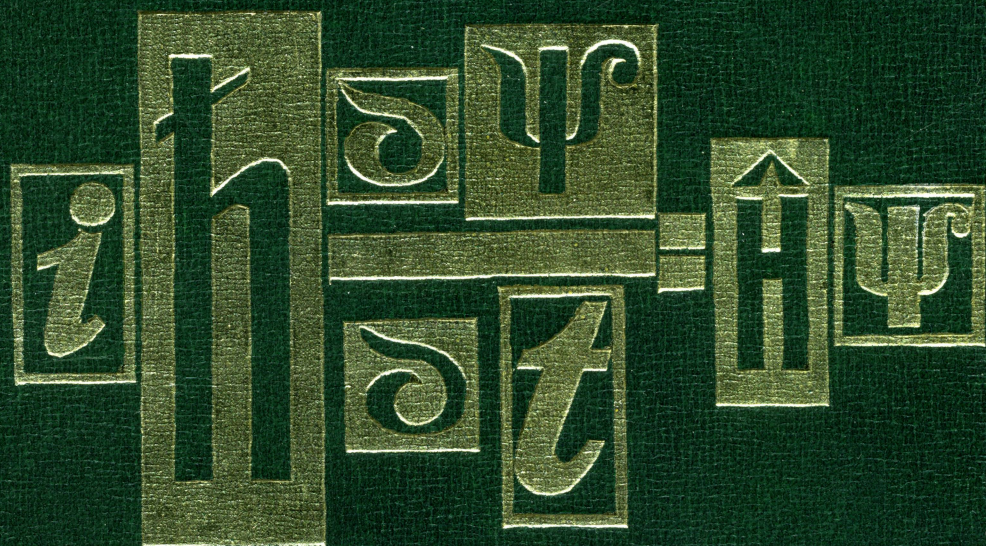


В.В. Ульянов

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ И КВАНТОВОЙ
СТАТИСТИКЕ



В.В. Ульянов

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ

Допущено Министерством высшего
и среднего специального образования СССР
в качестве учебного пособия
для студентов физических и радиотехнических

Х А Р Ь К О В
ИЗДАТЕЛЬСТВО ПРИ ХАРЬКОВСКОМ
ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ
ИЗДАТЕЛЬСКОГО ОБЪЕДИНЕНИЯ
«ВИЩА ШКОЛА»
1980

22.314+22.172
У51

УДК 530.145:536.7

Ульянов В. В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. — Харьков: Вища школа. Изд-во при Харьк. ун-те, 1980. 216 с.

В учебном пособии отражены некоторые современные методы и направления квантовой теории: гриновские операторы и функции, когерентные состояния, резонансные эффекты в слоистых средах, ВКБ-приближение более высокого порядка, интегральные уравнения для связанных состояний, вариационные методы, размерные явления, магнитные свойства, корреляции, парастатистика, метод Кубо, функции Грина квантовой кинетики и пр. Содержатся методические указания и пояснения к решению задач, замечания и советы по выбору литературы.

Для студентов физических и радиsfизических факультетов. Книга может быть полезна аспирантам, преподавателям, начинающим научным работникам и всем интересующимся вопросами конкретного применения методов квантовой теории в области механики и статистической физики, включая неравновесные процессы.

Ил. 24. Список лит.: 126 назв.

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, проф. В. Л. Стрижевский; канд. физ.-мат. наук, доц. Л. Ф. Блажиевский

Редакция естественнонаучной литературы
И. о. зав. редакцией Е. Е. Кравченко

У 20203—106
М226(04)—80 117—80 1703030000

© Издательское объединение
«Вища школа», 1980

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Введение	8
Основные обозначения	10

1 часть

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (задачи)	12
§ 1. Связанные состояния	12
§ 2. Рассеяние частиц	15
§ 3. Квазиуровни (распад и резонанс)	19
§ 4. Энергетические зоны	21
§ 5. Колебательное движение	25
§ 6. Когерентные состояния	28
§ 7. Движение в магнитном поле	30
§ 8. Движение в поле цилиндрической симметрии	32
§ 9. Квазиклассическое приближение	35
§ 10. Операторы эволюции (пропагаторы)	39
§ 11. Функции Грина стационарного уравнения Шредингера	42
§ 12. Матрица связи локальных решений	45
§ 13. Вариационные методы	48
§ 14. Теорема вириала и вириальные соотношения	51
§ 15. Параметрическое варьирование	53
§ 16. Соотношение неопределенностей	55

2 часть

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА (задачи)	60
§ 17. Смешанные состояния	60
§ 18. Ферми- и бозе-газы	63
§ 19. Парастатистика	65
§ 20. Граничные и размерные явления	68
§ 21. Магнитные свойства	70
§ 22. Корреляция флуктуаций	72
§ 23. Метод Кубо. Обобщенные восприимчивости	74
§ 24. Функции Грина квантовой кинетики	77

3 часть

ОТВЕТЫ. РЕШЕНИЯ. ПОЯСНЕНИЯ	80
§ 25. Связанные состояния	80
§ 26. Рассеяние частиц	87
§ 27. Квазиуровни (распад и резонанс)	94
§ 28. Энергетические зоны	102
§ 29. Колебательное движение	109
§ 30. Когерентные состояния	114
§ 31. Движение в магнитном поле	119
§ 32. Движение в поле цилиндрической симметрии	122
§ 33. Квазиклассическое приближение	124
§ 34. Операторы эволюции (пропагаторы)	135
§ 35. Функции Грина стационарного уравнения Шредингера	139

§ 36.	Матрица связи локальных решений	147
§ 37.	Вариационные методы	154
§ 38.	Теорема вириала и вириальные соотношения	160
§ 39.	Параметрическое варьирование	163
§ 40.	Соотношение неопределенностей	167
§ 41.	Смешанные состояния	171
§ 42.	Ферми- и бозе-газы	174
§ 43.	Парастатистика	177
§ 44.	Граничные и размерные явления	180
§ 45.	Магнитные свойства	184
§ 46.	Корреляция флуктуаций	185
§ 47.	Метод Кубо. Обобщенные восприимчивости	188
§ 48.	Функции Грина квантовой кинетики	197

Приложение 1.	Некоторые потенциальные модели	203
---------------	--	-----

Приложение 2.	Методические указания к исследованию в задачах	207
---------------	--	-----

Список литературы	212
-----------------------------	-----

... Примеры полезнее правил.

И. Ньютон

В постановлении ЦК КПСС и Совета Министров СССР «О мерах по дальнейшему совершенствованию высшего образования в стране» предусматривается обеспечить своевременную подготовку и издание учебников, учебно-методических пособий, особенно по новейшим направлениям науки и техники*. Предлагаемое учебное пособие поможет в освоении квантовой теории — фундаментальной науки, лежащей в основе современных представлений о строении материи. В него включены задачи по нерелятивистской квантовой механике и квантовой статистике (равновесие и кинетика), предлагавшиеся автором студентам старших курсов физических специальностей на практических занятиях, в различных заданиях для самостоятельной работы и при иллюстрациях лекций в Харьковском госуниверситете им. А. М. Горького. Задачи подобраны в соответствии с программами общих и специальных курсов.

Данное учебное пособие рассматривается как *дополнение* к имеющимся сборникам и в большей степени предназначается для *самостоятельной работы*. Вводится дополнительный методический материал (в небольшом объеме и так, чтобы при необходимости он мог быть опущен). Автор стремился разнообразить формы вопросов, применяя чаще исследовательско-поисковые и учебно-познавательные формулировки вместо доказательно-расчетных.

В книге почти нет ни узкоприкладных, ни совсем элементарных задач первичного знакомства с квантовой теорией. Большинство из них рассчитано на подготовленного читателя. Часто решение задачи служит предпосылкой к более широкому полю исследований.

Задачи составлены по некоторым современным разделам квантовой механики и кванто-

*Об идеологической работе КПСС. Сборник документов. М., Политиздат, 1977, с. 516.

вой статистики, не освещенным в опубликованных задачниках (когерентные состояния, критические явления в проблеме связанных состояний, движение в полях цилиндрической симметрии, квазиклассическое приближение более высокого порядка, парастатистика, корреляции, интегральные уравнения для связанных состояний, функции Грина квантовой кинетики) или не нашедшим в них достаточного отражения (пропагаторы, резонансные явления в слоистых средах, энергетические зоны, квазистационарные состояния). Специальное внимание уделено методам квантовой механики, условно названным нефункциональными, которые не связаны с явным решением уравнения Шредингера. К их числу относятся теорема вириала и вириальные соотношения, параметрическое варьирование, соотношение неопределенностей, чисто операторный подход в методе квазиклассического приближения.

Используется традиционный для физических учебников достаточно простой математический аппарат. Математические преобразования и доказательства проводятся на уровне «физической строгости».

Автор придерживается мнения, что практически любая физическая задача может быть продолжена, развита, может иметь различные ответвления. С другой стороны, с течением времени сравнительно простая модельная задача способна стать истоком нового направления исследований. Так было, например, с задачей о вынужденных колебаниях квантового осциллятора, которая оказалась тесно связанной с методом когерентных состояний (в частности, в квантовой оптике). Таким образом, бытующее выражение «дано исчерпывающее решение задачи» обычно следует понимать лишь относительно. В связи с этим, видимо, целесообразно ставить новые задачи в рамках даже хорошо известных разделов, не говоря уже о новых развивающихся направлениях.

В соответствии с выделением в психологии трех видов творческой активности личности (см. [125]) задачи можно разделить на три типа:

- 1) репродуктивные (воспроизведение за-

ученных действий, разработки в заданных пределах, преобразования по указанному пути, расчеты по известным алгоритмам, оценки стандартными методами);

2) эвристические (поисковые, требующие самостоятельности и выхода за привычные рамки);

3) креативные (творческие, исследовательские, дающие возможность расширить начальные рамки и вскрывающие происхождение полученных закономерностей, а также допускающие обобщения, требующие всестороннего анализа).

В связи со спецификой учебных целей задач приведенное деление является условным. Третий тип задач, в свою очередь, включает задачи, ограниченные рамками учебного материала и выходящие за них.

Автор отдает себе отчет в том, что любые вновь предлагаемые задачи, кажущиеся ему оригинальными, в действительности явно или неявно могут содержать элементы известных задач («физический фольклор»).

Книга рассчитана на довольно широкий круг читателей (студентов, аспирантов, преподавателей, молодых специалистов), поэтому автор надеется, что каждый сможет по-своему использовать задачи из интересующего его раздела.

Все замечания будут приняты с благодарностью.

Глубокую признательность автор выражает доценту Л. Э. Паргаманику за постоянную помощь конкретными советами, канд. физ.-мат. наук С. С. Недорезову, доценту Л. Ф. Блажиевскому и профессору В. Л. Стрижевскому — за доброжелательную и конструктивную критику.

Автор благодарен академику И. М. Лифшицу и всем своим коллегам по кафедре за поддержку и практические советы, наиболее активным студентам — за сотрудничество (многие задачи появились под их стимулирующим влиянием), а И. П. Ульяновой — за помощь при подготовке рукописи.

ВВЕДЕНИЕ

... Гораздо труднее увидеть проблему, чем найти ее решение.

Дж. Бернал

Один из важнейших исследовательских приемов — изучение закономерностей и их происхождения на простой модели. При этом достаточно ярко проявляются основные черты явления, а математическая простота решения не загромождает вычислительными деталями суть физической картины, что облегчает переход к реальному случаю.

Предлагаемые в книге задачи задуманы как подобные ячейки исследования более общих проблем. После названия параграфа следует краткий перечень вопросов, затрагиваемых в задачах, а в замечаниях к каждому из них содержатся сведения о литературе и конкретных физических применениях. Во многих параграфах первая задача является вводной, дающей возможность освоиться с основными понятиями рассматриваемой темы, терминологией и обозначениями. Последние задачи обычно носят качественный характер (подведение итогов, указание конкретных примеров и т. п.). Иногда ответ заложен в самой формулировке условия («убедитесь», «покажите» и др.). Часто для краткости приводится только основная конечная формула без пояснений или небольшое указание (подсказка) о возможных способах решения. Отдельные задачи сопровождаются более полным решением с элементами исследования и методическими пояснениями. Некоторые ответы содержат дополнительные вопросы о значении результата, физическом смысле и т. д. Нередко в ответах предлагаются *дополнительные задачи*.

В приложении 1 собраны часто используемые модели потенциальных полей, их краткие названия и некоторые характеристики, а в приложении 2 — замечания о приемах исследования для начинающих.

Когда вы приступаете к знакомству с очередной задачей или уже углубились в процесс ее решения, рекомендуем прочитать это приложение еще раз.

Многие задачи связаны таким образом, что цель предыдущей служит средством решения последующей. В других случаях — это однотипные задачи, одна из которых решена более подробно, а подобные ей — оставлены без решения и рассчитаны на самостоятельные усилия читателя. Есть и такие связи, когда после трудной задачи следует более простая, как некоторый частный случай. Затруднения при решении первой обычно исключаются после решения второй, когда такая «подсказка» следует за основной задачей. В психологии этот «каталитический» эффект хорошо известен. Иногда в цепочке двух-трех однотипных задач каждая дополняет соседние, а решение одной разъясняется в сопоставлении с другими.

Кроме того, задачи расположены группами, между которыми имеются взаимосвязи (от механики, через термодинамическое равновесие, к кинетике). Сделана попытка объединить не разрозненные, случайные задачи, а тесно связанные между собой и с задачами других параграфов.

После проработки задач из каждого параграфа попробуйте ответить на вопрос, как связан рассматриваемый материал с проблемами, затронутыми в других разделах.

Данная книга призвана помочь читателю освоить некоторые методы современной квантовой теории путем самостоятельного изучения материала задач. В условиях вуза это могут быть: домашние задания, контрольные работы, семинарские занятия по учебно-исследовательской работе студентов (УИРС), курсовые работы, доклады в студенческих научных кружках и т. п. Задачи должны формировать навыки исследовательских творческих поисков.

Хотелось бы особо отметить, что многие пояснения к задачам рассчитаны только на читателя, углубившегося в решение. Лишь в этом случае они могут оказаться полезными, могут сыграть роль наводящих соображений, — но не на первом этапе знакомства с задачей!

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

- A — коэффициент;
 a — характерный линейный размер;
 $\hat{a}, \hat{a}^+$ — операторы уничтожения и рождения (квази)частиц;
 B — коэффициент;
 b — классическая точка поворота;
 C — теплоемкость, коэффициент;
 c — скорость света;
 D — коэффициент;
 D_{fg} — корреляционный момент второго порядка для величин f и g ;
 E — полная энергия, напряженность электрического поля;
 e — заряд, основание натуральных логарифмов;
 F — сила;
 f — физическая величина, сила, амплитуда рассеяния;
 G — функции и операторы Грина, матрица связи локальных решений;
 g — физическая величина, вспомогательный оператор;
 H — гамильтониан, напряженность магнитного поля;
 $\hbar$ — постоянная Планка, $\hbar = 2\pi\hbar$;
 I — функция спектральной плотности;
 J — операторы эволюции (пропагаторы);
 $\vec{j}$ — вектор плотности потока (вероятности, числа частиц, заряда и пр.);
 K — характерная величина ВКВ-приближения;
 k — волновое число, полный набор квантовых чисел;
 L — характерная длина, вероятность в законе распада;
 l — показатель степени, момент (орбитальное квантовое число);
 M — эффективная масса, механический момент;
 m — масса частицы, магнитное квантовое число;
 N — число частиц, барьеров и т. п.;
 n — число заполнения одночастичных состояний, плотность числа частиц;
 P — обобщенный (канонический) импульс;
 p — кинематический импульс, квазиимпульс;
 Q — обобщенная координата, стандартное решение с определенными асимптотическими свойствами;
 q — обобщенная координата, величина типа волнового числа;
 R — резольвента, радиус круга или сферы;
 r — сферическая координата, максимальная заселенность в парастатистике;
 $\vec{r}$ — радиус-вектор многомерного пространства;
 S — оператор движения в представлении взаимодействия, энтропия;
 s — номер энергетической зоны, индекс суммирования;
 T — температура, кинетическая энергия, оператор хронологизации;
 t — время, переменная в эволюционном уравнении;
 U — потенциальная энергия, оператор движения в картине Шредингера;
 u — одна из функций Эйри (по Фоку);
 V — объем;
 v — скорость, одна из функций Эйри (по Фоку);
 W — вероятность;
 w — функции Эйри (по Фоку): $w = u + iv$;
 X — характерный линейный размер, решение эволюционного уравнения;
 x — декартова координата;
 Y — решение эволюционного уравнения;
 y — декартова координата;
 Z — безразмерная длина, решение эволюционного уравнения;
 z — декартова координата, параметр когерентных состояний;
 α — коэффициент, граничная фаза квазиклассической волновой функции;
 β — обратная температура, коэффициент;
 Γ — гамма-функция, ширина уровня энергии, число состояний;
 γ — добавка в квазиклассических правилах квантования;
 Δ — лапласиан, приращение;

Δf — неопределенность (среднее квадратичное отклонение) величины f ;
 δ — дельта-функция Дирака, вариация;
 ε — одночастичная энергия, бесконечно малая положительная величина;
 ζ — химический потенциал, дзета-функция Римана;
 η — вспомогательная величина, индекс обобщенного коммутатора;
 θ — ступенчатая функция Хевисайда;
 x — аналог волнового числа;
 λ — безразмерная энергия, внешний параметр, длина волны;
 μ — магнитный момент частицы, масса;
 ν — энергетическая плотность состояний, вспомогательная фаза;
 ξ — безразмерная координата, параметр;
 ρ — статистический оператор (матрица плотности), цилиндрическая координата, плотность вероятности;
 σ — тензор электропроводности, сечение рассеяния;
 τ — время релаксации, период колебаний;
 Φ — вектор состояния;
 φ — азимутальный угол, функция последствия;
 χ — обобщенная комплексная восприимчивость;
 Ψ — вектор состояния, волновая функция;
 ψ — вектор состояния, волновая функция;
 Ω — термодинамический потенциал, пространственная область;
 ω — частота колебаний;
 $\langle \rangle$ — среднее значение;
 $\hat{A}$ — оператор;
 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ — коммутант;
 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = i[\hat{A}, \hat{B}] / \hbar$ — квантовые скобки Пуассона;
 ВС — вириальные соотношения; СН — соотношение неопределенностей;
 НК — нулевые колебания; ТВ — теорема вириала;
 ПВ — параметрическое варьирование; ФГ — функция Грина.



ЧАСТЬ. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (Задачи)

Нет сомнения, что в квантовой механике имеется значительный элемент истины и что она станет пробным камнем для любой будущей теоретической основы...

А. Эйнштейн

§ 1. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

*Будьте милостивы, братцы!
Дайте чуточку подраться.*

П. П. Ершов

Метод вписанных и описанных моделей потенциала. Проблема существования связанных состояний и критические параметры полей. Интегральное уравнение. δ -аппроксимация. Влияние возмущений на энергию связи. Эффективные потенциалы. Многомерная сферическая яма. Четверной закон дисперсии. Импульсное представление. Основные квантовые эффекты финитного движения.

1. Докажите, что в случае как угодно слабой (узкой или мелкой) локальной одномерной потенциальной ямы произвольного профиля всегда существует связанное состояние частицы, зная, что это верно для прямоугольной ямы (метод «вписанного» потенциала)..

2. Аналогично предыдущей задаче, покажите, что в случае трехмерного слабого локального поля притяжения связанное состояние отсутствует. Считайте известным результат для сферической ямы (метод «описанного» потенциала).

3. При какой глубине потенциала Морза (см. п. 14 приложения 1) появляется первое связанное состояние частицы?

4. Найдите критические параметры, при которых появляется первое связанное состояние частицы, для потенциала $U(r) = -U_0 \text{ch}^{-2}(r/a)$.

5. Исследуйте параметры, при которых впервые возникает связанное состояние частицы, для моделей потенциала («полостей») со скачком U_0 на границе области Ω произвольной формы: $U(r) = -U_0 (r \in \Omega)$, $U(r) = 0 (r \notin \Omega)$. Используйте интегральное уравнение для волновой функции связанного стационар-

ного состояния и приближение постоянной волновой функции внутри «полости».

6. Оцените точность метода решения предыдущей задачи путем сравнения результатов с известными для сферической «полости».

7. Результаты задачи 5 обобщите для многомерного случая.

8. Используйте вариационную оценку собственных значений интегрального уравнения, распространив метод расчета энергии связи и критических параметров на случай произвольного локального поля. Оцените точность этого метода при простейшем выборе пробной функции $\Psi = \text{const}$ сравнением результатов с известными значениями критических параметров для экспоненциального потенциала и сферической «полости».

9. Рассчитайте критические параметры кубической «полости».

10. Разработанные в задачах 5 и 8 методы обобщите для случая нескольких «полостей».

11. Решите задачу о связанном состоянии частицы в δ -яме в импульсном представлении.

12. Убедитесь, что в первом приближении связанные стационарные состояния как в глубокой и узкой, так и в широкой и мелкой слабых одномерных потенциальных ямах такие же, как и для модели соответствующей δ -ямы. Какие детали в этой модели не охвачены?

13. Разберите вопросы предыдущей задачи на конкретной модели потенциала $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2}(x/a)$.

14. Исследуйте связанное состояние частицы в поле $U(x) = -u\delta(x) + U_0\theta(-x)$. Объясните физический смысл задачи*.

15. Изучите влияние одной однородной среды на связанное состояние в другой среде на примере потенциала $U(x) = -u\delta(x + L) + U_0\theta(x)$.

16. Задача, аналогичная 15, для модели потенциала $U(x) = -u\delta(x - L) + U_0\theta(x)$.

17. Исследуйте, как повлияет на движение частицы в поле $U(x) = F|x|$ добавочный δ -потенциал.

18. Как изменится энергия связи частицы в δ -образном поле при добавлении слабого степенного потенциала $U_1(x) = \beta|x|^2$?

19. Исследуйте влияние асимметрии квадратичного потенциала $U(x) = \beta_1 x^2 (x < 0)$, $U(x) = \beta_2 x^2 (x > 0)$ на уровни энергии (с помощью теории возмущений и квазиклассическим методом).

20. Задача, аналогичная предыдущей, в случае скачка потенциала: $U(x) = \beta x^2 - (\Delta U/2) \text{sgn } x$.

21. Как повлияет на структуру энергетического спектра незначительная экранировка кулоновского потенциала (в модели потенциала Юкавы)?

* Ступенчатая функция Хевисайда $\theta(x) = 1 (x > 0)$, $\theta(x) = 0 (x < 0)$.

22. Как изменяются волновая функция стационарных состояний и уровни энергии, если к гамильтониану частицы в некотором потенциальном поле добавлена часть $\hat{H}_1 = \hat{\alpha} p^2$?

23. Вопрос, аналогичный заданному в задаче 22, в случае $\hat{H}_1 = \gamma \hat{p}$.

24. Рассмотрите модель самосогласованного потенциала, «подстраивающегося» под энергию возбуждения системы, на примере движения частицы в одномерной бесконечной потенциальной яме, ширина которой $L(E)$ зависит от энергии. Покажите эквивалентность результата квантованию энергии $E_n = \pi^2 \hbar^2 [n + \gamma(E_n)]^2 / 2mL^2$ при фиксированной ширине ямы L .

25. Частица, движущаяся в одномерной конечной прямоугольной потенциальной яме, находится в основном состоянии. Какова вероятность обнаружить ее вне ямы? Рассмотрите предельные случаи глубоких и мелких ям. Объясните физический смысл результата. Сравните с гармоническими нулевыми колебаниями.

26. Исследуйте стационарные состояния заряда в поле равномерно заряженной плоскости с круглым отверстием. Движение заряда происходит по прямой, перпендикулярной к плоскости и проходящей через центр круга.

27. Исследуйте стационарные состояния частицы в сферической яме бесконечной глубины для многомерного случая.

28. Решите задачу о стационарных состояниях частицы для четверной зависимости кинетической энергии от импульса $T(p) = \alpha p^4$ в одномерной прямоугольной потенциальной яме бесконечной глубины.

29. Запишите стационарное уравнение Шредингера в импульсном представлении для двух частиц, взаимодействие которых определяется потенциалом Юкавы и на которые действует внешнее потенциальное поле.

30. Решите задачу восстановления вида потенциального поля по известным волновым функциям стационарных состояний частицы:

а) $\Psi(x) = A \exp(-\kappa|x|)$, $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}$; б) $\Psi(x) = A \exp(-\alpha x^2)$, $\hbar^2 \alpha = mE$; в) $\Psi(r) = A \exp(-\kappa r)$, $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}$.

31. Методом факторизации найдите уровни энергии частицы в полях:

а) $U(x) = U_0 \operatorname{tg}^2(\alpha x)$; б) $U(x) = U_0 \theta(x) - u \delta(x)$.

32. Назовите основные квантовые эффекты, возникающие в случае связанных состояний.

Замечания

1. С общими свойствами финитного движения лучше всего познакомиться по книге [1]. Много примеров имеется в сборниках задач [14—17]. Проблема существования связанных состояний затронута в [1], а о влиянии

магнитного поля см. в монографии [32]. О критических параметрах потенциальных полей сферической симметрии читайте в [10, с. 25]. Вопрос о формировании локальных связанных состояний обсуждается в работе [33]. См. также ФЭС [29]: т. 4, Связанные состояния, Потенциальная яма.

При использовании во многих задачах (данного и других параграфов) интегральных уравнений можно обращаться к книге [34]. Необходимые сведения о многомерных сферических координатах и лапласиане содержатся в [35]. Функции Эйри описаны в [36]. Чрезвычайно интересный метод так называемой факторизации детально изложен в [37], частично — в [9, т. 1, с. 259, 678, 732]. В последней книге см. об интегральных уравнениях (т. 1, с. 843) и точно решаемых задачах (т. 2, с. 620).

К числу методов, широко применяемых при исследовании связанных стационарных состояний, относится теория возмущений, которая в стандартной форме изложена во всех учебниках квантовой механики. В книге [9, т. 2] представлены различные варианты стационарной теории возмущений в сочетании с другими методами. Следует отметить монографию [38]. Теория возмущений на основе резольвенты развита в [39]. Много примеров по различным аспектам теории возмущений имеется в [11]. Математическая сторона вопроса рассматривается в [40].

2. В задачах 11—18 данного параграфа и в задачах других параграфов используется δ -образная модель потенциала. Обратите внимание, насколько интересна эта модель. Она достаточно проста, чтобы допускать точное решение в различных задачах. Хорошо имитирует некоторые реальные физические условия движения частиц (например, как и в атоме, в δ -поле притяжения имеется дискретная часть спектра энергии и непрерывная). С ее помощью удастся моделировать переход из связанного состояния в область инфинитного движения (ионизация) и демонстрировать влияние среды на свойства такого «атома» (сдвиг уровней, автоионизация и т. п.). Правда, можно возразить, что слишком беден дискретный спектр энергии (одноуровневый осциллятор!) — нельзя проследить за переходами в нем. Однако уже две δ -ямы (достаточно удаленные) дают двухуровневую систему. К тому же эта модель имеет конкретный физический смысл, описывая тонкие плоские прослойки. Заметим, что обсуждаемая модель в форме δ -функции Дирака приемлема для описания локализованного потенциального поля только в одномерном случае (подразумевается квадратичный закон дисперсии). О широком использовании δ -моделей и аналогичных трехмерных аппроксимаций для полей малого радиуса читайте в монографии [32].

Применение δ -моделей позволяет решить задачу до конца, получить полное количественное представление о рассматриваемом явлении. В этом состоит важная методическая роль δ -потенциала. Никакие рассуждения и объяснения качественного характера о том, как принципиально можно получить результаты в том или ином случае, не могут заменить «собственно-ручного» расчета доступными математическими средствами.

3. Под термином «локальный потенциал» («локальное поле» и т. п.) подразумевается пространственная сосредоточенность потенциальной энергии (см. [33]), а не интегральный характер действия оператора потенциала на волновую функцию.

§ 2. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ

При этом может играть роль также неравномерное преломление лучей в различных слоях воздуха, которые местами бывают теплее или холоднее, более влажными или более сухими.

М. Миннарт

Тонкие прослойки. Влияние поглощения частиц на прозрачность слоистой среды. Критические свойства рассеяния. Степенные потенциальные барьеры. Резонансное рассеяние. Многомерные пространства. Функции Грина. Неква-

дратичный закон дисперсии. Пакетное движение. Квантовые эффекты инфинитного движения.

1. Исследуйте одномерное рассеяние частиц на δ -барьере. Сравните с рассеянием на δ -яме. Сопоставьте рассеяние на δ -потенциале и прямоугольном потенциале. Дайте физическое толкование рассеяния на прямоугольном и δ -барьере.

2. Какой эффект при рассеянии описывает отрицательная (положительная) мнимая добавка к потенциалу? Сравните с оптической моделью в теории ядра. Введите соответствующие меры рассеяния с учетом поглощения частиц в слоистой среде. Выполните расчет для комплексного δ -потенциала.

3. Какова прозрачность симметричного степенного барьера $U = -\beta|x|^l$ при критической энергии $E = 0$? Сравните с соответствующей прозрачностью прямоугольного барьера.

4. Установите, как влияет несимметрия степенного потенциального барьера $U(x) = -\beta_1|x|^l (x < 0)$, $U(x) = -\beta_2x^l (x > 0)$ на его прозрачность при критической энергии $E = 0$.

5. Найдите прозрачность несимметричного разностепенного барьера $U(x) = -\beta_1|x|^l (x < 0)$, $U(x) = -\beta_2x^l (x > 0)$ при малых энергиях (в области «глубокого туннелирования»).

6. Изучите рассеяние линейным барьером $U(x) = -\beta_1|x| (x < 0)$, $U(x) = -\beta_2x (x > 0)$. Какое влияние оказывает на прозрачность асимметрия барьера? В случае симметричного барьера рассмотрите малые («глубокое туннелирование») и большие («сильное надбарьерие») энергии, а также критический диапазон энергий («мелкое туннелирование» и «слабое надбарьерие»).

7. Рассмотрите рассеяние частиц на несимметричном параболическом барьере $U(x) = -\beta_1x^2 (x < 0)$, $U(x) = -\beta_2x^2 (x > 0)$.

8. Какую прозрачность имеет δ -барьер «на фоне» симметричного квадратичного потенциала: $U(x) = u\delta(x) - \beta x^2$?

9. Решите задачу, аналогичную 8, для потенциала $U(x) = u\delta(x) - \beta|x|$.

10. Проанализируйте прозрачность экспоненциального барьера $U(x) = U_0 \exp(-|x|/L)$.

11. Сопоставьте закон убывания коэффициента отражения с увеличением энергии в случаях излома, скачка потенциала и δ -барьера.

12. Дайте общую оценку прозрачности барьеров типа 4 и 12 из приложения 1. Какие характерные области энергии можно выделить?

13. При движении частицы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}m^{-1}\hat{p}/2 + e\phi$ масса изменяется скачком на границе двух сред: $m(x) = m_1 (x < 0)$, $m(x) = m_2 (x > 0)$. Каков коэффициент прозрачности?

14. Исследуйте резонансное рассеяние при малых энергиях на локальном связанном состоянии в трехмерном случае.

15. Исследуйте рассеяние частиц потенциальным полем в многомерном пространстве.

16. Проанализируйте рассеяние слабым одномерным локальным потенциалом притяжения при малых энергиях. Сравните с трехмерным резонансным рассеянием.

17. В чем заключается физический смысл задач об одномерном рассеянии частиц? Сравните с трехмерным рассеянием. Сформулируйте, какие основные квантовые эффекты наблюдаются при рассеянии и объясните их происхождение. Сопоставьте с классической картиной прохождения частицы сквозь слоистую среду.

18. Получите функцию Грина $\langle x | (\hat{H} - E \mp i\delta)^{-1} | x' \rangle$ для одномерного свободного движения частицы.

19. Найдите ФГ для рассеяния частиц в двумерном случае.

20. Получите ФГ для трехмерного рассеяния.

21. Какой вид имеет ФГ для рассеяния в n -мерном случае?

22. Как получить ФГ задачи рассеяния для N частиц в n -мерном свободном движении?

23. Сформулируйте правило построения ФГ для задач рассеяния частиц в одномерном случае методом частных решений.

24. Используйте метод предыдущей задачи для отыскания ФГ задачи рассеяния частиц в случае потенциала $U(x) = u\delta(x)$.

25. Рассчитайте ФГ для рассеяния частиц на границе двух однородных сред: $U(x) = U_0 \theta(x)$.

26. Задача, аналогичная 25, в поле $U(x) = -\beta|x|$.

27. Найдите ФГ для рассеяния частиц в случае потенциального поля $U(x) = -\beta x^2$.

28. Исследуйте прохождение (рассеяние) зарядов в поле равномерно заряженной плоскости с круглым отверстием, если движение совершается вдоль прямой, перпендикулярной к плоскости и проходящей через центр круга.

29. Найдите выражение для вектора плотности потока вероятности частицы в случае четверного закона дисперсии * $T(p) = \alpha p^4$.

30. Исследуйте рассеяние частиц с четверным законом дисперсии в случае δ -потенциала.

31. Частица с четверным законом дисперсии $T(p) = \alpha p^4$ движется в потенциальном поле со скачком $U(x) = U_0 \theta(x)$. Проанализируйте состояния отражения ($E < U_0$).

32. Назовите возможные процессы при взаимодействии частицы со средой, описываемой одномерным потенциалом, в стационарных состояниях непрерывного спектра. Рассмотрите случаи квадратичного и четверного законов дисперсии.

* В этой книге под выражением «закон дисперсии» подразумевается чаще всего зависимость кинетической энергии от импульса. Обычно же имеется в виду зависимость энергии от квазиимпульса (в более общем случае — от некоторых квантовых чисел).

33. Изучите одномерное рассеяние частиц на моделях линейного потенциала со скачками: а) $U(x) = Fx\theta(x)\theta(L-x)$; б) $U(x) = Fx\theta(L-x)$.

34. Какова структура непрерывной части энергетического спектра?

35. Попробуйте качественно изобразить на рисунках отдельные этапы одномерного рассеяния волновых пакетов на прямоугольном барьере.

36. Приведите конкретные примеры физических явлений, обусловленных туннельным эффектом.

Замечания

1. Общие свойства прохождения частиц через слоистые среды (одномерное рассеяние) и рассеяния локальными трехмерными неоднородностями рассматриваются во всех книгах по квантовой механике. Много полезных соотношений и методов имеется во втором томе книги [9, с. 125, 461, 633, 647]. См. конкретные примеры в [17] и в других сборниках задач [14—16]. Рассеяние полями сферической симметрии подробно исследуется в книге [10], а обобщения на случай несферических рассеивателей изложены в монографии [32]. Аналитические свойства мер рассеяния описаны в [41]. Вы познакомитесь в этой книге с понятиями виртуальных и квазистационарных состояний. О применении метода комплексного потенциала в оптической модели ядра (адсорбционный потенциал в эффективной комплексной потенциальной энергии) можно прочитать в книге [42]. Прикладные вопросы рассеяния в слоистых структурах освещены в книге [43]. См. также [44].

О квазиклассическом надбарьерном отражении читайте в [11, с. 150], а о вариационных методах — в книге [45]. Изящное исследование рассеяния частиц короткодействующим потенциалом в магнитном поле выполнено в работе [46]. Из специальных книг по теории рассеяния следует назвать классическую монографию [47]. Читайте ФЭС [29]: т. 3. Оптика тонких слоев, Оптическая модель ядра; т. 4. Рассеяния теория, Резонансное рассеяние, Потенциальный барьер; т. 5. Туннельный эффект.

2. Как и в предыдущем параграфе, ряд задач включает модель δ -образного потенциала. В связи с этим читайте книгу [32] и замечания к § 1.

Можно отметить следующие аспекты происхождения одномерных задач:

а) в результате разделения переменных иногда удается «отщипить» одномерную ветвь движения от других степеней свободы системы (плоско-слоистые структуры, например);

б) движение может быть настолько ограничено вдоль двух направлений (эти степени свободы частицы не возбуждаются, «заморожены»), что фактически реализуется одномерное движение (например, нитевидные, трубчатые структуры);

в) наконец, чисто одномерные задачи имеют методическое, иллюстративное, общезначимое значение, позволяя в наглядной форме продемонстрировать некоторые физические явления и эффекты.

3. В работе [96] рассматривается одномерное рассеяние волновых пакетов на прямоугольных потенциальных барьерах и ямах. Вычисления выполнены с помощью ЭВМ и сопровождаются рисунками, ярко иллюстрирующими отдельные этапы пакетного движения при различных значениях параметров задачи.

Следует отметить обзор [74], посвященный экспериментам по непосредственному наблюдению туннельных явлений в слоистых структурах.

Старое предание говорит, что ледяные поля, после того, как их долго освещало Солнце, испускают ночью слабый свет.

М. Миннарт

Модели потенциальных ловушек. Резонансные эффекты в слоистых средах. Влияние поглощения частиц на прозрачность среды. Квазиклассическое приближение в теории квазистационарных состояний. Квантовые эффекты квазистационарных состояний. Кинетика распада и захвата. Многослойные структуры. Неквадратичные законы дисперсии частиц. Роль концепции квазиуровней.

1. Исследуйте квазистационарные состояния частицы, движущейся в потенциальном поле $U(x) = u\delta(x) - Fx$.

2. Найдите квазиуровни частицы в поле $U(x) = -u\delta(x) - Fx$. Сравните с результатами предыдущей задачи.

3. Выведите общие соотношения для квазиуровней частицы в поле δ -образного барьера на фоне произвольного потенциального «склона», используя квазиклассическое приближение.

4. Примените метод функций Грина для изучения квазиуровней частицы в случае δ -потенциала (ямы или барьера), находящегося на «склоне» потенциальной энергии.

5. Изучите квазиуровни частицы, движущейся в потенциальном поле $U(x) = u\delta(x) - Fx\theta(-x)$.

6. Задача, аналогичная 5, в поле $U(x) = -u\delta(x) - Fx\theta(x)$.

7. Проанализируйте квазиуровни частицы в случае потенциального поля $U(x) = U_0\theta(x) - u\delta(x - L)$. Обобщите задачу на случай слабой потенциальной ямы произвольного профиля.

8. Исследуйте распад квазистационарного состояния частицы в поле δ -образного барьера при наличии непроницаемой границы (полуограниченное движение).

9. Объясните физический смысл задач 1—8. Предложите свои модели односторонних потенциальных ловушек.

10. Проанализируйте квазистационарные состояния частицы в поле двух одинаковых δ -барьеров.

11. Изучите квазиуровни частицы, движущейся в потенциальном поле $U(x) = -u\delta(x) - F|x|$.

12. Решите задачу, аналогичную предыдущей, в случае потенциала $U(x) = -u\delta(x) - \beta x^2$.

13. Предложите потенциальные модели двусторонних ловушек, которые допускают точное решение.

14. Как найти квазиуровни частицы методом функций Грина для двусторонней ловушки, образованной δ -ямой на фоне потенциального барьера («вулкан»)?

15. Найдите квазиуровни частицы, движущейся в поле двух одинаковых слоев толщиной a , находящихся на расстоянии L (потенциальная энергия частицы в слое равна U_0).

16. Рассмотрите влияние поглощения частиц на резонансное рассеяние системой двух предельно тонких слоев, описываемых комплексными δ -образными потенциалами.

17. В первом квазиклассическом приближении с помощью матрицы связи локальных решений исследуйте резонансную прозрачность системы из двух одинаковых потенциальных барьеров (двусторонняя ловушка).

18. Проанализируйте квазиуровни частицы в критическом диапазоне энергий в случае линейной (излом) и квадратичной (простой максимум) «шапок» барьеров двусторонней потенциальной ловушки.

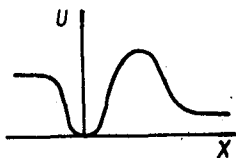


Рис. 1

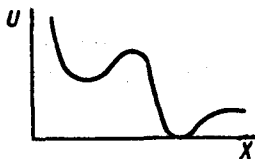


Рис. 2

19. Сохранится ли эффект резонансной прозрачности двусторонней потенциальной ловушки, если барьеры будут иметь разную форму?

20. Объясните физический смысл квазиуровней двусторонней потенциальной ловушки с точки зрения внешней задачи (резонансного рассеяния) и с точки зрения внутренней задачи (распада квазистационарного состояния).

21. Изучите квазистационарные состояния частицы в одно-сторонней потенциальной ловушке произвольного профиля в рамках первого ВКБ-приближения с помощью матрицы связи локальных решений. В частности, рассмотрите критический диапазон энергий в случае линейных и квадратичных «шапок» барьеров.

22. Качественно исследуйте одномерное движение частицы по графику эффективного потенциального поля (рис. 1 и рис. 2), сравнивая классическую картину с квантовой. Укажите квантовые эффекты.

23. Какова кинетика распада и захвата при движении частицы в случае одно- и двусторонних потенциальных ловушек? Опишите аналитические свойства основных характеристик квазистационарных состояний.

24. Отметьте роль квазиуровней среди различных видов энергетического спектра.

25. Рассмотрите свойства квазиуровней частицы в потенциальном поле, образованном цепочкой из нескольких одинаковых δ -образных барьеров.

26. На примере частицы с четверным законом дисперсии $T(p) = ap^4$ проследите изменения, вносимые видом закона дис-

персий, в свойства квазистационарных состояний. Опишите общий ход решения для какой-либо потенциальной модели и доведите решение задачи до конца.

Замечания

1. Общей проблеме квазистационарных состояний посвящена гл. VII книги [10]. Практически во всех учебниках по квантовой механике имеются фрагменты теории квазиуровней (например, [1, с. 192, 634, 686], [2, с. 216, 586—588], [3, § 99]). Некоторые задачи по квазистационарным состояниям есть в задачниках: [15, § 2, № 12; § 5, № 14,], [17, т. 1, с. 72]. См. также книгу [41, с. 109].

Основы квантовой теории распада изложены в работе [48]. Фоком и Крыловым установлена важная теорема о связи закона распада с энергетическим распределением квазистационарного состояния. Это направление исследований продолжено в работах Халфина (см., например, [92]). Закон распада квазистационарных состояний для конкретных энергетических распределений рассматривается в задачах 15, 16 из § 24.

Различные аспекты проблемы квазиуровней обсуждаются в статьях сборника [49]. Аналоги из теории дифракции и соответствующие конкретные примеры вы найдете в обзоре [50]. Физические применения результатов теории квазистационарных состояний в слоистых системах (прикладные вопросы улучшения эмиссии и т. п.) рассматриваются в книге [43]. Квазиуровни в цепочке потенциальных барьеров исследуются в работе [118].

Читайте ФЭС [29]: т. 4, Соотношение неопределенностей. См. замечания к § 16.

2. Что касается терминологии, то название «квазистационарные состояния» является общепринятым, а краткое и емкое слово «квазиуровни» можно встретить, например, в книгах [7] и [15]. Условие излучения обсуждается в [3]. Слово «ширина» по отношению к уровню энергии давно и прочно вошло в обиход. Каждый термин, однако, имеет свою «тонкую структуру», которой и были посвящены некоторые задачи данного параграфа.

3. Квазистационарные состояния занимают промежуточное положение между связанными стационарными состояниями дискретного спектра энергии и состояниями инфинитного движения непрерывного спектра. Метод квазиклассического приближения позволяет предсказать основные свойства и рассчитать параметры этих состояний при произвольной форме поля ловушек. Получаемые формулы для характеристик квазиуровней имеют несложный вид и содержат величины, имеющие простой физический смысл. Они охватывают практически все значения энергии, среди которых наибольший интерес представляет критический диапазон, соответствующий окрестности максимальных значений потенциальной энергии. Это еще раз подтверждает широкие возможности ВКБ-метода (в сочетании с точным решением стационарного уравнения Шредингера вблизи особых точек потенциала).

§ 4. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ

Как и в большинстве активно развивающихся отраслей науки, в проблеме Блоха наступление велось по многим направлениям и с постановкой множества различных тактических задач.

Дж. Займан

Точное решение для линейных и квадратичных моделей ячеек периодического потенциального поля. Приближение слабой связи и фурье-анализ. Квазиклассическое приближение. Интегральное уравнение и вариационные методы. Конкретные примеры периодических структур. Туннельное расщепление и резонансное отражение.

1. Исследуйте структуру энергетических зон частицы, движущейся в периодическом потенциальном поле δ -образных ям.

2. Рассмотрите энергетические зоны в случае одномерного периодического потенциального поля с ячейкой $U(x) = \beta|x|$, $|x| \leq L/2$ («пила» с изломами).

3. Задача, аналогичная предыдущей, для кусочно-линейного потенциала с ячейкой $U(x) = \beta x$, $|x| < L/2$ («пила» с разрывами).

4. Изучите структуру одномерных энергетических зон в периодическом потенциальном поле с параболической ячейкой $U(x) = -\beta x^2$ ($|x| \leq L/2$).

5. Задача 4 в случае периодически продолженного потенциального поля $U(x) = \beta x^2$ ($|x| \leq L/2$).

6. Сделайте общие выводы о структуре энергетических зон в различных диапазонах энергии на основании сравнения результатов решения задач 2—5 (как для сильных, так и для слабых полей).

7. Считая одномерное потенциальное поле слабым, исследуйте параметры нулевой зоны с помощью теории возмущений. Сформулируйте условие применимости теории возмущений.

8. Найдите средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы для стационарных состояний вблизи дна нулевой зоны в случае слабого поля.

9. Какой вид имеют блоховские волновые функции частицы в слабом потенциальном поле?

10. Проанализируйте структуру нулевой энергетической зоны вблизи дна, а также щели между зонами для следующих моделей слабого потенциального поля с ячейками ($|x| < L/2$): а) $U(x) = (U_0/2) \cos(2\pi x/L)$; б) $U(x) = 2U_0|x|/L$; в) $U(x) = U_0 \cdot x/L$; г) $U(x) = U_0(2x/L)^2$; д) $U(x) = -U_0(2x/L)^2$; е) $U(x) = U_0 \theta \times (|x| - a/2)$; ж) $U(x) = -i\delta(x)$.

11. Как повлияет на структуру энергетических зон небольшое искажение синусоидального потенциального поля (см. предыдущую задачу) при добавлении еще одной гармоник?

12. Предложите свои модели одномерных периодических потенциальных полей, допускающие простое решение в рамках приближения слабой связи.

13. Обобщите полученные с помощью теории возмущений результаты для нулевой зоны (см. задачу 7) на дву- и трехмерные случаи движения частицы в периодическом потенциальном поле.

14. Исследуйте структуру одномерных энергетических зон методом квазиклассического приближения (в первом ВКБ-приближении) с помощью матрицы связи локальных решений (оператора перехода через особенность потенциала).

15. Рассмотрите энергетические зоны в критическом диапазоне энергий для квадратичных вершин барьеров.

16. Решите задачу 15 в случае линейных вершин барьеров.

17. Сравните результаты, полученные на основе квазикласси-

ческого приближения и по теории возмущений, с точными для модели линейного потенциального поля задачи 2.

18. Составьте интегральное уравнение для волновых функций стационарных состояний частицы, движущейся в одномерном периодическом потенциальном поле. Наметьте пути решения задачи о структуре зонного спектра энергии.

19. Решите задачу о зонах энергии частицы в периодическом поле δ -образных потенциальных ям методом интегрального уравнения (см. предыдущую задачу).

20. Используя вариационную оценку для интегрального уравнения задачи 18, получите дисперсионное уравнение для нулевой энергетической зоны.

21. Выясните особенности энергетической зонной структуры частицы, движущейся в поле δ -образных потенциалов разного знака:

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [u_1 \delta(x - nL_1) - u_2 \delta(x - a - nL_2)].$$

22. Обычный предельный переход в модели Кронига—Пенни приводит к периодическому полю δ -образных барьеров (так называемая гребенка Дирака). Рассмотрите другие предельные случаи в рамках этой модели: а) цепочка δ -образных ям; б) мелкие потенциальные ямы.

23. Используя матрицу связи локальных решений (оператор перехода через особенность потенциальной энергии), запишите зонное дисперсионное уравнение в общем виде.

24. Дайте качественное объяснение эффекта расщепления уровней энергии частицы в поле двух удаленных потенциальных ям при добавлении к одной из них (путем постепенного углубления) новой такой же ямы. Добавьте еще одну потенциальную яму и т. д. Опишите, что получится в пределе бесконечного числа ям. Что будет, если ямы расположены достаточно близко друг к другу? Иллюстрируйте рассуждения графиками.

25. Опишите картину происхождения зонного энергетического спектра с точки зрения внешней задачи рассеяния частиц цепочкой потенциальных барьеров. Рассмотрите вначале поле, образованное двумя одинаковыми барьерами. Назовите квантовые эффекты, сравните с классической картиной движения. Затем добавьте еще один такой же барьер. Проследите, как на фоне непрерывного спектра энергии образуются квазиуровни, расщепляющиеся в зоны, между которыми в пределе бесконечно большого числа барьеров возникают полосы энергии с полным отражением.

26. Сопоставьте картины формирования зонного спектра путем образования разрешенных полос энергии (зон) в задаче 24 и путем возникновения полос запрещенных значений энергии (щелей) в предыдущей задаче.

27. Изобразите на графиках типичные зависимости от квазиимпульса (и от энергии) следующих характеристик зонной структуры: числа состояний, энергетической плотности состояний, средней скорости, обратной эффективной массы.

28. Можно ли решить обратную задачу восстановления вида одномерного слабого периодического потенциального поля, если известны параметры нулевой зоны в приближении слабой связи (см. задачу 7)? Тот же вопрос, если заданы величины щелей между зонами.

29. Могут ли перекрываться энергетические зоны в чисто одномерном случае?

30. Перечислите методы расчета зонной структуры энергии частицы, движущейся в одномерном периодическом потенциальном поле, и дайте им краткую характеристику.

31. Что объединяет вопросы, рассмотренные в последних четырех параграфах?

Замечания

1. Теория энергетических зон изложена в учебной литературе: [6, 15, 17, 18]. См. [11, с. 116]. Основные понятия и приложения в физике твердых тел с хорошей библиографией содержатся в книге [27], а о зонах в металлах см. [25, 26]. Специальным методам расчета зонной структуры посвящены книги [51, 52].

Проблема учета различных возмущений периодического поля (дефектов, электрических и магнитных полей) обсуждается в [53]. Теории энергетического спектра неупорядоченных систем посвящена работа [33]. См. также [54]. О влиянии границ советуем почитать в книге [55]. Синусоидальная модель потенциала изучается в [9, т. 1, с. 527 и т. 2, с. 14, 310]. См. литературу к § 5.

Линейные цепочки локальных полей малого радиуса в трехмерном пространстве и другие аналогичные вопросы рассматриваются в монографии [32]. О концепции квазиэнергии, связанной с зонной теорией, читайте в книге [10, с. 266].

С новым интересным направлением в создании и исследовании плоскостных структур знакомьтесь по книге [56]. Можно отметить монографию [57]. Напоминаем о ФЭС [29]: т. 2, Зонная теория, Квазиимпульс; т. 3, Металлы.

2. В упомянутых книгах основное внимание обычно уделяется исследованию зонного спектра энергии частиц, движущихся в трехмерном периодическом поле (электроны в кристалле). Одномерная задача при этом если и упоминается, то лишь для демонстрации общих квантовых закономерностей формирования зон. В настоящее время интерес к системам низкой размерности, вызванный экспериментальными и техническими достижениями в области изучения и применения тонкопленочных и нитевидных материалов, все возрастает. В связи с этим задача о структуре одномерных энергетических зон приобретает самостоятельное значение, выходя за рамки методической проблемы.

3. Некоторые задачи данного параграфа связаны с анализом одномерных зон в случае слабых полей (главным образом в приближении слабой связи). Часть задач посвящена квазиклассическому описанию энергетических зон, отвечающему достаточно сильным полям. При этом особое внимание уделяется структуре зон в окрестности максимумов потенциала — критическому диапазону энергий. Оба подхода — квазиклассический и слабого поля — позволяют найти меры зонной структуры для произвольного профиля поля. Общие результаты иллюстрируются на конкретных моделях по-

тенциальных полей, для которых возможно точное решение, что позволяет судить об эффективности используемых аппроксимаций.

Рассматриваемые одномерные задачи относятся прежде всего к теории энергетической зонной структуры частиц, движущихся в плоскостных средах, в частности структурах с искусственно созданной периодичностью (плёночных слоях, так называемых сверхрешетках [56, 74] и т. п.), где ветвь одномерного движения частицы сквозь слои отделяется от ветвей движения вдоль слоев. Кроме того, областью приложения может служить распространение возбуждений (квазичастиц) внутри «трубок» (проволок, нитей) с достаточно малыми поперечными размерами и периодическими свойствами. Отметим также связь зонной теории с некоторыми вопросами колебательного движения (см., например, задачу 28 из § 5).

4. Наряду с целым рядом искусственно созданных периодических структур, в которых движение квазичастиц происходит в трехмерном пространстве (объемные периодические структуры — сверхрешетки, «замороженные» волны и т. п.), возможно создание сред с искусственными периодическими свойствами и одномерным или двумерным характером движения. Это могут быть системы, в которых движение заряда происходит вдоль пространственных или плоских линий (винтовая линия, плоская цепочка полуокружностей и т. п.) или вдоль гофрированных поверхностей (например, плоскость с круглым гофром) в соответствующим образом направленном постоянном однородном электрическом поле. Отмеченные модели, описываемые синусоидальным эффективным потенциалом, допускают теоретический расчет с помощью хорошо изученных специальных функций (Матве). Экспериментальное осуществление подобных сред искусственной периодичности связано с необходимостью создания достаточно тонких каналов движения (нитей, проволок, пленок), в которых не должно быть экранировки внешнего электрического поля.

§ 5. КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ДВИЖЕНИЕ

*Он то клал свой шар в горшок, то
вынимал его обратно, и видно было, что
он совершенно счастлив!*

А. Милн

Нулевые колебания. Анггармонизмы. Нестационарные состояния. Вынужденные колебания. Когерентные состояния. Квантовый математический маятник. Затухание колебаний. Значение колебательного движения.

1. Оцените амплитуду нулевых колебаний гармонического осциллятора.

2. Как влияет на нулевые колебания осциллятора слабая нелинейность?

3. Исследуйте нулевые колебания осциллятора с сильной нелинейностью в полях: а) $U(x) = \beta x^4$; б) $U(x) = \beta x (x > 0)$, $U(x) = \infty (x < 0)$.

4. Каковы амплитуды нулевых колебаний при движении частицы в слабом одномерном потенциальном поле произвольного профиля?

5. Изучите вопрос о нулевых колебаниях частицы в одномерной конечной прямоугольной потенциальной яме.

6. На конкретных примерах установите, какую точность обеспечивают правила квантования Бора — Зоммерфельда при расчете энергии нулевых колебаний (в случае слабой и сильной нелинейностей).

7. Оцените энергию нулевых колебаний частицы, движущейся в степенном потенциальном поле $U(x) = \beta |x|^l$.

8. При каких значениях параметра u энергия нулевых колебаний частицы станет равной нулю в полях: а) $U(x) = m\omega^2 x^2/2 - u\delta(x)$; б) $U(x) = F|x| - u\delta(x)$? Сравните оценку по теории возмущений с точными значениями.

9. В условиях предыдущей задачи оцените эффект проникновения частицы в классически недостижимую область движения.

10. Объясните происхождение «нулевой» энергии. Назовите физические явления, обусловленные квантовым эффектом нулевых колебаний.

11. Найдите поправки к уровням энергии гармонического осциллятора в случае возмущения $\hat{H}_1 = \gamma(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})$. Решите задачу точно и с помощью теории возмущений. Сравните результаты.

12. Получите первые исчезающие поправки к уровням энергии осциллятора, если ангармонизмы вызваны добавочными членами потенциальной энергии: а) $\alpha \hat{p}^4$; б) $i\gamma[(\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2]$; в) $\alpha \hat{p}^3$; г) $A(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})^2$; д) $\gamma[(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2]$; е) $c(\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a})$.

13. Частица совершает нулевые колебания в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Вычислите вероятности переходов в первом приближении теории возмущений, если возбудитель дает добавку к гамильтониану вида: а) $-f(t)\hat{x}$; б) $\varphi(t)\hat{p}$.

14. Частица в бесконечной потенциальной яме находится в момент времени t_0 в нестационарном состоянии с вектором $\Psi = (\Psi_1 + \Psi_2)/\sqrt{2}$. Найдите вектор состояния к моменту времени t . Вычислите средние значения энергии, импульса и координаты, а также неопределенности и корреляционный момент второго порядка для координаты и импульса.

15. Задача, аналогичная 14, для гармонического осциллятора в начальном состоянии $\Psi = (\Psi_0 + \Psi_1)/\sqrt{2}$.

16. Частица, совершающая нулевые гармонические колебания, подвергается действию возмущения в виде δ -потенциала. Найдите среднее значение энергии, неопределенности координаты и импульса, а также вероятности переходов, если возмущение было кратковременным и если оно внезапно включилось и далее не изменялось.

17. Какие переходы разрешены в первом приближении теории возмущений при возбуждении гармонического осциллятора, описываемом добавкой к гамильтониану: а) $\varphi(t)\hat{p}$; б) $\varphi(t)\hat{p} - f(t)\hat{x}$; в) $\gamma(t)\hat{p}^2$; г) $\alpha(t)(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})$. Вычислите вероятности этих переходов и переданную осциллятору среднюю энергию.

18. Рассмотрите колебания двух слабо связанных осцилля-

торов, один из которых описывается классически и обладает затуханием. Гамильтониан взаимодействия пропорционален смещениям осцилляторов.

19. Как повлияет учет ангармонизмов на вероятности переходов осциллятора под действием слабого переменного однородного силового поля? Сравните вероятности двухквантовых процессов с одноквантовыми для гармонического осциллятора.

20. На модели вынужденных колебаний гармонического осциллятора проиллюстрируйте явление спонтанного и индуцированного излучения.

21. Рассмотрите вероятности переходов и переданную осциллятору среднюю энергию в случае вынуждающей силы $f(t) = f_0 \operatorname{ch}^{-2}(t/\tau)$.

22. Частица совершает нулевые колебания (гармонические). Внезапно ее масса изменяется ($m_1 \rightarrow m_2$). Какова вероятность обнаружить частицу вновь в основном состоянии?

23. Частица совершает нулевые колебания в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины. Чему равна вероятность перехода в основное состояние после внезапного сдвига одной из стенок на расстояние, равное первоначальной ширине ямы?

24. Исследуйте нулевые колебания «одноуровневого» осциллятора — частицы в δ -образной потенциальной яме.

25. В условиях предыдущей задачи найдите вероятность перехода в режим инфинитного движения (вероятность «ионизации») при внезапном изменении параметра потенциала или массы частицы.

26. Частица с четверным законом дисперсии $T(p) = ap^4$ движется в потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$. Каковы уровни энергии?

27. Опишите влияние возмущения $U_1(x) = U_0 \exp(-\alpha x^2)$ на структуру энергетического спектра гармонического осциллятора.

28. Исследуйте движение квантового математического маятника.

29. Составьте схему различных состояний квантовомеханических систем (чистых и смешанных, стационарных и нестационарных). Установите взаимосвязи этих состояний. Приведите конкретные примеры из теории колебаний.

30. В каких конкретных физических системах находит непосредственное применение модель гармонического осциллятора?

31. Получите вигнеровскую функцию для чистых стационарных состояний гармонического осциллятора.

Замечания

1. Теория гармонического осциллятора освещена во всех учебниках по квантовой механике (см. список литературы в конце книги). О роли нулевых колебаний рекомендуем почитать в сборнике [58] и книге [59]. Примеры применений задачи об осцилляторе имеются в монографии [60]. Нестационарным задачам теории колебаний отведена глава VI в книге [10]. О свойствах колебаний кристаллической решетки читайте в книгах [61, 51, 52]. О

фотонах и многоквантовых процессах см. в [62]. Литература по когерентным состояниям приведена в замечаниях к § 6. Оригинальный подход к учету влияния среды на затухание колебаний развит в работе Швингера [63]. Особые случаи колебательного движения (в частности, в молекулах этана и аммиака) описаны в книге [64].

2. О функциях параболического цилиндра достаточно прочесть в [31], с функциями Эйри знакомьтесь по книге [36], а о функциях Маттье можете почитать в т. 3 книги [30] (см. также оба тома в [9]).

§ 6. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

*Но вдруг сугроб зашевелился.
И кто ж из-под него явился?*

А. С. Пушкин

Вынужденные колебания осциллятора. Средние значения характеристик колебаний. Свойства когерентных состояний. Корреляционные меры. Базис когерентных состояний. Вероятности переходов и переданная энергия. Случайные, термические и электромагнитные возбуждения колебаний гармонического осциллятора. Роль когерентных состояний в современной квантовой теории.

1. В момент времени t_0 включения переменного однородного силового поля $f(t)$ гармонический осциллятор находился в основном состоянии. В какое состояние он перейдет к моменту времени t ? Сравните полученный вектор состояния в представлении Шредингера и Дирака.

2. Решите предыдущую задачу методом уравнений движения гейзенберговского представления.

3. Покажите, что когерентные состояния соответствуют собственным векторам оператора уничтожения квантов и что других собственных векторов у него нет. А как обстоит дело с оператором рождения?

4. Найдите средние значения и неопределенности координаты, импульса и энергии в когерентном состоянии гармонического осциллятора. Объясните физический смысл описания с помощью z -плоскости.

5. Сравните оценку на основе соотношения неопределенностей для произведения средних квадратичных отклонений энергии и координаты с точным значением для когерентных состояний.

6. В какое состояние перейдет осциллятор в условиях задачи 1, если начальное состояние было когерентным?

7. Гармонический осциллятор возбуждается из основного состояния двумя переменными однородными силовыми полями. Каким будет его состояние?

8. Получите распределение числа квантов в когерентном состоянии.

9. Какое состояние образуется при возбуждении гармонического осциллятора из вакуумного состояния возмущением $\hat{H}^1 = \varphi(t) \hat{p}$?

10. Есть ли среди z -состояний стационарные?

11. Чему равны при вынужденных колебаниях гармонического осциллятора следующие операторные величины: $\{\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)\}$, $\{\hat{p}(t_1), \hat{p}(t_2)\}$, $\{\hat{p}(t_1), \hat{x}(t_2)\}$, $[\hat{a}(t_1), \hat{a}^\dagger(t_2)]$?

12. Проследите за изменением временных корреляционных характеристик $D_{xx}(t_1, t_2)$, $D_{pp}(t_1, t_2)$, $D_{xp}(t_1, t_2)$ (центральные моменты второго порядка) при вынужденных колебаниях гармонического осциллятора под действием переменного однородного силового поля.

13. Какой вид имеют в представлении когерентных состояний: а) вектор состояния с определенным числом квантов $|n\rangle$, в частности вакуумный $|0\rangle$; б) вектор когерентных состояний $|z\rangle$; в) операторы проектирования на n -вектор и z -вектор?

14. Определите вид волновой функции когерентного состояния гармонического осциллятора в координатном представлении и объясните смысл описываемого ею состояния.

15. Вычислите переданную гармоническому осциллятору среднюю энергию при вынужденных колебаниях, считая вынуждающую силу случайной.

16. Найдите дисперсию энергии при вынужденных колебаниях гармонического осциллятора, если начальное состояние было смешанным стационарным.

17. Каковы вероятности переходов в состояния с определенным числом квантов гармонического осциллятора при возбуждении переменным однородным силовым полем, если начальное состояние было чистым стационарным? Сравните с результатами расчета в первом приближении теории возмущений.

18. Убедитесь, что в первом приближении теории возмущений получается правильный ответ для переданной гармоническому осциллятору энергии при вынужденных колебаниях, если начальное состояние было стационарным.

19. Объясните смысл когерентных состояний по отношению к: а) вынужденным колебаниям гармонического осциллятора, б) вопросу о минимизации произведения неопределенностей импульса и координаты, в) классическому закону изменения импульса и координаты, г) собственным векторам оператора уничтожения, д) сложению амплитуд при расчете интенсивностей.

20. Получите статистический оператор для вынужденных колебаний гармонического осциллятора, начальное состояние которого было термодинамически равновесным. Найдите распределение числа квантов.

21. Исследуйте состояние электрона, возникающее при включении дополнительного переменного однородного электрического поля, перпендикулярного постоянному однородному магнитному.

22. Убедитесь, что статистический оператор гармонического осциллятора в термостате в представлении когерентных состояний

имеет вид: $\hat{\rho} = (\pi \langle n \rangle)^{-1} \int dz \cdot |z\rangle \langle z| \cdot \exp(-|z|^2 / \langle n \rangle)$.

23. Используя результат предыдущей задачи, вычислите равновесное среднее значение $\langle \exp(i\mu\hat{a}^\dagger + i\nu\hat{a}) \rangle$.

24. В чем заключается преимущество базиса когерентных состояний по сравнению с представлением чисел заполнения?

25. Каким образом можно ввести осцилляторную аналогию и когерентные состояния в системе бозе-частиц? А для фермионов?

26. Приведите конкретные примеры физических систем, в которых могут возникнуть когерентные состояния.

27. Является ли суперпозиция когерентных состояний также когерентным состоянием?

28. Проследите за временной эволюцией вигнеровской функции гармонического осциллятора при вынужденных колебаниях под действием переменного однородного силового поля, если исходное состояние было вакуумным.

Замечания

Наиболее обстоятельное изложение теории когерентных состояний с конкретными практическими приложениями имеется в книге [65]. Она содержит обширную библиографию. Развитие теории когерентных состояний и ее применение в оптике и радиофизике освещены в сборнике [66] (статьи Кролля и Глаубера). См. также книгу [62]. Широкое использование концепции когерентных состояний в различных разделах квантовой физики отражено в сборнике [67]. Там вы найдете достаточное количество литературных ссылок для дальнейшего знакомства с этим интереснейшим направлением.

Когерентные состояния описаны и в учебниках по квантовой механике: впервые это сделано в книге [2, с. 157], а в [1, с. 95] когерентные состояния рассматриваются в задаче. См. также [10, с. 52].

§ 7. ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Небезынтересно представить себе, что переживали бы мы, если бы обладали непосредственным магнитным чувством.

Я. И. Перельман

Различные законы дисперсии. Поточковые картины в стационарных состояниях. Квантовые аномалии движения электрона. Всегда ли электрон движется против часовой стрелки? Магнитные поверхностные уровни. Функция Грина и связанные состояния. Магнитные слои. Скрещенные поля. Волновые функции в импульсном представлении. Функции Грина в квазиклассическом приближении. Функция распространения. Параметрическое варьирование энергии и теорема вириала. Соотношения коммутации и неопределенностей. Квантовые эффекты при движении заряженной частицы в магнитном поле.

1. Электрон с законом дисперсии $\epsilon(\mathbf{p}) = (p_x^2 + p_y^2)/2m + \alpha p_z^4$ движется в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси x . Найдите уровни энергии.

2. Решите задачу, аналогичную 1, при $\epsilon(\mathbf{p}) = \beta \sqrt{p_x^2 + p_y^2} + p_z^2/2m$.

3. Изобразите потоковую картину стационарного состояния электрона в однородном магнитном поле с определенным центром колебаний вдоль одной из осей координат, перпендикулярных магнитному полю.

4. В условиях предыдущей задачи рассмотрите состояние с определенным радиусом центра колебаний (цилиндрические координаты). Обратите особое внимание на квантовые аномалии движения электрона. Чем объяснить нарушение правила о движении электрона в перпендикулярной магнитному полю плоскости против часовой стрелки?

5. Проиллюстрируйте происхождение диамагнетизма зарядов в магнитном поле, используя параметрическое варьирование энергии.

6. Электрон движется в постоянном однородном магнитном поле в полупространстве. Исследуйте структуру энергетического спектра, если поле направлено вдоль граничной плоскости.

7. Получите функцию Грина для связанных состояний электрона с анизотропным квадратичным законом дисперсии в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль одной из главных осей тензора обратных эффективных масс.

8. Используя функцию Грина предыдущей задачи, исследуйте связанные состояния электрона в слабом локальном поле притяжения при наличии магнитного поля.

9. Изучите движение парамагнитной нейтральной частицы в слабом магнитном поле.

10. Рассмотрите рассеяние электронов магнитным полупространством.

11. Задача, аналогичная 10, в случае магнитного поля в виде слоя.

12. В чем заключаются особенности движения электрона в постоянном однородном магнитном поле, напряженность которого имеет разную величину в полупространствах $x > 0$ и $x < 0$, но одинаковое (или противоположное) направление? Дайте общее качественное описание движения, пользуясь графиками эффективного потенциала.

13. Обрисуйте потоковую картину движения заряда в стационарных состояниях в скрещенных магнитном и электрическом полях.

14. Найдите волновые функции стационарных состояний электрона в однородном магнитном поле для импульсного представления при различной калибровке векторного потенциала.

15. Получите квазиклассическое разложение для функции Грина электрона в постоянном однородном магнитном поле.

16. Выясните условия, при которых возможно разделение переменных в задаче двух зарядов в магнитном и электрическом полях.

17. Получите функцию распространения для электрона в постоянном однородном магнитном поле.

18. Влияет ли постоянное однородное магнитное поле на прохождение электронов сквозь слоистую среду, если поле и поток перпендикулярны слоям?

19. Какие результаты дает параметрическое варьирование уровней энергии Ландау?

20. Сформулируйте теорему вириала для заряда в магнитном поле.

21. Рассмотрите соотношения коммутации и неопределенностей для импульсно-координатных мер движения заряда в магнитном поле.

22. Как повлияет на указанные в предыдущей задаче соотношения электрическое поле, перпендикулярное магнитному?

23. Вычислите среднее значение спинового тока при движении электрона в скрещенных электрическом и магнитном полях.

24. Какова парамагнитная добавка к числу состояний электрона в магнитном поле?

25. Назовите квантовые эффекты, имеющие место при движении заряда в магнитном поле.

Замечания

1. Основные особенности задачи о стационарных состояниях электрона в однородном постоянном магнитном поле, а также общие свойства движения заряда в электромагнитном поле описаны во всех учебниках по квантовой механике. Много интересных задач на эту тему имеется в сборниках [14, 15]. Особенности движения электронов в металле в случае произвольного закона дисперсии рассматриваются в работе [25]. О различных свойствах систем в магнитном поле см. § 21 и замечания к нему.

2. Релятивистская задача о движении электрона в магнитном поле обсуждается в книге [68]. О спиновом токе см. в [1, § 115], а также в [3, с. 259]. Рекомендуем познакомиться со стабилизирующим влиянием магнитного поля на связанные состояния по книге [32]. Рассеяние зарядов короткодействующим потенциалом в магнитном поле рассмотрено в работе [46].

§ 8. ДВИЖЕНИЕ В ПОЛЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

— Легкое вращательное движение справа налево... Или, может быть, вернее сказать,— добавил он, попав в следующий водоворот,— слева направо...

А. Милл

Разделение переменных. Рассеяние. Функции Грина. Проблема существования связанных состояний и критические параметры. Магнитное поле. Момент импульса и токи. Законы сохранения.

1. Частица движется в потенциальном поле $U(\rho)$. Методом разделения переменных перейдите к радиальному уравнению

для волновой функции стационарного состояния. Изучите общие свойства движения.

2. Опишите стационарные состояния свободного движения частицы с определенными значениями проекций момента M_z и импульса p_z .

3. Постройте функцию Грина свободного движения частицы на основе решений из предыдущей задачи.

4. Получите уровни энергии частицы, движущейся внутри прямого кругового цилиндра с непроницаемыми стенками.

5. Исследуйте рассеяние частиц в поле цилиндрической симметрии. Введите меры рассеяния по аналогии с трехмерным случаем.

6. Найдите амплитуду и сечение рассеяния для полей аксиальной симметрии в борновском приближении. Проведите расчет для моделей потенциального поля: а) $U(\rho) = U_0 \exp(-\alpha \rho^2)$; б) $U(\rho) = (A/\rho) \exp(-\alpha \rho)$; в) $U(\rho) = A/(\rho^2 + a^2)$.

7. Вычислите функции Грина рассеяния и связанных состояний для частиц, движущихся в полях цилиндрической симметрии.

8. В цилиндрической области движения частицы имеется поле притяжения («пробка» потенциала, не зависящего от координат ρ и φ). Проанализируйте связанные состояния.

9. Опишите движение частицы внутри цилиндрической «трубы» при наличии потенциальных «пробок» (потенциал изменяется только в направлении оси «трубы»).

10. Вычислите критические параметры «полости» (см. задачу 5 в § 1) цилиндрической формы.

11. Найдите уровни энергии электрона в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндрической области движения.

12. Исследуйте стационарные состояния электрона в магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра, внутри которого напряженность равна H_1 , а снаружи равна H_2 .

13. Изучите стационарные состояния электрона в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндрической области, внутри которой движение запрещено (непроницаемая граница).

14. Движение частицы ограничено двумя коаксиальными цилиндрическими поверхностями (цилиндрический слой). Исследуйте стационарные состояния.

15. На каком расстоянии от двумерной области слабого притяжения должна находиться граница движения в виде прямой линии (отражатель), чтобы «вытеснить» связанное состояние частицы?

16. Как повлияет ограничение движения частицы полупространством на критические параметры трехмерной «полости» (см. задачу 5 в § 1)?

17. Движение частицы происходит в «полуцилиндре» с непроницаемыми стенками (сечение — полукруг). Найдите уровни энергии.

18. Аналогичная предыдущей задача для цилиндрического сектора.

19. Изучите стационарные состояния частицы, движущейся по поверхности прямого кругового цилиндра бесконечной длины.

20. Электрон, движение которого ограничено тонким цилиндрическим слоем, находится в электрическом поле, направленном перпендикулярно оси цилиндра. Исследуйте стационарные состояния.

21. Что представляют собой вынужденные колебания цилиндрического осциллятора (частицы в поле $U(\rho) = m\omega^2\rho^2/2$) под действием однородного переменного силового поля, перпендикулярного оси z ?

22. Исследуйте квазистационарные состояния частицы, движущейся в потенциальном поле $U(\rho) = u\delta(\rho - R)$.

23. Проанализируйте связанные стационарные состояния частицы, движущейся в потенциальном поле $U(\rho) = -u\delta(\rho - R)$ с определенным значением проекции момента $M_z \neq 0$.

24. Выясните потоковый смысл проекции момента импульса частицы на некоторую ось.

25. Назовите сохраняющиеся величины при движении частицы в полях, созданных заряженными (или гравитирующими): а) нитью, б) конусом, в) цилиндром (конечным и бесконечным). В чем своеобразие движения в полях винтовой линии, шестигранной призмы, гофрированного цилиндра?

26. Какова структура энергетического спектра при движении частицы внутри тонкой «трубки» с периодически расположенными «пробками»?

27. Приведите конкретные примеры физических систем, соответствующих полям осевой симметрии.

28. Что объединяет вопросы, рассмотренные в последних четырех параграфах?

Замечания

1. О рассеянии в поле цилиндрической симметрии читайте в книге [9, т. 2, с. 65]. Общие свойства рассеяния аналогичны трехмерному случаю, описанному во всех учебниках квантовой механики (см. также литературу в замечаниях к § 2). Некоторые задачи по двумерным системам с круговой симметрией имеются в сборниках задач [14—17]. Связанные состояния в случае слабых полей осевой симметрии рассматриваются в [1, с. 196]. О методе функций Грина см. в § 11. О явлениях квантования магнитного потока, квантовых вихрях и т. п. рассказывается в книге [69]. См. также работу [70].

2. В учебной литературе обычно тесно связывают вопрос о квантовании отдельной проекции момента с квантованием квадрата момента. В системах же с цилиндрической симметрией сохраняется только одна из проекций, так что необходимо обратить внимание на свойства отдельно взятой проекции момента. Здесь величина проекции показывает не «пространственное квантование», а «интенсивность вращения», что лучше всего иллюстрируется потоковым смыслом проекции момента (в цилиндрических координатах связь j_φ с M_z).

Случай полей цилиндрической симметрии любопытен еще и тем, что тесно связан с одно- и двумерными моделями движения. Например, при движении частиц внутри цилиндрической области малого диаметра мы получаем переход к одномерной ветви движения вдоль оси цилиндра. С другой стороны, в поле, создаваемом неограниченным (вдоль оси) цилиндром, возможно разделение переменных: после отделения ветви свободного распространения вдоль оси остается эффективное двумерное движение в перпендикулярном направлении. Обратите внимание на случаи близких симметрий: ось симметрии n -го порядка, гофрированный цилиндр. Особый случай — поле винтовой линии.

§ 9. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Как всегда бывает в физике, новое не отменило старое, а только наложило на него ограничения.

А. С. Компанеец

Первое ВКБ-приближение. Структура энергетического спектра в квазиклассическом приближении. Оценка точности правил квантования Бора — Зоммерфельда. Второе квазиклассическое приближение. Учет особенностей потенциальной энергии. Операторный подход к выводу правил квантования и расчету вероятностей и средних значений в стационарных состояниях. Число и плотность состояний в многомерном случае.

1. Убедитесь, что для потенциала Морза (см. п. 14 прил. 1) получаются правильные значения уровней энергии частицы уже в первом квазиклассическом приближении.

2. Покажите, что для потенциала Морза классические средние значения кинетической и потенциальной энергии в связанных стационарных состояниях совпадают с квантовомеханическими.

3. Докажите, что в случае движения частицы в потенциальном поле $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2}(x/a)$ квантовые периоды $\tau_{\text{кв}}(E) = \hbar dn/dE$ совпадают с классическими для всех уровней энергии.

4. Оцените точность второго квазиклассического приближения при вычислении энергии основного состояния для потенциала предыдущей задачи.

5. Сравните классическую частоту колебаний с квантовой при движении частицы в потенциальном поле типа 16 прил. 1.

6. Какую точность обеспечивает первое квазиклассическое приближение при расчете энергии нулевых колебаний в поле типа 16, прил. 1. Найдите поправки во втором ВКБ-приближении.

7. Подтвердите, что при движении частицы в потенциальном поле $U(x) = U_0 \text{ctg}^2(\pi x/a)$ зависимость классических частот колебаний от энергии такая же, как и квантовых.

8. Получите уровни энергии частицы в поле из задачи 7 во втором квазиклассическом приближении.

9. Найдите уровни энергии первого ВКБ-приближения для системы с гамильтонианом $H = Ap^{2s} + Bx^{2l}$.

10. Чему равна поправка γ в правилах квантования Бора — Зоммерфельда $\oint p dx = h(n + \gamma)$, $n = 0, 1, \dots$ при движении

частицы в конечной прямоугольной потенциальной яме шириной L ? Покажите, что уровни энергии в этом случае можно записать в неявном виде $E_n = \pi^2 \hbar^2 [n + \gamma(E_n)]^2 / 2mL^2$.

11. Сопоставьте квантовые периоды с классическими при движении частицы в конечной прямоугольной потенциальной яме.

12. Выведите квазиклассические правила квантования для полуограниченного движения на основании обычных правил «половинного» квантования Бора — Зоммерфельда.

13. Перенесите правила квантования первого ВКБ-приближения на случай движения на интервале (две непроницаемые границы).

14. Исследуйте энергетический спектр полуограниченного осциллятора в первом квазиклассическом приближении (граница не совпадает с положением равновесия).

15. Исследуйте энергетический спектр ограниченного (с двух сторон) осциллятора в первом ВКБ-приближении.

16. Заряд движется между двумя непроницаемыми стенками в перпендикулярном к ним однородном постоянном электрическом поле. Найдите уровни энергии финитной ветви движения. Сравните полученные значения энергии с вычисленными с помощью квазиклассического приближения.

17. Исследуйте энергетический спектр в условиях предыдущей задачи, если имеется только одна непроницаемая стенка. Какое число членов асимптотического ряда правил квантования обеспечивает наилучшую точность для энергии нулевых колебаний?

18. Найдите уровни энергии частицы в поле $U(x) = \beta x$ ($x > 0$) с граничным условием обращения в ноль производной волновой функции $\Psi'(0) = 0$.

19. Считая одномерный потенциал плавным, получите общее выражение для квантовых периодов и частот на основе правил квантования второго квазиклассического приближения.

20. Покажите справедливость соотношения $\text{Sp } \theta(E_n - \hat{H}) = n + 1/2$, $n = 0, 1, \dots$ в одномерном случае, если ступенчатая функция Хевисайда доопределена значением $1/2$ в нуле.

21. Свяжите с помощью преобразования Лапласа соотношение предыдущей задачи со шпуром типа статистической суммы

$$\text{Sp } \exp(-\beta \hat{H}).$$

22. На основании результатов двух предыдущих задач выведите правила квантования первого квазиклассического приближения для системы с гамильтонианом $H = T(p) + U(x)$, используя приближенную симметризацию операторной экспоненты: $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}/2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A}/2) [1 + O(\hbar^2)]$.

23. В условиях задачи 22 получите правила квантования во втором квазиклассическом приближении.

24. В рамках нефункционального подхода предыдущих задач найдите квазиклассические разложения для числа и плотности состояний как в одномерном, так и в многомерном случаях.

25. Получите квазиклассические выражения для распределения вероятностей координат и импульсов в стационарных состояниях одномерного движения.

26. Выведите формулу для среднего значения функции $f(x)$ в стационарном состоянии (второе квазиклассическое приближение)

$$\langle f \rangle_n = \frac{1}{\tau_{\text{кв}}} \left\{ \oint \frac{dx}{v} f(x) - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \oint \frac{dx}{v} [U''(x) f(x) - U'(x) f'(x)] \right\},$$

где $\tau_{\text{кв}}$ — квантовый период. Проиллюстрируйте ее применение на примерах.

27. Используйте соотношение задачи 20 для получения результатов теории стационарных возмущений. Рассмотрите соответствующее квазиклассическое разложение.

28. Исследуйте влияние излома и скачка потенциала на рассеяние и связанные состояния частиц в уточненном квазиклассическом приближении.

29. Охарактеризуйте роль квазиклассического приближения в квантовой теории.

Замечания

1. Основы квазиклассического приближения изложены в учебниках по квантовой механике. Достаточное количество задач имеется в книге [17]. См. также другие задачки по квантовой механике. Следует познакомиться с монографиями [71, 72]. О применении ВКБ-метода в многомерном случае читайте в книге [10, с. 211]. Там же, на с. 224 обсуждается вопрос о нестационарных состояниях.

Особый подход развит Фейнманом [13] (в связи с этим см. замечания к § 10). Применение квазиклассического приближения в статистической физике рассматривается в [18]. Влияние особенностей потенциальной энергии исследуется в работах [73, 118].

Более высоким приближениям ВКБ-метода посвящены книга [38] и работы [94, 95]. По методам надбарьерной квазиклассики можно рекомендовать монографию [76]. Следует отметить цикл работ Жирнова, опубликованных в журнале «Физика» (см., например, [97]), по развитию и обобщению различных аспектов квазиклассического приближения.

2. Разумеется, упомянуты лишь некоторые направления квазиклассического приближения, не говоря уже о специальной литературе.

Традиционный учебный круг вопросов квазиклассического приближения в квантовой механике ограничен стационарными состояниями. Обычно рассматриваются асимптотические разложения для волновых функций координатного представления, хотя возможно получение соответствующих результатов и в импульсном представлении (см., например, [14]), что особенно интересно, так как допускает обобщение на случай произвольного закона

дисперсии (см. [25], где имеются ссылки на работы этого направления). Затем асимптотики по разные стороны классических точек поворота «сшиваются» (получаются так называемые формулы связи). Возможны два способа «сшивания»: вдоль вещественной оси координат с помощью промежуточного решения в виде функций Эйри (по Крамерсу) и путем обхода точек поворота в комплексной плоскости координат (по Цвану и Кемблу). Оба способа имеют свои преимущества и недостатки, но обладают достаточной физической наглядностью. Конкретное применение формулы связи находят при вычислении коэффициента прозрачности плавного барьера в режиме «глубокого туннелирования» и при выводе правил квантования Бора — Зоммерфельда.

Существует еще один подход, заключающийся в построении асимптотик, перекрывающих всю область координат, включая окрестности классических точек поворота. Эта «глобальная» квазиклассика более сложна и математизирована. Можно отметить оригинальный способ построения сходящихся рядов, разработанный Фреманами [72].

Во всех перечисленных случаях основные усилия затрачиваются на получение более или менее удобных формул для волновых функций стационарных состояний. В то же время, часть вопросов квазиклассического приближения может быть решена вовсе без привлечения асимптотических разложений для волновых функций. Здесь сложилась любопытная ситуация, аналогом которой может служить картина в квантовой кинетике, связанная с методом Кубо (см. § 23), когда без построения кинетического уравнения непосредственно получают обобщенные восприимчивости. Такой чисто операторный подход в квазиклассическом приближении может быть условно назван «нефункциональным» (НФП). Конечно, подобно тому, как метод Кубо не решает всех вопросов квантовой кинетики, так и НФП не дает всех сведений о деталях движения.

Нефункциональный подход оказывается менее громоздким, чем обычно используемые способы получения квазиклассических правил квантования (особенно первого и второго приближений). Причем решение задачи о спектре энергии в рамках НФП не ограничивается квадратичным законом дисперсии. Достоинством является также возможность использовать подобный НФП в расчете других характеристик системы: энергетической плотности состояния, распределений по координатам и импульсам, средних значений и т. п. Причем не только для одномерных, но и для многомерных систем как в чистых стационарных состояниях, так и смешанных равновесных.

Другой круг вопросов, разрабатываемых в последние годы, связан с выходом за рамки стационарных состояний и построением различных вариантов нестационарной квазиклассики. Еще одна область применения квазиклассического приближения — статистическая физика (квазиклассическое разложение для статсуммы, квантовая функция распределения Вигнера и т. п.). Нельзя не упомянуть о развитии методов многомерной квазиклассики в проблеме квантования энергии, а также об исследованиях влияния особенностей потенциальной энергии (скачков, изломов и т. п.) на структуру энергетического спектра.

3. Нужно иметь в виду, что хотя движение системы в некотором стационарном состоянии может быть локально неквазиклассическим (например, вблизи точек поворота), интегральные характеристики движения (правила квантования, формулы для вероятностей и средних значений и т. п.) могут быть весьма «квазиклассичны», т. е. квазиклассическое приближение обеспечивает их вычисление с высокой точностью. Условия применимости квазиклассических разложений для волновых функций, сводящиеся к требованию больших квантовых чисел $n \gg 1$ (помимо удаления от точек поворота), фактически излишни при вычислении упомянутых мер движения, для которых существенна сглаженная картина хода потенциала. Например, правила квантования Бора — Зоммерфельда (первое ВКБ-приближение) обеспечивают достаточно высокую точность даже для основного уровня энергии в случае сингулярных потенциалов. С другой стороны, условие больших квантовых чисел $n \gg 1$ еще не гарантирует хорошего приближения для таких мер струк-

туры энергетического спектра, как плотность уровней энергии, в особых критических случаях.

Однако в учебниках по квантовой механике этот вопрос все еще рассматривается со слишком осторожных позиций (см. высказывания о пределах применимости правил квантования в книгах [1, с. 205, 206], [2, с. 100], [3, с. 151]). Следует отметить, что в учебной литературе и в монографиях по ВКБ-методу вы не встретите поправок к правилам квантования Бора — Зоммерфельда. Лишь в некоторых журнальных работах (например, [94, 95]) и книге [38] есть уточненные правила квантования для квадратичного закона дисперсии и потенциала без особенностей. Правила квантования содержат асимптотическое разложение, так что возникает вопрос о числе поправок для достижения наилучшей точности (см. в связи с этим соответствующие пояснения в книге [11]).

В современных применениях квантовой теории метод квазиклассического приближения занимает одно из ведущих мест. Он позволяет развить единые способы решения целого ряда задач в широком диапазоне параметров (энергий, потенциалов и др.) и допускает наглядную интерпретацию (пакетное движение, средние траектории и т. п.). Квазиклассическое приближение описывает основные квантовые эффекты как в области инфинитного движения (надбарьерное отражение, подбарьерное туннелирование, квазиуровни), так и в области связанных состояний (дискретность энергетического спектра, зонная структура).

§ 10. ОПЕРАТОРЫ ЭВОЛЮЦИИ (пропагаторы)

*Ветер по морю гуляет
И корабль подгоняет.*

А. С. Пушкин

Эволюционное уравнение и пропагаторы. Свойства и применения операторов эволюции. Т-экспонента. Симметризация операторных экспонент. Функции распространения. Картины Шредингера, Гейзенберга и Дирака.

1. Покажите, что решение эволюционного уравнения $\frac{\partial \hat{X}}{\partial t} = \hat{A}(t)\hat{X}$ с начальным условием $\hat{X}(t_0) = \hat{X}_0$ можно выразить через пропагатор $\hat{J}(t, t_0)$, удовлетворяющий тому же уравнению с условием $\hat{J}(t_0, t_0) = 1$ и обладающий следующими свойствами: $\hat{J}(t, t_0) = \hat{J}(t, t_1)\hat{J}(t_1, t_0)$; $\hat{J}^{-1}(t, t_0) = \hat{J}(t_0, t)$; $\hat{J}_A^+(t, t_0) = \hat{J}_A^{-1}A^+(t, t_0)$.

2. Рассмотрите аналогичный пропагатор $\hat{J}^{(1)}(t, t_0)$ для уравнения $\frac{\partial \hat{Y}}{\partial t} = \hat{Y}\hat{A}(t)$.

3. Установите связь между пропагаторами $\hat{J}(t, t_0)$ и $\hat{J}^{(1)}(t, t_0)$.

4. Выразите решения уравнений $\frac{\partial \hat{Z}}{\partial t} = [\hat{A}(t), \hat{Z}]$ и $\frac{\partial \hat{Z}}{\partial t} = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_+$ с начальными условиями $\hat{Z}(t_0) = \hat{Z}_0$ через пропагаторы $\hat{J}(t, t_0)$.

5. Запишите общие решения неоднородных операторных уравнений

$$\frac{\partial \hat{X}}{\partial t} = \hat{A}(t) \hat{X} + \hat{B}(t); \quad \frac{\partial \hat{Y}}{\partial t} = \hat{Y} \hat{A}(t) + \hat{B}(t); \quad \frac{\partial \hat{Z}}{\partial t} = \\ = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_{\pm} + \hat{B}(t),$$

используя пропагаторы соответствующих однородных уравнений.

6. Выразите пропагатор $\hat{J}_{A+B}(t, t_0)$ через $\hat{J}_A(t, t_0)$ в виде интегрального уравнения и постройте ряд по степеням B . Проиллюстрируйте полученные результаты графиками Фейнмана.

7. Свяжите пропагатор $\hat{J}_{A+B}(t, t_0)$ с $\hat{J}_A(t, t_0)$ в мультипликативной форме.

8. Задача, аналогичная предыдущей, для пропагатора $\hat{J}'_{A+B}(t, t_0)$.

9. Убедитесь, что

$$\left(\frac{\partial^3 \hat{J}}{\partial t^3} - \frac{\partial^3 \hat{J}'}{\partial t^3} \right)_{t=t_0} = \left[\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}, \hat{A} \right]_{t=t_0}.$$

10. Каков явный вид пропагатора, если $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ или

$$[\hat{A}(t_1), \hat{A}(t_2)] = 0 \quad \forall t_1, t_2 \in [t_0, t]?$$

11. Выведите правило дифференцирования пропагаторов по параметрам, от которых зависит генератор A .

12. Как дифференцировать операторную экспоненту?

13. Составьте интегральное уравнение для пропагатора и запишите его решение в виде итерационного ряда.

14. Каким образом пропагаторы связаны с T -экспонентами?

15. Вычислите $(T \exp \int \hat{A} dt)^+$ и $(T \exp \int \hat{A} dt)^{-1}$.

16. Найдите пропагатор в приближении «слабой» некоммутативности

$$[\hat{A}(t_1), [\hat{A}(t_2), \hat{A}(t_3)]] \approx 0 \quad \forall t_n \in [t_0, t].$$

17. Выразите $\exp(\hat{A} + \hat{B})$ через $\exp \hat{A}$ и соответствующую T -экспоненту.

18. Покажите, что $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}/2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A}/2) = \exp \hat{A} \exp \hat{B} \exp([\hat{B}, \hat{A}]/2)$, если $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ и $[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] = 0$.

19. Убедитесь, что $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}/2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A}/2) \times \times \exp([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]/24)$, если $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ и $[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] = 0$.

20. Докажите тождество $[\hat{A}, \hat{B}_1 \hat{B}_2 \dots \hat{B}_n] = [\hat{A}, \hat{B}_1] \hat{B}_2 \dots \hat{B}_n + \dots + \hat{B}_1 \hat{B}_2 \dots [\hat{A}, \hat{B}_n]$ (представление коммутатора через коммутаторы пар операторов).

21. Установите, справедливы ли тождества, аналогичные рассмотренному в задаче 20, для случаев представления: а) коммутатора через антикоммутаторы, б) антикоммутатора через коммутаторы, в) антикоммутатора через антикоммутаторы.

22. Назовите применения операторов эволюции в квантовой механике и в квантовой статистике (включая кинетику).

23. Сравните функции распространения свободной частицы в энергетическом, импульсном и координатном представлениях.

24. Исследуйте квантовую диффузию свободной частицы, масса которой изменяется со временем.

25. Найдите функцию распространения частицы с линейным законом дисперсии в свободном движении.

26. Получите функцию распространения для электрона в однородном переменном электрическом поле.

27. Как учесть анизотропию квадратичного закона дисперсии в функции распространения свободной частицы?

28. Чем отличаются операторы движения уравнений Шредингера и Лиувилля?

29. Каков физический смысл операторов канонических преобразований, связывающих описание состояний в картинах Шредингера, Гейзенберга и Дирака?

30. На основе общих свойств пропагаторов получите свойства операторов движения в картинах Шредингера и Дирака.

31. Найдите операторы производных по времени для физических величин в картинах Шредингера, Гейзенберга и Дирака. Установите связь между ними.

32. Решите гейзенберговские уравнения движения для электрона, движущегося в скрещенных однородных постоянных электрическом и магнитном полях.

33. Покажите, что резольвента гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ удовлетворяет уравнению $\hat{R} = \hat{R}_0 - \hat{R}_0 \hat{H}_1 \hat{R}$. Верно ли, что $\hat{R} \hat{H}_1 \hat{R}_0 = \hat{R}_0 \hat{H}_1 \hat{R}$?

34. Рассмотрите связь резольвенты гамильтониана системы с соответствующими пропагаторами и статистической суммой.

35. Дайте общую оценку роли операторов эволюции в квантовой теории.

Замечания

1. Основы временного описания систем в картинах Шредингера, Гейзенберга и Дирака (взаимодействия) вы найдете во всех учебниках по квантовой механике (см. список литературы в конце книги). Рекомендуем познакомиться с более полным изложением вопроса по книгам [68, 77]. О пропагаторах

и методе Фейнмана (интегралов по траекториям) см. [3, с. 608, 658] и [13]. В книге [21] есть много полезных сведений о представлении взаимодействия и пропагаторах волнового уравнения Шредингера. См. также ФЭС [29]: т. I, Грина функции (функции распространения).

Точные решения для функции распространения приведены в книге [10, с. 202]. Вопросы операторной симметризации рассмотрены в монографии [78]. Там же вы почерпнете полезные сведения об S -операторе, пропагаторах, диаграммах и т. п. О пропагаторах в статистической физике см. [79]. Методы Голдстоуна и Гугенгольца, основанные на теории возмущений для пропагаторов и резольвент, обсуждаются в книге [80]. Применение метода резольвенты в вопросе обоснования основного кинетического уравнения анализируется в обзоре [81]. См. работу Ван-Хова в сб. [28]. Там же, в работе Кона и Латтинжера, вы найдете примеры применения резольвенты в квантовой теории проводимости, а в работе Монтролла и Уорда — оригинальный диаграммный метод.

О конкретном использовании метода резольвенты см. в работе Кролля в сборнике [66]. Интересное изложение полевых методов, сведений о пропагаторах и т. п. имеется в книгах [24, 75]. Математические аспекты метода резольвенты вы найдете в монографии [40]. Об эволюционном уравнении читайте [38].

2. Помимо отмеченных применений операторов эволюции в механике, статистике («мнимое время» — обратная температура), кинетике (комплексные аргументы) и теории поля, пропагаторные методы используются во многих других разделах квантовой теории (см., например, «нефункциональные» методы квазиклассического приближения в § 9). Любопытный аналог пропагаторов встречается в формализме Фреманов для ВКБ-метода (см. [72]) при переходе от уравнения Шредингера к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка Кембла.

3. Явление квантовой диффузии в ином аспекте обсуждается в книге [59, с. 68] в связи с рассмотрением свойств так называемых квантовых кристаллов.

Обратите особое внимание на использование операторов эволюции в кинетических задачах в рамках метода Кубо (см. § 23, 47). Метод резольвенты лежит в основе интегрального подхода к решению задач о стационарных состояниях. Так, функции Грина позволяют записать стационарное уравнение Шредингера в интегральной форме, что особенно удобно для исследования проблемы существования связанных состояний в достаточно слабых потенциальных полях (см. § 11, 35).

§ 11. ФУНКЦИИ ГРИНА СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Этот метод по своей сути столь фундаментален, что все его наиболее существенные черты можно найти в принадлежащем Рэлею исследовании.

Дж. Займан

Метод резольвенты. Интегральные уравнения для связанных состояний. Многомерные ФГ. Слабые поля притяжения. Короткодействующие потенциалы. Критические параметры связанных состояний. Влияние вида закона дисперсии на связанные состояния. Значение метода функций Грина.

1. На основе уравнения Шредингера для стационарных состояний с помощью резольвенты составьте интегральное уравнение для связанных состояний системы в потенциальном поле.

2. Запишите операторное уравнение предыдущей задачи в координатном представлении, введя функцию Грина (ФГ) — матричные элементы резольвенты.

3. Сформулируйте связь задачи нахождения энергетического спектра системы в потенциальном поле с вопросом о собственных значениях интегрального уравнения.

4. Вычислите функцию Грина для связанных состояний частицы с изотропным квадратичным законом дисперсии в случае одно- и трехмерного движения.

5. Найдите ФГ частицы в n -мерном случае. Обобщите на случай N частиц.

6. Всегда ли в потенциальном поле притяжения существуют связанные состояния?

7. Исследуйте связанное состояние частицы в одномерной слабой локальной потенциальной яме. Рассчитайте энергию связи с точностью до кубических по потенциалу членов включительно.

8. Используя интегральное уравнение для связанных состояний, найдите энергию связи частицы в случае двумерного локального слабого потенциала.

9. Будет ли существовать связанное стационарное состояние частицы, если слабый локальный одномерный потенциал в среднем равен нулю ($\int U dx = 0$)?

10. В условиях предыдущей задачи рассмотрите конкретную модель δ -ямы и δ -барьера.

11. Получите уровни энергии и волновые функции связанных стационарных состояний координатного представления для частицы в δ -яме, используя интегральное уравнение.

12. С помощью интегрального уравнения найдите связанные состояния в случае двух различных δ -ям.

13. Подобная 12-й задаче для трех δ -потенциалов. Разберите различные комбинации ям и барьеров.

14. Дайте физическое толкование рассмотренным в задачах 10—13 потенциальным моделям.

15. Изучите связанные состояния частицы в слабом потенциальном поле в виде фрагмента (периода) синусоиды.

16. Частица движется в потенциальном поле, состоящем из прямоугольной конечной ямы и δ -барьера. Найдите энергию связи при $\int U dx = 0$, а также критические параметры, при которых «вытесняется» связанное состояние. Укажите физический смысл задачи.

17. Аналогичная предыдущей задаче в случае прямоугольной ямы и такого же барьера, примыкающего к яме. Дайте физическую трактовку.

18. Постройте ФГ для связанных состояний в случае полуограниченного движения частицы ($x > 0$).

19. Используйте ФГ предыдущей задачи для исследования связанных стационарных состояний в слабой потенциальной яме

произвольного профиля при полуограниченном движении частицы.

20. Найдите ФГ радиального трехмерного движения частицы в s -состоянии.

21. Как влияет условие непроницаемости (полуограниченности) на связанное состояние частицы в δ -яме?

22. Получите ФГ для связанных состояний частицы, движущейся в одномерной области $|x| < L/2$.

23. При какой ширине области движения «вытесняется» связанное состояние в случае δ -ямы?

24. Рассчитайте ФГ для связанных состояний в случае движения частицы в ступенчатом потенциальном поле $U(x) = U_0 \theta(x)$.

25. Примените полученную в предыдущей задаче ФГ для исследования связанных стационарных состояний частицы в случае несимметричной одномерной прямоугольной ямы.

26. Изучите связанные состояния частицы в потенциальном поле со слабым перепадом предельных значений $U(\pm\infty)$ для ямы произвольного профиля. Проверьте полученный критерий появления связанного состояния на примере модели предыдущей задачи.

27. Вычислите ФГ для связанных состояний частицы «на фоне» δ -барьера.

28. Запишите интегральное уравнение для связанных стационарных состояний частицы в n -мерном импульсном представлении. Используйте полученное уравнение для определения энергии связи в случае слабой одномерной потенциальной ямы.

29. Каким образом учесть анизотропию квадратичного закона дисперсии частицы при расчете ФГ?

30. Какой вид имеет ФГ в случае закона дисперсии $\epsilon(p) = \hbar^2 v^2 p^4$ для одномерного движения частицы?

31. Исследуйте влияние вида закона дисперсии частицы на связанные состояния в слабой локальной одномерной потенциальной яме.

32. Как влияет вид закона дисперсии на связанные состояния в многомерном случае?

33. Как связаны ФГ для рассеяния и финитного движения?

34. Какие ФГ можно использовать для исследования квазиуровней в односторонней ловушке? А в двусторонней?

35. Получите функцию Грина для связанных состояний частицы в полупространстве.

36. Исследуйте влияние одной среды на связанные состояния в другой на примере трехмерного движения частицы в полупространстве при наличии сферической потенциальной ямы («полости»).

37. Сравните метод функций Грина с другими методами исследования связанных состояний.

Замечания

1. Начните знакомство с функциями Грина по книге [2, с. 498, 503]. Много полезных сведений содержится в [10, гл. IV]. Широкое использование метода ФГ характерно для [9] (в т. 1 см. способы вычисления ФГ — с. 771, 834; интегральные уравнения — с. 843; во втором томе изложены вариационные методы для интегральных уравнений — с. 118, 647). Необходимые сведения о математических свойствах интегральных уравнений имеются в книге [24].

Основы метода резольвенты и его многочисленные применения изложены в монографии [39]. См. также [80]. Примеры применения резольвенты и функций Грина в кинетических проблемах можно найти в обзоре [81]. См. работу Эдвардса в сборнике [28].

2. В данном параграфе рассматриваются главным образом функции Грина для связанных состояний. ФГ для рассеяния см. в § 2. Кроме того, в § 1 много задач связано с методом ФГ.

Для одномерных задач можно использовать метод построения ФГ на основе двух частных решений стационарного уравнения Шредингера с соответствующим асимптотическим поведением. Часто этот способ оказывается самым простым. Другим методом расчета ФГ является разложение по собственным функциям рассматриваемой задачи. Этот способ удобен, например, для свободного многомерного движения частиц с различными законами дисперсии. Еще один способ — использование известной функции Грина R_0

для невозмущенной задачи и уравнения $(\hat{R} = \hat{R}_0 - \hat{R}_0 \hat{U} \hat{R})$ с возмущением U (например, в случае предельно короткодействующих потенциальных моделей).

В данном параграфе при упоминании о функциях Грина подразумеваем координатное представление резольвенты гамильтониана системы $R(r, r'; E) =$

$= \langle r | (H - E)^{-1} | r' \rangle$ (обычно — для отрицательных значений энергии, лежащих ниже границы сплошного спектра рассматриваемой задачи, т. е. вне энергетических особенностей резольвенты).

Функции Грина нестационарного уравнения Шредингера — функции распространения (матричные элементы операторов эволюции) — рассматриваются в § 10, а функции Грина квантовой теории неравновесных процессов — в § 24. В связи с обилием функций Грина (и соответствующих операторов) используем резольвентное обозначение R для механических величин, оставляя традиционное G за функциями Грина квантовой кинетики, а также применяя его для матрицы связи локальных решений (оператора перехода через особенность поля — см. § 12).

3. Метод интегральных уравнений для связанных состояний не излагается в учебниках по квантовой механике (он применяется лишь в теории рассеяния), хотя является, видимо, наиболее эффективным приемом исследования чисто квантового эффекта появления связанных состояний.

Обратите внимание на трактовку одномерных задач как фрагментов (ветвей) движения систем с большим числом степеней свободы. Во всех случаях не следует забывать об исходной полной картине движения и возвращаться к ней после решения одномерной задачи.

§ 12. МАТРИЦА СВЯЗИ ЛОКАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ

*Глядь — поверх текущих вод
Лебедь белая плывет.*

А. С. Пушкин

Общие свойства. Итерации. Дисперсионное уравнение для энергетических зон. Задачи рассеяния и связанных состояний в слоистых средах. Резонансная прозрачность. Матрица связи в ВКБ-методе. Степенные потенциальные поля. Зонные примеры. Значение метода в квантовой механике.

1. Введите матрицу, связывающую соответствующие частные решения (канонические, стандартные) стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении для двух смежных областей 1 и 2, на границе которых потенциал может иметь особенность — скачок, излом и т. п. (для квазиклассики это могут быть точки поворота или подбарьерная область):

$$\Psi^{(1,2)}(x) = C_{(1,2)} \psi^{(1,2)}(x) + D_{(1,2)} \varphi^{(1,2)}(x),$$

$$\begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix}, \quad \hat{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}.$$

Покажите, что можно выбрать однотипные решения в смежных областях таким образом, чтобы $\det \hat{G} = 1$.

2. Постройте G -оператор для перехода через δ -потенциал, выбирая для положительных значений энергии в качестве канонических решений бегущие в определенном направлении плоские волны, а для отрицательных (в случае δ -ямы) — убывающие и возрастающие экспоненты.

3. Свяжите собственные значения G -оператора G_1 и G_2 с его инвариантами (шпуром и детерминантом). Введите комплексную величину ν соотношением $G_1 = \exp(i\nu)$.

4. Выразите матричные элементы итерированного оператора $\hat{g} = \hat{G}^N$ через матричные элементы $\hat{G}$ и его собственные значения.

5. Покажите, что при периодических граничных условиях в цепочке особенностей дисперсионное уравнение для энергетических зон имеет вид

$$\text{Sp } \hat{G} = 2 \cos(pL/\hbar).$$

6. Установите непосредственную связь введенной в задаче 3 величины ν с квазиимпульсом для цепочки одинаковых особенностей и объясните физический смысл собственных векторов и собственных значений матрицы связи локальных решений.

7. Выразите основные меры рассеяния частиц отдельным потенциальным барьером (ямой) через матричные элементы G -оператора, вводя канонические решения с асимптотиками в виде бегущих волн.

8. Обобщите результаты предыдущей задачи на случай нескольких барьеров (ям), а также для задач о квазиуровнях.

9. Рассматривая в качестве канонических асимптотически экспоненциально убывающие и возрастающие решения, выразите в случае потенциальной ямы уравнение для связанных состояний через параметры G -оператора перехода через яму.

10. Распространите результат предыдущей задачи на случай нескольких потенциальных ям.

11. Вычислите оператор перехода через прямоугольный барьер для задач рассеяния и через прямоугольную яму для рас-

сеяния и связанных состояний. Сравните с соответствующими величинами для δ -потенциала. Примените к расчетам рассеяния и связанных состояний.

12. С помощью G -оператора найдите прозрачность цепочки из двух одинаковых δ -образных потенциальных барьеров и связанные состояния в системе из двух δ -ям.

13. Выясните свойства матричных элементов G -оператора в случае комплексного потенциала особенности.

14. Обобщите результаты задачи 12 для случая N одинаковых δ -потенциалов.

15. Исследуйте влияние асимметрии на резонансную прозрачность в системе двух разных δ -образных потенциальных барьеров.

16. Считая возможным применение квазиклассического приближения, используйте метод G -оператора для канонических решений в виде бегущих волн первого ВКБ-приближения в задачах рассеяния и связанных состояний в отдельном «отсеке» потенциала и в случае цепочек особенностей.

17. Для линейного потенциала $U(x) = -\beta x (x > 0)$ найдите основные параметры стандартного решения в виде бегущей волны квазиклассического приближения.

18. Подобная предыдущей задача для параболического потенциала $U(x) = -\beta x^2 (x > 0)$.

19. Задача, аналогичная 17, для критической энергии $E = 0$ в случае степенного потенциала $U(x) = -\beta x^l, x > 0, l > 0$.

20. Найдите матрицу связи бегущих волн в случае скачка потенциальной энергии.

21. Изучите рассеяние δ -потенциалом (ямой или барьером) с помощью матрицы связи бегущих волн.

22. Получите параметры связанных состояний в δ -яме методом матрицы связи локальных решений.

23. Используйте метод матрицы связи локальных решений в квазиклассическом приближении для анализа рассеяния частиц цепочкой одинаковых потенциальных барьеров.

24. С помощью матрицы связи локальных решений получите дисперсионное уравнение для энергетических зон в случае линейного потенциала с ячейкой $U(x) = U_0 x/L, |x| < L/2$. Рассмотрите предельные случаи слабого и сильного поля и сравните с соответствующими результатами в рамках теории возмущений и ВКБ-приближения.

25. Аналогичная предыдущей задача для линейного потенциального поля с ячейкой $U(x) = 2U_0|x|/L, |x| \leq L/2$.

26. Можно ли обобщить метод матрицы связи локальных решений на случай четверной зависимости кинетической энергии от импульса?

Замечания

1. Основные свойства матрицы связи локальных решений можно найти в книге [15], где связываются квазиклассические подбарьерные решения (с. 87—89). Простейшая форма матриц связи относится к формулам сопряжения ВКБ-решений по разные стороны от классической точки поворота (см., например, [1, с. 204]). Более сложные матрицы, зависящие от координат, используются в монографии [72].

О применении матрицы связи локальных решений (оператора перехода через особенность потенциальной энергии) в рамках первого квазиклассического приближения для полей с особенностями при исследовании резонансного рассеяния, квазиуровней, энергетических зон и т. п. см. в работах [73, 118].

2. Метод матрицы связи локальных решений особенно удобен, когда область движения разбивается на участки, где точное решение известно и имеет одинаковую форму, например в случае периодического поля. Разумеется, метод тесно связан с одномерным характером стационарного уравнения Шредингера и с координатным представлением, когда имеется два линейно независимых решения (при квадратичном законе дисперсии). Как отмечалось выше, существуют различные формы метода матрицы связи локальных решений, обобщающие рассмотренный вариант.

§ 13. ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

Еще не проведено полного сравнительного исследования эффективности различных методов в конкретных вычислениях, но в любом частном случае можно дать разумную практическую оценку, если не быть излишне предубежденным против ННР («не нами развитых») методов.

Дж. Займан

Варьирование мультипликативных функций. Оценки основного уровня энергии в потенциальных полях. Оценки энергии связи и критических параметров. Вариационный принцип для интегральных уравнений. Вариационные методы расчета энергетических зон. Вариационные принципы в статистической физике. Значение вариационных методов в квантовой теории.

1. Исследуйте энергетический спектр частицы в двумерном потенциальном поле $U(x, y) = -U_1(x)U_2(y)$ методом мультипликативного варьирования (выбирая пробную функцию в виде $\Psi = \psi_1(x)\psi_2(y)$).

2. Примените метод мультипликативного варьирования предыдущей задачи для расчета уровней энергии в случае цилиндрического потенциала прямоугольного сечения с большим, но конечным скачком на границе.

3. Обобщите метод мультипликативного варьирования задачи 1 на трехмерный случай.

4. Частица движется в трехмерном прямоугольном потенциальном «ящике» с конечным скачком потенциала на границе. Как влияет проницаемость стенок «ящика» на уровни энергии?

5. Методом мультипликативного варьирования (задача 3) найдите критическое условие появления связанных состояний в случае трехмерного потенциала кубической формы.

6. Обобщите результаты задач 3—5 на случай $n \geq 4$ измерений.

7. Методом мультипликативного варьирования рассчитайте энергию связи частицы в потенциальном поле $U = -U_0 \exp[-\alpha(x^2 + y^2 + z^2)]$ и сравните полученный ответ с результатом варьирования в сферических координатах, выбирая пробные функции в виде «гауссианов».

8. Используя в качестве пробной функции «гауссиан», оцените энергию нулевых колебаний частицы в полях $U(r) = \beta r^4$, $U(r) = -a/r$.

9. Для оценки основного уровня энергии частицы в степенном потенциальном поле $U = \beta|x|^l$ подберите пробную функцию из класса $\Psi \sim \exp(-\alpha|x|^n)$. Сравните с известными точными результатами для линейного (п. 17 прил. 1) и квадратичного потенциалов, а также с рассчитанными на ЭВМ для четверного (п. 20 прил. 1).

10. Оцените основной уровень энергии системы с гамильтонианом $H = Ap^4 + Bx^4$.

11. Оцените энергию основного состояния в однородном силовом поле с непроницаемой стенкой, используя пробную функцию $\Psi \sim x \exp(-\alpha x)$. Сравните с точным значением и с результатами расчета в первом и во втором ВКБ-приближении.

12. Частица с четверным законом дисперсии $T(p) = \alpha p^4$ движется в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины. Оцените энергию нулевых колебаний, используя пробную функцию $\Psi = Ax^2(L - x)^2$.

13. С какой точностью удастся определить уровень энергии в δ -яме с помощью гауссовой пробной функции?

14. Оцените точность вариационной оценки с помощью «гауссиана» при расчете нулевой энергии нелинейного осциллятора $U(x) = kx^2/2 + \beta x^4$.

15. Опишите вариационный метод оценки собственных значений интегрального уравнения для связанных состояний частицы в потенциальном поле.

16. На основе результатов предыдущей задачи исследуйте энергию связи частицы в случае слабой локальной одномерной потенциальной ямы, выбирая пробную функцию постоянной в области потенциала.

17. Примените метод вариационной оценки в интегральном уравнении (задача 15) для расчета критических параметров сферической полости, пользуясь пробными функциями внутри полости $\Psi = \text{const}$ и $\Psi = Cr^{-1/4}$. Сравните результаты. Оцените ошибки метода сравнением с точным значением.

18. На основе интегрального уравнения для связанных состояний разработайте вариационный метод оценки параметров нулевой энергетической зоны для движения частицы в одномерной цепочке потенциальных ям. Сравните результаты для слабого потенциала с точным решением для δ -ям.

19. Обобщите результаты предыдущей задачи на случай трехмерной линейной цепочки локальных потенциальных ям. Рассмотрите критические свойства нулевой зоны.

20. Перенесите результаты задачи 18 на двумерный случай.

21. Обобщите метод задачи 18 на случай трехмерного периодического потенциала.

22. Изучите свойства нулевой зоны в упорядоченной цепочке цилиндрических полостей.

23. Рассмотрите свойства нулевой зоны в трехмерной решетке из сферических потенциальных ям.

24. Дайте физическую трактовку рассмотренным в задачах 18—23 потенциальным моделям.

25. Оцените статусу гармонического осциллятора в термостате, используя вариационный метод Пайерлса на основе неравенства $\exp(-\beta H) \geq \exp(-\beta \bar{H})$ и выбирая в качестве системы векторов когерентные состояния. Объясните физический смысл результата.

26. Как формулируется вариационный принцип Боголюбова в статистической физике?

27. Дайте общую оценку вариационных методов в квантовой теории.

Замечания

1. Об истории развития вариационных методов в квантовой теории и основных пионерских работах читайте в книге [45]. Из учебной литературы можно рекомендовать [1, § 20], [2, § 51], [4, с. 200], [6, с.119—124]. Различные варианты методов Хартри-Фока и Томаса-Ферми обсуждаются в книгах [80, 49].

Большое количество примеров использования вариационного метода квантовой механики вы найдете в монографии [60]. Вариационные оценки собственных значений интегральных уравнений рассматриваются в книгах [34, 82]. См. также [9, т. 2, с. 118, 647].

Основы вариационного метода Боголюбова в статистической физике и его применение в теории магнетизма содержатся в монографии [23].

О неравенстве Пайерлса для статистической суммы см. в [79]. Вариационный метод в теории энергетической зонной структуры изложен в [53].

Общие представления о вариационных принципах и их историческом развитии может дать книга [83]. Обобщения вариационных принципов на задачи квантовой кинетики и литература по этому вопросу имеются в обзоре [81]. Рекомендуем ФЭС [29]: т. 1, Вариационный принцип (в квантовой статистике); т. 5, Томаса—Ферми модель атома, Хартри—Фока метод.

2. Тех, кто впервые сталкивается с вариационными методами квантовой механики на примерах простейших оценок основного уровня энергии для потенциальных моделей, поражает та огромная точность, которую обычно обеспечивают простые пробные функции. Постепенно вы осваиваетесь с этим свойством вариационных методов, начинаете понимать его происхождение и уже ожидаете не меньшей эффективности в других приложениях вариационного метода.

Вариационный метод можно включить в число основных приближенных методов квантовой механики, наряду с теорией возмущений (стационарных и нестационарных, адиабатических и внезапных и т. п.) и квазиклассическим приближением.

*Чтоб там речей не тратить по-пустому,
Где нужно власть употребить.*

И. А. Крылов

Связь с методом параметрического варьирования. Примеры конкретного использования ТВ. Обобщения. Вириальные соотношения для одномерных задач. Поля сферической и цилиндрической симметрии. Термодинамически равновесные системы. Роль ТВ и ВС в квантовой механике.

1. Выведите теорему вириала, пользуясь параметрическим варьированием энергии по постоянной Планка.

2. Вычислите плотность вероятности координаты частицы на краях конечной прямоугольной потенциальной ямы в связанном стационарном состоянии. Чему равна средняя сила, действующая на частицу на границе ямы? Найдите средние значения кинетической и потенциальной энергии.

3. Каково соотношение между средними значениями кинетической и потенциальной энергии ангармонического осциллятора $U = m\omega^2 x^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4$ в стационарных состояниях?

4. Получите ТВ в случае гамильтониана $H = T(p) + U(x)$ с произвольной зависимостью $T(p)$.

5. Выразите $\langle T \rangle$ и $\langle U \rangle$ через полную энергию для системы с гамильтонианом $H = \alpha p^s + \beta x^l$.

6. Обобщите ТВ на случай движения заряда в магнитном поле.

7. Справедлива ли ТВ в смешанных стационарных состояниях?

8. Как обобщить ТВ на случай нестационарного состояния?

9. Выведите общие вириальные соотношения для одномерных связанных стационарных состояний, пользуясь сохранением величины $\langle p f(x) \rangle$.

10. Покажите, что для одномерных связанных стационарных состояний частицы в потенциальном поле справедливо вириальное соотношение

$$2(k+1)E \langle x^k \rangle = \left\langle \left[x \frac{\partial U}{\partial x} + 2(k+1)U \right] x^k \right\rangle - \\ - \frac{\hbar^2 k}{4m} (k^2 - 1) \langle x^{k-2} \rangle.$$

11. Найдите моменты $\langle x^4 \rangle$, $\langle x^6 \rangle$, $\langle x^8 \rangle$, $\langle x^{10} \rangle$ для стационарных состояний гармонического осциллятора.

12. Покажите, что вириальные соотношения задачи 10 сохраняют силу и при полуограниченном движении частицы (граничное условие обращения в ноль волновой функции в начале координат).

13. Найдите дисперсии импульса и координаты в стационарных состояниях частицы, движущейся в однородном силовом

поле с непроницаемой границей: $U(x) = \beta x (x > 0)$, $U(x) = \infty (x < 0)$.

14. Обобщите ВС задачи 10 на случай движения, ограниченного интервалом $0 < x < L$.

15. Рассчитайте $\langle x^2 \rangle$ для стационарных состояний частицы, движущейся в однородном силовом поле между двумя непроницаемыми стенками.

16. Аналогичная предыдущей задача для ограниченного гармонического осциллятора.

17. Покажите, что при движении частицы в поле сферической симметрии $U(r)$ для связанных стационарных состояний с определенным моментом l выполняются вириальные соотношения

$$2(k+1)E\langle r^k \rangle = \left\langle \left[r \frac{\partial U}{\partial r} + 2(k+1)U \right] r^k \right\rangle - \frac{\hbar^2 k}{4m} [k^2 - 1 - 4l(l+1)] \langle r^{k-2} \rangle.$$

18. Используя результат предыдущей задачи, получите рекуррентное соотношение для средних значений $\langle r^k \rangle$ в кулоновом поле притяжения $U = -a/r$ и вычислите $\langle r^2 \rangle$, $\langle r \rangle$, $\langle r^{-3} \rangle$, $\langle r^{-4} \rangle$.

19. Задача 18 в случае изотропного гармонического осциллятора $U(r) = m\omega^2 r^2/2$ для средних значений $\langle r^6 \rangle$, $\langle r^4 \rangle$, $\langle r^2 \rangle$.

20. Выведите вириальные соотношения для частицы, движущейся в поле цилиндрической симметрии.

21. Выполните требования задачи 18 в случае двумерного кулонова поля $U(\rho) = -a/\rho$.

22. Рассчитайте моменты $\langle \rho^6 \rangle$, $\langle \rho^4 \rangle$, $\langle \rho^{-4} \rangle$ для двумерного изотропного осциллятора.

23. Составьте ВС для вычисления средних значений степеней импульса в одномерном случае.

24. Подсчитайте $\langle x^k \rangle$ для связанного стационарного состояния частицы в δ -яме.

25. Как обобщить вириальные соотношения на случай состояния термодинамического равновесия?

26. Получите $\langle x^4 \rangle$ для гармонического осциллятора в термостате с помощью вириальных соотношений.

27. Сформулируйте физический смысл теоремы вириала в квантовой теории. Дайте общую оценку роли вириальных соотношений.

28. Составьте самостоятельно задачи с применением вириальных соотношений.

29. Предложите свои формы вириальных соотношений.

Замечания

1. История вопроса, литература по теореме вириала, различного рода обобщения (на случай инфинитного движения, прежде всего) и приложения подробно обсуждаются в монографии [45]. О ТВ можно считать в учебниках: [2, с. 76], [8, с. 235]. См. также задачи: [15, § 1, № 21], [17, т. 2, с. 69 и 149].

Изложение основ метода вириальных соотношений вы найдете в книге [10, с. 59]. Там же дана литература по оригинальным работам этого интересного направления. О теореме вириала в статистической физике см. в [18] и [19, с. 50—52, 97—98]. Читайте ФЭС [29]: т. 1, Вириала теорема, Вириальное разложение.

2. На примере развития метода теоремы вириала и вириальных соотношений весьма поучительно проследить, как новые подходы к выводу известной теоремы приводили не только к установлению связи с другими методами, но и помогали обобщениям ее в различных направлениях. Так, стремясь получить ТВ масштабным варьированием, Фок пришел не только к связи ТВ с вариационным методом, но и дал толчок развитию ТВ в области непрерывного спектра энергии (см. книгу Демкова в п. 1 этих замечаний). Общее правило сохранения среднего значения явно не зависящей от времени величины в состоянии с определенной энергией (одна из квантовых форм выражения закона сохранения энергии) позволило обобщить ТВ по линии вириальных соотношений.

Тесная связь ТВ с методом параметрического варьирования устанавливается при дифференцировании значений энергии по постоянной Планка (см. задачу 1), и эта же связь позволяет фактически рассчитать моменты радиус-вектора в полях сферической симметрии, дополняя рекуррентные соотношения вириальных обобщенных теорем (см. задачи 18, 19).

3. Преимущества ВС по сравнению со стандартными методами вычисления средних значений с помощью координатных волновых функций стационарных состояний особенно ярко видны на примерах задач для кулонова поля и трехмерного осциллятора, упомянутых в предыдущем пункте. Это характерно для всех «нефункциональных» методов, к числу которых принадлежит и метод ТВ и ВС. Назовите известные вам «нефункциональные» методы. Однако даже при вычислении величин типа средних значений степеней координат удается получать их в явном виде лишь для специальных потенциальных полей. Точные «нефункциональные» соотношения теоремы вириала служат критерием выбора пробных функций в вариационном («функциональном») методе.

§ 15. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ВАРЬИРОВАНИЕ

Варьируйте условия: низкие и высокие облака, легкий и сильный ветер, при Луне и без нее.

М. Миннарт

Варьирование по массе и постоянной Планка. Связь с теоремой вириала. Чисто операторный вывод правил параметрического варьирования. Поля сферической и аксиальной симметрии. Линейные и нелинейные осцилляторы. Примеры одно-, дву- и трехмерных моделей потенциальных полей. Варьирование в квантовой статистике. Значение параметрического варьирования как одного из «нефункциональных» методов.

1. Покажите, что для дискретного энергетического спектра справедливо соотношение

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle.$$

2. Выясните, что дает варьирование уровней энергии частицы по массе в случае квадратичного изотропного закона дисперсии.

3. К каким результатам приводит параметрическое варьирование энергии по постоянной Планка?

4. Получите основное соотношение ПВ (задача 1) для одномерного случая, исходя из равенства $\text{Sp } \theta(E_n - \hat{H}) = n + 1/2$, $n = 0, 1, \dots$ (см. задачу 20 из § 9).

5. Исследуйте, к чему приводит ПВ квазиклассических правил квантования (первого и второго приближения).

6. Разъясните смысл вариации энергии по моменту l в случае движения частицы в поле сферической симметрии.

7. Аналогичная 6-й задаче для поля аксиальной симметрии при варьировании энергии по квадрату проекции момента на ось.

8. Установите, какие соотношения дает ПВ в случае одномерного гармонического осциллятора.

9. Используйте ПВ для анализа свойств ангармонического осциллятора $U(x) = kx^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4$.

10. Что можно узнать с помощью ПВ о движении частицы в бесконечной прямоугольной яме?

11. Задача, аналогичная 10, в случае конечной прямоугольной ямы.

12. Примените ПВ в случае одномерного кулонова поля.

13. Аналогичная 12-й задаче для потенциала Морза.

14. К чему приводит ПВ в случае потенциала $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2}(x/a)$?

15. Вопрос, аналогичный предыдущему, относительно движения частицы в поле $U(x) = U_0 \text{ctg}^2(\pi x/a)$.

16. Подобная 15-й задаче для поля $U(x) = U_0 [(x/a) - (a/x)]^2$.

17. Воспользуйтесь ПВ в случае δ -ямы.

18. Какую информацию о движении частицы в кулоновом поле дает ПВ?

19. Вопрос, аналогичный поставленному в задаче 18, для изотропного гармонического осциллятора.

20. Примените ПВ в случае движения частицы в сферической яме.

21. Рассмотрите ПВ при движении частицы в поле цилиндрической симметрии $U(\rho) = -a/\rho$.

22. Аналогичная 21-й задаче в случае «цилиндрического» осциллятора $U(\rho) = k\rho^2/2$.

23. Каков физический смысл производных уровней энергии частицы в поле $U(x) = kx^2/2 + u\delta(x)$ по параметрам k и u ?

24. Каким образом обобщается основное соотношение ПВ на случай (большого) канонического ансамбля в квантовой статистике?

25. Покажите, что квадратичная по возмущению поправка к Ω -потенциалу отрицательна.

26. Какая средняя сила требуется для удержания частицы массой m в сферической полости (с непроницаемой границей) радиуса R в основном состоянии? Рассмотрите задачу на примере электрона в случае $R = 10^{-8}$ см и нуклона в случае $R = 10^{-13}$ см.

27. Дайте общую оценку методу параметрического варьирования как одному из операторных методов квантовой теории. Назовите другие подобные «нефункциональные» чисто операторные методы.

28. Предложите свои примеры применения параметрического варьирования. Сравните ПВ с непосредственным расчетом соответствующих величин на основе знания волновой функции.

Замечания

1. Вывод основного соотношения параметрического варьирования вы найдете в [1, с.53]. О ПВ в статистической физике см. в [18] и [114]. В зарубежной литературе основное соотношение ПВ часто называют теоремой Фейнмана. Развитие ПВ в аспекте функционального дифференцирования изложено в [22] и [63].

2. Качественный прием исследования результата решения задачи в виде разбора зависимости от каждого из входящих в ответ параметров принимает форму количественного анализа энергии в методе ПВ. Здесь не нужно знать детали движения системы в стационарных состояниях, описываемых волновыми функциями. На уровне механики ПВ выглядит просто и мало используется в учебной литературе. В то же время, метод ПВ очень эффективен в методических задачах и в фактических расчетах, так как позволяет получать результаты для средних значений без каких-либо вычислений с волновыми функциями. Задачи данного параграфа призваны убедить вас в полезности метода ПВ, особенно если вы попытаетесь получить искомые средние значения с помощью волновых функций стационарных состояний. Последние даже для простых потенциальных моделей весьма громоздки и часто выражаются через сложные специальные функции математической физики.

§ 16. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Он знал, что одна из них была правая, знал он, кроме того, что если он решит, какая из них правая, то оставшаяся будет левая. Но он никак не мог вспомнить, с чего надо начать.

А. Милн

Оценка энергии различных нелинейных нулевых колебаний. Прямой вывод СН. Влияние корреляций. Смешанные состояния. Разновременные величины. Минимизирующие состояния. Конкретные примеры неопределенностей. Аномально большие значения произведения неопределенностей координаты и импульса. Роль соотношения неопределенностей в квантовой механике.

1. Оцените энергию нулевых колебаний частицы в потенциальном поле $U(x) = \beta x^4$, используя соотношение неопределенностей Гейзенберга. Сопоставьте с точным результатом из п. 20 прил. 1.

2. Какова точность расчета энергии основного состояния финитной ветви движения частицы в однородном силовом поле с непроницаемой плоской границей ($U = \beta x$, $x > 0$; $U = \infty$, $x < 0$) с помощью соотношения неопределенностей и теоремы вириала?

3. Оцените энергию нулевых колебаний гармонического осциллятора с помощью соотношения неопределенностей и вариационного метода (с «гауссианом» в качестве пробной функции).

4. Как выглядит СН для компонент скорости v_x и v_y при движении заряда в магнитном поле, направленном вдоль оси z ?

5. На основе положительной определенности скалярного произведения $(\alpha\Phi + \beta\chi, \alpha\Phi + \beta\chi)$, выбирая $\alpha = (\chi, \chi)$ и $\beta = [(\chi, \Phi) - (\Phi, \chi)]/2$, выведите СН для двух несовместимых величин.

6. Как изменится СН для двух величин, если учесть корреляцию между ними? Что получится для координаты и импульса? Для спиновых величин, связанных с матрицами Паули?

7. Существуют ли состояния, для которых $\Delta p \Delta x = \sqrt{n^2/4 + D_{xp}^2}$?

8. Как запишется СН для двух величин с коммутирующими операторами? Для величин f и g в состоянии с $\langle \hat{f}, \hat{g} \rangle = 0$? Приведите соответствующие примеры.

9. Как обобщить СН на случай смешанных состояний?

10. Распространите соотношение неопределенностей на случай двух величин, рассматриваемых в различные моменты времени.

11. На основании результатов задач 6, 9, 10 выведите обобщенное соотношение неопределенностей для двух физических величин.

12. Рассмотрите обобщенное СН для $p(t_1)$ и $x(t_2)$ в случае гармонического осциллятора, возбуждаемого силой $f(t)$ из исходного смешанного стационарного состояния со средним числом квантов n_0 .

13. К чему сведется обобщенное СН для классических величин?

14. Охарактеризуйте роль СН в квантовой механике.

15. Прямым варьированием произведения неопределенностей импульса и координаты установите условия его минимизации.

16. Какие методы непосредственного вычисления неопределенностей импульса и координаты вы можете предложить?

17. Как изменяется произведение неопределенностей $\Delta p \Delta x$ с ростом числа квантов в случае гармонического осциллятора?

18. Чему равно произведение неопределенностей (ПН) $\Delta p \Delta x$ для стационарных состояний частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме? Тот же вопрос для δ -ямы.

19. Оцените ПН $\Delta p \Delta x$ для частицы в слабой одномерной локальной потенциальной яме произвольного профиля, а также в слабом скомпенсированном поле ($\int U dx = 0$).

20. Какова величина ПН $\Delta p \Delta x$ для частицы в двумерном слабом поле притяжения?

21. Каким будет ПН $\Delta p \Delta x$ частицы в конечной прямоугольной потенциальной яме для слабосвязанных стационарных состояний?

22. Задача 21-я для полей: а) $U = -U_0 \exp(-\alpha|x|)$; б) $U = -U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$.

23. Найдите ПН $\Delta p \Delta x$ заряда в кулоновом поле притяжения для связанных стационарных состояний.

24. Получите ПН $\Delta p \Delta x$ частицы в степенном потенциальном поле $U = \beta|x|^l$, используя первое квазиклассическое приближение.

25. Вычислите ПН $\Delta p \Delta x$ для частицы, движущейся в однородном силовом поле с непроницаемой границей.

26. Какие изменения вносит в ПН $\Delta p \Delta x$ учет слабой нелинейности одномерного осциллятора?

27. Каково ПН $\Delta p \Delta x$ для когерентных состояний осциллятора?

28. Изменяется ли ПН $\Delta p \Delta x$ со временем при свободном движении частицы?

29. Задана величина A в представлении, где диагональна величина F . Состояние системы определяется вектором Ψ . Найдите неопределенности ΔA и ΔF , если

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{F} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Насколько их произведение близко к оценке, даваемой соотношением неопределенностей?

30. Что показывает соотношение неопределенностей при подходе к предельным случаям полной локализации частицы (по координате или импульсу)?

Замечания

1. О соотношении неопределенностей читайте в любом учебнике по квантовой механике. Так, § 16 в книге [1] посвящен основам СН, в § 13 книги [2] дано подробное описание соотношения неопределенностей. Много иллюстраций к СН имеется в [3, § 15, 16].

Подробный анализ СН изложен в [84, с. 172]. Там же — краткая история и ссылки на пионерские работы по СН. Прочтите статью «Соотношение неопределенностей» в четвертом томе ФЭС [29].

Исследование соотношения неопределенностей для азимутального угла и соответствующей проекции момента импульса см. в книгах: [2, с. 55], [10, с. 58], [62, с. 68]. Специальный случай СН — так называемое соотношение неопределенностей для энергии и времени — рассматривается в работе [48]. Современное изложение этого вопроса см. в [1, § 44], [3, § 113].

Обобщение соотношения неопределенностей на случай разновременных величин, с учетом корреляции и в смешанных состояниях дано в работе [85].

Общие замечания о принципе неопределенности содержатся в [1, § 1].

О связи соотношения неопределенностей с теорией измерений см. в книгах [112, 113].

2. Термин «неопределенность» для средних квадратичных отклонений Δf встречается в литературе (см., например, [12]), однако часто он используется в своем качественном аспекте, отражающем общую ситуацию в связи с принципом неопределенности. Это качественно-количественное различие

выражено двумя словосочетаниями: «соотношение неопределенности» и «соотношение неопределенностей».

3. Следует отметить, что учет корреляции величин в соотношении неопределенностей весьма поучителен. Физическое влияние корреляции на неопределенности величин — естественно и подкрепляется несложным расчетом, а в окончательном ответе четко выделяются два фактора — несовместимость и корреляция рассматриваемых в СН величин. К тому же в некоторых случаях (примеры даны в задачах) коммутаторный член вовсе не вносит вклада в соотношение неопределенностей. Тогда информационную нагрузку принимает на себя антикоммутаторный член корреляции.

Не менее интересно и другое обобщение, в котором рассматриваемые величины разнесены во времени (см. пояснения к задаче 10) и подчеркнуты преимущества картины Гейзенберга, описывающей временную эволюцию системы.

Полезно также обратить внимание на случай смешанных состояний, где используется скалярное произведение на множестве операторов. Здесь общие идеи линейных пространств реализуются не на привычном множестве волновых функций, а в пространстве линейных операторов (см. также пояснения к задаче 25 в § 39).

4. Для неопределенностей импульса и координаты частицы соотношение Гейзенберга в своей обычной форме $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ является неравенством и служит (не говоря о фундаментальной теоретической роли) для оценок квантовостатистических флуктуаций координат и импульсов, а также входит в более общие расчетные неравенства, например при нахождении энергии неллинейных нулевых колебаний (см. задачи 1, 2). Оно устанавливает нижнюю границу произведения неопределенностей (ПН), наименьшее принципиально возможное значение ПН, но не дает представления о фактических значениях этой величины для данной конкретной системы (вида поля) в заданном состоянии. Часто соотношение неопределенностей используют для оценок порядка величин, полагая $\Delta p \Delta x \sim \hbar$. Однако существуют состояния, для которых такая оценка оказывается неверной (существенно заниженной). При этом аномально большие значения произведения неопределенностей могут соответствовать как чисто квантовому случаю (квантовые аномалии), так и классическому (классические аномалии).

Чисто квантовое явление аномального возрастания ПН возникает в случае движения частицы в стационарных состояниях с малой энергией связи $|E|$ (в одномерном потенциальном поле притяжения это относится только к возбужденным состояниям). Анализ дает следующий порядок роста ПН в зависимости от уменьшения энергии связи: $\Delta p \Delta x = A (U_0/|E|)^{1/4} \hbar/2$, где U_0 — характерная глубина потенциальной ямы. Усилению неравенства в этой формуле способствуют два обстоятельства. Во-первых, энергию связи $|E|$ с помощью соответствующего подбора параметров поля можно сделать как угодно малой (при появлении очередного связанного состояния!). Во-вторых, множитель $A \gtrsim 1$. Например, для конечной прямоугольной ямы (задача 21) $A = \sqrt{\pi n}$, $n = 1, 2, \dots$, а для модели 22,6 в задаче 22 получается практически одинаковое для всех возбуждений значение $A = \sqrt{2}$. Аналогичная картина наблюдается и в трехмерном локальном поле при появлении каждого связанного состояния.

Явление аномального роста произведения неопределенностей объясняется тем, что вероятность пребывания частицы в области действия поля мала, существен чисто квантовый эффект проникновения частицы в классически недоступную область движения (по квантовым представлениям на границе с областью непрерывного спектра энергии движение становится все менее локализованным). При этом преобладающим оказывается рост Δx по сравнению с уменьшением Δp .

Особо следует отметить случай одномерного слабого поля притяжения (первая часть задачи 19), когда существует единственное связанное состояние, для которого получается обычное значение ПН: $\Delta p \Delta x = \hbar/\sqrt{2}$. Значительное увеличение неопределенности координат по сравнению с размерами

поля здесь полностью компенсируется уменьшением неопределенности импульсов. В аналогичном же двумерном случае (задача 20), где энергия связи экспоненциально мала, произведение неопределенностей достаточно велико.

Возможность классической аномалии проиллюстрируем на примере одномерных ветвей движения. В этом случае большая величина ПН вызывает увеличение каждой из неопределенностей в соответствии с классическим законом: средние значения для стационарных состояний в классическом пределе, т. е. для достаточно больших энергий, переходят в средние по классическому периоду колебаний (см. задачу 26 в § 9), так что $\Delta p \Delta x \approx \Delta p_{\text{кл}} \Delta x_{\text{кл}} \gg \hbar$. При этом неопределенности по порядку величины совпадают с классическими амплитудами колебаний (по координате и импульсу). Для однопараметрических потенциальных моделей из соображений размерности и с учетом того обстоятельства, что в квазиклассические правила квантования входит величина $\hbar n$, заключаем, что для $n \gg 1$ произведение неопределенностей становится аномально большим согласно соотношению $\Delta p \Delta x \sim \hbar n$ (см. задачи 17, 18, 24, 25).

Помимо отмеченных аномальных случаев в стационарных состояниях, можно указать увеличение ПН при расплывании пакетов (квантовая диффузия) стационарных состояний в свободном движении частицы (задача 28), когда при произвольной начальной форме пакета неопределенность импульса не изменяется со временем, а неопределенность координаты при больших значениях времени растет линейно. Можно привести пример термического возбуждения системы, когда неопределенности растут с увеличением температуры. Так, для гармонического осциллятора в термостате $\Delta p \Delta x = (\hbar/2) \text{cth}(\hbar\omega/2T)$. При высоких температурах ($T \gg \hbar\omega$) получаем $\Delta p \Delta x = T/\omega \gg \hbar$. Этот пример имеет непосредственное отношение к рассмотренным классическим аномалиям.

5. Любопытно также сравнить значения ПН $\Delta p \Delta x$ для стационарных состояний с наименьшей энергией (нулевых колебаний) в различных нелокальных полях. Известно, что для нулевых колебаний линейного (гармонического) осциллятора ПН принимает наименьшее возможное значение $\hbar/2$ (то же касается, например, и таких нестационарных состояний, как когерентные). Этот же результат приближенно справедлив для основного состояния в потенциальном поле с простым минимумом, а учет нелинейности (задача 26) $U = m\omega_0^2 x^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4$ дает поправку: $\Delta p \Delta x = [1 + \hbar\alpha^2/2m^3\omega_0^5 + O(\hbar^2)] \hbar/2$. В симметричном поле ($\alpha = 0$) изменения Δp и Δx в первом приближении взаимно компенсируются. Для полей с существенной (сильной) нелинейностью имеем близкие результаты: в случае одномерной прямоугольной ямы бесконечной глубины $\Delta p \Delta x = 1,14\hbar/2$ (задача 18); для кулонова поля $\Delta p \Delta x = 1,15\hbar/2$ (задача 23); в однородном силовом поле с непроницаемой границей $\Delta p \Delta x = 1,23\hbar/2$ (задача 25). Добавим пример локального поля δ -ямы (задача 18), где некоторое увеличение ПН $\Delta p \Delta x = 1,41\hbar/2$ связано с тенденцией к аномальному возрастанию, отмеченному в п. 4.

ЧАСТЬ. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА (задачи)

Тех, кто только-только овладел сложной диаграммой техникой при $T = 0$, зрелище поднимающей свою ужасную голову температуры может заставить, как Архимеда, воскликнуть: «Не трогай моих диаграмм!»

Р. Маттук

§ 17. СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Описание с помощью матрицы плотности является наиболее общей формой квантовомеханического описания систем.

Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц

Соотношение неопределенностей в смесях. Гармонический осциллятор в термостате. Вынужденные колебания. Когерентные смеси. Системы с микроканоническим распределением. Движение смесей. Вигнеровская квантовая функция распределения. Свойства статистического оператора. Конкретные примеры систем в смешанных состояниях.

1. Обобщите соотношение неопределенностей для двух величин на случай смешанного состояния.

2. Получите равновесную матрицу плотности гармонического осциллятора в координатном представлении.

3. Найдите распределение вероятностей координат и импульсов для гармонического осциллятора в термостате.

4. Изучите амплитуды колебаний осциллятора в состоянии теплового равновесия. Найдите произведение флуктуаций координаты и импульса.

5. Исследуйте состояние осциллятора при вынужденных колебаниях под действием переменной силы, если вначале он находится в термодинамически равновесном состоянии.

6. Каким будет распределение координат осциллятора при вынужденных колебаниях из начального термодинамически равновесного состояния? Какое распределение числа квантов при этом возникает?

7. Убедитесь, что распределение вероятностей некоторой величины f в смешанном состоянии можно представить в форме $\text{Sp} [\hat{\rho} \delta(f - \hat{f})]$.

8. В начальный момент времени осциллятор находился в смешанном когерентном состоянии

$$\hat{\rho} = \int_0^{2\pi} d\varphi \eta(\varphi) |ze^{i\varphi}\rangle \langle ze^{i\varphi}|, \quad \int_0^{2\pi} d\varphi \eta(\varphi) = 1.$$

Определите его состояние при вынужденных колебаниях в переменном однородном силовом поле.

9. Рассмотрите распределение числа квантов осциллятора в смешанном когерентном состоянии

$$\hat{\rho} = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |ze^{i\varphi}\rangle \langle ze^{i\varphi}|.$$

10. Покажите, что статистический оператор чистого стационарного состояния с энергией E при отсутствии вырождения можно записать в виде

$$\hat{\rho} = [\text{Sp} \hat{\rho} (E - \hat{H})]^{-1} \hat{\rho} (E - \hat{H}).$$

11. Распространите результат предыдущей задачи на случай системы с микроканоническим распределением.

12. В методе Мацубары статистический оператор системы с гамильтонианом $H = H_0 + H_1$ для канонического распределения выражается через температурную S -матрицу: $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 \hat{S}(\beta) / \langle S(\beta) \rangle_0$. Продумайте возможность аналогичного представления в случае микроканонического распределения.

13. Обобщите мацубаровский результат для средних значений $\langle f \rangle = \langle f S(\beta) \rangle_0 / \langle S(\beta) \rangle_0$ на случай микроканонического распределения.

14. Тожество Кубо перенесите на случай системы с микроканоническим распределением.

15. Вычислите следующие средние значения для равновесных идеальных газов: $\langle (\hat{a}_k^\dagger)^n (\hat{a}_l)^s \rangle$; $\langle \hat{N}_k \hat{N}_l \rangle$.

16. Какой вид имеет уравнение Лиувилля для матрицы плотности в представлениях Гейзенберга и Дирака?

17. Как связаны между собой представления Шредингера, Гейзенберга и Дирака для статистического оператора?

18. На систему, находящуюся первоначально в некотором смешанном состоянии, действует переменное возмущение. Получите интегральное уравнение для статоператора и решите его итерационным методом в представлении взаимодействия.

19. Может ли при движении системы чистое состояние перейти в смешанное?

20. Укажите смысл собственного представления статоператора. Приведите примеры.

21. Разберите пример двухрядной матрицы плотности. Сколько независимых параметров она содержит? Покажите, что $0 \leq \det \hat{\rho} \leq 1/4$. Что означают предельные значения 0 и $1/4$?

22. Приведите конкретные примеры физических систем в смешанном состоянии.

23. На примере одной частицы покажите, что функция Вигнера $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d\mathbf{R} \langle \mathbf{r} - \mathbf{R}/2 | \hat{\rho} | \mathbf{r} + \mathbf{R}/2 \rangle \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}/\hbar)$, где $\hat{\rho}$ — статистический оператор, обладает многими свойствами, сближающими ее с классической функцией распределения в фазовом пространстве: она вещественна и при интегрировании по импульсному пространству дает распределение вероятностей координат, а по координатному — импульсов.

24. Получите вигнеровскую функцию для гармонического осциллятора в термостате.

25. Убедитесь, что при движении частицы в потенциальном поле уравнение движения для вигнеровской функции имеет много общего с кинетическим уравнением классической статистики. Рассмотрите переход к классическому пределу в одномерном случае.

26. Как выражается вектор средней плотности потока числа частиц через матрицу плотности в координатном представлении?

27. Примените соотношение задачи 20 из § 9 для вывода точных правил квантования энергии гармонического осциллятора (на основании результатов для матрицы плотности из задачи 2).

28. Система из двух связанных осцилляторов (энергия взаимодействия пропорциональна смещениям) находится в основном состоянии. Вычислите матрицу плотности в координатном представлении для одного из осцилляторов.

29. Сопоставьте описание квантовомеханических систем в чистых и смешанных состояниях.

30. Объясните происхождение смешанных состояний на примере случаев подсистемы и «двойной статистики».

Замечания

1. Основы метода матрицы плотности (статистического оператора) изложены в учебниках по квантовой механике [1, § 14.], [2, § 14]. Читайте книги [19, § 7—9], [114, гл. 2], [20, 24, 84, 87].

Построение квантовой механики на основе концепции смешанных состояний, а также вопрос об энтропии обсуждаются в книге [62]. Метод квантовой функции распределения Вигнера рассматривается в [18, 88, 114]. На основе функций Вигнера развиты метод кинетических уравнений в монографии [89] и теория плазмы в [90].

В книге [91] вводятся свертки многочастичных матриц плотности и развивается метод цепочек Боголюбова.

Обязательно см. ФЭС [29]: т. 3, Матрица плотности; т. 4, Смесь состояний.

2. В некоторых случаях чистое состояние (например, с определенным значением энергии) целесообразно описывать с помощью статистического оператора (см. задачу 10, а также задачи 25, 26 в § 9).

В классической статистической физике очень удобной оказалась концепция фазового пространства (метод Гиббса). В квантовом случае непосредственно сопоставлять состояния системы и точки такого пространства нельзя, поскольку

конфигурационное и импульсное подпространства физически несовместимы (дополнительны). Однако сохранение преэмственности реализует метод вигнеровской квантовой функции распределения (см. задачи 23—25, а также 31 в § 5 и 28 в § 6).

§ 18. ФЕРМИ- И БОЗЕ-ГАЗЫ

*Фермионы — индивидуалисты,
а бозоны — коллективисты.*

М. И. Каганов, И. М. Лифшиц

Общие свойства квантовых газов. Метод плотности состояний. Квази-частицы. Обменные высокотемпературные поправки. Вырожденный ферми-газ. Фазовые переходы при анизотропных законах дисперсии. Аномалии одномерного ферми-газа. Особенности теплоемкости двумерных газов.

1. Выразите основные термодинамические величины идеальных ферми- и бозе-газов через одночастичную энергетическую плотность (число) состояний. Укажите характерные температурные области.

2. Получите энергетическую плотность состояний для n -мерного случая при изотропном степенном законе дисперсии $\epsilon(\mathbf{p}) = Vp^l$.

3. Покажите, что для степенной зависимости числа состояний от энергии $\Gamma(\epsilon) = A\epsilon^a$ средняя энергия идеальных газов непосредственно связана с Ω -потенциалом соотношением $E = -a\Omega$.

4. Исследуйте высокотемпературные термодинамические свойства идеальных газов со степенной плотностью состояний.

5. Рассмотрите обменные квантовые поправки в термических коэффициентах обычных газов при высоких температурах.

6. Постройте термодинамику вырожденного ферми-газа со степенной зависимостью плотности одночастичных состояний от энергии.

7. Какова температурная зависимость химического потенциала ферми-газа при $T \ll \epsilon_F$?

8. Изобразите графически температурную зависимость химического потенциала обычного ферми-газа. Чему равна его производная по температуре в точке, где он обращается в нуль?

9. Найдите кубический по температуре вклад в теплоемкость при постоянных внешних параметрах для вырожденного ферми-газа.

10. Сравните термические коэффициенты обычного вырожденного ферми-газа с соответствующими классическими величинами.

11. Найдите энергию и теплоемкость при постоянном объеме для обычного ферми-газа при температуре вырождения (когда химический потенциал равен нулю).

12. Сравните температуру обращения в нуль химического потенциала с граничной энергией Ферми для обычного ферми-газа. Та же задача в одно- и двумерном случаях.

13. Исследуйте термодинамические свойства двумерного ферми-газа.
14. Каковы флуктуации числа частиц (плотности) в вырожденном ферми-газе со степенной плотностью одночастичных состояний?
15. Сравните среднюю длину волны де Бройля частицы в обычном ферми-газе при низких температурах и при температуре вырождения с соответствующей высокотемпературной величиной.
16. Выразите сдвиг энергии Ферми $\Delta\epsilon_F = \epsilon_F - \epsilon_F^0$ через добавку к числу состояний. Покажите, что в первом приближении теплоемкость ферми-газа можно выразить через сдвиг энергии Ферми следующим образом (для плавной добавки к числу состояний): $C = (1 - d\Delta\epsilon_F/d\epsilon_F^0) C_0$.
17. Оцените степень вырождения обычного бозе-газа при температуре бозе-эйнштейновской конденсации, сравнивая среднюю энергию газа с классической.
18. Чему равно среднее число фотонов в 1 см^3 равновесного излучения при комнатной температуре?
19. Найдите среднюю энергию и теплоемкость вырожденного бозе-газа со степенной плотностью состояний.
20. Исследуйте фазовые переходы в бозе-газе при степенной зависимости плотности состояний от энергии.
21. Сформулируйте условие появления конденсата в идеальном бозе-газе со степенной плотностью состояний. Найдите число частиц в конденсате.
22. Сопоставьте термодинамические свойства двумерных обычных ферми- и бозе-газов.
23. Изучите термодинамические величины двумерного равновесного излучения.
24. Исследуйте термодинамические свойства одномерного обычного ферми-газа. Отметьте аномальный ход теплоемкости при промежуточных и высоких температурах. Назовите конкретные физические приложения.
25. Проанализируйте аномальное поведение химического потенциала одномерного ферми-газа.
26. Могут ли двумерные ферми- и бозе-газы иметь совпадающие теплоемкости при всех температурах?
27. Зависит ли теплоемкость смеси двумерных ферми- и бозе-газов от ее состава?
28. Исследуйте одномерный бозе-газ, находящийся в потенциальном поле $U(x) = -u\delta(x)$.
29. Каков смысл химического потенциала ферми- и бозе-газов при низких температурах?
30. Изучите флуктуации энергии вырожденного ферми-газа. Сравните с соответствующими классическими величинами.
31. Опишите эффект обменного взаимодействия в идеальных квантовых газах.

32. Постройте графики теплоемкости для ферми-и бозе-газов в случае различных размерностей пространства и законов дисперсии. Приведите сравнительный анализ.

33. Назовите конкретные примеры физических систем с элементарными возбуждениями фермиевского типа.

34. Аналогичная предыдущей задача для бозевских ветвей элементарных возбуждений.

Замечания

1. Общие представления о статистиках Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна и конкретные примеры можно почерпнуть из учебной литературы: [1, гл. 9], [3, гл. 19, 20], [18]. См. также [19, 79, 114, 119]. Решайте задачи из сборника [16].

О квазичастицах в металле читайте [25, 26]. В книге [27] имеется обильный список литературы по элементарным возбуждениям в твердых телах.

Специальные квазичастицы рассматриваются в [59, 80, 93]. См. также [24, 52, 62, 117, 120]. Проблема учета взаимодействия между квазичастицами подробно обсуждается в монографиях [21—23, 78]. Применению полевых методов в теории неидеальных газов посвящены также книги [115, 116].

О газах в пространствах различной размерности читайте, например, в работе [98]. В книге [20] обратите внимание на вопросы: бозе-газ в потенциальном поле и ферми-газ в сильном магнитном поле.

Изучите соответствующие статьи в ФЭС [29]: т. 1, Бозе-газ и др.; т. 2, Квазичастицы; т. 5, Ферми-газ и др.

2. Различные свойства газов фермионов и бозонов рассматриваются в задачах других параграфов: граничные и размерные явления (§ 20), магнитные свойства (§ 21), корреляция (§ 22) и др. См. также задачи о свойствах парагазов (§ 19).

§ 19. ПАРАСТАТИСТИКА

Пока все еще остается тайной, почему природа предпочла выбрать... частные случаи, которые приводят к обычной статистике Ферми и Бозе.

А. Исихара

Общие свойства газов с парастатистикой. Парараспределение: Метод плотности состояний. Характерные температуры. Обобщение формул Румера и Зоммерфельда. Термодинамика низкотемпературного парагаза. Свойства в окрестности температуры нулевого химического потенциала. Обменные эффекты при высоких температурах. Одномерные и двумерные парагазы. Значение парастатистик.

1. Запишите средние значения чисел заполнения $\langle n_k \rangle \equiv n^p(\epsilon_k)$ одночастичных состояний парагаза с $n_k \leq r$ в «фермиевской» и «бозевской» формах (для большого канонического ансамбля). Проследите за переходом к предельным случаям ферми- и бозе-газов.

2. Изобразите график зависимости парараспределения $n^p(\epsilon)$ от энергии. Какое значение принимает функция парараспределения при энергии, равной химическому потенциалу? Какую форму принимает график при низких температурах? Как

он изменяется с увеличением температуры? Введите соответствующую граничную энергию.

3. Выразите основные термодинамические величины парагаза через число $\Gamma(\epsilon)$ и плотность $\nu(\epsilon) \equiv \Gamma'(\epsilon)$ одночастичных состояний. Наметьте пути построения термодинамики парагаза.

4. Покажите, что для степенной зависимости числа состояний от энергии $\Gamma(\epsilon) = A\epsilon^\alpha$ средняя энергия парагаза E пропорциональна Ω -потенциалу: $E = -\alpha\Omega$.

5. Убедитесь, что для парагаза с любым максимальным значением чисел заполнения r справедлива формула, обобщающая известные формулы Румера для ферми- и бозе-газов:

$$\Omega = - \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{d\beta z(\beta)}{2\pi i \beta^2} \cdot e^{\beta\epsilon} \frac{\pi\beta T}{\sin(\pi\beta T)} \sin \frac{r\pi\beta T}{r+1} / \sin \frac{\pi\beta T}{r+1};$$

$$0 < \sigma < T^{-1}; \quad z(\beta) = \sum_k \exp(-\beta\epsilon_k).$$

6. Выделите основные области и «опорные» точки на шкале температур для парагазов.

7. Покажите, что при низких температурах ($T \ll \epsilon_p$) характерные интегралы в термодинамике парагаза можно вычислить с помощью асимптотического разложения, обобщающего зоммерфельдовскую формулу в ферми-статистике:

$$\int_0^\infty \varphi(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon = r \int_0^\infty \varphi(\epsilon) d\epsilon + \frac{r\pi^2 T^2}{3(r+1)} \varphi'(\xi) + O(T^4; e^{-\epsilon/T})$$

(для плавной функции $\varphi(\epsilon)$).

8. Постройте термодинамику низкотемпературного парагаза с произвольной зависимостью плотности состояний от энергии.

9. Рассмотрите теплоемкость (при постоянных внешних параметрах) для парагаза в области низких температур. Сравните с соответствующими значениями теплоемкости ферми-газа.

10. Как изменяется граничная энергия парагаза с ростом максимального значения чисел заполнения r для степенной плотности состояний?

11. Как влияет увеличение r на флуктуации плотности частиц парагаза? Объясните физический смысл результата.

12. Покажите, что при добавлении плавной части к числу состояний теплоемкость парагаза при низких температурах может быть выражена через сдвиг граничной энергии $\Delta\epsilon_p = \epsilon_p - \epsilon_p^0$ так же, как и в теории ферми-газа: $C = (1 - d\Delta\epsilon_p/d\epsilon_p^0) C_0$.

13. Более подробно рассмотрите термодинамику трехмерного парагаза при низких температурах в случае квадратичного закона дисперсии на примере средней энергии, граничной энергии, теплоемкости, уравнения состояния, термических коэффициентов.

14. Каков общий вывод о поведении парагаза при низких температурах?

15. Обоснуйте высокотемпературное разложение термодинамических величин парагаза по малому параметру $\exp(\zeta/T)$.

16. Найдите среднюю энергию парагаза со степенной плотностью состояний при высоких температурах в зависимости от температуры. Обратите внимание на знак квантовых обменных поправок и сравните их с соответствующими «силовыми» вкладами.

17. Выведите уравнение состояния для трехмерного парагаза со степенной плотностью состояний при высоких температурах.

18. Получите высокотемпературную зависимость химического потенциала.

19. Рассмотрите теплоемкость (при постоянных внешних параметрах) для парагаза со степенной плотностью состояний при высоких температурах, учитывая члены порядка $T^{-2\alpha}$ (см. задачу 4).

20. Разберите частные случаи предыдущей задачи для $\alpha = 3/2$ и $\alpha = 1/2$. Укажите физический смысл рассматриваемых значений и подчеркните аномалию поведения теплоемкости парагаза во втором случае.

21. Более подробно рассмотрите случай $\alpha = 1$ из задачи 19. Укажите физический смысл результата. Сравните с соответствующим значением теплоемкости парагаза при низких температурах, а также с особенностями предельных случаев ферми-и бозе-газа во всей области температур (см. задачу 22 в § 18).

22. Найдите флуктуации числа частиц парагаза со степенной плотностью состояний при высоких температурах. Сравните с соответствующим классическим пределом. Объясните квантовые обменные эффекты в парагазе.

23. Дайте общую характеристику поведения парагазов при высоких температурах. Объясните происхождение найденных закономерностей.

24. Проанализируйте поведение парагаза со степенной плотностью состояний при температуре T_0 обращения в ноль химического потенциала. Всегда ли существует такая температура? Как она зависит от r и α ? Изобразите график зависимости T_0 от указанных параметров.

25. Найдите энергию парагаза со степенной плотностью состояний в точке нулевого химического потенциала. Сравните с соответствующим классическим значением при этой же температуре. Оцените степень вырождения газа.

26. Исследуйте теплоемкость при постоянных внешних параметрах в точке обращения в ноль химического потенциала.

27. Постройте термодинамику парагаза со степенной плотностью состояний и $\zeta \equiv 0$.

28. В каких реальных случаях возможно обнаружение частиц (или квазичастиц) с парастатистикой? Каков методический смысл рассматриваемых в задачах термодинамических свойств газов с парастатистикой?

Замечания

1. Начните знакомство с парастатистикой по книге Исихары [79, с. 114, 405]. В ней излагаются общие понятия, выводы основных формул, полевой аспект и возможные применения, рассматриваются роль и происхождение парастатистик. Можно назвать также книгу Кемпфера [87, с. 141, 278].

Обсуждение истории проблемы, дискуссий и физической интерпретации, исследование термодинамических свойств парагазов и конкретных примеров содержатся в многочисленных журнальных работах.

2. Следует отметить ту замечательную возможность объединения статистик Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна, которую дает парастатистика. Она углубляет наши представления об этих двух типах предельных статистик, кажущихся столь различными, и позволяет проследить за непрерывным переходом от одной из них к другой, вскрывая их общность.

§ 20. ГРАНИЧНЫЕ И РАЗМЕРНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

*И пред шумящую пучиной,
Недоумения полна,
Остановилась она.*

А. С. Пушкин

Плотность состояний в пленках и цилиндрах. Граничное влияние в квазиклассическом приближении. Корреляция флуктуаций и ФГ для пластины. Магнитные свойства электронов. Газы в слоях.

1. Найдите число и плотность одночастичных состояний для движения в слое (модель непроницаемых границ).

2. Задача, аналогичная 1, для модели с конечным скачком потенциала на границе.

3. Задача, аналогичная предыдущей, с учетом размытия потенциальной модели граничного влияния.

4. Рассмотрите число и плотность одночастичных состояний для цилиндрической области движения с прямоугольным сечением в модели непроницаемых стенок.

5. Учтите конечность скачка потенциала на границе в условиях предыдущей задачи.

6. Вопрос, поставленный в задаче 5, с учетом влияния размытия границ в потенциальной модели.

7. Исследуйте плотность состояний в круговом цилиндре с непроницаемыми стенками и с учетом размытия границ.

8. Рассчитайте число и плотность состояний в модели прямоугольного «ящика» с непроницаемыми границами и с конечным скачком потенциала на границе.

9. Определите плотность состояний для электрона в слое и в перпендикулярном слою магнитном поле.

10. Исследуйте граничную особенность одномерного потенциала типа излома и квадратичного хода вблизи границы с условием непроницаемости.

11. Задача, аналогичная 10, для случая граничного условия обращения в нуль производной волновой функции.

12. Найдите граничные фазы первого квазиклассического приближения в условиях предыдущих двух задач. Выявите физический смысл граничной фазы и укажите ее роль в правилах квантования первого ВКБ-приближения.

13. Для линейной (излом) и квадратичной (простой максимум) особенностей рассчитайте граничную фазу в более высоком ВКБ-приближении.

14. Установите вид правил квантования с учетом граничных особенностей потенциала.

15. Свяжите характеристики внутренних особенностей типа максимума и излома (классическое движение частицы с данной энергией может происходить по обе стороны от такой особенности потенциала) с соответствующими величинами для граничных особенностей.

16. Укажите конкретные физические приложения метода граничной фазы.

17. Исследуйте корреляцию флуктуаций плотности числа частиц вырожденного электронного газа в слое.

18. В условиях предыдущей задачи учтите дополнительное магнитное поле, перпендикулярное слою.

19. Изучите поверхностное натяжение вырожденного электронного газа.

20. Исследуйте термодинамические свойства вырожденного электронного газа в тонком цилиндрическом слое.

21. Опишите поведение идеального бозе-газа в слое.

22. Проанализируйте параметрическое возбуждение электронного газа в слое (в рамках модели прямоугольной потенциальной ямы, параметры которой — ширина и глубина — изменяются с течением времени).

23. Получите функцию Грина (одночастичную) для идеального газа электронов в слое.

24. Электронный газ находится в круговом цилиндре с непроницаемыми стенками и в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра. Исследуйте его равновесные магнитные свойства.

25. В чем заключается особенность движения частиц в потенциальном поле с граничными условиями периодичности? Разберитесь на конкретных примерах.

26. Резюмируйте значение рассмотренных граничных и размерных явлений.

Замечания

1. Различные размерные эффекты в металлах подробно обсуждаются в книге [26]. Поверхностные и размерные явления в процессах переноса рассматриваются в монографии [52]. О поверхностных (таммовских) состояниях см. [55]. Магнитным поверхностным уровням посвящена работа [102].

2. Вопросы, связанные с изучением импульсного пространства и особых траекторий в магнитном поле (внутренние особенности эффективного потенциала) исследуются в работе [25]. Влияние различных граничных и внутренних особенностей потенциальных полей на структуру одночастичного энерге-

тического спектра исследуется в работе [73]. Проблемы, связанные с работой выхода, затронуты в монографии [43]. О слоистых и нитевидных проводниках рассказано в статье Гинзбурга из сборника [100]. В теории ядра см. [120].

§ 21. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Не следует думать, что магнит действует только на железо... Еще замечательнее свойства так называемых диамагнитных тел, например цинка, свинца, серы, висмута: эти тела отталкиваются от сильного магнита!

Я. И. Перельман

Газы нейтральных частиц. Магнетизм зарядов в тонких пленках. Одночастичные функции Грина электронов. Магнетизм ферми-газа в цилиндрах. Магнитные свойства парагазов. Проводимость электронов в магнитном поле.

1. Исследуйте термодинамические свойства ферми-газа парамагнитных нейтральных частиц в однородном магнитном поле. Рассмотрите случай сильного магнитного поля и степенной (без поля) зависимости плотности одночастичных состояний от энергии. Разберите различные частные случаи и дайте им физическое толкование. В чем заключаются особенности теплоемкости вырожденного газа? Как ведет себя магнитная восприимчивость?

2. Бозе-газ парамагнитных нейтральных частиц находится в постоянном однородном магнитном поле. Изучите его равновесные магнитные свойства. Что происходит в слабом магнитном поле? Считайте, что проекция собственного магнитного момента бозонов может принимать три значения.

3. Опишите свойства системы, упомянутой в предыдущей задаче, в сильном магнитном поле. Какое влияние оказывает магнитное поле на свойства конденсата?

4. Как влияет однородное магнитное поле на свойства газа заряженных бозе-частиц?

5. Двумерный газ электронов находится в постоянном однородном магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости движения. Исследуйте магнитные свойства в случае не очень сильного магнитного поля.

6. В условиях предыдущей задачи разберите случай очень сильного магнитного поля.

7. Аналогичная предыдущей задача для бозе-газа заряженных частиц.

8. Как повлияет на свойства системы в условиях задачи 5 дополнительное перпендикулярное магнитному электрическое поле?

9. Вычислите одночастичную функцию Грина (термодинамическую) для идеального электронного газа с анизотропным квадратичным законом дисперсии в постоянном однородном магнитном поле.

10. Какие термодинамические величины непосредственно позволяют получить функция Грина предыдущей задачи?

11. Постройте функцию Грина, аналогичную предлагаемой в задаче 9, для электронов в пластине.

12. Как зависит фазовый множитель полной одночастичной функции Грина электронов в однородном постоянном магнитном поле от выбора векторного потенциала?

13. Какой вид будет иметь фазовый множитель (см. задачу 12) в случае двухчастичных функций Грина?

14. Электронный газ находится в тонком цилиндрическом слое и в однородном постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра (двумерное движение по боковой поверхности цилиндра). Исследуйте его магнитные свойства при низких температурах.

15. В условиях задачи 14 опишите влияние дополнительного электрического поля, направленного перпендикулярно оси цилиндра.

16. Будет ли в низкотемпературном парагазе наблюдаться эффект де Гааза-ван Альфена?

17. Опишите магнитные свойства парагаза при низких температурах.

18. Рассмотрите магнитные свойства высокотемпературных парагазов.

19. Получите высокочастотные асимптотики для тензора электропроводности электронного газа в постоянном однородном магнитном поле.

20. Какое влияние оказывает вид закона дисперсии на проводимость в условиях предыдущей задачи?

21. Запишите правила сумм для проводимости электронного газа в постоянном магнитном поле.

22. Какие обобщенные восприимчивости описывают реакцию системы зарядов на включение переменного однородного магнитного поля?

23. Можно ли независимо рассматривать парамагнитные и диамагнитные свойства электронного газа?

24. Сопоставьте свойства размерных и магнитных осцилляций термодинамических величин в ферми-газе.

Замечания

1. Основные магнитные свойства электронного газа описаны в [18]. Магнитные свойства металлов подробно разбираются в работах [25 и 26], общие вопросы магнетизма твердых тел изложены в [27]. Там же имеется обширная библиография.

О сильном магнетизме читайте в [23, 93, 101, 114]. Изящный метод исследования магнитных свойств электронного газа предложен в работе [99] (см. также [20] и [119]). Можно посоветовать соответствующие разделы в книгах [51, 52].

Вопросу о магнитных поверхностных уровнях посвящена работа [102]. Различные виды волн в металлах в магнитном поле рассматриваются в обзоре [104].

О работах по теоретическому исследованию эффектов размерного квантования в магнитных явлениях вы узнаете из [25]. Теория осцилляционных явлений для электронов в пластине и в магнитном поле развивается в [86] и [105].

Не забывайте о ФЭС [29]: т. I, Де Хааза-ван Альфена эффект, Диамагнетизм; т. 5, Циклотронный резонанс.

§ 22. КОРРЕЛЯЦИЯ ФЛУКТУАЦИЙ

Наш метод представляет собой механику, объектами которой являются корреляции.

И. Пригожин

Связь с фазой волновой функции. Динамика корреляций и квантовая диффузия. Корреляция и неопределенность. Корреляции при вынужденных и тепловых колебаниях. Флуктуации и корреляции в газах. Равновесные, стационарные и неравновесные корреляции. Роль корреляции.

1. Как влияет фаза координатной волновой функции частицы на корреляцию координаты и импульса? Рассмотрите случай одномерного движения и приведите примеры. Какие еще эффекты непосредственно связаны с фазой волновой функции координатного представления?

2. Составьте динамические уравнения для центральных корреляционных моментов второго порядка координат и импульсов частицы.

3. Как влияет корреляция флуктуаций координаты и импульса частицы на квантовую диффузию (расплывание волнового пакета)?

4. Рассмотрите свойства квантовой диффузии для произвольного закона дисперсии.

5. Решите задачу о квантовой диффузии в однородном переменном силовом поле.

6. Задача, аналогичная 5, для гармонического осциллятора.

7. Как связаны закономерности перемещения и распывания свободного волнового пакета с соотношением неопределенностей?

8. Исследуйте закон квантовой диффузии для параболического поля отталкивания, проследив за изменением дисперсий координаты и импульса и за их корреляцией.

9. Изучите динамику корреляций при вынужденных колебаниях осциллятора.

10. Какова роль корреляции флуктуаций в соотношении неопределенностей?

11. Какое состояние отвечает наименьшему возможному произведению неопределенностей координаты и импульса при заданной величине корреляции флуктуаций этих величин?

12. Свяжите дисперсию кинетической энергии частицы с дисперсией ее импульса.

13. Рассматривая флуктуации координаты и импульса осциллятора в термостате, проследите, как на чисто квантовые флуктуации накладываются тепловые. Можно ли отделить одни флуктуации от других?

14. Рассмотрите корреляцию чисел заполнения в идеальных газах.

15. Вычислите корреляцию флуктуаций квадратов компонент импульса частицы $\langle p_x^2 p_y^2 \rangle - \langle p_x^2 \rangle \langle p_y^2 \rangle$ в случае высших и низких температур для идеальных газов Ферми и Бозе.

16. Установите связь корреляции флуктуаций плотности числа частиц с двухчастичными функциями Грина для ферми- и бозе-газов.

17. Разберите особенности корреляции флуктуаций плотности вырожденного ферми-газа со степенной зависимостью кинетической энергии от импульса. Как влияют вид закона дисперсии и размерность пространства на основные свойства корреляции?

18. Исследуйте корреляцию флуктуаций числа частиц в высокотемпературных газах фермионов и бозонов.

19. Получите формулу для неравновесной матрицы корреляционных моментов второго порядка в методе Кубо с помощью канонического преобразования для представления взаимодействия и найдите явный вид первой поправки по внешнему возмущению.

20. Отметьте основные свойства спектрального представления матрицы стационарных корреляций.

21. В чем особенности корреляции флуктуаций частотного представления в случае микроканонического ансамбля?

22. Укажите непосредственную связь матрицы корреляций с обобщенными восприимчивостями.

23. Какова роль корреляции флуктуаций плотности числа частиц по отношению к рассеянию частиц на статистических неоднородностях системы?

24. На примере построения временных корреляционных моментов второго порядка проиллюстрируйте более общий характер гейзенберговского представления. Можно ли в шредингеровском представлении построить матрицу временных корреляций?

25. Рассмотрите корреляционные меры для кинематических величин электрона в постоянном однородном магнитном поле.

Замечания

1. В книге [18] вы можете познакомиться с физическими основами явления корреляции, ролью корреляции флуктуаций в эффектах рассеяния. Вопрос о значении корреляции в различных физических процессах освещен в [12], [21], [22]. Рассеяние на флуктуациях плотности обсуждается в статье Мюнстера из сборника [28]. См. также [117].

О связи корреляционных характеристик с неравновесными величинами в рамках метода Кубо читайте в его работе из [28]. Корреляция флукту-

аций плотности в бозе-газе вблизи температуры конденсации рассматривается в [79].

Влияние корреляции на соотношение неопределенностей исследуется в работе [85].

См. ФЭС [29]: т. 1, Временная корреляция флуктуаций; т. 2, Корреляция флуктуаций; т. 5, Флуктуации.

2. В данном параграфе собраны задачи, посвященные корреляциям как в квантовой механике, так и в статистике. Следует отметить, что в курсах квантовой механики обычно мало внимания уделяется корреляции (исключением является книга [12]), хотя во многих явлениях она играет важную роль, отражая статистическое взаимодействие различных физических величин.

Интересно проследить за проявлениями корреляции уже на уровне механического описания. Например, фаза волновой функции в координатном представлении, непосредственно «управляющая» потоковыми величинами, определяет и корреляцию координаты и импульса, которая, в свою очередь, влияет на квантовую диффузию.

Поучительно появление корреляционной меры и в соотношении неопределенностей, где она служит источником взаимосвязи флуктуационных отклонений двух величин, наряду с традиционно учитываемой физической несовместимостью (некоммутативностью операторов). Можно сказать кратко, что некоммутативность и корреляция — это две причины появления соотношения неопределенностей.

В квантовой механике при расчете корреляционных моментов второго порядка возникают две интересные проблемы. Во-первых, нужно знать, какую операторную величину сопоставлять с произведением двух физических характеристик (решается простым правилом симметризации — берется половина соответствующего антикоммутатора). Во-вторых, необходимо ввести описание двух величин, относящихся к различным моментам времени (решается использованием представления Гейзенберга для временной эволюции системы).

Конечно, наиболее важные проявления корреляции флуктуаций относятся к области статистической физики: эффекты рассеяния волн и частиц на статистических неоднородностях среды, тесная связь спонтанных флуктуаций с кинетическими явлениями (флуктуационно-диссипационная теорема) и т. п. С корреляцией связаны задачи и в других параграфах: 4 в § 23, 8, 10, 20, 25, 26, в § 24 и др.

§ 23. МЕТОД КУБО. ОБОБЩЕННЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Метод важнее открытия, ибо правильный метод исследования приведет к новым, еще более ценным открытиям.

Л. Д. Ландау

Постановка кинетической задачи. Ряд Кубо. Обобщения метода Кубо. Линейное приближение и нелинейные эффекты. Зонды. Адмиттансы. Функции последствия. Свойства обобщенных восприимчивостей и методы их вычисления. Конкретные примеры. Связь восприимчивостей с другими величинами.

1. В момент времени t_0 задано состояние системы со стат-оператором $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}(t_0)$, так что $\{\hat{H}_0, \hat{\rho}_0\} = 0$ (стационарное, в частности, равновесное состояние). После этого на систему, гамильтониан которой $\hat{H}_0$ явно не зависит от времени, действует переменное возмущение $\hat{H}_1(t)$. Решая уравнение Лиувилля в пред-

ставлении взаимодействия методом итераций, получите ряд теории возмущений для статоператора.

2. Используя результат предыдущей задачи, найдите ряд Кубо для средних значений физических величин.

3. С помощью канонического преобразования выразите среднее значение физической величины через S-оператор (в представлении взаимодействия). Прodelайте аналогичные вычисления, исходя из гейзенберговского представления.

4. В линейном приближении получите выражение для неравновесных корреляционных моментов второго порядка величин $A(t_1)$ и $B(t_2)$, считая для простоты, что $\langle A(t) \rangle = 0$ и $\langle B(t) \rangle = 0$.

5. Перенесите результаты метода Кубо на случай произвольных начальных условий $\hat{\rho}(t_0)$ и для системы с переменной естественной эволюцией (гамильтониан которой явно зависит от времени). Объясните физический смысл результата.

6. Какой средний импульс получает гармонический осциллятор под действием переменной однородной силы $f(t) = P\delta(t)$? Найдите линейную реакцию, считая собственную частоту осциллятора распределенной по гауссовому закону (со средним значением ω_0 и дисперсией D).

7. Обобщите все результаты метода Кубо на случай феноменологического учета взаимодействия системы с термостатом в приближении времени релаксации, вводя в уравнение Лиувилля член $(\hat{\rho} - \hat{\rho}_0)/\tau$. Кратко опишите его влияние.

8. Как перейти к классическому пределу в рамках метода Кубо?

9. Изучите релаксацию системы после выключения возмущения.

10. Рассмотрите квадратичные члены ряда Кубо и отметьте нелинейные эффекты (самодействия и взаимного влияния).

11. Сравните восприимчивости линейного приближения с кросс-восприимчивостями нелинейных членов.

12. Исследуйте вопрос о распространении результатов метода Кубо на случай начального смешанного стационарного состояния.

13. Приведите конкретные примеры механических и термических возмущений. Есть ли между ними резкое различие?

14. Решите кинетическую задачу в случае кратковременного действия зонда.

15. Запишите формулу Кубо для функций последействия и обобщенных восприимчивостей в различных формах. Сделайте то же в случае микроканонического ансамбля.

16. Проанализируйте свойства симметрии функций последействия.

17. Укажите прямой физический смысл функций последействия и обобщенных восприимчивостей.

18. Выразите функции последействия через восприимчивости.
19. Какова роль фазы и модуля обобщенных восприимчивостей?

20. Получите спектральное разложение для функций последействия.

21. Выразите реакцию на выключаемый зонд через функцию последействия и через обобщенную восприимчивость.

22. Получите функции последействия поляризационного типа и соответствующие восприимчивости для идеального газа электронов.

23. Вычислите функции последействия $\varphi_{xx}(t)$, $\varphi_{xp}(t)$, $\varphi_{pp}(t)$ и соответствующие восприимчивости для гармонического осциллятора.

24. Задача, аналогичная 23-й, с учетом затухания за счет связи с классическим осциллятором, совершающим затухающие колебания.

25. Рассмотрите функции последействия и соответствующие восприимчивости для частицы в пластине с непроницаемыми границами.

26. Где могут найти применение найденные в предыдущих четырех задачах кинетические характеристики?

27. Каким образом с помощью метода Кубо можно получить результаты нестационарной теории возмущений для вероятностей переходов?

28. Установите прямую связь обобщенных восприимчивостей с запаздывающими функциями Грина.

29. Назовите основные свойства обобщенных восприимчивостей.

30. Перечислите основные методы вычисления адмиттансов.

31. Укажите связь обобщенных восприимчивостей с кинетическими коэффициентами.

32. Проквантуйте вектор плотности электрического тока. Найдите выражение для среднего значения электрического тока. Сравните с другим способом получения этого результата на основе вектора плотности потока вероятности. Каким образом возникает дополнительный член в выражении для тока при наличии электромагнитного поля?

33. Исследуйте тензор электропроводности идеального газа частиц двух сортов (электронов и ионов) в постоянном однородном магнитном поле.

34. Обобщите формулу Кубо для адмиттансов на случай начального состояния системы с микроканоническим распределением.

35. Выведите формулу Кубо для обобщенных восприимчивостей в случае исходного неравновесного состояния системы, описываемого матрицей эффективных температур.

36. Охарактеризуйте достоинства и недостатки метода Кубо.

37. Какая роль отведена функциям Грина в методе Кубо?

Замечания

1. Знакомство с литературой по методу Кубо рекомендуем начать с работ из сборника [28], посвященных развитию и применению этого метода и аналогичных подходов других исследователей. Основы метода и другие вопросы кинетики изложены в статье Кубо из [103]. Там же имеются еще две работы (Мазура и Монтролла) этого направления.

В [19] методу Кубо отведена вся глава III. В [18] обсуждаются основные положения этого метода и свойства обобщенных восприимчивостей. Метод Кубо затронут в книгах [2, с. 462], [20, 23, 24, 79]. См. также [106]. Много полезных сведений содержит обзор [81].

2. По линии другого направления квантовой кинетики — квантовых кинетических уравнений — можно рекомендовать книги [62, 88, 89—91]. Различные вопросы кинетических явлений в металлах освещены в [26]. Методы описания процессов, далеких от состояния равновесия, рассматриваются в монографии [107].

Читайте ФЭС [29]: т. 2, Кинетические коэффициенты, Корреляция флуктуаций (о матрице эффективных температур); т. 3, Необратимые процессы.

§ 24. ФУНКЦИИ ГРИНА КВАНТОВОЙ КИНЕТИКИ

Сначала неприветлива, молчалива, непонятна земля, неприветлива и молчалива Природа.

Но иди, не унывая, вперед, дивные скрыты там вещи,

Клянусь, не сказать никакими словами, какая красота в этих дивных вещах.

Уолт Уитмен

Спектральное представление. Свойства симметрии. Роль полюсов запаздывающей функции. Связь с кинетическими величинами. Аналитическое продолжение в область комплексного времени. Термодинамические функции Грина. Аналогия с теорией распада. Методы расчета функций Грина. Общая роль ФГ в кинетических задачах.

1. Получите спектральные представления для запаздывающих, опережающих и причинных функций Грина.

2. Исследуйте свойства симметрии функции спектральной интенсивности и перенесите результаты на частотное представление функций Грина.

3. Найдите связь между спектральными интенсивностями $I_{AB}(\omega)$ и $I_{BA}(\omega)$, если усреднение производится по каноническому ансамблю. А что, если по микроканоническому?

4. Установите свойства симметрии причинной функции Грина в частотном представлении.

5. Сформулируйте свойства симметрии гриновских функций во временном представлении.

6. Вычислите функцию спектральной интенсивности для двухуровневой системы.

7. Считая, что функции Грина $G'_{AB}(\omega)$ имеют только простые полюсы, исследуйте закон релаксации системы.

8. Выразите величины $G_{AB}(t)$, $\varphi_{AB}(t)$, $D_{AB}(t)$ и $G_{AB}(\omega)$, $\varphi_{AB}(\omega)$, $D_{AB}(\omega)$, $\chi_{AB}(\omega)$, $I_{AB}(\omega)$ через одну из них, перебрав все.

9. Докажите, что из всех запаздывающих и опережающих функций Грина в мацубаровском представлении определена лишь некоммутаторная запаздывающая функция. В какой области температурной переменной?

10. Покажите, что корреляционные функции $F_{AB}(t) = \langle A(t) B \rangle$ допускают непосредственное аналитическое продолжение в полосу комплексного времени $0 < \text{Im } t < \hbar/T$.

11. Какова роль температурной симметрии функции спектральной интенсивности $I_{AB}(\omega)$?

12. Опишите аналитические свойства запаздывающих, опережающих и мацубаровских функций Грина.

13. Сформулируйте прямую и обратную задачи теории распада в связи с теоремой Фока — Крылова.

14. Проведите сравнение временного обрезания запаздывающих функций Грина, приводящего к аналитичности частотного представления этих функций, с полуограниченностью энергетического спектра систем, вызывающей аналитичность амплитуды вероятности нераспада.

15. Исследуйте закон распада (вероятность нераспада) для функции распределения по энергии вида $\rho(E) = A\Gamma(E)/[(E - E_0)^2 + \Gamma^2(E)]$, считая, что $\Gamma(E) \ll E_0$.

16. Получите закон распада в случае энергетического распределения $\rho(E) = 1/\Delta E$, $|E - E_0| < \Delta E/2$; $\rho(E) = 0$, $|E - E_0| > \Delta E/2$.

17. Для гармонического осциллятора в термостате вычислите функции Грина поляризационного G_{xx} и токового G_{px} типа.

18. Укажите конкретный физический смысл запаздывающих функций Грина во временном $G_{AB}(t)$ и частотном $G_{AB}(\omega)$ представлениях.

19. Изобразите схематическую цепочку взаимосвязей функций Грина разного типа в различных представлениях (временном, частотном, мацубаровском, дискретно-частотном).

20. Имеет ли функция спектральной интенсивности $I_{AB}(\omega)$ непосредственный физический смысл?

21. Приведите примеры функций Грина квантовой кинетики для конкретных систем.

22. Укажите методы конкретного расчета рассматриваемых в кинетике функций Грина. Какую роль играют при этом так называемые частичные функции Грина?

23. Назовите полевые методы, позволяющие найти функции Грина для данной многочастичной системы.

24. Какого типа функции Грина описывают нелинейные эффекты?

25. Что собой представляет флуктуационно-диссипационная теорема и каково ее значение в квантовой кинетике?

26. Рассмотрите особенности флуктуационно-диссипационной теоремы в приближении времени релаксации.

27. Дайте общую оценку роли метода функций Грина в квантовой кинетике.

Замечания

1. С основами и главными направлениями метода функций Грина квантовой теории неравновесных процессов можно познакомиться по книгам [19, 23].

Одной из первых монографий по методу ФГ в статистической физике и кинетике была книга [22], в которой введены частичные ФГ, развиты полевые методы их вычисления, установлена связь с кинетическими задачами, даны конкретные приложения в теории электропроводности, сверхпроводимости, ферромагнетизма, плазмы твердых тел.

Особый подход развит в [63], а в [88] это направление метода ФГ продолжено и конкретизировано (частичные функции Грина, вариационные производные, квантовые уравнения Больцмановского типа, явления переноса, приложения в теории металлов, плазмы, ферми-жидкости, распространения звука).

По методу частичных функций Грина можно рекомендовать монографию [21] (наиболее полное изложение различных аспектов в статистической физике и частично в кинетике). Дальнейшее развитие этого метода для кинетических задач дано в работе [108].

Особая графическая техника вычисления кинетических коэффициентов предложена в работе [109]. Разработке специальной диаграммной техники для расчета ФГ посвящена статья Монролла и Уорда из [28].

Широкое использование полевых методов (обобщенной теории возмущений, диаграмм Фейнмана, частичных функций Грина и т. п.) характерно для монографии [90]. Там же рассматриваются аналитические свойства ФГ и интегралы типа Коши (в приложении). См. также [24]. Аппарат функций Грина применяется в теории сильного магнетизма в книге [23]. О неравенствах для ФГ и их использовании, а также о классическом пределе для ФГ см. [110].

По различным аспектам полевых методов см. книги [78, 80, 111, 120].



ЧАСТЬ. ОТВЕТЫ. РЕШЕНИЯ. ПОЯСНЕНИЯ.

Читатель, который ищет только решения в узком смысле слова (вот, что спрашивалось, и вот, как это делается), многого не заметит и потеряет большую часть удовольствия.

П. Халмош

§ 25. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Как всегда, решение одной задачи порождает новые. И последней задачи никогда не будет.

А. Я. Смородинский

1. При небольшом изменении потенциальной энергии на δU по теории возмущений сдвиг основного уровня энергии равен $\delta E_0 = \langle \delta U \rangle_0$. Значит, по отношению к вписанной прямоугольной яме, в которой всегда есть хотя бы одно связанное состояние (см., например, [1, с. 90]), в яме несколько более глубокой и широкой основной уровень энергии будет залегать глубже, а в рассматриваемой яме (повторяем «углубления») — еще глубже.

Таким образом, не только доказывается существование связанного состояния, но и получается оценка энергии связи. Кстати, запишите ее в явном виде. Самостоятельно решите аналогичную задачу в двумерном случае, опираясь на известный результат для двумерной ямы круговой симметрии (см. [1, с. 197]). Сравните одно- и двумерный случаи с трехмерным, из следующей задачи.

2. Общий способ решения остается таким же, как и в предыдущей задаче. Основываемся на результате для сферической ямы (см. [1, с. 139]), где критические параметры — глубина U_0 и радиус R — определяются уравнением $2\sqrt{2mU_0}R = \pi\hbar$, выражающим условие появления первого связанного состояния. Следовательно, если рассматриваемая яма целиком помещается внутри (имеется в виду график потенциальной энергии) критической сферической ямы, то в ней еще не будет связанного состояния.

Обобщите результаты на случай $n \geq 4$ измерений.

Почему же в одно- и двумерном случаях при локализации частицы связанные состояния не «вытесняются», а в трехмер-

ном случае это происходит? Дайте хотя бы самое предварительное объяснение. Свяжите этот вопрос с соотношением неопределенностей. Какую роль при этом играет энергетическая плотность состояний непрерывной части спектра энергии?

Примечание. В первых двух задачах этого параграфа вы познакомились с простейшим «качественным» вариантом метода эталонных, стандартных моделей, когда сложный профиль потенциала (в общем случае — гамильтониана системы) заменяется более простым, правильно передающим основные черты истинного потенциала (предельные значения, поведение в окрестности особых точек и т. п.). В других задачах данного параграфа используются различные количественные методы расчета энергии связи и критических параметров. См. § 11, где также имеются задачи, посвященные проблеме появления связанных состояний.

3. $U_0 = \hbar^2/8ma^2$.

Интересно, что размерная оценка (выполните ее подробно) отличается от точного значения почти на порядок. Сравните, однако, с ответом из следующей задачи.

4. $U_0 = \hbar^2/ma^2$.

Используйте результаты для аналогичной одномерной модели из п. 11 прил. 1. Сформулируйте общее соотношение для уровней энергии нечетных состояний в симметричной одномерной потенциальной яме и s -состояний в соответствующей сферически-симметричной трехмерной яме.

Примеры критических параметров для других моделей сферически-симметричных полей вы можете найти в книге [10, с. 25].

Предложите свои модели потенциалов и попытайтесь найти для них критические параметры. Объясните, чем вызван интерес к критическим параметрам потенциальных полей.

Заметьте, что вопрос о критических параметрах возникает и для отдельной потенциальной ямы в одномерном случае, когда ставится задача о появлении первого возбужденного уровня энергии (а также последующих).

5. Волновая функция связанного стационарного состояния частицы в потенциальном поле $U(r)$ с полной энергией $E = -|E|$ в координатном представлении удовлетворяет интегральному уравнению

$$\Psi(r') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int dV U(r) \Psi(r) \frac{\exp(-\alpha|r-r'|)}{|r-r'|}; \quad \hbar\alpha = \sqrt{2m|E|} \quad (1)$$

(см. § 11). Для полости получаем

$$\Psi(r') = A \int dV \Psi(r) \frac{\exp(-\alpha|r-r'|)}{|r-r'|}; \quad A \equiv \frac{mU_0}{2\pi\hbar^2}. \quad (2)$$

Волновая функция основного состояния не имеет узлов, а для «только появившегося» уровня энергии к тому же слабо изменяется внутри полости, так что ее можно разложить под знаком интеграла в ряд вблизи начала координат, помещенного в центре

($\oint_{\Sigma} x_{1,2,3} dV/r = 0$) полости. Тогда, полагая в формуле (2) $r' = 0$, в первом приближении для критического значения A , при котором появляется ($E \rightarrow -0$) первое связанное состояние, имеем

$$A^{-1} = \int_{\Sigma} \frac{dV}{r} = \frac{1}{2} \oint \frac{rdS}{r}, \quad (3)$$

где второй интеграл берется по ограничивающей полость поверхности.

Формула (3) отвечает приближению постоянной волновой функции внутри полости, так что большой точности ожидать не следует (см. оценку в следующей задаче). Зато она очень простая и удобна для качественного исследования критических параметров.

Для изотропных полостей результат можно улучшить. Покажите, что в случае осей симметрии x_1, x_2, x_3 выше второго порядка («шаровой волчок») последующие члены разложения волновой функции дают

$$A^{-1} = \int_{\Sigma} \frac{dV}{r} - \frac{2\pi}{3} \int_{\Sigma} rdV / \int_{\Sigma} \frac{dV}{r} = \frac{1}{2} \oint \frac{rdS}{r} - \frac{\pi}{3} \oint rrdS / \oint \frac{rdS}{r}. \quad (4)$$

6. Для оценки точности выражений (3) и (4) сравним известное (см., например, [1, с. 139]) значение критической глубины для сферы радиуса R , которому отвечает $A^{-1} = 16R^2/\pi$, с рассчитанным по формуле первого приближения (3), где $A^{-1} = 2\pi R^2$. Относительная ошибка при вычислении величины A равна — 19%. Применение же формулы (4) дает критическое значение $A^{-1} = 5\pi R^2/3$ и доводит относительную ошибку до — 2,7%. См. также задачу 8, где используется иной метод решения интегрального уравнения, приводящий к более точной (и имеющей более широкую область применимости) формуле для критических параметров.

7. Уравнение (1) в n -мерном случае принимает вид

$$\Psi(r') = - \frac{m\chi^{n/2-1}}{2^{n/2-1}\pi^{n/2}\hbar^2} \int dV \frac{U(r)\Psi(r)}{|r-r'|^{n/2-1}} K_{n/2-1}(x|r-r'|),$$

где $K_n(x)$ — функция Макдональда. При $n \geq 3$ получаем подобно формуле (4)

$$A^{-1} = \int_{\Sigma} r^{2-n} dV - \frac{2\pi^{n/2}}{n\Gamma(n/2-1)} \int_{\Sigma} r^{4-n} dV / \int_{\Sigma} r^{2-n} dV;$$

$A \equiv \Gamma(n/2-1) mU_0/2\pi^{n/2}\hbar^2$; $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Найдите критическую глубину для гиперсферы, решая задачу точно. Оцените ошибку приближенной формулы в четырехмерном случае. Как изменяется критическая глубина гиперсферической потенциальной ямы с ростом n ?

8. Симметризируйте ядро одномерного интегрального уравнения Фредгольма второго рода (1). Сформулируйте вариационный

метод для собственных значений такого уравнения. Покажите, что выбор пробной функции $\Psi = \text{const}$ приводит к уравнению для критических параметров вида

$$2\pi\hbar^2 \int U(\mathbf{r}) dV = -m \iint dV dV' U(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}') |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}, \quad (5)$$

а для полостей (см. задачу 5) получаем

$$A^{-1} = \frac{1}{v} \iint dV dV' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} = -\frac{1}{2v} \oint \oint dS dS' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \quad (6)$$

где v — объем полости. Для сферической полости формула (6) дает $A^{-1} = 8\pi R^2/5$. Сравните с точным значением (см. задачу 6) и убедитесь, что относительная ошибка для A равна $+1,3\%$. К какой ошибке приводит использование формулы (5) для экспоненциального потенциала $U(\mathbf{r}) = -U_0 \exp(-ar)$?

9. Для полости в форме куба с ребром l формула (4) дает $Al^2 = 0,51$, а формула (6) приводит к $Al^2 = 0,53$. Таким образом, критическая глубина полости кубической формы должна быть близка к значению $U_0^I = 1,05\pi\hbar^2/ml^2$. Сравните этот результат с соответствующим значением для сферы $U_0^R = \pi^2\hbar^2/8mR^2$ при одинаковых объемах. Какая форма полости благоприятствует образованию связанного состояния? Попытайтесь исследовать этот вопрос в общем виде. Не забывайте о фиксации объема. Рассмотрите также влияние размытия границ полости в моделях сглаженного потенциала при постоянном эффективном объеме (как его ввести?). Проанализируйте также случай отклонения квадратичного закона дисперсии $p_1^2/2m_1 + p_2^2/2m_2 + p_3^2/2m_3$ от изотропного при $m_1 \cdot m_2 \cdot m_3 = \text{const}$, а также в случае увеличения эффективной массы частицы вдоль одной из осей в N раз (для сферической полости). Другие примеры законов дисперсии вы найдете в § 11.

Какую роль играет появление связанного состояния в потенциальной яме по отношению к рассеянию частиц? Как бы вы сформулировали общий принцип появления связанных состояний (качественно) и критерий возможности связанных состояний (количественно)?

Если вы заинтересуетесь более сложными случаями в проблеме связанных состояний (нелокальные потенциалы, влияние различных экранировок, в среднем равные нулю потенциальные поля, связь со структурой непрерывной части спектра для различных законов дисперсии и т. п.), то обратитесь к задачам из § 11.

Оцените критическую глубину гауссова потенциала $U(\mathbf{r}) = -U_0 \exp(-ar^2)$, используя формулу (5). Сравните с квазиклассической оценкой. Кстати, как использовать первое ВКБ-приближение в такой задаче?

11. В импульсном представлении уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид

$$(p^2/2m) \Psi(p) + \int dp' U_{pp'} \Psi(p') = E \Psi(p).$$

В нашем случае $U(x) = -u\delta(x)$, так что матричные элементы $U_{pp'} = -u/h$. Отсюда для связанных состояний

$$\Psi(p) = \frac{2mu}{h} \cdot \frac{\int \Psi(p') dp'}{p^2 + 2m|E|},$$

а интегрирование по импульсу дает энергию единственного связанного состояния $E_0 = -mu^2/2\hbar^2$. Соответствующая волновая функция $\Psi_0(p) = A/(p^2 + 2m|E_0|)$.

Нормировочную постоянную найдите сами. Сравните импульсное решение с координатным (см. задачу 11 из § 11). Вычислите $|\psi|$.

Обобщите результат на другие примеры зависимости энергии от импульса. Рассмотрите случай $T(p) = ap^4$.

В чем особенность аналогичного решения в области непрерывного спектра энергии?

Приведите другие примеры решения задачи о стационарных состояниях частицы (или системы частиц) в некотором поле в импульсном представлении.

12. Постарайтесь разобраться самостоятельно. Можете начать с конкретной модели. Пользуйтесь прил. 1. Обратите внимание на другие задачи этого и других параграфов, где фигурируют δ -модели потенциальной энергии. В чем особенность одномерного движения? Когда можно использовать δ -аппроксимацию потенциала в многомерном случае? Какую роль играет при этом вид закона дисперсии (зависимость энергии от импульса)?

13. Используйте п. 11 прил. 1.

14. Изобразите график потенциальной энергии. Всегда ли существует связанное состояние? Найдите критические условия. Вычислите уровень энергии и волновую функцию стационарного состояния. Постарайтесь применить разные способы решения.

Помните, что одномерные задачи подобного типа отвечают некоторой ветви трехмерного движения частицы в слоистой среде. Что смоделировано в данной задаче? См. п. 7 прил. 1.

Сопоставьте рассматриваемую задачу с последующими двумя из этого же параграфа. Подчеркните различия.

15. См. указания к предыдущей задаче.

16. Сравните с двумя предыдущими задачами. Какое новое явление прослеживается в данной задаче при некоторых значениях параметров?

17. Постройте график потенциала. Постарайтесь не только самостоятельно решить задачу, но и обобщить результаты. Опирайтесь на рекомендации прил. 2.

18. Добавление указанного потенциала приведет к сдвигу единственного уровня энергии в δ -яме на величину (в первом приближении теории возмущений) $\Delta E = \beta \langle |x|^l \rangle_0 = \beta \hbar^{2l} \Gamma(l+1)/(2m)^l$. Имеется в виду случай $\beta > 0$. Если же $\beta < 0$, то возникает новое явление — связанное состояние переходит в «квазисвязанное» (см. задачи из § 3. Квазиуровни). Что можно сказать в этом случае о других значениях полной энергии?

Нарисуйте графики потенциалов для наиболее характерных значений показателя степени l . Дайте качественное объяснение полученным результатам.

Предложите свои варианты данной задачи.

Опишите явления, которые вызовет переменное возмущение, если начальным было связанное состояние в δ -яме.

Поучителен следующий простой вариант задачи. Добавкой к потенциалу $U_0(x) = -u_0\delta(x)$ служит возмущение $U_1(x) = u_1\delta(x)$. Нужно найти энергию связи с помощью теории возмущений. Известно точное решение задачи: в случае $u_0 > u_1$ единственному связанному состоянию отвечает энергия $E = -m(u_0 - u_1)^2/2\hbar^2$ (А в случае $u_0 < u_1$?). По теории же возмущений в первом приближении

$$\Delta E = \langle U_1 \rangle_0 = u_1 |\psi_0(0)|^2 = mu_0u_1/\hbar^2,$$

что соответствует линейному по u_1 члену точного решения. Самое интересное — получение квадратичной поправки, в которой нужно учитывать непрерывную часть спектра энергии. Выполните самостоятельно все вычисления и покажите, что получаемый вклад в выражение для энергии полностью исчерпывает влияние возмущения. Основная трудность заключена в нормировке соответствующих волновых функций непрерывного спектра с учетом двукратного вырождения. Каков физический смысл выбранных вами решений в области непрерывного спектра энергии? Заметьте, что обычно в задачах инфинитного движения (рассеяние и т. п.) нормировка вообще не требуется, а в нашей задаче она является ключевым моментом. Кроме того, задача еще раз иллюстрирует эффективность стационарной теории возмущений даже в своей простейшей форме (ряд Рэлея — Шредингера).

19. Начните с графика потенциальной энергии. Отдельно решите задачу методом теории возмущений, отдельно — квазиклассическим методом. Затем сравните результаты. Не ограничивайтесь первыми приближениями.

Посмотрите задачу 20. Предложите свои варианты задачи с квадратичным потенциалом или подобными моделями. Где они могут реализоваться?

20. См. указания к предыдущей задаче. Не забывайте, что скачок потенциала не обязательно мал. Как влияет скачок потенциала на квазиклассические правила квантования?

22. Подсказка — можно учесть добавочный член, переопределив массу. Далее полностью решите задачу, а затем обратитесь к приводимым ниже указаниям.

Эффективная масса связана с массой частицы m соотношением $m_s^{-1} = m^{-1} + 2\alpha$. Если при этом $m_s > 0$, то общий характер движения не изменится. Все сводится к количественным изменениям при $m \rightarrow m_s$.

Рассмотрите какой-нибудь конкретный пример самостоятельно (воспользуйтесь моделями из прил. 1). Считая добавочный член в гамильтониане малым, выполните расчеты по теории возмущений и сравните полученные результаты с точными для выбранной вами модели, придавая параметрам численные значения.

Что можно сказать о характере движения, если $m_s < 0$? Проиллюстрируйте на конкретном примере. При каких условиях может встретиться случай $m_s < 0$? Какие особенности возникают при переходе от положительных малых m_s^{-1} к отрицательным?

Можно ли обобщить задачу на случай трехмерного движения частицы?

23. Путем фазового преобразования волновой функции стационарного состояния в координатном представлении избавиться от линейного (по импульсу) члена в гамильтониане. Каким будет в этом случае новый, эффективный гамильтониан? Зависит ли результат от знака γ ? Каков физический смысл γ ?

Запишите ответ для волновой функции стационарного состояния и для уровней энергии, выбрав конкретное потенциальное поле (например, из прил. 1) для невозмущенного движения.

Подберите модель, для которой решение задачи по теории возмущений будет достаточно простым, и сравните такое приближенное решение с точным, оценивая эффективность теории возмущений.

Сформулируйте окончательно физический смысл результата.

Обобщите задачу на случай трехмерного движения частицы.

Сравните с постановкой и результатами предыдущей задачи. Какой напрашивается вывод относительно применяемого в обеих задачах метода? Подберите примеры подобных добавок к гамильтониану, которые можно учесть точно.

28. Уровни энергии определяются корнями уравнения

$$\cos kL \operatorname{ch} kL = 1,$$

где $\hbar k = (E/\alpha)^{1/4}$, L — ширина ямы. Возможно ли $k = 0$? Получите приближенную формулу для корней уравнения и оцените ее точность. Как выглядит волновая функция? Нарисуйте ее график для основного состояния. Сравните со случаем квадратичного закона дисперсии.

Сопоставьте полученное правило квантования с квазиклассической формулой в виде $\oint p dx = h(n + \gamma)$. Какое значение γ отвечает рассматриваемому примеру?

Чему равна плотность состояний?

32. Дискретность энергии. Проникновение в классически недоступную область движения. Нулевые колебания и нулевая энергия. Возможность отсутствия связанных состояний (в достаточно слабой трехмерной потенциальной яме, например). Осцилляционная теорема. Постоянство всех средних значений в стационарном состоянии.

Это была подсказка. Остановитесь на каждом эффекте подробнее, сопровождая его примерами, рисунками. Дополните составленную вами картину деталями, заимствованными в учебниках. Назовите физические явления, связанные с отмеченными эффектами.

§ 26. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ

Задача, которую вы решаете, может быть скромной, но если вы решаете ее собственными силами, то вы сможете испытать ведущее к открытию напряжение ума и насладиться радостью победы.

Д. Пойа

1. Используйте функцию Грина из задачи 18. О прямоугольном потенциале см. в п. 6 прил. 1. Обратите внимание на терминологию, единую для всех задач о прохождении частиц сквозь неоднородную среду, а также на специфику одномерного движения. Помните, что рассматриваемые одномерные модели относятся к одной из ветвей трехмерного движения, например в случае слоистой среды. В чем особенность одномерного рассеяния по сравнению с трехмерным? Сравните меры рассеяния в обоих случаях.

2. См. замечания к предыдущей задаче. Если вы не знакомы с методом комплексного потенциала, то обратитесь к литературе, рекомендуемой в замечаниях к параграфу.

Вспомните, как вводятся коэффициенты отражения и прозрачности, и введите соответствующий коэффициент поглощения частиц. Какое соотношение существует между этими тремя коэффициентами?

Используйте решение предыдущей задачи. Проследите, как изменяется отражение частиц с увеличением мнимой части потенциала. Изобразите графики зависимости трех упомянутых коэффициентов от величины мнимой части потенциала, а также от энергии. Что будет при отсутствии вещественной части потенциала?

Перейдите от δ -потенциала к прямоугольному. Дайте физическую трактовку этим моделям. Обобщите задачу на случай

различных прослоек, моделируя объемное поглощение и поверхностное.

$$3. T_0 = \sin^2 [\pi/(l+2)].$$

Рассмотрите наиболее интересные частные случаи ($l = 1, 2, 4$). Нарисуйте графики соответствующих барьеров-рассеивателей. Обратите внимание на то обстоятельство, что прозрачность при критической энергии не зависит от величины β . Для каких l можно решить задачу о прозрачности симметричного степенного барьера точно при всех энергиях? Каков смысл случая $l = 4$? Сравните с классической картиной движения частицы при критической энергии (чем оправдано такое название?) и при других значениях энергии. Приведите конкретные физические примеры. См. четыре последующие задачи.

$$4. T_0 = 4(\beta_1\beta_2)^{\frac{1}{l+2}} \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2 \left/ \left(\beta_1^{\frac{1}{l+2}} + \beta_2^{\frac{1}{l+2}} \right)^2 \right.$$

Сравните со случаем симметричного степенного барьера. Запишите выражение для коэффициента прозрачности при слабой и сильной несимметрии. Чтобы проникнуться значением требования сильной асимметрии, уясните, при каком отношении β_1/β_2 прозрачность уменьшается вдвое по сравнению с симметричным случаем для линейного ($l = 1$) и для квадратичного ($l = 2$) барьеров. Какой можно сделать вывод?

В этой задаче (как и в предыдущей) рассматривалось критическое значение энергии, так как только при такой энергии возможно точное решение задачи о прозрачности степенного барьера для всех значений показателя степени. Наметьте пути приближенного решения для окрестности критической энергии (критического диапазона). Оцените величину этого диапазона. Каким образом можно «уловить» отражение при больших энергиях (предложите методы расчета)? О случае малых энергий (глубокое туннелирование) см. в задаче 5.

$$5. T = \exp \left[-\frac{2}{l_1} |\lambda_1|^{\frac{l_1+2}{2l_1}} B(3/2, 1/l_1) - \frac{2}{l_2} |\lambda_2|^{\frac{l_2+2}{2l_2}} B(3/2, 1/l_2) \right];$$

$\lambda = E(2m/\hbar^2)^{\frac{1}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}$; $B(x, y)$ — бета-функция.

Используйте подбарьерную квазиклассику. Запишите результат для случая несимметричного одностепенного барьера, а также для симметричного. При каких значениях энергии справедливы эти формулы? Для оценки точности рассмотрите пример квадратичного барьера (см. п. 4 прил. 1) и найдите относительную ошибку при $|\lambda| = 1$. Не правда ли, высокая точность? А ведь это при небольших (по абсолютной величине) энергиях, лежащих на границе критического диапазона! Однако выбрана простая модель потенциала. Попытайтесь такую же оценку получить для линейного симметричного барьера.

Ошибка будет несколько большей (во сколько раз?), но все же подтверждается возможность использования простой подбарьерной квазиклассической формулы для коэффициента прозрачности вплоть до границы критического диапазона (для степенных барьеров) энергии. См. также замечания к предыдущей задаче.

6. Случай симметричного барьера см. в п. 18 прил. 1. Задача рассчитана на самостоятельное решение.

7. Случай симметричного барьера см. в п. 4 прил. 1.

8. Воспользуйтесь методом функций Грина (см. задачу 27). Обобщите результаты на случай рассеяния частиц δ -барьером «на фоне» некоторого барьера, для которого решение известно. См. следующую задачу.

9. См. замечания к предыдущей задаче. Функцию Грина найдете в задаче 26.

10. Сопоставьте прозрачность при критической энергии с результатом задачи 6 для чистого излома. Выполните то же при больших энергиях.

12. Опирайтесь на конкретные модели из прил. 1.

В первом случае (барьер на фоне свободного движения) выделите условие слабости барьера (большая прозрачность почти для всех энергий) и условие сильного действия барьера. Именно барьеры последнего типа представляют наибольший интерес. Для них-то и введите области энергий, учитывая наличие критического значения. Используйте опыт решения предыдущих задач на конкретных моделях потенциала (особенно степенных). Сравните квантовую картину с классической. В каких случаях прозрачность определяется всем профилем барьера? Когда существенна форма барьера вблизи его вершины? В чем особенность рассеяния частиц в случае изломной вершины потенциала? Сравните со вторым предложенным типом барьеров.

14. Используйте интегральное уравнение для задачи рассеяния частиц. Покажите, что амплитуда рассеяния f для медленных частиц с $kr_0 \ll 1$ (r_0 характеризует область действия потенциала) связана с ее предельным значением для нулевой энергии f_0 (длиной рассеяния) соотношением $f = f_0/(1 - ikf_0)$; $\hbar k = \sqrt{2mE}$. При этом предполагается, что $|f_0| \gg r_0$. Таким образом, рассеяние оказывается изотропным, а сечение $\sigma = 2\pi\hbar^2/m(E + \epsilon)$ (формула Вигнера) значительно превосходит классическое ($\sigma \gg r_0^2$). Величина $\epsilon = \hbar^2/2mf_0^2$ имеет смысл энергии связи, если в яме только появилось первое связанное состояние. Покажите это непосредственно с помощью интегрального уравнения для связанных состояний, ограничиваясь основным состоянием. При этом $f_0 < 0$. Резонансное рассеяние происходит на реальном уровне энергии. Если же длина рассеяния положительна (и велика), то связанного состояния еще нет, но оно может появиться при небольшой деформации потенциальной ямы (углублении или рас-

ширении). Говорят, что в этом случае резонансное рассеяние происходит на виртуальном уровне энергии. Полюс аналитического продолжения амплитуды рассеяния находится в точке $k = -i/f_0$ в соответствии с общими свойствами этой величины. Виртуальному состоянию соответствует $f_0 > 0$.

Полученные результаты справедливы для любой формы потенциала (обычно рассматривают сферически-симметричные потенциалы). Нами рассмотрено рассеяние только на основном уровне энергии.

Примечание. Виртуальное — одна из самых многоликих концепций квантовой теории. Поучительно начать с классической механики, где вводится понятие виртуальных перемещений, а также виртуальных траекторий (в связи с принципом стационарности действия). Здесь нет возможности подробно останавливаться на различных аспектах виртуального, однако отметим значения соответствующих слов в разных языках. От немецкого *virtual* (воображаемый, мнимый, возможный) и французского *virtuel* (скрытый, потенциальный, возможный) через латинское *virtualis* (способный, который должен или может проявиться, возможный) приходим к английскому *virtual* (фактический, эффективный, действительный, возможный). Естественно, что в русском языке виртуальный означает и возможный, и кинематически допустимый, и воображаемый, и промежуточный, и как бы существующий, и условный, и в становлении, и реальный, но в виде возможности, а не действительности и т. д. Это и перемещения, и траектории, и уровни энергии, и процессы, и частицы, и структуры, и переходы, и состояния. Особенно широко используется эта концепция в квантовой теории поля, откуда широко проникает и в квантовую механику с квантовой статистикой. См. ФЭС [29], а также учебники по квантовой механике и квантовой электродинамике.

15. Возьмите за основу результат задачи 21. Обобщите выводы трехмерной теории рассеяния. Выделите особенности трехмерного и других пространств нечетного числа измерений.

16. $T = E/(E + \epsilon)$, где ϵ — энергия связи. Рассмотрите рассеяние медленных частиц на конкретных примерах потенциалов (прямоугольная яма — см. п. 5 прил. 1, яма из п. 11 прил. 1, две δ -ямы), в которых появляются возбужденные уровни энергии. Какова при этом прозрачность барьеров? Сравните рассеяние на реальных и виртуальных уровнях энергии с соответствующим трехмерным свойством рассеяния. Отметьте другие случаи резонансного рассеяния (например, прямоугольным барьером). В чем причина этих явлений? Как они используются на практике? Особый интерес представляют случаи резонансного рассеяния системой ям и барьеров, моделирующей средуслонистой структуры. Эти явления рассматриваются в § 3, посвященном концепции квазиуровней.

18. Имеется в виду $\delta \rightarrow +0$. Удобно использовать импульсное представление, в котором гамильтониан диагонален, так что искомые матричные элементы резольвенты

$$R_{\pm}(x, x'; E) \equiv \langle x | (\hat{p}^2/2m - E \mp i\delta)^{-1} | x' \rangle = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{h} e^{ip(x-x')/\hbar} / (p^2/2m - E \mp i\delta)$$

могут быть вычислены замыканием контура интегрирования в соответствующей полуплоскости комплексного p . К тому же, в силу четной зависимости кинетической энергии от импульса, $\Phi\Gamma$ зависит только от $|x - x'|$. Используя теорему о вычетах, получаем

$$R_{\pm}(x, x'; E) = \pm i (m/\hbar^2 k) \exp(\pm ik|x - x'|); \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

Если известна величина $R_+(x, x')$, то как найти $R_-(x, x')$? Какую роль играют полученные функции Грина в одномерной задаче рассеяния частиц? Проиллюстрируйте на примерах с использованием интегрального уравнения.

Убедитесь, что связь энергетической плотности состояний с $\Phi\Gamma$

$$\nu(E) = \pm \pi^{-1} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} \hat{R}_{\pm}(E)$$

в рассматриваемом одномерном случае дает правильное значение этой плотности (без учета внутренних степеней свободы частицы).

19. Задача оказывается несколько более сложной, чем предыдущая. Не спешите повторять ход одномерного решения. Найдите свой способ вычислений. Ответ:

$$R_{\pm}(\rho, \rho'; E) = \pm \frac{im}{2\hbar^2} H_0^{(1, 2)}(k|\rho - \rho'|); \quad \hbar k = \sqrt{2mE},$$

где $H_0^{(1, 2)}$ — соответственно, первая и вторая функции Ганкеля. Найдите энергетическую плотность состояний частицы для двумерного случая.

20. Можно использовать тот же прием, что и в задаче 18 для одномерного случая. Ответ:

$$R_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = (m/2\pi\hbar^2) \exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|; \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

Как решается задача о трехмерном рассеянии частиц с помощью $\Phi\Gamma$? Как выглядят матричные элементы резольвенты в импульсном представлении? Найдите трехмерные $\Phi\Gamma$ для рассеяния частиц с анизотропным квадратичным законом дисперсии. Какая связь существует между рассматриваемыми функциями Грина и теми, что фигурируют в задаче о связанных состояниях?

21.

$$R_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \pm \frac{im}{2\hbar^2} \left(\frac{k}{2\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right)^{\frac{n}{2}-1} H_{\frac{n}{2}-1}^{(1, 2)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|);$$

$$\hbar k = \sqrt{2mE}.$$

22. Если массы частиц одинаковы, то задачу можно свести к предыдущей (кстати, при этом вы убеждаетесь, что многомерные случаи могут иметь простой смысл для нескольких частиц, движущихся в пространстве малой размерности). А как быть, если массы частиц различны?

23. См. соответствующие задачи из § 11.

24. Имеется в виду, что δ -потенциал служит фоном, а основным рассеивателем, для которого строится искомая функция Грина, будет некоторый другой потенциал (например, еще один δ -потенциал). Ответ:

$$R_+(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} \left[e^{ik|x-x'|} - \frac{imu}{\hbar^2 k + imu} e^{ik(|x|+|x'|)} \right]; \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

Сравните предложенный в условии задачи способ с методом уравнения типа Дайсона для резольвенты (интегральное уравнение теории возмущений см. в § 10), где ΦG для свободного движения считается известной (задача 18), а δ -потенциал служит возмущением. Не правда ли, ответ в последнем случае получается гораздо быстрее и изящнее?

25. Ответ: например, при $x < 0$ и $x' < 0$

$$R_+(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} \left[e^{ik|x-x'|} + \frac{k-q}{k+q} e^{-ik(x+x')} \right];$$

$$R_+(0, 0; E) = 2mi/\hbar^2 (k+q); \quad \hbar k = \sqrt{2mE}; \quad \hbar q = \sqrt{2m(E-U_0)}.$$

Воспользуйтесь методом задачи 23. Укажите применение найденной ФГ. Каким еще методом можно было бы получить эту функцию?

26. См. пояснения к предыдущей задаче. Ответ: наиболее интересное для приложений значение функции Грина

$$R_+(0, 0; E) = (m^2/2\hbar^4\beta)^{1/3} \omega(-\lambda)/\omega'(-\lambda);$$

$$\lambda = E(2m/\hbar^2\beta^2)^{1/3}; \quad \omega = u + iv;$$

u и v — функции Эйри по Фоку. Применение — в задаче 9.

27. Используйте функции параболического цилиндра. Решайте самостоятельно. См. пояснения к другим задачам этого цикла (23—26) и применение в задаче 8.

28. Найдите эффективную потенциальную энергию. Изобразите ее график. Рассмотрите предельные случаи. По ним восстановите общую картину. Не пытайтесь получить точное решение, а пользуйтесь приближенными методами. Проявите самостоятельность. См. также задачу 26 из § 1.

29. Ответ:

$$\begin{aligned} J &= 2\alpha \operatorname{Re}[\Psi^* \hat{p} \hat{p}^2 \Psi + (\hat{p} \Psi)^* \hat{p}^2 \Psi] = \\ &= i\alpha \hbar^3 (\Psi^* \nabla \Delta \Psi - \nabla \Psi^* \Delta \Psi + \Delta \Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Delta \Psi^*). \end{aligned}$$

Вспомните вначале, каким образом обычно выводится выражение для вектора плотности потока вероятности для одной частицы в случае квадратичной зависимости кинетической энергии от импульса. Один из способов — квантование соответствующей классической величины путем симметризации простейшего вида для некоммутирующих операторов скорости и функции от координаты:

$$\hat{j}(r) = [\hat{v} \delta(r - \hat{r}) + \delta(r - \hat{r}) \hat{v}] / 2.$$

Отсюда получается среднее значение $\langle j \rangle = \text{Re}(\Psi^* \hat{v} \Psi)$, совпадающее с вектором плотности потока вероятности (кстати, покажите, что это так). Такая простая симметризация получается при квадратичном законе дисперсии, когда оператор скорости пропорционален оператору импульса. А как симметризовать вектор плотности потока числа частиц, если в соответствии с заданным законом дисперсии скорость равна $\hat{v} = 4\alpha p^2 \hat{p}$? Ответ дает другой путь решения — уравнение непрерывности. На основе волнового уравнения Шредингера, записанного в координатном представлении, получаем уравнение непрерывности в виде

$$\partial \rho / \partial t + i\hbar^{-1} (\Psi^* \hat{T} \Psi - \Psi \hat{T} \Psi^*) = 0,$$

где ρ — плотность вероятности координат частиц, а T — кинетическая энергия. Преобразование выражения в скобках с выделением дивергенции и дает для рассматриваемого закона дисперсии указанное в ответе выражение. Что получится в одномерном случае?

30. Прежде чем переходить к решению в заданном конкретном поле, пересмотрите основные положения общей теории рассеяния, учитывая результат предыдущей задачи. Затем можете приступить к решению уравнения Шредингера, помня, что в координатном представлении оно станет уже уравнением четвертого порядка. Для δ -потенциала нужно заново сформулировать условие непрерывности волновой функции и ее производных. Какие производные будут иметь скачок? Можно использовать также и метод функций Грина. Можно ли перенести задачу на трехмерный случай с δ -аппроксимацией короткодействующего потенциала?

31. Используйте ответ решения задач 29, 30. Рассмотрите подробно предельный переход к бесконечно большому скачку потенциала и сформулируйте граничные условия для случая четвертого закона дисперсии при непроницаемой стенке. Этот результат пригодится при решении задачи 28 в § 1.

33. Обратите внимание на особенность прозрачности при критической энергии в случае 33, б. Сравните с плавными потенциалами. Почитайте прил. 2.

34. На первый взгляд, непрерывная часть энергетического спектра (континуум) аморфна, бесструктурна. Обычно указывают область значений энергии. Например, непрерывному спектру энергии отвечают значения $E > 0$. Однако существуют меры структуры и для сплошного спектра. Прежде всего — плотность состояний (подробнее о ней см. в § 18, 20), которая очень чувствительна к размерности пространства и виду закона дисперсии. Кроме того, имеется тесная связь непрерывной части энергетического спектра с дискретными значениями энергии, проявляющаяся на стыке этих двух диапазонов энергии в резонансном характере рассеяния на реальных и виртуальных

уровнях, в концепции квазиуровней (см. § 3). Структура непрерывного спектра у его «основания» определяет возможность образования связанных состояний (или невозможность) и отсутствие (или наличие) бозе-конденсации (см. § 11, 18). Эти замечания должны послужить толчком к более основательному исследованию поставленного вопроса.

35. Руководствуйтесь результатами стационарной теории рассеяния. Подберите соответствующие параметры барьера и пакета. Представьте себе аналогичную картину при набегании морской волны на волнорез. Пользуйтесь координатным и импульсным описанием. Дайте прямую физическую интерпретацию наблюдаемым явлениям и всей задаче в целом. Как повлияет сглаживание барьера на рассеяние? Что будет наблюдаться, если барьеров будет несколько?

36. Вспомните основные положения теории и конкретные задачи, в которых вы непосредственно получали коэффициент прозрачности в режиме туннелирования (глубокого и мелкого). Перечислите по памяти явления, о которых идет речь. Сгруппируйте их (ядерная физика, электроника, сверхпроводимость и т. д.).

§ 27. КВАЗИУРОВНИ (распад и резонанс)

Для того чтобы достичь более глубокого понимания, надо самому решать задачи в данной области физики. Пассивное изучение дает только слабое представление о тех красотах, которые открываются при самостоятельной работе.

А. Б. Мигдал

1. Начните с рисунка. Уясните цель. Не спешите записывать уравнения. Обдумайте ход решения. Решение стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении имеет вид

$$\Psi(x) = \begin{cases} Cv(-\lambda - z), & x < 0; \\ A\omega(-\lambda - z) + B\omega^*(-\lambda - z), & x > 0; \end{cases}$$

$$z = x(2mF/\hbar^2)^{1/3}; \quad \lambda = E(2m/\hbar^2 F^2)^{1/3}.$$

Сшивая в начале координат (точке «действия» δ -потенциала) позволяет выразить коэффициенты при бегущих волнах через множитель в стоячей убывающей волне:

$$\begin{cases} iA = C[1 + 2\alpha_0 \Delta x v(-\lambda) \omega^*(-\lambda)], \\ -iB = C[1 + 2\alpha_0 \Delta x v(-\lambda) \omega(-\lambda)]; \\ \Delta x = (\hbar^2/2mF)^{1/3}; \quad \alpha_0 = tu/\hbar^2. \end{cases}$$

Напомним, что $u(z)$ и $v(z)$ — функции Эйри (по Фоку), а $w(z) = u(z) + iv(z)$. В рамках чисто стационарного подхода есть два

пути решения задачи. Если вас интересуют только квазиуровни, то условие отсутствия приходящих в ловушку волн $B=0$ дает уравнение $v(-\lambda)w(-\lambda) = -1/2\kappa_0\Delta x$, комплексные корни которого при $\kappa_0\Delta x \gg 1$

$$\lambda = \lambda^0 + [2\kappa_0\Delta x u(-\lambda^0)v'(-\lambda^0)]^{-1} + \\ + iv'(-\lambda^0)u^{-1}(-\lambda^0)[2\kappa_0\Delta x u(-\lambda^0)v'(-\lambda^0)]^{-2}$$

и есть квазиуровни (λ^0 — корни уравнения $v(-\lambda) = 0$, отвечающие полной изоляции ловушки при бесконечно большой интенсивности барьера $\kappa_0 \rightarrow \infty$, т. е. уровни энергии в линейной потенциальной яме с непроницаемой границей). Воспользовавшись тем, что для функций Эйри при всех интересующих нас значениях аргумента с большой точностью (убедитесь сами) выполняются соотношения $u(-\lambda^0)v'(-\lambda^0) = -1$ и $v'(-\lambda^0)/u(-\lambda^0) = -\sqrt{\lambda^0}$, запишем ответ в обычных единицах энергии:

$$E_n = E_n^0 - F/2\kappa_0 - ikF/4\kappa_0^2; \quad \hbar k = \sqrt{2mE_n^0}.$$

Вещественная часть этого комплексного выражения дает резонансные значения энергии (почему сдвиг этих значений по сравнению с уровнями энергии в изолированной яме отрицателен?), при которых амплитуда C волновой функции в ловушке значительно превосходит по абсолютной величине амплитуду B (или A) за пределами ловушки. Сдвиг одинаков для всех квазиуровней. Наибольший интерес представляет, конечно, мнимая часть энергии квазиуровней, которая в стационарной задаче дает ширину резонанса, а в квазистационарных состояниях определяет время жизни соответствующего пакета стационарных состояний (время распада) и связанную с ним ширину распределения по энергии в таком пакете (среднее значение энергии пакета дает вещественная часть квазиуровня). Подчеркнем, что полученный ответ относится к случаю достаточно интенсивного барьера ($\kappa_0\Delta x \gg 1$), способного создать ловушку для частиц (а что будет в противном случае?). Кроме того, число ярко выраженных квазиуровней ограничено, так как при достаточно большой энергии барьер станет настолько прозрачным, что ловушка не будет удерживать частицу. Постарайтесь оценить число квазиуровней при заданных параметрах ловушки. Заметьте, что они выражены через точные значения энергии E_n^0 изолированной ямы. А каковы они в явном виде? Получите поправки к найденным значениям сдвига и уширения. Это позволит вам лучше почувствовать малые параметры задачи.

Другой путь решения задачи. Сравним амплитуды волновой функции в ловушке и вне ее:

$$I = |C/B|^2 = |1 + 2\kappa_0\Delta x v(-\lambda)w(-\lambda)|^{-2}.$$

Покажите, что для значений энергии в интервале между квазиуровнями $I \sim (k/\kappa_0)^2$, а для значений, равных вещественной части

квазиуровней, I достигает максимума порядка $(\chi_0/k)^2$. Рассмотрите поведение этой функции вблизи максимума и оцените ширину резонанса по убыванию значения I вдвое по сравнению со значением в максимуме. Еще раз обратите внимание, насколько острый резонансный пик получается для не очень больших энергий. Попробуйте изобразить графически зависимость I от энергии.

Решите эту же задачу методом функций Грина (задача 4). Сравните результат с аналогичным в задаче 5. Сопоставьте картину движения в рассмотренной односторонней ловушке с подобными в случае других моделей одно- и двусторонних ловушек в последующих задачах. Освоив стационарное решение, перейдите к вопросам кинетики, о которых упоминалось в пояснениях к этой задаче. См. прил. 2.

2. Используйте пояснения и начальный этап решения предыдущей задачи, изменив знак перед соответствующей характеристикой потенциала в основных уравнениях. Однако обратите внимание и на существенное отличие задачи с δ -ямой: если в предыдущей задаче δ -потенциал являлся изолятором, а линейный — рабочим полем, то теперь их роли поменялись. Сколько квазиуровней возникает? Пользуйтесь асимптотиками для функций Эйри. Какой характер имеет движение за пределами квазиуровня (по энергетической шкале)? Примените метод функций Грина. Сравните с задачей 6.

3. Для сдвига и уширения получаем в первом ВКБ-приближении следующие формулы:

$$\Delta E = -\hbar\omega k/2\pi\chi_0; \quad \Gamma = \hbar\omega (k/\chi_0)^2/4\pi; \quad \chi_0 = m\hbar/\hbar^2,$$

где ω — классическая частота колебаний частицы в изолированной яме при соответствующих дискретных значениях энергии E_n^0 , а $\hbar k = \sqrt{2mE_n^0}$. Зависит ли результат от поведения потенциала вне ловушки? Попытайтесь уточнить полученные выражения, используя поправки второго ВКБ-приближения. Учтите возможность излома потенциала в точке δ -барьера (сравните с результатами подобной задачи 5). Какие величины войдут в формулы для сдвига и уширения вместо классической частоты ω и волнового вектора k ? Объясните смысл знаков сдвига и уширения (Γ входит в мнимую часть квазиуровня со знаком минус). Дайте полуклассическую трактовку ширины Γ (соударения с допускающим туннелирование барьером).

4. См. общий метод функций Грина (§ 11).

5. Пользуйтесь пояснениями к задаче 1.

6. См. пояснения к задаче 2.

7. Возьмите за основу пояснение к задаче 1. Что произойдет при достаточно глубокой потенциальной яме?

8. Пусть начало координат находится в граничной точке, т. е. потенциальная энергия равна

$$U(x) = u\delta(x-L), \quad x > 0; \quad U(x) = \infty, \quad x < 0.$$

Стационарная часть решения аналогична приведенной в задаче 1, так что следуйте данным там пояснениям (задача 1 более сложная в стационарной постановке, однако в нашей задаче необходимо сделать новый шаг — рассмотреть квазистационарные состояния). Кроме того, такая задача подробно рассмотрена в задачнике Флюгге [17, т. 1, с. 70]. Удобно начинать с формального вычисления квазиуровней, как комплексных значений энергии в стационарном решении уравнения Шредингера с искусственным для него условием «излучения». Это служит ориентировкой при переходе к исследованию резонансного поведения отношения амплитуд волновой функции в ловушке и вне ее. В свою очередь, это отношение, помимо наглядной демонстрации роли квазиуровней в чисто стационарных состояниях, непосредственно определяет распределение по энергии в соответствующем квазистационарном состоянии и закон его распада. Именно эта — нестационарная — часть задачи и представляет для нас интерес.

Итак, будем считать, что квазиуровни найдены. В шкале волнового вектора (в данной задаче везде удобно пользоваться именно этой шкалой) получаем

$$k_n L = k_n^0 L - k_n^0 / 2x_0 - i (k_n^0 / x_0)^2 / 4;$$

$$k_n^0 = \pi n / L; \quad n = 1, 2, \dots; \quad x_0 = m\hbar^2,$$

а отношение квадратов модулей амплитуд волновой функции в ловушке и вне ее при $k \ll x_0$ сводится к выражению (численный множитель не играет роли)

$$I = \gamma [\gamma^2 + \sin^2(k - k_n) L]; \quad \gamma = (k_n^0 / x_0)^2 / 4.$$

Простоты ради это выражение записано для значений k вблизи квазиуровней (вы же должны иметь полный ответ). Переходим к основной части задачи.

Предположим, что в начальный момент времени частица находилась в ловушке в некотором стационарном состоянии, соответствующем полной изоляции, т. е. совершенно непроницаемому барьеру ($x_0 \rightarrow \infty$). Нужно проследить за ее дальнейшей судьбой. С точки зрения истинных стационарных состояний непрерывного спектра начальное состояние является их пакетом. Вот его-то структуру и требуется определить. В данном случае закон сохранения энергии проявляется в том, что остается постоянным распределение по энергии.

Итак, начальную волновую функцию

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{2/L} \sin k_n^0 L, & 0 < x < L; \\ 0, & x > L \end{cases}$$

нужно разложить по полному набору волновых функций

$$\psi_k(x) = \begin{cases} C \sin kx, & 0 < x < L; \\ A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x > L; \quad nk = \sqrt{2mE}. \end{cases}$$

Напоминаем, что уровни энергии не вырождены, отношение коэффициентов A , B и C вы должны были определить при решении задачи на первом ее этапе. Требуемая в данном случае нормировка, которая должна установить каждую из этих величин, может быть проведена и без специальных вычислений [1, с. 86]. Численный множитель роли не играет, так как всегда можно выполнить нормировку окончательного выражения, например самого распределения по энергии. Плотность вероятности энергии (или волнового вектора)

$$\rho(k) = |\langle \psi_k, \Psi \rangle|^2 = \left| \int_0^L dx \psi_k^*(x) \Psi(x) \right|^2$$

будет иметь следующий вид:

$$\rho(k) = I(k) \left(\frac{\sin kL}{k^2 - k_n^2} \right)^2 f(k),$$

где I — та самая функция энергии, которая определяется квадратом модуля отношения амплитуд волновой функции в ловушке и за ее пределами и для которой был записан ответ вблизи квазиуровней. Функция f плавно зависит от энергии и ее явный вид легко восстановить. Таким образом, распределение ρ ведет себя вблизи квазиуровней так же, как и функция I , и имеет те же особенности (полюсы). Дополнительные множители определяют далекие от квазиуровней (по сравнению с шириной) «крылья» распределения и не имеют особенностей. Во всех точках $k = k_l^0 \neq k_n^0$ плотность распределения обращается в ноль. Нарисуйте полный график зависимости плотности распределения от k . Убедитесь, что синусоидальный множитель «гасит» резонансный характер функции I для всех квазиуровней, кроме выделенного n -го.

На третьем этапе решения задачи нас интересует эволюция исходного состояния — кинетика распада. Зависимость волновой функции от времени

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dk \Psi(k) \psi_k(x) \exp(-itE/\hbar)$$

определяется амплитудой распределения по энергии $\Psi(k) = \int_0^\infty dx \psi_k^*(x) \Psi(x)$. При расчете распределения мы сразу же перешли к квадрату модуля этой величины. Найдите $\Psi(k)$. Убедитесь, что эта функция имеет простой полюс, который и будет определять поведение волновой функции $\Psi(x, t)$ на основном интервале времени внутри ловушки. Вне ловушки через некоторое время (оцените его) сформируется пакет убегающих плоских волн, с центром, движущимся равномерно по классическому закону и постепенно в соответствии с общими свойствами кван-

товой диффузии расплывающимся. Ваша задача выполнить все расчеты до конца и найти все те характерные временные величины, о которых говорилось.

Таким образом, приходим к следующей картине распада квазистационарного состояния в односторонней ловушке. Исходный пространственно локализованный в ловушке пакет рассасывается по закону распада (экспоненциально, со временем жизни $\hbar/2\Gamma$), определяемому полюсом функции распределения ρ (или I), т. е. шириной квазиуровня Γ . Вне ловушки с некоторой задержкой, определяемой все тем же временем распада, появляется обычная группа волн — пакет — с классическим перемещением центра (максимума) и квантовой диффузией (расплыванием), которая совершается значительно медленнее, чем задержка (время расплывания порядка $m/\hbar\gamma^2 \gg \hbar/\Gamma = m/\hbar k\gamma$). Сам же этот пакет имеет ширину, соответствующую разбросу по волновому вектору $\Delta k \sim \gamma/L$, т. е. пространственно распределенному в интервале $\Delta x \sim 1/\Delta k \sim L/\gamma$, значительно превосходящем размеры ловушки L . Другие детали опускаем. Изобразите рисунки на разных стадиях распада для плотности вероятности координат, помня о сохранении площади под этим графиком.

Оцените вклад в $\Psi(x, t)$ от приходящих волн. Он не существен. Однако в задаче захвата пакета ловушкой именно он будет определять процесс приближения частицы к ловушке. Его роль можно проиллюстрировать и на примере нашей задачи, если рассмотреть времена, предшествующие начальному (тем самым будет дана полная картина всем возможным распадно-захватным процессам для квазистационарных состояний в односторонней ловушке).

10. Воспользуйтесь методом функций Грина (см. задачу 24 в § 2), считая фоном для рассеяния одним из барьеров потенциал, создаваемый другим, или примените матрицу связи локальных решений для δ -барьера и подействуйте ею дважды.

Квазистационарные задачи для двусторонних ловушек имеют много общего с аналогичными для односторонних, так что используйте пояснения к задачам 1 и 8. Можно сразу перейти к получению прозрачности цепочки из двух барьеров, однако лучше вначале получить значения энергии, при которых наступает полная прозрачность. Для этого нужно приравнять нулю амплитуду отраженной волны (предварительно выраженную через амплитуду прошедшей волны), что и даст уравнение для резонансных значений энергии. Правда, в данной конкретной задаче выражение для коэффициента прозрачности

$$T = \left[1 + 4 \left(\frac{x_0}{k} \right)^4 \left(1 + \frac{k^2}{x_0^2} \right) \sin^2 \left(kL + \arctg \frac{k}{x_0} \right) \right]^{-1}$$

$$(\hbar k = \sqrt{2mE}; \quad x_0 = m u / \hbar^2)$$

имеет настолько простой вид, что такой предварительный оценочный ход не нужен, но в других задачах лучше заранее знать, где резонанс. Далее получите ширину резонансных пиков прозрачности. Сформулируйте условие, накладываемое на интенсивность барьеров, при котором будет наблюдаться резонансная прозрачность. Изобразите графически зависимость коэффициента прозрачности от k (вновь мы встречаемся со случаем, когда шкала волнового числа удобнее шкалы энергии). Оцените сдвиг резонансных энергий по сравнению с энергиями полностью изолированной ловушки ($\kappa_0 \rightarrow \infty$). Объясните физическую причину возникновения резонансной прозрачности (сохранится ли она, если барьеры будут разными?). А если вместо барьеров будут δ -ямы или рассеиватель состоит из барьера и ямы?

Переходя к квазистационарным состояниям распада, мы должны потребовать, чтобы в стационарном решении оставались только расходящиеся из ловушки волны (для захвата — сходящиеся), т. е. теперь необходимо приравнять нулю амплитуду падающей волны (выраженную через амплитуду прошедшей волны), что даст уравнение для квазиуровней — комплексных значений энергии. Убедитесь, что в первом приближении вещественная часть квазиуровня есть резонансная энергия, а мнимая — равна ширине резонанса. При более точном расчете можно заметить небольшие различия этих величин (для данной конкретной задачи это лучше всего сделать на примере комбинации δ -барьера и δ -ямы, однако попытайтесь дать ответ в общем случае). Далее можно перейти к кинетике распада. Здесь повторяется картина задачи 8, но учтите, что полный набор состояний (в соответствии с двукратным вырождением энергии) включает не только состояния с падением частиц, скажем, слева и прохождением их направо от ловушки, но и состояния с противоположным направлением общего движения. Распределение по энергии в квазистационарном состоянии теперь определится коэффициентом прозрачности, время распада будет связано с мнимой частью квазиуровня (полюса T), а вещественная часть квазиуровня сыграет роль среднего значения энергии.

11. См. пояснения к предыдущей задаче, а также задачу 9 из § 2.

12. См. пояснения к задаче 10 и задачу 8 из § 2.

15. Примените итерацию оператора перехода через отдельный прямоугольный барьер (см. § 12). См. пояснения к задаче 10. Проверьте результаты сравнением с тем, что было получено в задаче 10 в соответствующем предельном случае.

16. Опирайтесь на метод задачи 10.

17. См. § 12. Постарайтесь выразить все результаты через меры рассеяния отдельным барьером и параметры потенциальной ямы между барьерами. Сформулируйте условие применимости метода.

Заметьте, что при малых энергиях (в режиме глубокого туннелирования) ширина квазиуровней равна $\Gamma = \hbar\omega T/2\pi$, где ω — классическая частота колебаний частицы в яме между барьерами, а T — прозрачность отдельного барьера.

18. Используйте общее решение предыдущей задачи. Обратите особое внимание на различие квантовой и классической картин движения. Классическое описание имеет резкую границу при критической энергии: при меньших энергиях движение либо финитно (колебания в яме), либо инфинитно (справа или слева от системы барьеров), а при больших — инфинитно. Квантовые закономерности характеризуют плавный переход от области малых энергий с резко выраженными резонансными свойствами ловушки к области больших, где квазиуровни размываются, через критический диапазон энергий, свойства которого определяются формой вершин барьеров. Такой диапазон, разумеется, «захлопывается» в классическом пределе. Здесь расчеты нужно вести, сочетая точные решения вблизи вершин барьеров с квазиклассическим приближением вдали от них.

Освоив метод, вы без труда обобщите результаты на случай нескольких одинаковых барьеров, что важно не только для описания внешней задачи прохождения частиц сквозь многослойную структуру, но и для понимания происхождения зонного характера энергетического спектра.

19. Да, хотя прозрачность в резонансе и не становится полной. Выразите максимальное значение коэффициента прозрачности ловушки через меры рассеяния на отдельном барьере. Получите ширину резонанса.

20. См. пояснения к задачам 8 и 10. Суммируйте выводы.

21. См. аналогичную задачу 17, а также 18.

22. Не спешите переходить от одного графика к другому. Разбейте энергетическую шкалу на диапазоны в соответствии с особыми точками потенциальной энергии. Помните, что чисто стационарные состояния являются основой пакетной трактовки движения. Заостряя внимание на квантовых эффектах, не забывайте о предельном переходе к классическому описанию.

24. Дискретное и непрерывное диалектически объединяются в концепции квазиуровней, где на фоне формально непрерывного спектра энергии возникают дискретные элементы, а среди форм инфинитного движения встречаются сравнительно долго существующие почти связанные состояния. Квантовая картина движения гораздо богаче классической.

Не менее интересен в этом отношении и случай зонного энергетического спектра (см. следующий параграф), где еще теснее переплетены элементы сплошного и прерывистого: каждая зона есть нечто дискретное, а внутри нее энергия принимает непрерывный ряд значений (в случае неограниченного периодического поля).

Если вас заинтересовал вопрос о единстве дискретного и непрерывного в отношении спектра энергии, то вы можете продолжить рассуждения, учитывая сложность гамильтониана — наличие многих степеней свободы системы. Отдельные части гамильтониана могут отвечать непрерывной ветви энергии (например, движение центра инерции атома), тогда как другие соответствуют смешанному спектру (в том же примере внутреннее движение — связанные состояния и состояния ионизации). Еще один пример — электрон в постоянном однородном магнитном поле. Движение вдоль магнитного поля — свободное. Эта ветвь энергетического спектра непрерывна, а ветвь энергии движения в перпендикулярном полю направлению — дискретна. Причем уровни энергии Ландау обладают большой кратностью вырождения. Таким образом, отдельному значению энергии дискретной ветви отвечает целая полоса непрерывного спектра (как «над» ним за счет движения вдоль поля, так и «внутри» него за счет вырождения). Полосы перекрываются. Изобразите на шкале энергий эти подсистемы уровней. Приведите свои примеры сложного, разветвленного энергетического спектра, сопровождая их рисунками.

Как проявляется диалектическое единство противоположностей в других квантовомеханических явлениях?

25. Пользуйтесь матрицей связи локальных решений (оператором перехода через отдельный барьер, итерируя его). Проследите за изменением результатов в зависимости от числа барьеров. Перейдите к пределу больших значений этого числа. Сделайте общие выводы. Перейдите к случаю прямоугольных барьеров. Выберите свою цепочку конкретных барьеров. Распространите результаты на случай барьеров произвольной формы. Дайте физическую интерпретацию как условиям задач, так и результатам.

26. Учтите опыт решения задач с таким законом дисперсии в предыдущих параграфах (28 из § 1 и 31 из § 2).

§ 28. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ

Существенным ингредиентом процесса решения всякой задачи является желание, стремление, решимость ее решить.

Д. Пойа

1. Пусть параметры потенциала выбраны так, что

$$U(x) = -u \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL),$$

тогда в области отрицательных энергий ($E < 0$) получается дисперсионное уравнение $\operatorname{ch} \kappa L - (\kappa_0/\kappa) \operatorname{sh} \kappa L = \cos(pL/\hbar)$, в котором

$$\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}, \quad \kappa_0 = mu/\hbar^2.$$

Сколько зон укладывается в этой области энергий? Как зависит структура нулевой зоны (самой низкоэнергетической) от параметров задачи? Найдите положение дна зоны, среднего и максимального значения энергии в зоне. При каких значениях параметров нулевая зона выходит в область положительных энергий? Изобразите на графике основные энергетические параметры нулевой зоны в зависимости от периода L . Переходите к другим характеристикам (эффективные массы, средние скорости, энергетическая плотность состояний и др.).

Как перейти к зонам, расположенным в области положительных энергий? Нельзя ли непосредственно из выписанной формулы для отрицательных энергий найти этот результат?

Какие методы расчета вы использовали? Перечислите возможные подходы. В данном случае речь идет, конечно, о способах точного решения задачи, однако отметьте и приближенные методы расчета зонной структуры.

См. также задачи 19 и 22.

Познакомьтесь с общей теорией энергетической зонной структуры (см. литературу в замечаниях к этому параграфу). Чем отличаются одномерные задачи зонного типа от трехмерных? Какие непосредственные физические применения находят те и другие? Сравните результаты данной простой вводной задачи с известными из таких моделей, как «гребенка» Дирака (стандартный предел модели Кронига — Пенни). См. в связи с этим пп. 23, 24 прил. 1. Разберитесь в фактических отличиях моделей δ -ям и δ -барьеров. Как все же получить рассматриваемую модель из модели Кронига-Пенни?

В каком направлении возможно развитие рассматриваемой задачи? Назовите несколько путей.

2. Начните с рисунка. Рекомендуем пользоваться функциями Эйри по Фоку (см. [36]). Примените метод матрицы связи локальных решений (задача 5 из § 12). Получив точное дисперсионное решение, переходите к рассмотрению случаев слабого потенциала, где предстоит довольно кропотливая работа с рядами для функций Эйри (сравните с методом теории возмущений в соответствующей задаче 10, б), а также сильного потенциала, на котором сосредоточьте основное внимание. В этом втором случае отдельно рассмотрите области малых и больших энергий, критического диапазона энергий (вблизи максимумов потенциала). Сделайте общие выводы о влиянии различных участков потенциала на структуру зон в каждом случае. Воспользуйтесь возможностью сравнения результатов точного решения с квазиклассическим приближением из задач 14 и 16.

Сопоставьте также решение данной задачи с аналогичным в следующей.

3. См. пояснения к предыдущей задаче и задаче 1. Сделайте общие выводы по последним двум задачам и укажите воз-

можные физические применения рассмотренным в них моделям.

4. Здесь точное решение будет выражено через функции параболического цилиндра (см. [31]). Все делайте по программе задачи 2, а затем сравните результаты с двумя предыдущими для линейного потенциала. К какому из них данная задача ближе?

5. См. пояснения к предыдущей задаче. После решения данной задачи подведите итоги по двум и четырем последним. См. следующую задачу. Не забывайте о прикладной стороне. Предлагайте свои варианты.

6. Сформулируйте указанные условия сильного и слабого поля и дайте им физическую трактовку.

7. Закон дисперсии вблизи дна нулевой зоны ($|p| \ll \pi\hbar/L$) можно записать в виде

$$E(p) = E(0) + p^2/2M + \alpha p^4 + O(p^6). \quad (7)$$

В силу известного свойства $E(-p) = E(p)$ входят только четные степени квазиимпульса p . Величина $E(0)$ определяет положение дна зоны, т. е. сдвиг границы спектра энергии по сравнению со случаем свободного движения, где $E(0) = 0$, $M = m$ и $\alpha = 0$. Обратная эффективная масса у дна нулевой зоны получает добавку: $M^{-1} = m^{-1} + \delta M^{-1}$. Коэффициент α дает вклад четвертого члена в разложении энергии по степеням квазиимпульса.

Для получения этих мер зонной структуры удобно представить потенциальную энергию в виде ряда Фурье

$$U(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{2\pi i l x/L}; \quad U_l = \frac{1}{L} \int dx U(x) e^{-2\pi i l x/L}. \quad (8)$$

Расчет проводится на основе стационарной теории возмущений (в ее простейшей форме с рядом Рэлея — Шредингера для уровней энергии: двукратное вырождение невозмущенного спектра не снимается в интересующей нас области энергий), когда в качестве волновых функций нулевого приближения используются плоские волны свободного движения частицы с квазинепрерывным спектром энергии. В первом приближении получается общее смещение спектра энергии на величину среднего по невозмущенному движению значения накладываемого поля $\bar{U} = \frac{1}{L} \int dx U(x)$.

Во втором приближении поправка к энергии с учетом свойств ряда Фурье (8) может быть преобразована к выражению

$$E^{(2)}(p) = -m \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / [(\pi\hbar l/L)^2 - p^2], \quad (9)$$

разложение которого по степеням p приводит к закону дисперсии (7) и дает следующие результаты для параметров нулевой зоны с точностью до членов порядка U^2 включительно.

Дно зоны сдвигается под влиянием поля на величину

$$E(0) = \bar{U} - m(L/\pi\hbar)^2 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2/l^2, \quad (10)$$

где знак второго слагаемого отрицателен, как и должно быть у квадратичной по возмущению поправки к основному уровню энергии.

Обратная эффективная масса изменяется на величину

$$\delta M^{-1} = -2m(L/\pi\hbar)^4 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2/l^4, \quad (11)$$

а неквадратичная (четверная) поправка по квазиимпульсу входит в выражение для энергии с коэффициентом

$$\alpha = -m(L/\pi\hbar)^6 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2/l^6. \quad (12)$$

Отрицательный знак величин (11) и (12) объясняется тенденцией обратной эффективной массы к уменьшению: внутри нулевой зоны (в слабом поле — вблизи верхнего края этой зоны) она должна обратиться в ноль. Сравните закон дисперсии (7) с классической квазирелятивистской зависимостью энергии от импульса $E(p) = mc^2 + p^2/2m - p^4/8m^3c^2 + O(p^6)$. В обоих случаях поправка с p^4 отрицательна.

Заметим, что структура рядов в формулах (10) — (12) определяется видом «исходного» закона дисперсии. В частности, показатель степени множителя l^{-2} в сумме (10) происходит от квадратичности невозмущенного закона дисперсии. Какой вид будет иметь формула (10) при произвольной зависимости исходной энергии от импульса?

Сюда же можно добавить известное выражение для щели (полосы запрещенных энергий) между $(s-1)$ -й и s -й зонами:

$$\delta E_s = 2|U_s| + O(U^2), \quad s = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Щели образуются в результате расщепления двукратно вырожденных уровней энергии, удовлетворяющих условию брэгговского отражения, так что на краях зон, где средняя скорость частицы обращается в ноль, вырождения не будет. В нулевом по величине поля приближении щели расположены при значениях энергии $E_s = \pi^2 \hbar^2 s^2 / 2mL^2$, соответствующих спектру частицы, запертой в отдельной ячейке поля. Вблизи щелей обратная эффективная масса значительно возрастает по абсолютной величине (имея соответствующий знак). Так, можно показать, что у верхнего края нулевой зоны

$$M^{-1} = -m^{-1} \pi^2 \hbar^2 / mL^2 |U_1|. \quad (14)$$

Возникает вопрос, можно ли аппроксимировать суммы в выражениях (10) — (12) слагаемыми с первой гармоникой потен-

циала. Учитывая быструю сходимость рядов для обычных моделей потенциала, когда $|U_l| \rightarrow 0$ с ростом l , приходим к выводу, что во всех формулах (10) — (12) можно для оценок (а в большинстве случаев и для количественных расчетов) оставить только первые члены. Выражения (10) — (12) упрощаются:

$$\begin{aligned} E(0) &= \bar{U} - m(L/\pi\hbar)^2 |U_1|^2; \\ \delta M^{-1} &= -2m(L/\pi\hbar)^4 |U_1|^2; \quad \alpha = -m(L/\pi\hbar)^6 |U_1|^2. \end{aligned} \quad (15)$$

Исключение составляют сингулярные потенциальные модели. Например, в модели δ -ям (см. задачу 10) все гармоники одинаковы, так что в формуле для положения дна зоны (10) нужно вычислять всю сумму (это не составляет труда: сумма равна $\sum_{l=1}^{\infty} l^{-2} = \pi^2/6$), поскольку относительная ошибка замены ее первым членом слишком велика. Добавка к обратной эффективной массе при такой замене будет вычислена с ошибкой в 7,5%, а коэффициент α — в 1,5%.

Малым параметром теории является отношение величины щели между нулевой и первой зонами $\delta E_1 = 2|U_1|$ к ширине невозмущенной нулевой зоны $\Delta E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Таким образом, необходимо выполнение неравенства $\delta E_1 / \Delta E_0 \ll 1$. Из формул (15) при $\bar{U} = 0$ вытекает оценка

$$\frac{|E(0)|}{\Delta E_0} = \frac{|\delta M^{-1}|}{m^{-1}} = \frac{1}{8} \left(\frac{\delta E_1}{\Delta E_0} \right)^2,$$

т. е. поправка к массе и сдвиг дна нулевой зоны достаточно малы даже при $\delta E_1 \sim \Delta E_0$. Это дает основание надеяться, что и в случае не очень слабого поля формулы (10) — (12) будут иметь силу. Анализ конкретных моделей периодического поля (см. задачу 10) подтверждает такое предположение.

Обратим внимание на слабую чувствительность $E(0)$, δM^{-1} , α в выражениях (10) — (12) к деталям профиля поля, поскольку основную роль играют невысокие гармоники. Наиболее устойчив результат для коэффициента α , далее идет добавка к массе, а затем — как более подвижный элемент зонной структуры — положение дна нулевой зоны $E(0)$. Что касается щелей между зонами, то для щели между нулевой и первой зонами также существенна только первая гармоника потенциала, а для других щелей важны более высокие гармоники — каждая гармоника формирует соответствующую щель (13). Таким образом, незначительное изменение профиля поля (например, сглаживание по сравнению с изломной моделью) слабо сказывается на рассматриваемых параметрах нулевой зоны.

Можно указать следующие черты зонной структуры в условиях слабой связи. Эффект нулевого приближения заключается

в разбиении энергий на полосы (черновая разметка будущих зон брэгговским условием отражения), которые определяются параметром периодичности L (хотя поле предельно малое — его еще нет, — но уже известен его период). Эффекты первого приближения состоят в общем смещении спектра энергий на величину $\bar{U}$ и в появлении щелей (полос запрещенных значений энергии). Квадратичные эффекты заключаются, во-первых, в дополнительном сдвиге дна нулевой зоны (наиболее интересной для нас зоны, так как первая зона, да и верхний край нулевой зоны, лежат в области очень больших энергий). Во-вторых, в появлении добавки к массе частицы и неквадратичного (четвертого) члена в разложении энергии по степеням квазиимпульса у дна нулевой зоны. Кроме того, величиной, классифицирующей стационарные состояния, становится квазиимпульс. К формированию зон можно подойти и с другой стороны: существующий в как угодно слабой (мелкой или узкой) отдельной одномерной яме уровень энергии при сильном перекрытии волновых функций отдельных ям уширится в нулевую зону (в случае очень большой величины периода L перекрытие может стать незначительным и приведет лишь к экспоненциально малому расщеплению — картине сильной связи).

Мы рассмотрели более подробно структуру нулевой зоны у ее дна, где расчет ведется с помощью теории возмущений без вырождения, а также некоторые свойства щелей и окрестности верхнего края нулевой зоны, где применяется теория возмущений с учетом вырождения. То, что мы ограничились главным образом параметрами нулевой зоны, объясняется, с одной стороны, важностью именно этой области энергий, а с другой стороны, возможностью проиллюстрировать основные эффекты в простом расчете.

8. Используйте результаты решения предыдущей задачи и метод параметрического варьирования (§ 15).

9. Если в предыдущих задачах больше внимания уделялось структуре энергетического спектра зон, то здесь вы имеете возможность сосредоточиться на волновых функциях, на деталях движения в стационарных состояниях. Рассмотрите какой-нибудь конкретный пример (модели из следующей задачи).

10. Возьмите за основу общие результаты задачи 7.

Среди рассматриваемых моделей имеются как двухпараметрические (амплитуда поля U_0 и его период L — постоянная «решетки»), так и более сложные (дополнительным параметром служит размер ямы). С точки зрения гармонического анализа изучаемые модели двухпараметрического типа занимают место между предельными случаями с одной гармоникой (синусоидальный потенциал) и с равномерным распределением по гармоникам (обращенная «гребенка» Дирака — модель δ -ям).

Для двухпараметрических потенциальных моделей формулы основных мер структуры нулевой зоны настолько просты, что

возникает соблазн получить их просто из размерных соображений (учитывая квадратичную зависимость от величины поля). Однако, если ввести оценочные параметры — глубину ям U_0 , период поля L , массу свободной частицы m и постоянную Планка $\hbar$ (полную!) — и образовать величины соответствующих размерностей, то численные коэффициенты оказываются все же существенными и чувствительными к профилю поля. Хуже поддается такой оценке величина дополнительного сдвига дна нулевой зоны. Лучше всего подходит размерная оценка для определения поправки к эффективной массе. Таким образом, попытки оценок из соображений размерности даже для двупараметрических моделей не позволяют во всех случаях получить количественно верные результаты.

Особенность модели δ -ям состоит в том, что все гармоники потенциала одинаковы. Значит щели между зонами в первом приближении равны. Эта модель отвечает предельному переходу в модели Кронига — Пенни (с учетом переноса начала отсчета энергии в максимумы барьеров), когда ширина ям уменьшается, а глубина их увеличивается при постоянстве площади ям, так что образуется обратная «гребенка» Дирака. Обычно рассматривается другой предельный случай с устремлением высот барьеров и их ширины соответственно к бесконечности и нулю при сохранении площадей барьеров — «гребенка» Дирака (см. прил. 1).

Говоря о точности вычисления характеристик зонной структуры, мы должны различать расчет полной величины (обратной эффективной массы, положения дна нулевой зоны, щелей между зонами, коэффициента при p^4) и расчет добавок к обратной эффективной массе и дополнительного сдвига дна нулевой зоны.

Анализ показывает, что даже когда первая щель равна половине ширины невозмущенной нулевой зоны, относительные ошибки невелики: наименьшая по модулю возникает при расчете обратной эффективной массы (не более 0,5%), далее идет положение дна нулевой зоны (не более 2%), затем — первая щель (от 0,1% для синусоиды до 7% для δ -модели), хуже обстоит дело с коэффициентом α (около 10%).

Таким образом, формулы (10) — (12) хорошо аппроксимируют соответствующие меры структуры зонного спектра даже в случае промежуточных (не очень слабых) полей, когда величина первой щели достигает порядка ширины невозмущенной нулевой зоны.

О реализации синусоидальной модели потенциала см. пояснения к задаче 28 о квантовом математическом маятнике (§ 29).

14. См. § 12. Дадим краткие ответы для закона дисперсии и ширины зоны:

$$E_s(p) = \bar{E}_s + (-1)^{s+1} \pi^{-1} \hbar \omega \arcsin [\sqrt{T} \cos(pL/\hbar)];$$

$$\Delta E_s = (2/\pi) \hbar \omega \arcsin \sqrt{T}.$$

Здесь T — коэффициент прозрачности отдельного барьера, L — период потенциала, s — номер зоны, $\bar{E}_s$ — средние энергии зон, ω — квантовые частоты отражаемой части пакета стационарных состояний в отдельной яме (переходят в соответствующие классические частоты колебаний в яме при малых энергиях и условных колебаний между точками вершин соседних барьеров — при больших энергиях). При этом можно считать, что $\omega = \omega(\bar{E}_s)$ и $T = T(\bar{E}_s)$, так как с изменением энергии во всех областях в пределах одной зоны эти величины мало изменяются.

Чему равна энергетическая плотность зон и величина щели между зонами?

Как выглядит общее уравнение для правил квантования, из которого получены выписанные результаты?

Убедитесь, что при малых энергиях (режим глубокого туннелирования с экспоненциально малым коэффициентом прозрачности T) найденные формулы переходят в известные результаты (см. [15]). А что наблюдается при больших энергиях? Как зависит величина щели между зонами от прозрачности барьера? От чего зависит коэффициент надбарьерного отражения? При каких условиях определяющим является общий профиль потенциала, а при каких — только окрестность вершины барьера? Что интересного наблюдается в критическом диапазоне энергий? Переходите к двум следующим задачам.

15. См. пояснения к задаче 14. Рассмотрите окрестность критической энергии. Оцените число зон в критическом диапазоне энергий.

16. См. пояснения к двум предыдущим задачам, а также задачу 2.

§ 29. КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ДВИЖЕНИЕ

Очень советуем всем решать задачи. Ни для кого не секрет, что математику учат решая задачи, а не наблюдая, как их решают другие.

М. Рид, Б. Саймон

1. Какая величина может служить мерой амплитуды колебаний в квантовомеханическом описании? Сравните ее зависимость от энергии при большом числе квантов с классической зависимостью амплитуды колебаний от энергии. Какую роль играет классическая частота колебаний в квантовой картине? Как зависит амплитуда нулевых колебаний от массы и от коэффициента квазиупругой силы?

2. Разберите случай эффективного потенциала

$$U(x) = m\omega_0^2 x^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4.$$

Какой смысл имеют коэффициенты α и β с точки зрения поведения потенциальной кривой в окрестности простого минимума? Что будет в случае минимума более высокого порядка?

Основывайтесь на известных результатах для уровней энергии, полученных с помощью теории возмущений (см., например, [1, с. 167]). Найдите $\langle x^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$, применяя параметрическое варьирование уровней энергии, а в случае несимметричного потенциала рассчитайте $\langle x \rangle_0$, используя теорию возмущений для волновой функции. Затем найдите неопределенности координаты и импульса для рассматриваемых нелинейных нулевых колебаний. Какой вклад вносит в эти величины ангармоничность колебаний? Обратите внимание, чему равно произведение $\Delta p \Delta x$ (особенно в симметричном случае). Вычислите классическую частоту колебаний в зависимости от энергии и сопоставьте выражение нулевой энергии через классическую частоту с аналогичным выражением для гармонического осциллятора (частоту берите для нулевой же энергии).

В каких физических явлениях нелинейность колебаний является определяющим фактором?

3. Найдите энергию нулевых колебаний, амплитудные меры по импульсу и координате и произведение неопределенностей импульса и координаты. Выразите энергию нулевых колебаний через классическую частоту при этой же энергии. Оцените, насколько точно классическая частота таких нелинейных колебаний описывает структуру энергетического спектра в окрестности основного состояния системы в соответствии с квазиклассическим соотношением $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}$ и $dE/dn = \hbar \omega_{\text{кл}}$ (см. пп. 17, 20 прил. 1). Сравните со случаем слабой нелинейности в предыдущей задаче. Обратите особое внимание на расчет дисперсии координаты в примере «а». Суммируйте выводы.

5. Рассмотрите предельные случаи сильной (глубокой или широкой) и слабой (мелкой или узкой) ямы.

6. А как изменяется эта точность при переходе к первому возбужденному уровню энергии? Насколько повышает точность учет первой квазиклассической поправки к правилам квантования Бора — Зоммерфельда, т. е. каков эффект учета второго ВКБ-приближения? Рассмотрите примеры из задач 2 и 3 (слабая и сильная нелинейность).

8. Покажите, что уровни энергии определяются из уравнения $uR(0, 0; E) = 1$, где координатные матричные элементы резольвенты — функция Грина — относятся к невозмущенному движению, а возмущением является δ -потенциал (см. задачи 1 и 2 из § 11). В данном случае нужно знать лишь значения ФГ при $r = r' = 0$, что заметно упрощает задачу (за счет предельной локализации возмущения). К тому же говорится о критической ситуации, т. е. о случае, когда $E = 0$. Выполняйте самостоятельно. Учтите, что в первой задаче вам потребуются функции параболического цилиндра, а во второй — функции Эйри. Не

забудьте и о теории возмущений. Придумайте аналогичные задачи. Нельзя ли распространить метод на случай многомерного движения?

9. Уточните, о какой области идет речь. Постарайтесь обойтись без явного вида волновых функций. Кстати, как их найти (тем же методом интегрального уравнения)?

12. Нет ли среди предложенных примеров случая, допускающего точное решение? Если таковой обнаружите, то исследуйте его подробно.

13. Сравните с соответствующим возбуждением гармонического осциллятора. Перенесите на случай произвольного начального стационарного состояния. Какое непосредственное применение полученных величин вы можете предложить?

14. В чем основное отличие слабой нестационарности состояний от сильной, когда система подвергается внешнему переменному воздействию? Что изменится, если в пакете будет не два стационарных состояния, а три или более? Каким образом квантовое описание переходит в классическое? Имеют ли классический аналог строго стационарные состояния? В чем проявляется закон сохранения энергии, если состояния нестационарные? Какое соотношение неопределенностей «управляет» ими? Приведите свои примеры слабо нестационарных состояний. В отдельно взятом векторе состояния фазовый множитель не существен. А что можно сказать о роли фазовых множителей отдельных вкладов в пакете?

17. В каком случае возможно также и точное решение задачи?

20. Обратите внимание на то, что в полуклассической теории излучения излучающая система (например, атом) описывается квантовомеханически, а электромагнитное поле — классически. В нашей же задаче осциллятором является полевая мода (поле квантуется), а взаимодействие с излучателем описывается заданной классической обобщенной силой.

$$22. W = 2 \sqrt{m_1 m_2} / (\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2}).$$

Рассмотрите другие случаи внезапных возмущений параметров задачи (кривизна потенциала, положения равновесия и т. п.). Что получается при незначительном изменении параметров (скажем, в том же примере с массами)? При каком отношении масс вероятность равна половине? Легко ли добиться значительного изменения вероятности? Что фактически понимают, говоря о переходах в то или иное конечное состояние? В каком состоянии находится система и что показывают вероятности переходов (и «непереходов»? Терминология переходов заимствована из старой (боровской) квантовой теории.

23. См. пояснения к предыдущей задаче.

26. Каков классический характер движения? Сохраняется ли свойство гармоничности колебаний? Удалось ли вам решить

квантовомеханическую задачу? Подсказка — посмотрите на гамильтониан частицы с квадратичным законом дисперсии в четверном потенциальном поле.

27. Рассмотрите малые и большие U_0 . Задайте различные α . С чем нужно сравнивать величины этих параметров? Все время делайте соответствующие рисунки. В условии задачи сказано о качественной стороне исследования, однако по мере возможности сопровождайте решение хотя бы оценочными расчетами. Выявите новые особенности колебаний. Подчеркивая квантовые эффекты, не забывайте о предельном переходе к классике. В каких реальных физических явлениях возникают колебания такого типа?

28. Задача рассчитана на самостоятельное решение. Начните с чисто классической картины движения частицы, которая помещена в однородное гравитационное поле и находится на «привязи» (модель нити или стержня). Имеется в виду перемещение только в вертикальной плоскости (плоский маятник). Главное, на что следует обратить внимание в классическом описании, — переход от колебательного режима при малых энергиях к вращательному при больших энергиях. Нарисуйте график зависимости потенциальной энергии от координат. Зафиксируйте критическое значение полной энергии. Что предсказывает классика для движения со строго критической энергией? Обратите внимание на особенность граничных условий периодичности: если в качестве обобщенной координаты выбран соответствующий угол, то при изменении на 2π он приводит вновь к исходному положению. Это — новый важный элемент решения квантовомеханической задачи, к которой и следует перейти.

Вначале заметьте, что квантовый математический маятник (КММ) аналогичен плоскому ротатору в однородном поле (заряд, движущийся по круговому кольцу в однородном постоянном электрическом поле). В стандартных задачах по ротатору исходным считается вращательное движение, а затем учитывается влияние поля на вращение (обычно поле считается слабым, применяется теория возмущений, дающая только сдвиг вращательных двукратно вырожденных уровней энергии). См., например, разбор задачи в книге Флюгге [17, т. 1, с. 121, т. 2, с. 57]). Задача данного параграфа заключается в исследовании сильного влияния поля, т. е. в рассмотрении колебаний, которые приобретают новые черты за счет периодических граничных условий, физически отвечающих возможности вращательного характера движения. Как вы уже убедились, классическая картина резко отделяет колебания от вращений. Что же даст квантовая картина?

Разбейте всю область энергий на три участка: малые энергии, промежуточные (критический диапазон) и большие. Займитесь малыми энергиями (влияние ангармонизмов и гранич-

ных условий периодичности, нулевые колебания), затем особое внимание уделите критическому диапазону (структура энергетического спектра вблизи критической энергии, квантовые и классические частоты, колебательно-вращательный характер движения, ширина критического диапазона). Это наиболее важная часть задачи. Затем перейдите к большим энергиям (экспоненциально малое расщепление вращательных уровней). Используйте квазиклассическое приближение (как первое, так и второе) в сочетании с точным решением вблизи максимума потенциала, а также прямую связь с соответствующей зонной задачей Морза для синусоидального потенциала. Основное внимание уделите физическому аспекту задачи.

На координатной оси есть две граничные точки, однако их положение (совместный перенос) может быть любым. Удобно для трактовки результатов при малых энергиях выбрать в качестве граничных точки максимума потенциала («половинка» слева и «половинка максимума» справа). Тогда вы имеете картину потенциальной ямы и исходите из колебательного характера движения. При больших же энергиях предпочтительнее поместить эти точки в местах минимума потенциала (тоже по «половинке»), с тем, чтобы подчеркнуть влияние надбарьерного отражения на вращательное движение. А что же для критического диапазона? Здесь, пожалуй, нельзя отдать предпочтение какой-либо из картинок, так что они дополняют друг друга.

В задаче имеется много других вопросов и деталей, но советуем из уже отмеченных выбрать главное — характер перехода от колебаний при малых энергиях к вращению при больших (хотя, строго говоря, большим энергиям отвечает состояние в виде стоячей волны — две бегущие волны свободного вращения расщепляются на две стоячие волны). В области больших энергий уровни попарно сливаются (практически), а при малых — почти эквидистантны. Как же они расположены в промежуточной области энергий? Попробуйте предсказать, а затем проверьте догадку расчетом и изобразите структуру спектра на оси энергий. Попытайтесь также не ограничиваться стационарными состояниями, а давать пакетную трактовку движения (только так и можно сравнивать результаты с классическими), помня, что в рассматриваемом нами случае уровни энергии расположены очень плотно (даже при малых энергиях), так что энергетический спектр имеет квазидискретную структуру. Убедитесь в этом сами, оценивая расстояние между соседними уровнями энергии во всех энергетических областях (а также общее число уровней с энергией, меньшей данной).

Подведя итоги, найдите ближайшие аналогичные задачи (два периода синусоиды, другие формы потенциала с теми же периодическими граничными условиями и т. п.) и укажите их физические применения. Как связана рассмотренная задача с движением электронов в тонкостенном цилиндре, помещенном

в перпендикулярное его оси электрическое поле? Предложите свои пространственные реализации КММ.

Дайте общую оценку роли задачи о КММ в квантовой механике и квантовой статистике.

Обратите внимание на следующие примеры реализации синусоидальной модели потенциала, близкие к задаче о КММ. Заряд движется вдоль цилиндрической винтовой линии в постоянном однородном электрическом поле, направленном перпендикулярно к оси цилиндра. Исследуйте стационарные состояния. Рассмотрите аналогичный случай двумерного движения заряженной частицы по гофрированной плоской поверхности (уточните вид гофра) в соответствующим образом ориентированном электрическом поле.

Перечислите другие известные вам примеры систем с искусственно созданными периодическими свойствами (линейные, поверхностные и объемные периодические структуры).

29. Какое место займут в этой схеме состояния термодинамического равновесия? А состояние с нулевой температурой?

30. Обратите особое внимание на этот вопрос. Переберите последовательно все вам известные системы такого типа, четко выделяя, что именно является осциллятором в каждом конкретном случае. Затем обратитесь к учебникам, пополнив свой перечень. Освежите в памяти классическую картину движения системы, совершающей малые колебания (главные колебания, собственные частоты и т. д.). Перейдите к квантованию и языку возбуждений (фотонам, фононам, плазмонам и т. п.).

§ 30. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Хороший учитель обязан помнить, что никакую задачу нельзя исчерпать до конца. Этот взгляд он должен прививать и своим ученикам. Всегда остается что-нибудь, над чем можно размышлять.

Д. Поля

1. В представлении взаимодействия это когерентное состояние описывается вектором $e^{i\chi} |z_1\rangle$, где параметр

$$z_1 = \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega(t'-t_0)} f(t')$$

содержит амплитуду нулевых колебаний Δx_0 (вакуумное значение неопределенности координаты). Что собой представляет величина χ в фазовом множителе? Переходя к представлению Шредингера, получаем выражение

$$e^{i\chi - i\omega(t-t_0)/2} |z_1 e^{-i\omega(t-t_0)}\rangle,$$

которое отличается от предыдущего добавкой в фазе комплексного параметра (помимо несущественного приращения общего

для всего вектора фазового множителя). Теперь перейдите к исследованию полученного результата, привлекая основные свойства когерентных состояний. Что касается решения, то его можно вести в представлении взаимодействия, составив и проинтегрировав уравнение для S -оператора. При этом можно использовать операторы рождения и уничтожения квантов (сравните с аналогичным ходом решения для импульсно-координатных операторов).

2. В гейзенберговском представлении вектор состояния фиксирован, а все движение перенесено на операторы. Все величины будем выражать через операторы рождения $\hat{a}^+$ и уничтожения $\hat{a}$ возбуждений осциллятора (квантов). Так как гамильтониан осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2) - \Delta x_0 f(t) (\hat{a}^+ + \hat{a}),$$

получаем уравнения движения гейзенберговских величин

$$\partial \hat{a}_\Gamma / \partial t = \{ \hat{H}, \hat{a} \}_\Gamma = -i\omega \hat{a}_\Gamma + i\hbar^{-1} \Delta x_0 f(t)$$

с начальным условием $\hat{a}_\Gamma(t_0) = \hat{a}$ (временной параметр представлений считаем равным t_0 , т. е. в этот момент времени операторы и векторы для всех представлений совпадают). Отсюда

$$\hat{a}_\Gamma(t) = e^{-i\omega(t-t_0)} \hat{a} + \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega(t'-t)} f(t') = e^{-i\omega(t-t_0)} (\hat{a} + z_1).$$

Для оператора рождения не следует заново решать уравнение движения, так как $(\hat{a}^+)_\Gamma = (\hat{a}_\Gamma)^+$. Ответ можно записать следующим образом:

$$\hat{a}_\Gamma^+(t) = e^{i\omega(t-t_0)} (\hat{a}^+ + z_1^*) = e^{i\omega(t-t_0)} \hat{a}^+ + z^*.$$

Попробуйте получить эти же результаты способом канонического преобразования, переходя от представления взаимодействия (Дирака) к гейзенберговскому по правилу

$$\hat{a}_\Gamma(t) = \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{a}_D(t) \hat{S}(t, t_0)$$

и используя найденные в предыдущей задаче явные выражения для $\hat{S}$ и $\hat{a}_D$ (как сразу увидеть $\hat{a}_D$ в ответе для $\hat{a}_\Gamma$?).

Теперь перейдите к использованию полученного решения. Заметьте, что никаких предположений о виде начального состояния не делалось, так что вы получаете полное решение задачи о вынужденных колебаниях осциллятора под действием однородной переменной силы. При каких же начальных условиях движение отвечает когерентным состояниям?

Например, начните с простейших средних $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$. Вспоминаем смысл гейзенберговского представления: для любой величины среднее значение в некоторый момент времени $\langle A(t) \rangle$ равно среднему значению соответствующего гейзенберговского

оператора по начальному состоянию (в общем случае речь идет о состоянии в момент времени совпадения всех представлений). Итак, $\langle A(t) \rangle = \langle \hat{A}_T(t) \rangle_0$. Это — основа всех конкретных расчетов. Так, для координаты осциллятора получаем

$$\langle x(t) \rangle = \Delta x_0 (z^* + z) + \Delta x_0 [e^{i\omega(t-t_0)} \langle \hat{a}^+ \rangle_0 + e^{-i\omega(t-t_0)} \langle \hat{a} \rangle_0].$$

Покажите, что для любого смешанного стационарного состояния (включая чистые стационарные состояния, состояния термодинамического равновесия и т. д.) средние значения операторов рождения и уничтожения равны нулю. А чему равны эти средние для начального когерентного состояния?

Запишите самостоятельно выражения для среднего значения импульса, среднего числа квантов, для дисперсий и неопределенностей всех этих величин, считая начальное состояние стационарным (не обязательно чистым). Найдите приращение среднего значения энергии (знак, отличие от классического результата, если оно есть и т. д.).

3. Достаточность (первая часть условия задачи) вы легко проверите, подействовав оператором уничтожения на вектор когерентного состояния, представленный в виде разложения в базисе числа квантов. Необходимость же проиллюстрируем прямым решением задачи о собственных значениях и собственных векторах этого оператора $\hat{a}\psi_a = a\psi_a$ в представлении числа квантов, где $\hat{a}\psi_a(n) = a\psi_a(n)$. Используя правило действия оператора уничтожения «на индекс представления» (повышающее!), имеем рекуррентное соотношение $\sqrt{n+1}\psi_a(n+1) = a\psi_a(n)$, откуда $\psi_a(n) = \psi_a(0) a^n / \sqrt{n!}$. В обозначениях Дирака $\langle n|a \rangle = Ca^n / \sqrt{n!}$, что характерно для когерентных состояний с параметром $z = a$.

4. Чему соответствует начало координат? Что показывает модуль z ? Какова роль фазы z ? Каким величинам отвечают абсциссы и ординаты?

6. Найдите соответствующие волновые функции в различных представлениях.

7. Рассмотрите случай совместного действия полей и случай включения одного после окончания действия другого. А если будет несколько возбудителей? Проиллюстрируйте на интенсивностях (среднем числе квантов, приращении среднего значения энергии). Сделайте выводы.

8. Затем рассмотрите случаи малого и большого модуля z . Чему отвечают эти предельные значения?

9. Вначале предскажите результат, исходя из общих соображений, а затем выполните полную программу решения во всех представлениях (в шредингеровской, гейзенберговской и дираковской картинах). Каждый этап решения сравнивайте с соответствующей задачей силового возбуждения.

11. Влияет ли возбуждающая сила на результаты (предполагается, что все операторы берутся в картине Гейзенберга)? Как

связаны между собой все эти величины? Где они находят непосредственное применение? Что получается для совпадающих временных аргументов?

12. Пользуйтесь представлением Гейзенберга. Считайте начальное состояние осциллятора стационарным смешанным. Объясните смысл всех величин и связь между ними. Что они показывают при совпадающих временных аргументах? Какое влияние оказывает вынуждающая сила?

Убедитесь, что между рассматриваемыми величинами существует соотношение, отвечающее обобщенному СН для разновременных величин (проверьте выполнение неравенства обобщенных СН, привлекая также необходимую величину из предыдущей задачи).

15. Введите дополнительное усреднение, полагая среднее значение сил равным нулю, и спектральное представление для матрицы автокорреляции сил, считая соответствующий случайный процесс стационарным. Рассмотрите передаваемую осциллятору мощность, переходя к пределу бесконечно большого времени действия возбуждения.

17. Используйте явный вид S -оператора задачи 1 через операторы рождения и уничтожения числа квантов. Преобразуйте его так, чтобы операторы рождения (все) были левее операторов уничтожения, и вычислите матричные элементы $\langle n|S|m \rangle$ в представлении числа квантов (энергетическом), записывая каждую из экспонент, на которые расщепляется S -оператор в указанной форме нормального произведения, в виде суммы степеней полевых операторов. Внимательно вычислите матричные элементы для каждого слагаемого такой двойной суммы, а для компактной записи ответа обратитесь к математическим справочникам (например, [31]). Затем найдите вероятности переходов. Что получается для слабого возмущения? А в случае сильного?

20. Решайте задачу в представлении взаимодействия, используя S -оператор из задачи 1, переходя затем к представлению Шредингера, или сразу рассмотрите эволюцию матрицы плотности в представлении Шредингера, используя найденные операторы рождения и уничтожения в картине Гейзенберга (в задаче 2). В обоих случаях потребуется операторная симметризация промежуточного выражения. Приведем ответ для статистического шредингеровского оператора

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 \exp[z(e^{\hbar\omega\beta} - 1)\hat{a}^+] \exp[z^*(1 - e^{-\hbar\omega\beta})\hat{a}] \times \\ \times \exp[|z|^2(e^{-\hbar\omega\beta} - 1)],$$

где $\hat{\rho}_0$ — статистический оператор исходного состояния термодинамического равновесия с температурой β^{-1} , а осцилляторный параметр когерентных состояний

$$z = i\hbar^{-1}\Delta x_0 \int_0^t dt' f(t') \exp[i\omega(t' - t)].$$

Диагональные элементы оператора $\hat{\rho}(t)$ в представлении числа квантов, определяющие искомое распределение, легко найти, используя опыт решения задачи 17. В результате получите

$$\langle n | \rho(t) | n \rangle = \langle n | \rho_0 | n \rangle e^{-|z|^2 [1 - \exp(-\hbar\omega\beta)] L_n \left(-4 |z|^2 \operatorname{sh}^2 \frac{\hbar\omega\beta}{2} \right)},$$

где $L_n(x)$ — полиномы Лагерра (более простые, чем в задаче 17).

21. Считайте, что в начальный момент времени включения возмущения электрон находился в стационарном состоянии с равным нулю квантовым числом Ландау и определенным положением центра колебаний вдоль той оси, по которой направлено электрическое поле. Выберите соответствующий вид векторного потенциала и покажите, что задачу можно свести к задаче о когерентных состояниях осциллятора.

22. Найдите матрицу этого оператора в представлении числа квантов (энергетическом).

23. Запишите экспоненту в форме нормального произведения и воспользуйтесь представлением когерентных состояний (статоператор в подходящей форме дан в предыдущей задаче).
 Ответ:

$$\langle \exp(i\mu\hat{a}^+ + i\nu\hat{a}) \rangle_0 = \exp[-\mu\nu(\langle n \rangle_0 + 1/2)],$$

где $\langle n \rangle_0$ — равновесное среднее значение числа квантов. Как выразится оно в явном виде через температуру?

Примените полученный результат для расчета равновесного распределения по координатам, основываясь на соотношении

$$\rho_{xx} = \langle \delta(x - \hat{x}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{i\alpha x} \langle e^{-i\alpha\hat{x}} \rangle.$$

Доведите вычисления до конца и обсудите результат.

Обратите внимание на «производящие» свойства рассмотренной величины (особенно в записи $\langle \exp i\mu\hat{a}^+ \cdot \exp i\nu\hat{a} \rangle$, — чем это выражение отличается от фигурировавшего ранее?). Дифференцирование по параметрам μ и ν дает средние значения от произведения полевых операторов, с которыми очень легко оперировать (особенно в базисе когерентных состояний) — так называемые нормальные произведения. После дифференцирования можно положить $\mu = \nu = 0$.

Обобщите задачу на случай вынужденных колебаний осциллятора, первоначально находившегося в состоянии термодинамического равновесия. Теперь заданное в условии задачи среднее относится к неравновесному состоянию. Сведите, однако, задачу к предыдущему случаю, используя гейзенберговское представление полевых операторов (см. задачу 2). Выведите распределение по координатам. Убедитесь, что оно остается по-прежнему гауссовым, с той же дисперсией, что и в начальном равновесном состоянии, но с переменным центром (по закону

смещения координаты в когерентных состояниях). Найдите также плотность вероятности для импульса, предварительно предсказав результат.

Имеются ли среди смешанных состояний когерентные? Относятся ли к их числу встретившиеся в этой задаче состояния осциллятора?

27. Нет.

§ 31. ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Наше мышление приходит к решению задачи весьма извилистой дорогой. Только в последний момент в задаче устанавливается порядок.

А. Эйнштейн

1. Выбором векторного потенциала $A_x = A_y = 0$, $A_z = yH$ сводим задачу о движении в перпендикулярной магнитному полю плоскости к одномерной с эффективным гамильтонианом $\hat{H}_\perp = \hat{P}^2/2m + \beta \hat{Q}^4$, где $\hat{P} = \hat{P}_y$; $\hat{Q} = \hat{y} + cP_z/|e|H$ (сохраняются P_x и P_z); $\beta = \alpha (eH/c)^4$; $E_\perp = E - P_x^2/2m$. Об уровнях энергии для такой модели см. в п. 20 прил. 1. Допускает ли задача точное решение? К чему приведет другой выбор векторного потенциала? Перечислите все сохраняющиеся величины и укажите их физический смысл. Что можно сказать о классической картине движения?

Как решается задача, если магнитное поле направлено по оси z ?

2. См. пояснения к предыдущей задаче. Найдите эффективный потенциал и сравните его с встречающимся в задачах 26 из § 1 и 28 из § 2. Обратите особое внимание на случай магнитного поля вдоль оси z (дополнительный вопрос). Правильным ли будет ответ для уровней энергии $E = \beta \sqrt{\hbar \omega (n + 1/2)} + P_z^2/2m$; $\omega = |e|H/mc$?

3. На первый взгляд, получаемая квантовая картина средних значений плотностей заряда и тока ничего общего не имеет в рассматриваемых стационарных состояниях с классическим движением по винтовой линии (или, отвлекаясь от ветви свободного движения вдоль поля, по окружности). Однако стоит представить себе «размывание» такой окружности путем перемещения ее центра вдоль одной из осей координат при фиксированном положении вдоль другой оси (что должно сопровождаться также и «разбуханием» самой трубки движения — размытием радиуса), как вы получите квантовую картину движения, а также наглядное представление о ее происхождении. Сделайте несколько пробных набросков, пока не получите четкого динамического рисунка.

Конечно, это лишь некоторые пояснения на качественном уровне. Вы же должны подкрепить все сказанное количественным расчетом, в частности для средней плотности потока заряда. Как связан вектор плотности потока вероятности со средними потоковыми характеристиками? Перечислите сохраняющиеся величины. Каким образом кинематические импульсы (скорости) связаны с обобщенными (каноническими) импульсами?

Что будет в случае анизотропного квадратичного закона дисперсии?

4. Математическую часть решения можно заимствовать из [1, с. 525] или [15, §6]. Однако важно перейти к исследованию физической части задачи. Детали лучше всего изложены в [14, гл. X]. Нас же будет интересовать потоковая картина движения, так что запаситесь выражением для вектора плотности электрического тока, рассматривая соответствующие состояния и предельные значения параметров задачи. Разберите как классический предельный случай, так и аномальную ситуацию, при которой в некоторой области пространства возможно направление среднего потока, противоположное обычному классическому направлению (привычному вращению электрона «против часовой стрелки»). Дайте наглядное толкование этому эффекту, рассматривая размазанные классические траектории-окружности (речь идет о перпендикулярной полю плоскости) как по положению центра, так и по радиусу.

Сравните с состояниями движения в предыдущей задаче. Чем объясняется возможность различных состояний при одной и той же энергии?

В классическом режиме движения центр колебаний размыт незначительно по сравнению с величиной среднего радиуса размазанного кольца (модель — известное упражнение с обручем «хула-хуп»). В аномальном режиме движения центр колебаний размыт по окружности радиуса, значительно превосходящего радиус кольца (модель детской вертушки, насаженной на один конец длинной палки, вращающейся вокруг другого ее конца). Хорошие рисунки вам должны помочь.

Разъясните физические причины появления таких аномалий.

Постарайтесь предсказать эксперименты, в которых этот эффект можно было бы не только непосредственно наблюдать, но и использовать на практике.

Подведите итоги решения двух последних задач.

5. Какую роль играет конкретный выбор векторного потенциала?

6. См. пояснения к задаче 14 из § 9. Применяйте только приближенные вычисления (ВКБ-метод, теорию возмущений). Никаких специальных функций использовать не нужно.

7. Приведем ответ для функции Грина связанных состояний (поле направлено вдоль оси z):

$$A = [Hr]/2; \quad R(r_1, r_2; E) = \exp[i(|e|\hbar/2mc)(x_1y_2 - x_2y_1)]g(r);$$

$$g(r) = \frac{m_3 |e| H}{2\pi \hbar^3 c} \sum_{n=0}^{\infty} x_n^{-1} e^{-x_n |z| - \rho^2/4} L_n(\rho^2/2);$$

$$r = r_1 - r_2; \quad \rho^2 = (|e| H / \hbar c) [V \overline{m_1/m_2} (x_1 - x_2)^2 + V \overline{m_2/m_1} (y_1 - y_2)^2];$$

$$\omega = |e| H / \sqrt{m_1 m_2} c; \quad \hbar x_n = \sqrt{2m [\hbar \omega (n + 1/2) - E]}.$$

8. См. § 2, 11 и 13.

9. Сведите задачу к одномерной. Изобразите график эффективного потенциала. Найдите обобщения.

10. Вначале рассмотрите классическую картину движения в случае магнитного «зеркала». Введите эффективную одномерную задачу.

13. См. пояснения к задаче 3.

14. Выберите определенный полный набор физических величин. Сравнивайте с решением в координатном пространстве.

Постройте соответствующую функцию Грина в импульсном представлении. Обратите особое внимание на специфический фазовый множитель. Сопоставьте с таковым для координатной ФГ.

16. Считайте, что потенциальная энергия взаимодействия тел (зарядов) зависит только от расстояния между ними, а поля однородны.

18. Как сформулировать задачу рассеяния в более общем случае? Для локального потенциала?

20. Вначале ограничьтесь одним только магнитным полем, затем учтите возможность дополнительных потенциальных полей. В чем особенность квантовой силы Лоренца? Как учесть собственный магнитный момент частицы? Приведите пример применения полученных результатов.

21. Назовем некоторые: координаты заряда (декартовы, цилиндрические), координаты центра колебаний, координаты смещения по отношению к центру колебаний, импульсы обобщенные (канонические), импульсы кинематические (скорости), моменты импульса и т. п. Изучите [14, гл. X].

Уделите специальное внимание парам совместимых величин (операторы коммутируют). См. соответствующий материал в § 16.

Что изменяется, если закон дисперсии квадратичный, но анизотропный?

22. См. пояснения к предыдущей задаче.

23. Выберите конкретные направления полей и состояния движения.

Можно ли прийти к спиновому току квантованием классического вектора плотности потока? А из уравнения непрерывности?

25. Какие из них уже встречались в других ситуациях, а какие специфичны именно для движения в магнитном поле?

Стремление решить задачу плодотворно уже само по себе, так как оно, в конечном счете, может привести к решению и, безусловно, дает толчок вашим мыслям.

Д. Поля

1. Главное внимание уделите граничным условиям для радиальной волновой функции в начале координат и форме эффективного потенциала.

Познакомьтесь с соответствующей теорией для полей сферической симметрии (например, [1, гл. VI]).

Для иллюстрации приводите примеры.

2. Для полного набора $k = (p_\perp^2, m, p_z)$

$$\Psi_k(\rho, \varphi, z) = A J_{|m|}(\rho_\perp \rho/h) \exp(im\varphi + ip_z z/h);$$

$M_z = m\hbar$; $J_\nu(x)$ — функции Бесселя.

Найдите коэффициент A , используя разные формы нормировки волновой функции. Как выглядит волновая функция этого же состояния в собственном представлении рассматриваемого полного набора?

3. Подскажем одну из формул «теоремы сложения»:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x) J_m(y) \cos m\theta = J_0(\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \theta}).$$

Проанализируйте переход от двумерной функции Грина к трехмерной.

4. Используйте законы сохранения и разделение переменных. См. решение задачи 2. Запишите выражение для основного уровня энергии в явном виде, прибегнув к нужным таблицам.

Укажите физический смысл всех фигурирующих в задаче квантовых чисел. Как изменяются уровни энергии с увеличением абсолютного значения магнитного квантового числа (при фиксации радиального)?

5. Отделите ветвь свободного движения вдоль оси симметрии. Опирайтесь на функцию Грина двумерной задачи рассеяния. Дайте физическую трактовку сечения рассеяния.

6. Борновская амплитуда рассеяния (первое приближение теории возмущений) для рассматриваемого потенциала осевой симметрии равна

$$f^B(\varphi) = -e^{i\pi/4} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2\pi}{k}} \int_0^\infty J_0(q\rho) U(\rho) \rho d\rho,$$

$$\hbar k = \sqrt{2mE}; \quad q = 2k \sin(\varphi/2);$$

$J_\nu(x)$ — функция Бесселя.

Попытайтесь исследовать в каждом из предложенных примеров полное сечение рассеяния.

Что характерно для двумерного поля, не обладающего круговой симметрией? Как сформулировать условие применимости борновского приближения? Какие еще приближенные методы можно использовать для двумерного рассеяния?

7. См. § 11.

8. Отделите ветвь движения вдоль оси z .

9. Сведите задачу к одномерной. Не забывайте о возможности нескольких «пробок».

10. В первом приближении для оценки критических параметров (при которых появляется первое связанное состояние) можно использовать формулу, выведенную в задаче 5 из § 1:

$$A^{-1} = \int_{\mathcal{S}} dV/r = \oint dS r/2r; \quad A = mU_0/2\pi\hbar^2.$$

Наибольший интерес представляет случай изменения формы цилиндра при фиксированном его объеме. Найдите экстремальное соотношение между высотой и радиусом цилиндра.

11. Имеется в виду, что движение происходит внутри цилиндра с непроницаемыми стенками.

14. Запишите общее точное уравнение для уровней энергии и рассмотрите наиболее интересные частные и предельные случаи. См. прил. 2.

15. Постройте функцию Грина связанных состояний для полуплоскости, используя готовую функцию Грина для полупрямой (см. § 11). Примените вариационную оценку собственных значений соответствующего интегрального уравнения (§ 13). Покажите, что искомая величина расстояния L связана с характерным размером a области действия потенциала $U(\rho)$ соотношением

$$L = a \exp \left(\left| \frac{m}{\pi\hbar^2} \int U(\rho) d\rho \right|^{-1} \right).$$

16. Используйте функцию Грина связанных состояний для полупространства. См. пояснения к предыдущей задаче. При больших расстояниях между полостью и экраном должно получиться следующее изменение критических параметров:

$A^{-1} = A_{\infty}^{-1} - v/2L$; $A \equiv mU_0/2\pi\hbar^2$; $v \equiv \int u(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$; $U(\mathbf{r}) = -U_0 u(\mathbf{r})$, где L — упомянутое расстояние, а величина A_{∞} отвечает критическим параметрам без экрана.

20. См. задачу 28 из § 5.

21. Что получается в случае двух связанных между собой осцилляторов, для которых $U(\rho) = k_1 x^2/2 + k_2 y^2/2 - \alpha xy$, возбуждаемых силой, лежащей в плоскости (x, y) ?

22. Перейдите к радиальному уравнению. Изобразите соответствующие картинки отдельно для равного нулю магнитного квантового числа и для отличного от нуля. Можно решать

задачу на основе общего метода квазиклассического приближения, развитого в § 3, хотя она допускает и точное решение. Не забывайте об особенностях сшивки радиальных волновых функций в точке R .

23. При каких значениях момента (магнитного квантового числа) связанные стационарные состояния перестают существовать? Во что они переходят? Постарайтесь качественный анализ подкрепить расчетами. Чем характерен случай нулевой проекции момента?

24. Используйте цилиндрические координаты. Рассмотрите состояние с определенным значением указанной проекции момента. Сравните с соответствующим потоковым смыслом импульса. Сопровождайте рассуждения рисунками. Обратите внимание на квантование «вращательного движения». Какие значения может принимать проекция момента? Есть ли какое-либо ограничение (сравните со случаем состояний с определенным квадратом момента)?

25. Каким образом используется сохранение величин при изучении движения систем (метод интегралов движения)?

Обратите особое внимание на три последних примера. Укажите конкретные физические ситуации.

В чем заключается различие между движением частицы в поле винтовой линии и движением ее вдоль (по) винтовой линии? Исследуйте стационарные состояния электрона, движущегося по винтовой линии в постоянном однородном электрическом поле (направленном перпендикулярно или параллельно оси линии). Рассмотрите аналогичную задачу с магнитным полем, направленным вдоль оси линии.

§ 33. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Стремитесь извлечь из своих усилий максимальную пользу, старайтесь подмечать в задаче, которую вы решаете, то, что сможет пригодиться и в будущем при решении других задач.

Д. Поля

1. Точные значения уровней энергии вы найдете в п. 14 прил. 1. Покажите, что для потенциала Морза поправка к правилам квантования Бора — Зоммерфельда (учет второго квазиклассического приближения) обращается в ноль. Правила квантования второго ВКБ-приближения имеют вид (для плавного потенциала $U(x)$)

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint U''(x) p dx = h \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (16)$$

См. также следующую задачу.

2. Используйте параметрическое варьирование уровней энергии. Последние вы найдете в п. 14 прил. 1. См. предыдущую задачу.

Не сложилось ли у вас впечатление, что вообще все квантовые свойства движения в рассматриваемом поле совпадают с классическими? Разъясните ситуацию подробнее. Сравните с движением квантового гармонического осциллятора.

3. Основывайтесь на точных значениях уровней энергии из п. 11 прил. 1. Найдите связь указанных квантовых периодов с соответствующими классическими периодами колебаний на основании уточненных квазиклассических правил квантования. См. формулу (16).

Найдите средние значения кинетической и потенциальной энергии в связанных стационарных состояниях. Что можно сказать о рассеянии частиц в рассматриваемом поле?

4. Здесь потребуется формула (16). Точное значение энергии нулевых колебаний см. в п. 11 прил. 1. Придавая различные численные значения характерному параметру $\hbar^2/mU_0a^2$, оцените относительные ошибки, к которым приводит как первое, так и второе ВКБ-приближение. Обратите особое внимание на случай неглубокой ямы. Сравните с точностью при расчете первого возбужденного уровня энергии.

5. См. квантовый период из задачи 3. Квантовую частоту можно ввести соотношением $\omega_{\text{кв}} = 2\pi/\tau_{\text{кв}}$, т. е. $\hbar\omega_{\text{кв}} = dE/dn$. Более подробно о квантовых частотах см. в задаче 19. Обратите внимание на то, что структура спектра эквидистантна, хотя потенциал отличается от квадратичного. Объясните причину (сравните с эффективным потенциалом трехмерного осциллятора). Разложение потенциала вблизи минимума приводит к ангармоническим поправкам, которые дают вклады в уровни энергии, компенсирующие друг друга таким образом, что остается лишь общий сдвиг уровней энергии (изменение энергии нулевых колебаний по сравнению с линейными колебаниями).

Точные энергетические уровни вы найдете в п. 16 прил. 1.

6. См. пояснения к задачам 1, 4 и 5.

7. Точные значения уровней энергии см. в п. 15 прил. 1.

О квантовых частотах сказано в пояснении к задаче 5.

8. См. предыдущую задачу, а также пояснения к задаче 1.

Какое впечатление сложилось у вас о точности первого квазиклассического приближения при расчете энергии нулевых колебаний и слабовозбужденных уровней энергии? Ведь обычно считается, что применять методы ВКБ можно только для больших квантовых чисел. А насколько увеличивает точность поправка второго квазиклассического приближения в правилах квантования (16)? Быть может, в предыдущих задачах подбирались выгодные потенциальные модели? Что же способствовало столь большой точности? Постарайтесь не спешить с окончательными выводами, а перейдите к другим примерам как

плавных потенциалов, так и имеющих различные особенности (скачки, изломы, граничные условия непроницаемости и т. п.).

9. После получения ответа в общем виде перейдите к наиболее интересным частным случаям. Найдите поправки за счет второго ВКБ-приближения (см. общую формулу (16)).

Посмотрите, с какой точностью удастся получить основной и первый возбужденный уровни энергии для четверного потенциала (и квадратичной зависимости кинетической энергии от импульса), сравнивая относительные ошибки для первого и второго квазиклассического приближения. Точные значения для энергии вы найдете в п. 20 прил. 1. Добавьте получаемые выводы к тому, что уже накопилось по предыдущим задачам. Таким образом, вы уже сталкивались и со случаем плавных потенциалов, имеющих простой минимум (с различными асимптотическими законами неограниченного возрастания и перехода к свободному движению — нулевому значению), и со случаем менее благоприятным для квазиклассики — четверным потенциалом (кстати, когда такой потенциал может появиться на практике?).

10. Опирайтесь на неявную запись точного решения для уровней энергии в п. 5 прил. 1. При указанном в правилах квантования отсчете квантового числа n от равного нулю значения имеем

$$\gamma = 1 - \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}}.$$

А как записать эту величину для часто используемого в задачах с бесконечной глубины ямой отсчета n от единицы?

В чем преимущества такой записи ответа? Какие обобщения допускает запись уровней энергии через $\gamma(E)$? Какие влияния на уровни энергии вбирает величина γ ? Что получится для других моделей движения в сглаженной яме (по сравнению с граничными условиями непроницаемости даже конечная прямоугольная яма со скачками потенциала фактически отвечает размазыванию движения: квантовая картина определяется не столько видом потенциала, сколько поведением волновой функции, удовлетворяющей дифференциальному уравнению второго порядка по координатам, так что даже скачок потенциала отзывается только на второй производной волновой функции)?

См. также задачу 24 из § 1.

11. Пользуйтесь неявной формой записи уровней энергии (см., например, п. 5 прил. 1). Такая форма записи уровней энергии чрезвычайно удобна в тех случаях, когда вас интересуют вариации энергии (см. параметрическое варьирование уровней энергии в § 15).

Рассмотрите случай достаточно глубокой ямы (где представляют интерес как слабовозбужденные состояния, так и состоя-

ния с малой энергией связи) и мелкой ямы (в общем случае, конечно, имеется в виду соотношение между глубиной и шириной ямы, обеспечивающее либо сильную, либо слабую «вместимость» ямы). В последнем случае в яме будет только одно связанное состояние. Какой же смысл можно придать результату для квантового периода в такой слабой яме? Не спешите с ответом. Учтите возможность инфинитного движения в одном из направлений (не яма, а уступ, отдельный скачок). См. задачу 19.

12. Имеется в виду граничное условие непроницаемости, т. е. обращения в ноль волновой функции на границе движения. Расширьте потенциал до симметричного (четного относительно граничной точки) и примените правила полуполого квантования, отбирая нечетные квантовые числа. Объясните, почему именно эти состояния дадут вклад в исходную задачу. Где пригодятся аналогичные правила с четными квантовыми числами?

Заметьте, как проявляется закон сохранения четности в такого типа задачах. Дайте другие примеры действия этого закона (конкретные).

13. Формально можно использовать результат предыдущего подхода, трактуя вклады в фазовую добавку правил квантования γ как результат отражения от плавной части потенциала (соответствующая точка поворота дает вклад в γ , равный $1/4$) и от непроницаемой границы (отдельная граничная точка вносит в γ число $1/2$). Строгий расчет подтверждает правильность такой трактовки, однако точный ответ касается случая постоянного потенциала на рассматриваемом интервале или очень хорошего приближения для больших (по сравнению со значениями потенциала) энергий. В противном случае возникают критические ситуации (см. задачи 14—16).

14. Когда граница близка к положению равновесия, используйте разложение потенциала вблизи точки границы. При границе, удаленной от точки минимума осцилляторного потенциала (кстати, насколько?), простые результаты вы получите, если положение равновесия останется вне области движения. Здесь выделите малые энергии, для которых аппроксимируйте потенциал линейной функцией, не забывая о поправках на кривизну, и большие энергии, где вновь фактическое отклонение границы от положения равновесия не существенно. Если же минимум осцилляторного потенциала находится внутри области движения (все случаи легко разберете на рисунках), то рассмотрите область малых энергий, где граница будет очень слабо влиять на положение уровней. В случае больших энергий можете опираться на результат задачи 12, но особое внимание уделите критическому диапазону энергии, где происходит переход классических точек поворота «с плавной потенциальной кривой на стенку». Фактически эти точки находятся на координатной оси, так что речь идет о точках пересечения кривой потенциала с

горизонтальной прямой уровня энергии, т. е. энергия близка к значению потенциала в особой точке.

Какие физические приложения имеет рассматриваемая модель?

15. См. замечания к предыдущей задаче. Рассмотрите различные возможные случаи. Укажите конкретные физические применения.

17. Опирайтесь на точные значения энергии из п. 17 прил. 1. Правила квантования второго ВКБ-приближения для потенциалов с особенностями имеют вид

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \left[\oint U'' p dx - \frac{5}{6} \frac{\partial}{\partial E_n} \oint (U')^2 p dx \right] = \\ = h(n + \gamma), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

Для рассматриваемого граничного условия обращения в ноль волновой функции фазовая добавка равна $\gamma = 3/4$.

Убедитесь, что относительная ошибка при расчете основного уровня энергии по формуле первого квазиклассического приближения равна $-0,8\%$, а учет поправки второго приближения делает относительную ошибку равной $+0,06\%$ (!), тогда как для первого возбужденного уровня энергии относительная ошибка уменьшается по абсолютной величине еще на порядок (в обоих случаях). Найдите соответствующие значения ошибок.

Самостоятельно найдите поправки третьего квазиклассического приближения (помня об особенности потенциала) и покажите, что их использование не улучшает точности расчета энергии нулевых колебаний.

Чем же можно объяснить столь высокую точность квазиклассических правил квантования даже для энергии основного состояния? Что в данном конкретном случае способствовало квазиклассике? Отметим, что следует принимать во внимание общий ход потенциала, характер особой точки и возможность трактовки основного состояния в заданной яме как возбужденного в некоторой расширенной. Что можно сказать об изменении относительной ошибки при переходе от основного уровня энергии к первому возбужденному? Является ли эта закономерность общей для всех потенциалов или характерна только для линейного потенциала (см. другие модели в первых задачах этого параграфа)? Что можно сказать о переходе от первого возбужденного уровня энергии к последующим?

Попытайтесь теперь суммировать выводы о точности квазиклассических правил квантования при расчете уровней энергии. Почитайте, что по этому поводу написано в учебниках, где слишком осторожно оценивают возможности правил квантования. Означает ли столь высокая точность квазиклассических правил квантования, что и в вопросе о других характеристиках

стационарных состояний следует также ожидать подобных результатов? Что можно сказать о квазиклассической аппроксимации для волновой функции?

18. См. пояснения к предыдущей задаче. В квазиклассических правилах квантования (17) для данного граничного условия нужно брать в первом ВКБ-приближении $\gamma = 1/4$ (объясните, почему именно это число), а во втором приближении $\gamma = 1/4 - \hbar\beta/4\pi \sqrt{2mE^3}$. Попытайтесь найти общий вид γ для такого типа граничных условий. Где фактически возникают такие граничные условия?

Все сравнения и выводы делайте по программе предыдущей задачи.

19. Эти правила квантования вы найдете в пояснениях к решению задачи 1 (помните, однако, что формула (16) отвечает плавному потенциалу, а в более общем случае справедлива формула (17) с соответствующими значениями величины γ). Плавной мерой структуры энергетического спектра может служить плотность состояний dn/dE (речь идет об одномерном движении), с которой можно связать характерные частоты и периоды

$$\hbar\omega_{\text{кв}} = dE/dn; \tau_{\text{кв}} = \hbar dn/dE; \omega_{\text{кв}} = 2\pi/\tau_{\text{кв}},$$

которые будем называть квантовыми. Во-первых, с помощью этих величин уточняется квазиклассическое соотношение $\Delta E = \hbar\omega_{\text{кв}}$ для расстояния между соседними уровнями энергии и классической частотой колебаний (являющееся одним из проявлений принципа соответствия). Вместо приближенного равенства $\Delta E = \hbar\omega_{\text{кв}}$, предполагающего большие энергии, используется другая мера структуры энергетического спектра $\omega_{\text{кв}}$, которая определена для всех энергий. Каким образом выразить более точно расстояние между соседними уровнями энергии (например, для плавного потенциала получите такие формулы на основе квазиклассических правил квантования (16) более высокого приближения)?

Во-вторых, квантовые периоды и частоты определяют время движения пакетов стационарных состояний. Исследуйте этот вопрос более подробно (начните с непрерывного спектра для рассеяния и полуфинитного движения). Покажите, что движение центра пакета совершается по правилам, где классическое время перемещения из одной точки в другую получает чисто квантовую добавку, определяемую прежде всего энергетической зависимостью фаз квазиклассических волновых функций стационарных состояний (точнее — граничными фазами отражения). Как видите, если амплитуды функций определяют интегральные эффекты движения, например коэффициент прозрачности, то фазы дают более тонкие кинетические детали нестационарного движения. Так устанавливается связь стационарных характеристик с нестационарными.

Затем перейдите к квазидискретному спектру энергии финитного движения. Здесь вы найдете связь периода пакетных колебаний в яме $\tau_{\text{кв}}$ с фазами отражения, входящими в величину γ из правил квантования, т. е. получите квазиклассическую трактовку формулы $\tau_{\text{кв}} = \hbar dn/dE$.

В общем случае согласно формуле (17) квантовый период

$$\tau_{\text{кв}} = \tau_{\text{кл}} - \hbar \frac{d\gamma}{dE} - \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{U'' dx}{p} + \frac{5\hbar^2}{24} \frac{\partial^3}{\partial E^3} \oint \frac{(U')^2 dx}{p}$$

содержит как обычные квазиклассические поправки в виде фазовых интегралов, так и особые (граничные, критические) добавки за счет энергетической зависимости γ . В случае плавного поведения потенциала остаются только первые (их можно тогда объединить). Они оказываются малыми вплоть до энергии основного состояния, в чем вы уже имели возможность убедиться (еще раз проверьте это утверждение на моделях данного параграфа). В случае же особенностей потенциала основную роль в критическом диапазоне энергий играет добавка $-\hbar d\gamma/dE$. При этом квантовые периоды (и частоты) могут существенно отличаться от классических, так как эта чисто квантовая добавка компенсирует или сглаживает особенности. Например, в случае простого максимума потенциала классический период стремится к бесконечности при приближении энергии к критическому значению, отвечающему максимуму потенциала, что по обычному соотношению квазиклассики означало бы уплотнение уровней энергии. Однако этого не происходит, так как квантовый период оказывается конечной, медленно изменяющейся величиной, — квантовая добавка гасит особенность классического периода. В связи с этим см. задачу 28 в § 5 о квантовом математическом маятнике.

В отличие от обычно принятых в квазиклассическом приближении представлений о роли классической частоты $\omega_{\text{кл}}$ в описании структуры энергетического спектра, складывается своеобразная картина: в области малых квантовых чисел n квазиклассическое приближение дает очень хорошую точность, тогда как среди больших n могут возникнуть островки (критический диапазон), где структура энергетического спектра не описывается $\omega_{\text{кл}}$.

20. Проверьте непосредственным вычислением шпура в энергетическом представлении. См. применение этого соотношения в ближайших задачах данного параграфа (а также в 4-й § 15). Здесь же укажем еще одну возможность использования этого скромного на вид равенства. Запишите рядом с указанным соотношением для n такое же для соседнего квантового числа $n + 1$. Вычитая одно из другого и считая разность энергий для соседних уровней небольшой, разложите результат по степеням

этой разности, учитывая, что квантовые частоты и периоды можно записать в виде

$$\tau_{\text{кв}} = \hbar dn/dE = \hbar \operatorname{Sp} \delta(E_n - \hat{H}).$$

Таким образом, вы получите формулу для расстояния между соседними уровнями энергии в виде разложения по степеням постоянной Планка и в зависимости от квантовых периодов (или частот) и производных по энергии нарастающего порядка от этих величин. Далее можно перестроить ряд, используя уже квазиклассические формулы для самих квантовых частот соответствующего типа (в этих соотношениях нет ограничений на вид потенциала — его плавность и т. п.).

21. На основании преобразования Лапласа получаем

$$\int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \frac{d\beta}{2\pi i \beta} e^{\beta E_n} \operatorname{Sp} e^{-\beta \hat{H}} = \operatorname{Sp} \theta(E_n - \hat{H}) = n + \frac{1}{2}; \quad \sigma \rightarrow +0.$$

Таким образом, задача построения квазиклассических правил квантования сводится к отысканию соответствующей аппроксимации для $\operatorname{Sp} \exp(-\beta \hat{H})$ при $\operatorname{Re} \beta > 0$. Далее можно использовать различные приемы вычисления такого типа шпура (см., например, следующую задачу).

22. Положите, например, $\hat{A} = -\beta \hat{U}$ и $\hat{B} = -\beta \hat{T}$. Вычислите шпур в координатном представлении. Используйте собственные функции импульса (подробности см. в следующей задаче).

23. Пользуемся более точной операторной симметризацией (см. § 10) $\exp(-\beta \hat{H}) = \exp(-\beta \hat{U}/2) \exp(-\beta \hat{T}) \exp(-\beta \hat{U}/2) [1 + (\hbar^2 \beta^3/24) (\hat{U}')^2 \hat{T}'' - (\hbar^2 \beta^3/12) \hat{U}'' (\hat{T}')^2 + O(\hbar^3)]$, где штрихи означают производные по соответствующим аргументам. Отсюда на основании инвариантности шпура, используя плоские волны $\langle x | p \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$, имеем:

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp} e^{-\beta \hat{H}} &= \int dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \\ &= \iint \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \left[1 - \frac{\hbar^2 \beta^3}{24} (T')^2 U'' + O(\hbar^4) \right] e^{-\beta H(p, x)}, \end{aligned}$$

$H(p, x)$ — соответствующая классическая функция Гамильтона системы. Подстановка этого выражения в левую часть формулы задачи 21 дает

$$\iint \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \left[1 - \frac{\hbar^2}{24} (T')^2 U'' \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \theta[E_n - H(p, x)] + O(\hbar^3),$$

а правила квантования преобразуются к окончательному виду

$$\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

где интегралы берутся между классическими точками поворота. Для квадратичной зависимости кинетической энергии от импульса $T(p) = p^2/2m$ формула правил квантования переходит в формулу задачи 1.

24. Например, для одномерной энергетической плотности состояний $\nu(E)$ получается следующее выражение:

$$h\nu(E) = h \operatorname{Sp} \delta(E - \hat{H}) = \oint \frac{dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \oint \frac{U'' dx}{v} + O(\hbar^4).$$

Каким образом эта величина связана с квантовым периодом $\tau_{\text{кв}}$ (задача 19)?

25. Вычисления аналогичны проведенным в задаче 23 и дают формулу для плотности вероятности координат

$$\rho_n(x) = \frac{2}{\tau_{\text{кв}}} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2U'' \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} - (U')^2 \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \right\} \frac{\theta[E_n - U(x)]}{v},$$

в которой квантовый период $\tau_{\text{кв}}$ также содержит члены порядка $\hbar^2$, однако их объединение с подобными поправками в фигурных скобках нецелесообразно, поскольку при этом теряется смысл структуры разложения. В этом расчете удобно использовать статистический оператор рассматриваемого стационарного состояния в виде (см. § 17) $\hat{\rho}_n = \delta(E_n - \hat{H}) / \operatorname{Sp} \delta(E_n - \hat{H})$, а затем найти его диагональные матричные элементы в координатном представлении, используя нефункциональный подход предыдущих задач.

Сравните со стандартным функциональным методом квазиклассического разложения для координатной волновой функции стационарного состояния.

Не забудьте о распределении по импульсам. Укажите применения полученным формулам.

26. Используйте результаты предыдущей задачи. Каким образом можно найти такие средние значения $\langle f \rangle_n$ в обычном функциональном подходе ВКБ-метода? Нужно было бы получить приближенные выражения для координатной волновой функции стационарного состояния в классической и подбарьерной областях вдали от точек поворота, а также в окрестности этих точек, сшить такие асимптотики, а затем вычислить соответствующий координатный интеграл, собрав и оценив все вклады от пяти (!) областей интегрирования, не забывая о нормировке (во втором квазиклассическом приближении). Продолжайте все это, и вы осознаете существенное преимущество нефункционального подхода, дающего «глобальное» разложение, по сравнению с функциональным способом локальных разложений.

В качестве примера применения формулы для среднего значения функции от координат рассмотрите дисперсию координаты, сводящуюся к величине $\langle x^2 \rangle_n$, для четверного потенциала —

$U(x) = \beta x^4$. Посмотрите, какую долю основной, классической части составляет квантовая добавка даже для основного состояния. Разберите другие примеры.

Получите аналогичную формулу для функции от импульса. Что будет в случае произвольной зависимости кинетической энергии от импульса?

27. Обратите особое внимание на квадратичные поправки к энергии (как в первом, так и во втором квазиклассическом приближении). Проверьте полученный результат на примере расчета ангармонических поправок осциллятора.

28. Покажите, что в классически доступной области движения квазиклассические решения стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении имеют вид $\frac{1}{\sqrt{K(x)}} \times \exp\left[\pm i \int^x K(x') dx'\right]$, где величина K удовлетворяет уравнению $K^2(x) = k^2(x) + V\overline{K(x)} [1/V\overline{K(x)}]''$. Выпишем соответствующее разложение не только во втором, но и в третьем ВКБ-приближении:

$$K = k \left[1 + \frac{5}{64} \frac{\hbar^2 F^2}{m T^3} - \frac{1}{16} \frac{\hbar^2 F'}{m T^2} - \frac{1105}{8192} \frac{\hbar^4 F^4}{m^2 T^6} + \frac{221}{1024} \frac{\hbar^4 F^2 F'}{m^2 T^5} - \right. \\ \left. - \frac{19}{512} \frac{\hbar^4 (F')^2}{m^2 T^4} - \frac{7}{128} \frac{\hbar^4 F F''}{m^2 T^4} + \frac{1}{128} \frac{\hbar^4 F''}{m^2 T^3} + O(\hbar^6) \right],$$

где $T = E - U(x)$, $F = -U'(x)$.

Выбор нижнего предела фазовых интегралов для таких решений в виде бегущих волн не существен в задачах рассеяния с большими энергиями, однако для получения правил квантования, например, это — важный вопрос, так как непосредственный переход к обычно фигурирующим классическим точкам поворота затруднен расходимостью интегралов уже во втором ВКБ-приближении. Выход из положения дает следующая уловка. Пока нижний предел указанных интегралов выбран в некоторой фиксированной точке вдали от поворотной, можно преобразовать интеграл, вынося дифференцирование по энергии, как по параметру, за его пределы, что дает во втором ВКБ-приближении выражение

$$\int_a^x K dx = \int_a^x k dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_a^x U'' k dx + \frac{5\hbar^2}{24m} \frac{\partial^3}{\partial E^3} \int_a^x (U')^2 k dx.$$

А далее можно и в фазовый множитель добавить аналогичный интеграл, не зависящий от координат, но с классической точкой поворота. Таким образом, во втором квазиклассическом приближении получим решения с фазовым интегралом

$$\int_b^x k dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \int_b^x U'' k dx + \frac{5\hbar^2}{24m} \frac{\partial^3}{\partial E^3} \int_b^x (U')^2 k dx,$$

что приведет при выводе правил квантования к соответствующему изменению формулы Бора — Зоммерфельда.

Этот же прием целесообразно использовать и при комплексном обходе точек поворота, вынося в контурных интегралах производные по энергии за знак интеграла, а уже затем «оседая» на промежутки действительной оси координат между точками поворота. То же касается, разумеется, и третьего квазиклассического приближения.

В общем случае вы придете к правилам квантования (17), а для плавных полей получите формулу (16). Отмеченные же случаи излома и скачка на дне ямы потребуют дополнительного сшивания волновой функции связанного стационарного состояния в особой точке (обычно же такая сшивка проводится для произвольной точки в классически доступной области движения ямы, вдали от точек поворота). Эту часть задачи решите самостоятельно. Подобные замечания нужно сделать и относительно рассеяния на скачке и на изломе, где сшивка в особой точке даст непосредственный эффект надбарьерного отражения. Покажите, что коэффициент прозрачности для больших энергий равен

$$T_{\text{пр}} = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{K_1}{K_2}} - \sqrt{\frac{K_2}{K_1}} \right)^2 + \frac{1}{16K_1K_2} \left(K_1' - K_2' \right)^2 \right]^{-1},$$

где индексы 1 и 2 у величины K и ее производной по координате означают, соответственно, координатные пределы слева и справа от особой точки потенциала типа излома и скачка. Таким образом, отражение определяется двумя величинами, одну из которых

$$\frac{1}{4} \left(\sqrt{K_1/K_2} - \sqrt{K_2/K_1} \right)^2$$

условно можно назвать членом асимметрии, а вторую —

$$\frac{1}{16K_1K_2} \left(\frac{K_1'}{K_1} - \frac{K_2'}{K_2} \right)^2 -$$

силовым членом. Например, в силовом члене

$$\frac{K'}{K} = \frac{F}{2T} \left[1 - \frac{15 \hbar^2 F^2}{32 m T^3} + \frac{9 \hbar^2 F'}{16 m T^2} - \frac{1}{8} \frac{\hbar^2 F''}{m T F} + O(\hbar^4) \right].$$

Рассмотрите, что получается в первом и во втором квазиклассическом приближении для разного вида скачков потенциала (соответствующие предельные значения производных могут быть одинаковыми и разными при скачке самого потенциала), для излома (здесь сравните результат с соответствующим коэффициентом отражения для линейного барьера), для несимметричных квадратичного, кубического и четверного потенциалов

$$U(x) = -|x|^l \begin{cases} \beta_1, & x < 0; \\ \beta_2, & x > 0; \end{cases} \quad l = 2, 3, 4.$$

Что можно сказать о такого типа симметричных потенциалах? Когда квазиклассика в указанной форме не улавливает отражения? Какие квазиклассические методы применяются в случае гладких вершин барьера?

Рассмотрите квазиклассическое приближение (второе и третье) для подбарьерных областей движения. Укажите применения. Дайте соответствующие примеры.

Сделайте общие выводы о квазиклассическом приближении более высокого порядка для волновых функций координатного представления и о соответствующих применениях такого функционального подхода (локальной квазиклассики). Сравните с нефункциональными методами предыдущих задач (глобальной квазиклассикой). Заметьте, что в рассматриваемых задачах для стационарных состояний имеется две проблемы: правила квантования для энергии и приближения для различных других характеристик, являющихся функциями от энергии как в непрерывном, так и в дискретном спектре. Сделайте обобщающие выводы.

§ 34. ОПЕРАТОРЫ ЭВОЛЮЦИИ (ПРОПАГАТОРЫ)

Держитесь к задаче возможно ближе, но будьте готовы отойти от задачи настолько далеко, насколько вас вынуждают обстоятельства.

Д. Поля

1. Величины A , J и X , конечно, являются операторами (в этом параграфе чаще всего фигурируют операторы, так что специальные значки опускаются). Вещественный аргумент t совсем не обязательно временной (приведите примеры). Обратите внимание, что у основания пропагатора иногда выписан параметрический оператор A (генератор). Отмеченные свойства касаются любых значений аргументов, в частности порядок следования t_0 , t_1 и t не существен. При каком условии пропагатор является унитарным оператором? Поинтересуйтесь конкретными применениями пропагаторов в механике и статистике.

3. $J_A^{(')} (t, t_0) = J_A^{-1} (t, t_0).$

4. Например, для первого уравнения $Z(t) = J_A(t, t_0) \times Z_0 J_A^{-1}(t, t_0).$

5. Для первого уравнения

$$X(t) = J_A(t, t_0) X_0 + \int_{t_0}^t dt_1 J_A(t, t_1) B(t_1).$$

6. $J_{A+B}(t, t_0) = J_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 J_A(t, t_1) B(t_1) J_{A+B}(t_1, t_0) =$

$$= J_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 J_A(t, t_1) B(t_1) J_A(t_1, t_0) + \\ + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 J_A(t, t_1) B(t_1) J_A(t_1, t_2) B(t_2) J_A(t_2, t_0) + \dots$$

$$7. J_{A+B}(t, t_0) = J_A(t, t_0) \tilde{J}_B(t, t_0);$$

$$\tilde{B}(t_1) = J_A^{-1}(t_1, t_0) B(t_1) J_A(t_1, t_0).$$

9. О чем свидетельствует это соотношение? Обратитесь к T -экспоненте.

$$10. J_A(t, t_0) = \exp \left[\int_{t_0}^t A(t_1) dt_1 \right].$$

$$11. \frac{\partial}{\partial \lambda} J_A(t, t_0) = \int_{t_0}^t dt_1 J_A(t, t_1) \frac{\partial A}{\partial \lambda} J_A(t_1, t_0).$$

$$12. \frac{\partial}{\partial \lambda} e^A = e^A \int_0^1 dt e^{-tA} \frac{\partial A}{\partial \lambda} e^{tA}.$$

Запишите результат так, чтобы экспонента отщепилась не первым, а последним множителем. Где применяется это правило? Как дифференцировать соответствующий операторный синус?

13.

$$J_A(t, t_0) = 1 + \int_{t_0}^t dt_1 A(t_1) J_A(t_1, t_0);$$

$$J_A(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n A(t_1) A(t_2) \dots A(t_n).$$

Сделайте то же для пропагатора $J_A^{(')} (t, t_0)$.

14. Например, для обычной (прямой) хронологизации

$$T \exp \left[\int_{t_0}^t A(t_1) dt_1 \right] = \begin{cases} J_A(t, t_0), & t > t_0; \\ J_A^{(')} (t, t_0), & t < t_0. \end{cases}$$

А что получается для обратной хронологизации?

15. Используйте свойства пропагаторов.

17. Опирайтесь на результаты задачи 7.

$$e^{A+B} = e^A T \exp \left(\int_0^1 dt e^{-tA} B e^{tA} \right).$$

18. См. задачу 7.

19. См. задачи 7, 17 и 18.

23. Функцией распространения будем называть матричные элементы оператора движения уравнения Шредингера $U(qt; q_0 t_0) \equiv \langle q | U(t, t_0) | q_0 \rangle$. Для свободной частицы $\hat{U}(t, t_0) =$

$= \exp[-i(t-t_0)\hat{p}^2/2m\hbar]$, так что в энергетическом и импульсном представлениях $U(Et; E_0t_0) = \delta(E-E_0) \exp[-i(t-t_0)E/\hbar]$; $U(\mathbf{p}t; \mathbf{p}_0t_0) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0) \exp[-i(t-t_0)\mathbf{p}^2/2m\hbar]$, а в координатном представлении

$$U(\mathbf{r}t; \mathbf{r}_0t_0) = \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)} \right]^{3/2} \exp \left[i \frac{m(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{2\hbar(t-t_0)} \right].$$

24. Имеется в виду, что гамильтониан частицы равен

$$\hat{H}(t) = \hat{p}^2/2m(t),$$

где введена гипотетическая зависимость массы от времени. В этом случае оператор эволюции картины Шредингера можно записать в виде

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-i \frac{\hat{p}^2}{2\hbar} \int_{t_0}^t \frac{dt'}{m(t')} \right].$$

Убедитесь в этом. Покажите, что функция распространения (координатная матрица пропагатора) соответствует решению задачи 23 с заменой

$$\frac{t-t_0}{m} \rightarrow \int_{t_0}^t \frac{dt'}{m(t')}.$$

Для иллюстрации квантовой диффузии (расплывания волнового пакета) возьмите начальное состояние с гауссовой волновой функцией в координатном представлении.

29. Речь идет об операторах $\hat{U}(t, t_0)$, $\hat{U}_0(t, t_0)$, $\hat{S}(t, t_0)$. Первый оператор связывает между собой представления Шредингера и Гейзенберга: $\Psi_{\Gamma} = \Psi(t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \Psi(t)$; $\hat{A}_{\Gamma}(t) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$;

второй — представления Шредингера и Дирака: $\Psi_{\text{Д}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \Psi(t)$; $\hat{A}_{\text{Д}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0)$;

третий — представления Гейзенберга и Дирака: $\Psi_{\text{Д}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_{\Gamma}(t)$; $\hat{A}_{\text{Д}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \hat{A}_{\Gamma}(t) \hat{S}^{-1}(t, t_0)$; $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) \hat{S}(t, t_0)$.

Убедитесь, что $\hat{U}(t, t_0)$ описывает движение системы в картине Шредингера (как именно?), $\hat{U}_0(t, t_0)$ имеет тот же смысл для системы с гамильтонианом $\hat{H}_0$, а $\hat{S}(t, t_0)$ является оператором движения в картине Дирака (взаимодействия). Особое внимание уделите последнему случаю (пропагаторной роли S -оператора).

31. Во всех случаях операторы производных (скоростей) dA/dt определяются соотношением

$$\langle \frac{dA}{dt} \rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle.$$

В картине Шредингера оказывается, что

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\}.$$

В картине Гейзенберга

$$\left(\frac{dA}{dt} \right)_\Gamma = \frac{\partial}{\partial t} A_\Gamma = U^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} A \right) U + \{H_\Gamma, A_\Gamma\}.$$

В картине Дирака

$$\left(\frac{dA}{dt} \right)_D = \frac{\partial}{\partial t} A_D + \{H_{1D}, A_D\} = U_0^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} A \right) U_0 + \{H_D, A_D\};$$

$$\frac{\partial}{\partial t} A_D = U_0^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial t} A \right) U_0 + \{H_{0D}, A_D\}; \quad H = H_0 + H_1.$$

Как и всегда, шредингеровские величины специальных значков не имеют. Чаше всего операторы физических величин (да и вспомогательные операторы) в картине Шредингера явно не зависят от времени, т. е. $\partial A/\partial t = 0$, так что все соотношения упрощаются (приведите, однако, примеры явной зависимости). Тогда в силу $\{A_\Gamma, B_\Gamma\} = \{A, B\}_\Gamma$ получаем очень важные для приложений уравнения движения, которые служат основой решения динамических задач в гейзенберговском представлении: $\partial A_\Gamma/\partial t = \{H, A\}_\Gamma$.

В представлении взаимодействия им соответствуют уравнения $\partial A_D/\partial t = \{H_0, A\}_D$.

32. Используйте уравнения движения предыдущей задачи. Дополнительно получите S -оператор для заряда в переменном однородном электрическом поле.

33. Познакомьтесь с основными свойствами оператора резольвенты. Фактически в задачах у нас будет встречаться только резольвента гамильтониана (см. § 2 и § 11).

34. Как связана энергетическая плотность состояний с оператором резольвенты гамильтониана? Какую роль играет резольвента в задачах рассеяния и связанных состояний? Приведите конкретные примеры.

Пассивный читатель с равной простотой воспринимает стандартные вычисления и чудо изобретательности, но потом, когда ему приходится действовать самому, оказывается, что все исчезло так же быстро, как когда-то было воспринято.

П. Халмош

1. Записывая уравнение Шредингера для системы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ в виде $(\hat{H}_0 - E)\Psi = -\hat{H}_1\Psi$ и используя оператор резольвенты невозмущенного гамильтониана $\hat{R}_0(E) = (\hat{H}_0 - E)^{-1}$, получаем для энергий, лежащих за пределами невозмущенного спектра, интегральную форму исходного уравнения $\Psi = -\hat{R}_0(E) \hat{H}_1\Psi$.

В нашей задаче возмущением является потенциальная энергия, а резольвента относится к свободному движению. Энергии связанных состояний лежат ниже границы сплошного спектра. В дальнейшем дополнительный нулевой значок у резольвенты писать не будем.

Вспомните основные свойства оператора резольвенты гамильтониана (будет фигурировать резольвента только этого оператора). Как решается аналогичная задача в непрерывной части спектра (рассеяние), где есть особенности резольвенты? Каким образом резольвента связана с пропагаторами, статистической суммой и энергетической плотностью состояний? Назовите применения оператора резольвенты в механике и статистике.

2. Явный вид операторного уравнения предыдущей задачи в координатном представлении

$$\Psi(\mathbf{r}) = - \int R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

действительно дает интегральное уравнение для волновой функции стационарного связанного состояния, а матричные элементы координатного представления резольвенты $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \equiv \langle \mathbf{r} | (\hat{T} - E)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle$ будем называть функциями Грина.

Как записать исходное уравнение в других представлениях? Какой вид имеет функция Грина в импульсном представлении? Покажите непосредственно, что функция Грина удовлетворяет

уравнению $(\hat{T} - E) R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, где имеется в виду действие гамильтониана «на индекс представления» $\mathbf{r}$, относящийся к любой размерности пространства, а роль гамильтониана выполняет оператор кинетической энергии. Запишите последнее уравнение, используя явный вид

оператора кинетической энергии в координатном представлении (одна частица, две частицы, одномерный случай, трехмерный и т. п.). Подробнее рассмотрите одномерный случай. Что получается, если невозмущенный гамильтониан содержит не только кинетическую, но и часть потенциальной энергии (в задачах будет встречаться такой случай)?

3. Обратитесь к теории интегральных уравнений. Какие «титлы» носит полученное в предыдущей задаче уравнение? Что называется собственным значением интегрального уравнения? Какая величина будет играть роль такого собственного значения в нашем уравнении? А как же найти интересующие нас значения энергии (собственные значения гамильтониана всей системы)? Познакомьтесь с общими свойствами собственных значений и методами решений такого типа интегральных уравнений, к которым относится и наше. Не увлекайтесь изучением всех вопросов их теории. Особое внимание уделите вариационным оценкам собственных значений и процедуре симметризации ядра интегрального уравнения (в нашем исходном уравнении роль этого ядра выполняет величина $-R(r, r'; E) U(r')$). При этом учитывайте свойства резольвенты. Уровни энергии ограничены снизу (существует основное состояние системы с наименьшей энергией). А что можно сказать о собственных значениях интегрального уравнения нашего типа?

Обязательно обратитесь к конкретному примеру потенциального поля (начните с прямоугольной одномерной ямы), выявите собственные значения интегрального уравнения и, помогая себе рисунками, установите соответствие между энергией и таким параметром. Сначала рассмотрите прямую связь (энергия фиксируется), а затем — наиболее интересную обратную связь (собственное значение интегрального уравнения фиксируется). Еще раз сформулируйте, что дано и что найти в каждой из постановок задачи. Практически в задачах встретятся оба подхода: заданы параметры потенциала, а требуется определить уровни энергии, или рассматривается условие появления связанного состояния (задана равная нулю энергия), а необходимо получить соответствующие критические значения параметров потенциала.

Что можно сказать о поведении волновой функции на больших расстояниях? Какие основные параметры размерности длины будут фигурировать в задаче?

4. См. задачи 18 и 20 из § 2. Вычисления можно проводить тем же способом, но помните, что в нашем случае $E = -|E|$ так что полюсы находятся в других местах плоскости комплексного импульса. Как непосредственно перейти от готовых функций Грина для задач рассеяния к функциям Грина связанных состояний?

5. См. § 2, задачи 21, 22. Видимо, в случае n -мерного пространства проще всего получить ответ, пользуясь не сфериче-

скими координатами, а декартовыми (в импульсном пространстве), если применить параметрическое интегрирование

$$\frac{1}{p^2/2m + |E|} = \int_0^\infty d\alpha \exp[-\alpha(p^2/2m + |E|)].$$

Тогда многомерный импульсный интеграл разбивается на произведение одностипных одномерных (разные массы), вычисление которых не служит затруднением, как и окончательное интегрирование по вспомогательному параметру. Приведем ответ для случая n измерений при изотропном квадратичном законе дисперсии частицы:

$$R(r, r'; E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \left(\frac{x}{2\pi |r - r'|} \right)^{n/2-1} K_{n/2-1}(x |r - r'|);$$

$$\hbar x = \sqrt{2m |E|}.$$

Здесь $K_n(z)$ — функции Макдональда (цилиндрические функции мнимого аргумента). Проверьте частные случаи одного, двух и трех измерений. Как будут выглядеть эти функции Грина для анизотропного квадратичного закона дисперсии и для нескольких частиц? Рассмотрите поведение ФГ на малых и больших расстояниях (по сравнению с чем?). Выпишите основные свойства функций Макдональда (ряды для различных индексов имеют разную структуру!). Отдельно запишите случаи четной и нечетной размерности пространства. Обратите внимание на общность асимптотик и на случай полуцелых индексов. Составьте справочную таблицу. Отметьте связь этих функций с функциями Ганкеля.

6. Не спешите с ответом. Подумайте, как результат зависит от следующих факторов: размерности пространства, вида закона дисперсии, формы и размеров потенциального поля. Как обстоит дело в нелокальном поле? В поле с притяжением и отталкиванием? Какие еще факторы могут оказывать влияние (магнитное поле, спин, другие частицы и т. п.) на формирование связанных состояний?

7. Уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(x)$ связанного стационарного состояния частицы с обычным законом дисперсии (эффективная масса m) в потенциальном поле $U(x)$, записанное в интегральной форме с помощью соответствующей функции Грина (см. задачу 5), имеет вид

$$\Psi(x') = -\frac{m}{\hbar^2 x} \int dx U(x) \Psi(x) \exp(-x |x - x'|); \quad \hbar x = \sqrt{2m |E|}.$$

(18)

Это частный случай уравнения задачи 7 из § 1 при $n = 1$. Приравняв нулю определитель Фредгольма и производя разложение по степеням малой величины $\hbar a \ll 1$ (a — размер области действия поля), выводим общую формулу для величины x

в случае слабой (мелкой или узкой) потенциальной ямы произвольного профиля с единственным связанным состоянием:

$$\kappa = -\frac{m}{\hbar^2} \int dx U(x) - \frac{m^2}{\hbar^4} \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(U_0^3 a^5). \quad (19)$$

Полученный результат содержит, в частности, уточнение известного (см. [1, с. 196]) выражения для энергии связи $|E|$. При чем формула для κ более удобна, чем непосредственное выражение для $|E|$ (кстати, выпишите его). Видно, что разложение ведется по малому параметру $ma^2 U_0 / \hbar^2 \ll 1$ и охватывает как случай мелкой (малая характерная глубина U_0), так и узкой (малый пространственный размер a) ямы.

Попробуйте решить интегральное уравнение (18), используя метод последовательных приближений, считая волновую функцию постоянной в области действия поля (в первом приближении). Получив первое приближение, учтите поправки к нему (для энергии и для волновой функции). Сравните полученный ответ с соответствующим разложением известного значения энергии связи в случае модели прямоугольной потенциальной ямы.

9. В задаче 7 речь шла о моделируемой потенциальной ямой области эффективного притяжения. Возникает вопрос, как повлияет на формирование связанного состояния наличие областей отталкивания. При каких условиях связанных состояний не будет?

Особый интерес вызывает случай в среднем равного нулю потенциала ($\int dx U(x) = 0$). Например, когда имеются яма и барьер, взаимно компенсирующие друг друга. Любопытно, что связанное состояние все еще сохраняется. Найденное в задаче 7 выражение (19) описывает эффект (второе слагаемое) и в случае скомпенсированного поля, а в следующем приближении на основе малости величины $\kappa L \sim (mU_0 a L / \hbar^2)^2$, где L — расстояние между неоднородностями поля, имеем

$$\kappa = -\frac{m^2}{\hbar^4} \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| - \\ - \frac{m^3}{\hbar^6} \iiint dx dx' dx'' U(x) U(x') U(x'') |x - x'| |x' - x''| + O(U_0^4 a^4 L^3).$$

При этом можно показать, что $\iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| < 0$, если $\int dx U(x) = 0$.

Таким образом, если для отдельной потенциальной ямы энергия связи имела порядок $U_0 m U_0 a^2 / \hbar^2$, то для равного нулю в среднем потенциала энергия связи $|E| \sim U_0 (m U_0 a^2 / \hbar^2)^2$ (считаем, что $L \sim a$) значительно уменьшается, как и следовало ожидать. Платой за возможность захвата частицы слабым полем является большая величина квантового эффекта проникновения в классически недоступную область движения $E < U(x)$ далеко за пре-

делу ямы, на расстояние порядка $\kappa^{-1} \sim |E|^{-1/2}$, так как волновая функция $\Psi(x) \sim \exp(-\kappa|x|)$ — вне поля.

Соотношение (19) можно использовать и для оценки таких параметров потенциала разного знака с $\int U(x) dx > 0$, при которых возникает (исчезает) связанное состояние в слабом поле.

В как угодно слабом одномерном поле притяжения связанное состояние существует всегда, тогда как наличие областей отталкивания — барьеров — способно вытеснить связанное состояние. Это чисто квантовое явление наблюдается при следующих значениях критических параметров поля, получаемых из формулы (19) при $\kappa \rightarrow 0$:

$$\int U(x) dx = -\frac{m}{\hbar^2} \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(U_0^4 a^4 L^3).$$

Таким образом, выражение (19) содержит три результата: а) уточнение обычной формулы для энергии связи в слабом поле притяжения ($\int U(x) dx < 0$); б) утверждение о сохранении связанного состояния для скомпенсированного поля ($\int U(x) dx = 0$); в) критическое условие вытеснения связанного состояния в случае преобладания отталкивания ($\int U(x) dx > 0$).

Рассмотренные случаи знакопеременных полей относились к достаточно близким ($\kappa L \ll 1$) областям притяжения — отталкивания. Если же область отталкивания (барьер) удалена от области притяжения (ямы) на значительное расстояние, то уровень энергии в яме будет лишь слабо возмущен. Найдите соответствующую поправку к энергии связи частицы в слабой яме при наличии удаленной области отталкивания.

О решении данной задачи с помощью вариационного метода см. п. 16 в § 37.

11. Подставляя в интегральное уравнение

$$\kappa \Psi(x) = -\frac{m}{\hbar^2} \int dx' U(x') e^{-\kappa|x-x'|} \Psi(x')$$

заданную функцию потенциальной энергии $U(x) = -u\delta(x)$, получаем

$$\kappa \Psi(x) = \frac{mu}{\hbar^2} \Psi(0) e^{-\kappa|x|}.$$

Отсюда, во-первых, полагая $x = 0$, имеем $\kappa = mu/\hbar^2$ и $E = -mu^2/2\hbar^2$, а во-вторых, $\Psi(x) = \Psi(0) \exp(-\kappa|x|)$, где $\Psi(0)$ определяется из условия нормировки. Ответ: для единственного связанного стационарного состояния в δ -яме $E_0 = -mu^2/2\hbar^2$; $\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0} \exp(-\kappa_0|x|)$; $\kappa_0 = mu/\hbar^2$.

12. Рассмотрите малые и большие расстояния между ямами. Найдите критическое расстояние. Перейдите к случаю одинаковых ям. Нарисуйте графики зависимости уровней энергии от

расстояния между ямами и зависимости волновых функций от координат при малых, больших и критическом расстояниях между ямами.

13. Подробнее остановитесь на случае одинаковых ям и расстояний. Изобразите графики волновых функций связанных состояний. Сравните с двумя ямами из предыдущей задачи. Что будет происходить при увеличении числа ям?

14. Основывайтесь на результатах задач 9 и 7.

18. $R(x, x'; E) = (m/\hbar^2) \{ \exp[-\kappa |x - x'|] - \exp[-\kappa(x + x')] \}$; $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}$.

22. Что получается при $L \rightarrow \infty$? Используйте этот предельный переход для проверки полученного ответа. Как перейти к случаю задачи 18?

23. Сравните с влиянием одиночного экрана (одностороннего отражателя) в задаче 21.

24. Проверьте ответ при $U_0 \rightarrow 0$ и $U_0 \rightarrow \infty$.

25. Используйте вариационную оценку собственных значений интегрального уравнения. Рассмотрите случаи малого и большого перепадов потенциала, используя соответствующие пробные волновые функции. Сравняйте с п. 7 прил. 1. Проверьте полученную оценку критической глубины при малом перепаде на модели потенциала из книги [9, т. 2, с. 602].

26. См. предыдущую задачу и замечания к ней.

27. Рассмотрите уравнение теории возмущений для резольвенты $\hat{R} = \hat{R}_0 - \hat{R}_0 \hat{U} \hat{R}$, считая заданный потенциал возмущением и переходя к координатному представлению (одномерная ФГ невозмущенной задачи найдена в задаче 4).

30. $R(x, x'; E) = (\kappa/2|E|) \exp(-\kappa |x - x'|/\sqrt{2}) \sin(\kappa |x - x'|/\sqrt{2} + \pi/4)$; $\hbar\kappa = \sqrt{B^{-1}|E|}$. Найдите ФГ для четверного закона дисперсии в трехмерном случае.

31. Начните с δ -ямы ($U(x) = -u\delta(x)$). Тогда получается уравнение для определения уровней энергии (из соответствующего интегрального уравнения) $uR(0, 0; E) = 1$. Таким образом, все определяется поведением величины

$$R(0, 0; E) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{T(p) + |E|}.$$

Для квадратичного закона дисперсии $R(0, 0; E) = m/\hbar^2$. Получаем соответствующее выражение энергии связи. Для четверного закона дисперсии $[R(0, 0; E)]^{-1} = 2\sqrt{2}\hbar\alpha^{1/4}|E|^{3/4}$ и т. д. Однако определяющий величину $R(0, 0; E)$ интеграл по импульсам может расходиться при больших p . Найдите значения $R(0, 0; E)$ для $T(p) = \alpha|p|^l$. При каких l обеспечена сходимость?

Если же интеграл расходится, то δ -потенциал нельзя использовать для аппроксимации короткодействующего поля. Если же интеграл сходится и при $|E| \rightarrow 0$, то рассматриваемый короткодействующий потенциал не при всех параметрах приводит к связанному состоянию: критическая глубина будет определяться уравнением $uR(0, 0; 0) = 1$.

32. В случае n измерений для некоторого закона дисперсии разбираем два вопроса: когда можно использовать δ -аппроксимацию (и каковы ее возможности в описании связанного состояния) и когда вообще возможно образование связанных состояний в слабом поле.

Первый вопрос решается так, как уже намечено в предыдущей задаче: для δ -ямы в пространстве любого числа измерений интегральное уравнение приводит к выражению $uR(0, 0; E) = 1$. При этом

$$R(0, 0; E) = \frac{1}{h^n} \int \frac{dp}{T(p) + |E|},$$

или в записи с помощью энергетической плотности состояний $\nu(E)$

$$R(0, 0; E) = \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{\nu(\varepsilon) d\varepsilon}{\varepsilon + |E|}.$$

Тогда сходимость на верхнем пределе определяет возможность использования δ -модели (например, для l -степенного закона дисперсии при больших импульсах в n -мерном случае получаем условие применимости такой модели $n < l$). При указанной возможности сходимость на нижнем пределе при $|E| \rightarrow 0$ дает критические свойства такой модели (например, для того же степенного поведения, но при малых импульсах получаем условие возможности критических параметров $n > l$, т. е. для одинакового степенного поведения при всех импульсах выполнение этих двух условий невозможно — если δ -модель существует, то она всегда удерживает связанное состояние). Рассмотрите возможные случаи степенного поведения плотности состояний. Сформулируйте результаты.

Теперь перейдем ко второму вопросу. Если при $|E| \rightarrow 0$ $R(r, r'; 0)$ не существует, то связанные состояния есть при всех параметрах ямы и их можно найти из уравнения, например, в интегральной форме. Если же такой предел $R(r, r'; 0)$ существует (конечная величина), то только при критических значениях параметров возникает связанное состояние (и эти параметры определяются из соответствующего интегрального уравнения). Записывая ФГ для рассматриваемых примеров в виде импульсного интеграла (опускаем несущественные множители)

$$\int dp \frac{\exp[ip(r - r')/\hbar]}{T(p) + |E|},$$

видим, что все определяется сходимостью при малых значениях импульсов, т. е. поведением интеграла

$$\int_{(0)} \frac{d\mathbf{p}}{T(\mathbf{p}) + |E|} \sim \int_{(0)} \frac{\nu(\epsilon) d\epsilon}{\epsilon + |E|}.$$

Для степенной плотности состояний при малых энергиях $\nu(\epsilon) = B\epsilon^{\alpha-1}$ критерий возможности связанных состояний имеет вид $\alpha \leq 1$. Например, для l -степенного закона дисперсии в n -мерном пространстве связанные состояния в слабом поле существуют при $n \leq l$, в частности для квадратичного закона дисперсии получается известный результат $n \leq 2$.

Итак, в проблеме связанных состояний мы можем ответить на такие вопросы. Когда при слабом поле есть связанное состояние? Если при слабом нет, то при каких параметрах оно появляется? Когда можно применить δ -аппроксимацию? Наконец, совместима ли эта аппроксимация с критической ситуацией? Еще раз на конкретных примерах проиллюстрируйте выводы.

Будет ли существовать связанное состояние частицы с законом дисперсии $T(\mathbf{p}) = \alpha p^4 + p^2/2m$ в трехмерной слабой потенциальной яме? А если закон дисперсии имеет вид $T(\mathbf{p}) = \alpha_1 p_1^4 + \alpha_2 p_2^4 + p_3^2/2m$ или $T(\mathbf{p}) = \alpha \sqrt{p_1^2 + p_2^2} + p_3^2/2m$?

Любопытно сравнить условие существования связанных состояний в терминах поведения энергетической плотности состояний $\nu(\epsilon) = B\epsilon^{\alpha-1}$ при малых $\epsilon \rightarrow 0$, т. е. условие $\alpha \leq 1$, соответствующее достаточно большой плотности состояний на границе сплошного спектра, с критерием бозе-конденсации (см. § 18), где $\alpha > 1$, т. е. требуется малая плотность состояний. Физический смысл этих условий проясняется, если представить себе частыми штрихами тесно расположенные состояния в первом случае, когда «легко отщепить» в область дискретного спектра хотя бы одно из них. Для бозе-конденсации обилие состояний вблизи основного мешает проявлению обменного взаимодействия (в идеальной газе), рассредоточивает частицы. Хотя в случае малой плотности (редкие штрихи) труднее «заманить» один из уровней в область дискретного спектра, зато легче всем бозонам накапливаться в отдельном, достаточно изолированном от других состоянии и проявить в полной мере свое «умение» взаимодействовать обменно.

Мышление можно назвать продуктивным, если оно приводит к решению данной конкретной задачи; мышление можно назвать творческим, если оно создает средства для решения будущих задач.

Д. Поля:

1. Воспользуйтесь непрерывностью волновой функции и ее производной, выбирая в качестве точки сшивания решений особую точку потенциала (точку скачка, излома и т. д.) или другую характерную точку на границе рассматриваемых двух смежных областей координат. В случае δ -потенциала, напомним, производная волновой функции имеет скачок

$$\Psi'(+0) - \Psi'(-0) = \Psi(0) 2mu/\hbar^2; \quad U(x) = u\delta(x).$$

Таким образом, вы получите два уравнения, из которых можно найти прямую связь коэффициентов C и D по разные стороны особенности, т. е. выразить матричные элементы оператора перехода через значения локальных волновых функций и их производных в пограничной точке. После доказательства, требуемого в условии задачи (подскажем, что оно основано на постоянстве вронскиана), вы можете усмотреть и различные свойства симметрии матричных элементов. Что получается, например, если канонические решения выбраны комплексно сопряженными?

Подумайте, какая физическая закономерность отражена в доказанном свойстве детерминанта. Заметьте, что метод матрицы связи локальных решений (оператора перехода через особенность — другое название, которым будем чаще пользоваться) определяется одномерным характером стационарного уравнения Шредингера, а в рассматриваемой форме, кроме того, относится к квадратичному закону дисперсии.

Перейдите к конкретным примерам использования матрицы.

2. В случае потенциала $U(x) = u\delta(x)$ волновую функцию по разные стороны от особенности запишем в виде ($E > 0$)

$$\Psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{ikx} + D_1 e^{-ikx}, & x < 0; \\ C_2 e^{ik(x-L)} + D_2 e^{-ik(x-L)}, & x > 0; \end{cases} \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

Обратите внимание на введенную в решение при $x > 0$ величину L . Для одиночного потенциала можно не вводить такую фазовую добавку, однако для цепочки потенциалов важно, чтобы по отношению к следующему δ -всплеску (в нашем примере), находящемуся в точке L , локальное решение слева было аналогично левому решению по отношению к точке $x = 0$. Тогда полученный в данной задаче оператор перехода через отдельный барьер мы сможем применить непосредственно и для цепочки барьеров.

Отмечавшееся в задаче 1 сшивании решений по разные стороны от особенности даст два уравнения, из которых вы получите, что

$$C_2 = \left(1 - i \frac{mu}{k\hbar^2}\right) e^{ikL} C_1 - i \frac{mu}{k\hbar^2} e^{ikL} D_1;$$

$$D_2 = i \frac{mu}{k\hbar^2} e^{-ikL} C_1 + \left(1 + i \frac{mu}{k\hbar^2}\right) e^{-ikL} D_1.$$

Таким образом, матрица связи бегущих волн построена:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \left(1 - i \frac{mu}{k\hbar^2}\right) e^{ikL} & -i \frac{mu}{k\hbar^2} e^{ikL} \\ i \frac{mu}{k\hbar^2} e^{-ikL} & \left(1 + i \frac{mu}{k\hbar^2}\right) e^{-ikL} \end{pmatrix}.$$

В рассмотренном случае δ -потенциал мог описывать и барьер ($u > 0$), и яму ($u < 0$). Если же речь идет об отрицательных значениях энергии, т. е. о связанных состояниях, то для потенциальной ямы $U(x) = -u\delta(x)$ выберем канонические решения в виде убывающих и возрастающих решений следующим образом:

$$\Psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{-\kappa x} + D_1 e^{\kappa x}, & x < 0; \\ C_2 e^{-\kappa(x-L)} + D_2 e^{\kappa(x-L)}, & x > 0; \end{cases} \quad \hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}.$$

Далее вновь нужно сшить решения при $x < 0$ и $x > 0$, что приведет окончательно к оператору перехода через δ -яму для описания связанных состояний:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{mu}{\kappa\hbar^2}\right) e^{-\kappa L} & \frac{mu}{\kappa\hbar^2} e^{-\kappa L} \\ -\frac{mu}{\kappa\hbar^2} e^{\kappa L} & \left(1 - \frac{mu}{\kappa\hbar^2}\right) e^{\kappa L} \end{pmatrix}.$$

Итак, есть первая пара операторов перехода через особенность (вообще говоря, матрица для рассеяния и матрица для связанных состояний теснейшим образом связаны — аналитическим продолжением по энергии). Убедитесь, что выполнено свойство определителя. Выявите свойства симметрии, установленные в задаче 1. Обратите внимание на фазовые приращения матричных элементов в этом случае. Переходите к использованию найденных операторов (см. соответствующие задачи данного параграфа).

4. Дадим подробные пояснения.

Замечая, что для оператора перехода через цепочку одинаковых особенностей $\hat{g} = \hat{G}^N$ можно записать

$$\hat{g} = \left[\frac{d^N}{d\sigma^N} e^{\sigma \hat{G}} \right]_{\sigma=0}, \quad (20)$$

рассмотрим матричные элементы оператора $\hat{e} \equiv \exp(\sigma \hat{G})$. В силу $\hat{de}/d\sigma = \hat{G}\hat{e}$ для матричных элементов e_{12} и e_{22} имеем систему уравнений $de_{12}/d\sigma = G_{11}e_{12} + G_{12}e_{22}$; $de_{22}/d\sigma = G_{21}e_{12} + G_{22}e_{22}$. Поиски частного решения в виде $e_{12} = A \exp(\sigma G)$; $e_{22} = B \exp(\sigma G)$ приводят к системе уравнений для A и B , условием существования ненулевого решения которой служит квадратное уравнение для величин G : $G^2 - (G_{11} + G_{22})G + G_{11}G_{22} - G_{12}G_{21} = 0$, корни которого G_1 и G_2 являются собственными значениями оператора $\hat{G}$, а соответствующие решения для A и B связаны при этом между собой соотношением $B = A(G - G_{11})/G_{12}$.

Таким образом, для матричных элементов получаем

$$e_{12} = A_1 e^{\sigma G_1} + A_2 e^{\sigma G_2};$$

$$e_{22} = A_1 \frac{G_1 - G_{11}}{G_{12}} e^{\sigma G_1} + A_2 \frac{G_2 - G_{11}}{G_{12}} e^{\sigma G_2},$$

где при $\sigma = 0$ в соответствии с определением $\hat{e}$ должно быть $e_{12} = 0$ и $e_{22} = 1$, что приводит к связи $A_1 = -A_2 = G_{12}/(G_1 - G_2)$ и окончательному решению

$$e_{12} = G_{12} \frac{\exp(\sigma G_1) - \exp(\sigma G_2)}{G_1 - G_2};$$

$$e_{22} = \frac{(G_1 - G_{11}) \exp(\sigma G_1) + (G_{11} - G_2) \exp(\sigma G_2)}{G_1 - G_2} =$$

$$= \frac{(G_{22} - G_2) \exp(\sigma G_1) - (G_{22} - G_1) \exp(\sigma G_2)}{G_1 - G_2},$$

а согласно (20) отсюда для искомых матричных элементов итерированного оператора имеем

$$g_{12} = G_{12} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2};$$

$$g_{22} = \frac{G_1^{N+1} - G_2^{N+1}}{G_1 - G_2} - G_{11} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} =$$

$$= G_{22} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} - G_1 G_2 \frac{G_1^{N-1} - G_2^{N-1}}{G_1 - G_2}.$$

Аналогичным образом для второй пары матричных элементов

$$g_{21} = G_{21} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2};$$

$$g_{11} = \frac{G_1^{N+1} - G_2^{N+1}}{G_1 - G_2} - G_{22} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} =$$

$$= G_{11} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} - G_1 G_2 \frac{G_1^{N-1} - G_2^{N-1}}{G_1 - G_2}.$$

Учитывая, что $G_1 G_2 = \det \hat{G} = 1$, и вводя обозначение $((N)) \equiv (G_1^N - G_2^N)/(G_1 - G_2)$, выпишем полученные результаты для итерированной матрицы: $g_{11} = G_{11}((N)) - ((N-1)) = ((N+1)) - G_{22}((N))$; $g_{12} = G_{12}((N))$; $g_{21} = G_{21}((N))$; $g_{22} = G_{22}((N)) - ((N-1)) = ((N+1)) - G_{11}((N))$.

См. также [15, § 2, задача 11].

5. Периодические (циклические) граничные условия означают, что в цепочке особенностей локальные решения в первой и $(N+1)$ -й областях координат должны совпадать (N — число особенностей). Значит, $C_{N+1} = C_1$. Используем обозначение для

вектора, образованного коэффициентами C и D , $C \equiv \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$. Другими словами, $\hat{G}^N C_1 = C_1$. Это приводит (см. задачу 3) к уравнению $\cos N\gamma = 1$. Таким образом, учитывая связь собственных значений оператора перехода через особенность с квазиимпульсом: $\gamma = pL/\hbar$ (см. задачу 6), где L — период потенциала, получаем дисперсионное уравнение для энергетических зон $\text{Sp} \hat{G} = 2 \cos(pL/\hbar)$, в котором для указанных периодических граничных условий $p = \hbar n/NL$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Фактически рассматриваемые граничные условия играют вспомогательную роль в строго периодическом случае ($N \rightarrow \infty$), а для конечного числа особенностей нужно учитывать реальные физические граничные условия. Все же проанализируйте структуру зон: сколько имеется уровней энергии и какой кратности при четном и при нечетном числе особенностей N .

6. Пусть C_1 является собственным вектором оператора перехода через отдельную особенность $\hat{G}$, принадлежащим собственному значению $G_1 = \exp(i\gamma)$. Тогда в соседней ячейке потенциала

$C_2 = \hat{G} C_1 = G_1 C_1 = \exp(i\gamma) C_1$, т. е. собственному значению G_1 и собственному вектору C_1 отвечает такая линейная комбинация решений в первом отсеке, что в следующем получается та же функция, умноженная на $\exp(i\gamma)$: $\Psi_2(x+L) = \exp(i\gamma) \Psi_1(x)$, или $\Psi(x+L) = \exp(i\gamma) \Psi(x)$. Таким образом, этот случай соответствует бегущим блоховским волнам $\Psi_p(x) = \exp(ipx/\hbar) u_p(x)$,

а собственное значение оператора $\hat{G}$ связывается с квазиимпульсом: $\gamma = pL/\hbar$. Тем самым иллюстрируется физический смысл собственных векторов и собственных значений оператора перехода через отдельный барьер и т. п.

7. Вдали от рассеивателя (асимптотически или за пределами конечной области действия потенциала) волновая функция для стационарного решения (двукратное вырождение уровней энергии позволяет рассматривать различные состояния: прохожде-

ние частиц слева направо, справа налево, встречные пучки) может быть записана в виде

$$\Psi(x) = \begin{cases} C_1 k^{-1/2} \exp[ikx] + D_1 k^{-1/2} \exp[-ikx], & x \rightarrow -\infty; \\ C_2 k^{-1/2} \exp[ik(x-L)] + D_2 k^{-1/2} \exp[-ik(x-L)], & x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

При этом для вектора плотности потока вероятности получаем в соответствующих областях $j_1 = (\hbar/m)(|C_1|^2 - |D_1|^2)$; $j_2 = (\hbar/m)(|C_2|^2 - |D_2|^2)$. Для задачи рассеяния, выбирая для определенности состояние с падением частиц слева, имеем $D_2 \equiv 0$. Таким образом, каждому вкладу в потоковые меры придается определенный физический смысл (нет интерференции между падающей и отраженной волнами): $j_1 = j_{\text{пад}} + j_{\text{отр}}$; $j_2 = j_{\text{прох}}$.

Отсюда для коэффициентов прозрачности T и отражения R получаем

$$T = j_{\text{прох}}/j_{\text{пад}} = |C_2|^2/|C_1|^2; \quad R = |j_{\text{отр}}|/j_{\text{пад}} = |D_1|^2/|C_1|^2,$$

а в силу связи C и D через оператор перехода

$$C_2 = G_{11}C_1 + G_{12}D_1; \quad D_2 = G_{21}C_1 + G_{22}D_1 = 0$$

приходим к окончательному выражению основных характеристик рассеяния через матрицу связи локальных решений:

$$T = 1/|G_{22}|^2; \quad R = |G_{21}|^2/|G_{22}|^2.$$

Эти формулы являются самыми общими. Они пригодны и в случае сложной структуры рассеивателя (тогда под $\hat{G}$ следует понимать произведение операторов перехода через отдельный барьер, например), и в случае нелокального потенциала с различными предельными значениями $U(\pm\infty)$ (проверьте это свойство сами), и в случае учета поглощения или испускания частиц в зоне рассеивателя (модель комплексного потенциала), когда $T + R \neq 1$. Покажите, что во всех случаях (кроме случая комплексного потенциала) выполняется соотношение $|G_{22}|^2 = 1 + |G_{21}|^2$, так что меры рассеяния можно выразить через один матричный элемент: $T = 1/(1 + |G_{21}|^2)$; $R = |G_{21}|^2/(1 + |G_{21}|^2)$.

В случае нескольких особенностей в T и R войдут матричные элементы итерированного оператора $g_{21} = G_{21}((N)) = G_{21} \sin N\nu/\sin \nu$.

8. См. пояснения к задаче 7. Как запишется условие резонансной прозрачности?

Квазиуровням распада отвечает решение в виде расходящихся волн, т. е. (см. общее решение в предыдущей задаче) $C_1 \equiv 0$; $D_2 \equiv 0$, или в терминах оператора перехода $G_{22} = 0$ (что невозможно для стационарного решения в силу $|G_{22}|^2 = 1 + |G_{21}|^2$). Аналогично для квазиуровней захвата приходим к условию $D_1 \equiv 0$; $C_2 \equiv 0$ и уравнению $G_{11} = 0$.

9. В случае связанных состояний выбираем однотипные канонические решения таким образом, чтобы

$$\Psi(x) = \begin{cases} C_1 x^{-1/2} \exp[-\kappa x] + D_1 x^{-1/2} \exp[\kappa x], & x \rightarrow -\infty; \\ C_2 x^{-1/2} \exp[-\kappa(x-L)] + D_2 x^{-1/2} \exp[\kappa(x-L)], & x \rightarrow \infty; \end{cases}$$

$$\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}.$$

Здесь, как и в соответствующем выражении для волновой функции в непрерывном спектре энергии (см. задачу 7), введена величина L так, чтобы можно было применять итерации оператора перехода через особенность. В последнем случае предполагается, что яма имеет конечную область действия, так что волновая функция в записанной форме относится к координатам за пределами ямы, а не к асимптотическим их значениям. См. по этому поводу замечания к решению задачи 2.

Условие финитности движения (связанных состояний) означает, что $C_1 \equiv 0$; $D_2 \equiv 0$. Для матрицы связи это приводит к уравнению $G_{22} = 0$.

Заметьте, что в непрерывном спектре аналогичные уравнения для вещественных значений энергии решений не имеют (помните, что операторы введены для разного типа решений и значений энергии). Однако есть все же общность. Чему соответствует аналогичное уравнение в непрерывном спектре энергии?

10. Воспользуйтесь итерациями оператора перехода через отдельную яму (см. задачу 4). Получите уравнение

$$\sin(N+1)\nu = G_{11} \sin N\nu; \nu \neq 0, \pi.$$

Найдите решение для двух случаев: а) $|G_{11}| \ll 1$, N — любое; б) $N \gg 1$, G_{11} — любое. Объясните физический смысл результатов. Обратитесь к конкретным примерам. Сравните предельный случай $N \rightarrow \infty$ с зонной задачей при периодических граничных условиях.

13. Начните с δ -потенциала. Используйте полученные результаты.

14. Ограничьтесь первым квазиклассическим приближением. Воспользуйтесь аналогией со случаями, рассмотренными в задачах 7 и 9. В качестве канонических решений выбирайте такие, которым отвечают вдали от особенностей потенциала (включая классические точки поворота) квазиклассические решения в форме бегущих волн (для классически доступных областей движения). Развивайте метод.

17. Точному решению отвечают функции Эйри по Фоку (см. литературу в замечаниях к § 1) $v(-\lambda - z)$ и $u(-\lambda - z)$, где введены безразмерные переменные $\lambda = E(2m/\hbar^2 \beta^2)^{1/3}$ и $z = x(2m\beta/\hbar^2)^{1/3}$. Однако этим решениям отвечают асимптотики в форме стоячих волн. Функция $w = u + iv$ соответствует бегущей от начала координат волне. Покажите, что Q — решение уравне-

ния Шредингера, переходящее вдали от точки поворота в классически доступной области движения в квазиклассическое решение первого приближения $\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int_b^x k(x') dx'\right)$, где b — точка поворота при $E < 0$ и $b = 0$ при $E > 0$, связано с функциями Эйри следующим образом:

$$Q(x) = (\hbar^2/2m\beta)^{1/6} \exp[-2i\lambda^{3/2}\theta(\lambda)/3 - i\pi/4] w(-\lambda - z);$$

$$\theta(\lambda) = 1, \lambda > 0; \theta(\lambda) = 0, \lambda < 0.$$

Уточните эту связь во втором квазиклассическом приближении. Напоминаем, что энергия отсчитывается от значения потенциала в начале координат, а решение относится только к области $x > 0$; в области $x < 0$ потенциал может иметь другой вид.

18. См. пояснения к предыдущей задаче. Покажите, что Q — решение первого квазиклассического приближения связано с точным решением в виде функций параболического цилиндра соотношением

$$Q(x) = \left(\frac{2\hbar^2}{m\beta}\right)^{1/8} \exp\left[-\frac{\pi\lambda}{8} - i\left(\frac{\pi}{8} + \frac{\lambda}{4} \ln \frac{|\lambda|}{2e}\right)\right] D_p[(1-i)z],$$

где безразмерные величины координаты и энергии равны

$$z = x(2m\beta/\hbar^2)^{1/4} \text{ и } \lambda = E(2m/\hbar^2\beta)^{1/2},$$

а индекс функций параболического цилиндра $p = -1/2 + i\lambda/2$. О функциях параболического цилиндра достаточно сведений имеется в книге [31].

Уточните связь функций параболического цилиндра с решением в виде убегающих волн во втором квазиклассическом приближении.

Где найдут непосредственное применение полученные результаты?

19. Убедитесь, что Q -решение уравнения Шредингера (см. две предыдущие задачи) определяется функцией Ганкеля (первой):

$$Q(x) = \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta}\right)^{\frac{1}{2(l+2)}} \left(\frac{\pi z}{l+2}\right)^{\frac{1}{2}} H_{\frac{l}{l+2}}^{(1)}\left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}}\right) \exp i\left[\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2(l+2)}\right],$$

где безразмерная координата $z = x(2m\beta/\hbar^2)^{1/(l+2)}$.

Уточните это соотношение во втором квазиклассическом приближении. Где найдет применение эта формула? Почему мы ограничились только значением энергии $E = 0$?

Решение задач — практическое искусство, подобное плаванию, катанию на лыжах или игре на фортепиано: научиться ему можно, только подражая хорошим образцам и постоянно практикуясь.

Д. Пойа

1. Используем общий вариационный принцип для стационарных состояний

$$\delta \left[\frac{(\Psi, \hat{H} \Psi)}{(\Psi, \Psi)} \right] = 0.$$

Для нашей системы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 - \hat{U}_1 \hat{U}_2$ среднее значение полной энергии в соответствии с волновой функцией $\Psi = \psi_1 \psi_2$ равно

$$\frac{(\Psi, \hat{H} \Psi)}{(\Psi, \Psi)} = \frac{(\psi_1, \hat{T}_1 \psi_1)}{(\psi_1, \psi_1)} + \frac{(\psi_2, \hat{T}_2 \psi_2)}{(\psi_2, \psi_2)} - \frac{(\psi_1, \hat{U}_1 \psi_1) (\psi_2, \hat{U}_2 \psi_2)}{(\psi_1, \psi_1) (\psi_2, \psi_2)}.$$

Варьируя ψ_1 и ψ_2 независимо, получаем два связанных уравнения:

$$\hat{H}_1^3 \psi_1 = E_1^3 \psi_1, \quad \hat{H}_2^3 \psi_2 = E_2^3 \psi_2; \quad \hat{H}_{1,2}^3 = \hat{T}_{1,2} + \hat{U}_{1,2}^3; \quad E_{1,2}^3 = \langle T_{1,2} \rangle - \langle U_1 \rangle \langle U_2 \rangle; \quad \hat{U}_1^3 = -\langle U_2 \rangle \hat{U}_1, \quad \hat{U}_2^3 = -\langle U_1 \rangle \hat{U}_2,$$

где эффективные потенциальные энергии имеют тот же профиль, что и исходные одномерные потенциалы, но множитель в каждой из них зависит от параметров движения для другой степени свободы. При этом искомые значения полной энергии будут равны

$$E = \langle T_1 \rangle + \langle T_2 \rangle - \langle U_1 \rangle \langle U_2 \rangle = E_1^3 + E_2^3 + \langle U_1 \rangle \langle U_2 \rangle.$$

Таким образом, приходим к самосогласованному решению системы двух уравнений.

Вначале освоите общий метод варьирования функции в целом, учитывая ее комплексность и т. д. Почитайте литературу, рекомендованную в замечаниях к § 13. Затем выполните все отмеченные преобразования. Когда техническая сторона будет ясна, перейдите к разбору самосогласования. Здесь лучше всего начать с конкретного примера, которым может послужить задача 2.

2. Переменные разделяются только частично: можно сразу отделить ветвь свободного движения вдоль оси цилиндра, а движение в перпендикулярном направлении будет определяться потенциальной энергией, для которой как раз возможна запись

в виде произведения, если отсчитывать энергию от значения потенциала вне ямы. При таком отсчете

$$U(x, y) = -U_0 \theta(x) \theta(L_1 - x) \theta(y) \theta(L_2 - y),$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда. Таким образом, на основе решения предыдущей задачи мы приходим к эффективным одномерным движениям частицы в прямоугольных ямах:

$$U_1^0(x) = -U_0 \omega_2^0 \theta(x) \theta(L_1 - x);$$

$$U_2^0(y) = -U_0 \omega_1^0 \theta(y) \theta(L_2 - y).$$

Величины ω^0 имеют смысл вероятностей пребывания частицы в эффективной яме. Их зависимость от энергии проще всего получить параметрическим варьированием (см. задачи из § 15). Таким образом, получаем систему уравнений:

$$E_1^0 = E_{n_1}(U_0 \omega_2^0); \quad \omega_1^0 = \omega_1(U_0 \omega_2^0, E_1^0);$$

$$E_2^0 = E_{n_2}(U_0 \omega_1^0); \quad \omega_2^0 = \omega_2(U_0 \omega_1^0, E_2^0),$$

где указанные скобками зависимости функций от аргументов отвечают чисто одномерной задаче. Принципиально из правой пары уравнений находим явную зависимость ω_1^0 и ω_2^0 от E_1^0 и E_2^0 . Подстановка этих выражений в левую пару уравнений даст возможность найти эти последние эффективные энергии как функции квантовых чисел n_1 и n_2 .

Затем получаем полное решение на основе всех найденных величин:

$$E_{n_1, n_2} = E_1^0(n_1, n_2) + E_2^0(n_1, n_2) + U_0 \omega_1^0(n_1, n_2) \omega_2^0(n_1, n_2).$$

На практике эта процедура упрощается, так как отпадает надежда на явную и точную запись всех результатов (ведь даже решение для отдельной одномерной ямы записывается в виде неявного уравнения для энергии — см. п. 5 прил. 1 — с учетом принятого отсчета энергии от дна ямы). Например, в данной задаче яма предполагается глубокой, так что можно использовать метод последовательных приближений. Полагаем вероятности пребывания в эффективных одномерных ямах в первом приближении равными единице, что соответствует полному разделению переменных (аддитивное приближение энергии). Затем находим поправки, в которых также эти вероятности заменяются единицами, и т. д. Найдите первую поправку к аддитивному приближению, отвечающему бесконечно глубокой яме. Кстати, в этом случае практически более удобен отсчет энергии от дна ямы. Запишите вид потенциальной энергии при таком отсчете, используя также ступенчатые функции. Убедитесь, что появятся аддитивные вклады, наряду с мультипликативными. Обобщите общие соотношения предыдущей задачи для такого типа потенциальной энергии. Убедитесь, что мультипликативный член потенциала играет роль возмущений для доста-

точно глубокой ямы, и получите искомую поправку к энергии методом теории возмущений. Сравните использованные методы.

3. Если вы разобрались в предыдущих двух задачах, то решение этой и последующих аналогичных задач не должно вас затруднить.

8. Вычисленное с помощью волновой функции $\Psi = A \times \exp(-\gamma r^2/2)$ среднее значение энергии в поле $U = \beta r^4$ $\langle E \rangle = 3\hbar^2\gamma/4m + 15\beta/4\gamma^2$ имеет минимальное значение $\langle E \rangle_{\min} = 9 \times 5^{1/3}\hbar^4/3\beta^{1/3}/4(2m)^{2/3}$. Точное же значение отвечает первому возбужденному уровню энергии одномерного потенциального поля (см., например, п. 20 прил. 1): $E_1 = 3,80\hbar^4/3\beta^{1/3}/(2m)^{2/3}$. Таким образом, относительная ошибка составляет +1,3%. Найдите аналогичную оценку для основного уровня энергии одномерного четверного потенциала. В каком случае достигается большая точность с помощью «гауссиана»?

Для кулонова поля используйте найденное среднее значение кинетической энергии. Тогда $\langle E \rangle = 3\hbar^2\gamma/4m - 2\alpha\sqrt{\gamma/\pi}$. Минимальное значение энергии $\langle E \rangle_{\min} = -4m\alpha^2/3\pi\hbar^2$ сравниваем с точным $E_1 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. Относительная ошибка, равная +15%, достаточно велика. Объясните причину. Как улучшить результат? Какой вид имеет точная волновая функция основного состояния в кулоновом поле?

Предложите свои примеры потенциалов сферической симметрии и выполните для них вариационные расчеты с помощью «гауссиана», а также других пробных функций. В каком случае трехмерный «гауссиан» даст точный ответ? Убедитесь прямым расчетом (для тренировки).

Дайте подобную оценку критических параметров, подобрав несложные для подсчета трехмерные модели потенциала и варьируемых функций.

Сравните метод вариационных оценок в заданном классе функций с изменением параметров и более общие вариации форм волновых функций в целом, встречавшиеся в первых задачах этого параграфа.

Распространите вариационные оценки с помощью «гауссиана» на случаи полей сферической симметрии при $p \geq 4$ измерений.

9. Начните с общего случая. Проверьте, соответствует ли соотношение между средними значениями кинетической и потенциальной энергии критерию теоремы вириала. Далее выберите отдельные l и для каждого из них оптимальное значение показателя степени в пробной функции (можно ограничиться множеством целых чисел). Видимо, проще всего начать с квадратичного потенциала, а затем перейти к линейному (обратитесь к п. 17 прил. 1). Рассмотрите случай четверного потенциала. Когда практически может встретиться такая потенциальная яма? Уровни энергии для нее вы найдете в справочных данных п. 20 прил. 1. Сравните достигнутую точность с той,

которую дает квазиклассическое (первое и второе) приближение. Как перейти к первому возбужденному уровню энергии?

11. Для интересующей нас ветви финитного движения в поле потенциала $U(x) = Fx$ ($x > 0$); $U(x) = \infty$ ($x < 0$). среднее значение кинетической энергии для предложенной пробной функции равно $\langle T \rangle = \hbar^2 \alpha^2 / 8m$, а потенциальная энергия дает вклад $\langle U \rangle = 3F/\alpha$ в полное среднее значение энергии $\langle E \rangle = \hbar^2 \alpha^2 / 8m + 3F/\alpha$. Минимальное значение этой функции параметра α оказывается равным $\langle E \rangle_{\min} = 3^{5/3} \hbar^{2/3} F^{2/3} / 4^{2/3} (2m)^{1/3}$. Точные же значения уровней энергии определяются нулями функций Эйри (см. нечетные решения п. 17 прил. 1). В частности,

$$E_0 = 2,338 \hbar^{2/3} F^{2/3} / (2m)^{1/3}.$$

Таким образом, даже такая «грубая» пробная функция, какую мы использовали, приводит к относительной ошибке +6%. А что же дает квазиклассическое приближение? Первое приближение, выражаемое формулой Бора—Зоммерфельда с учетом граничного условия непроницаемости $\oint p dx = h(n + 3/4)$, приводит к относительной ошибке—0,8%. Вот это точность! Если же учесть поправку к первому ВКБ-приближению, то получаем относительную ошибку +0,06% (!). Прodelайте сами квазиклассические расчеты. Особое внимание уделите второму квазиклассическому приближению. В основу положите результаты задач из § 9. Попробуйте дать объяснение столь высокой точности квазиклассического метода в применении к расчету основного уровня энергии.

Примените другие пробные функции (например, $\Psi \sim x \times \exp(-\alpha x^2)$). Рассмотрите расширенную линейную симметричную потенциальную яму $U(x) = F|x|$ и для оценки основного уровня энергии подберите варьируемую функцию. Также сравните достигнутую точность с обеспечиваемой квазиклассическим приближением. Увеличивается ли точность, если переходить ко все более высокому ВКБ-приближению?

12. Вычисление среднего значения энергии (подумайте, как упростить выражение для среднего) приводит к очень простому результату: $\langle E \rangle = 504 \alpha \hbar^4 / L^4$. Сравниваем с точным значением, которое (см. задачу 28 из § 1) определяется правилами квантования $kL = \pi(n + 1/2) - (-1)^n \arcsin \operatorname{ch}^{-1} kL$; $n = 1, 2, \dots$, так что $k_1 L \approx 3\pi/2 + 2 \exp(-3\pi/2)$. Отсюда $E_1 = 500,7 \alpha \hbar^4 / L^4$. Таким образом, относительная ошибка составляет всего +0,7% (должна ли она быть положительной?).

Прodelайте аналогичные расчеты для случая квадратичного закона дисперсии, используя функцию $\Psi = Ax(L - x)$ (см. также [14, гл. III, задача 12]). Сравните с рассмотренным примером для четверного закона дисперсии. Предложите свои варианты задачи.

13. Не правда ли, результат несколько неожиданный после высокой точности, достигнутой, например, в предыдущих двух

задачах? Чем вызвана столь невысокая точность? Удовлетворяет ли предложенная пробная функция критерию теоремы вириала? Выберите другие пробные функции, помня, что точное решение определяется экспоненциальной функцией (заодно и ее примените). Используйте рассматриваемую простую модель потенциала для иллюстрации того, как увеличение числа параметров варьируемой функции не ухудшает точности, хотя бы на примере двухпараметрической функции (нормировочный множитель не считается!).

14. Правильно ли учитывается первая ангармоническая поправка в нулевой энергии? Можно ли то же самое сказать о случае несимметричного ангармонизма, когда $U(x) = kx^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4$. Сравните с результатом теории возмущений (например, [1, с. 167]).

15. Нас интересует основное состояние системы, так что оценка для соответствующих собственных значений интегрального уравнения (укажите эти значения в рассматриваемой задаче, как они связаны с собственными значениями энергии, экстремальное значение отвечает минимуму или максимуму) приводит к неравенству

$$\iint U(r) |\Psi(r)|^2 dr \geq \iint R(r, r'; E) U(r) U(r') \Psi^*(r) \Psi(r') dr dr',$$

в котором $R(r, r'; E)$ — функция Грина для связанных состояний (координатная матрица резольвенты гамильтониана), а знак равенства достигается для собственной функции основного состояния. Подчеркнем, что выражение относится к любой размерности пространства. Соответствующим образом нужно понимать интегрирование и аргументы всех функций. Вводя профильную функцию для потенциала $U(r) = -U_0 u(r)$, получаем непосредственную оценку критической (если связанное состояние только появляется) глубины поля или произвольной глубины (в зависимости от энергии имеющегося основного состояния):

$$U_0^{-1} \geq \frac{\iint R(r, r', E) u(r) u(r') \Psi^*(r) \Psi(r') dr dr'}{\int u(r) |\Psi(r)|^2 dr}.$$

Явный вид функций Грина вы найдете в задачах § 11. Если речь идет о критических свойствах или о мелком залегании основного уровня энергии, то целесообразна аппроксимация $\Psi = \text{const}$ в области действия потенциала. В этом случае мы получаем простую и удобную формулу

$$U_0^{-1} = v^{-1} \iint R(r, r'; E) u(r) u(r') dr dr'; \quad v \equiv \int u(r) dr,$$

которую можно получить и непосредственно из интегрального уравнения

$$\Psi(r) = - \int dr' R(r, r'; E) U(r') \Psi(r'),$$

умножая обе части его на $U(r) \Psi^*(r)$ и интегрируя по всему пространству, а затем полагая $\Psi = \text{const}$. Однако смысл прибли-

жения остается неясным, в отличие от строгого вариационного метода оценок собственных значений интегрального уравнения, использованного в предыдущих формулах. Разъяснение можно найти в книге [53, с. 100].

16. Одномерная резольвента свободного движения дает функцию Грина связанных состояний в виде

$$R(x, x'; E) = (m/\hbar^2 \kappa) \exp(-\kappa |x - x'|); \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|},$$

так что рассмотренное в предыдущей задаче приближенное уравнение для основного уровня энергии принимает форму

$$\kappa = -m \iint dx dx' U(x) U(x') \exp(-\kappa |x - x'|) / \hbar^2 \int U(x) dx.$$

Считая, что $\kappa a \ll 1$, где a — размер области действия потенциала (когда такое неравенство может нарушаться для неглубокого потенциала и как быть в таком случае?), раскладываем экспоненту в ряд и получаем

$$\kappa = -m\hbar^{-2} \int U(x) dx - m^2\hbar^{-4} \iint U(x) U(x') |x - x'| dx dx' + O(U^3).$$

Откуда для основного уровня энергии имеем окончательную формулу

$$E = -(m/2\hbar^2) \left(\int U dx \right)^2 - (m^2/\hbar^4) \left(\int U dx \right) \iint U(x') U(x'') |x' - x''| dx' dx'' + O(U^4).$$

Любопытно, что таким простым способом удастся получить не только хорошо известный результат первого приближения (см., например, [1, с. 196]), но и поправку к нему. Эта поправка представляет совершенно самостоятельный интерес, когда потенциал в среднем равен нулю (или $\int U(x) dx$ очень мал по абсолютной величине). Возвращаясь в этом случае к разложению для κ , получаем

$$E = -m^3 \left[\iint U(x) U(x') |x - x'| dx dx' \right]^2 / 2\hbar^6.$$

При этом стоящий в скобках двойной интеграл должен быть отрицательной величиной (см. формулу для κ), что действительно всегда выполняется в случае $\int U(x) dx = 0$ (попробуйте доказать это). Полученный результат не только дает ответ на вопрос, существует ли связанное состояние в одномерном случае для равного нулю в среднем потенциала, но и предоставляет формулу для расчета энергии связи.

С помощью формулы для κ можно также решить вопрос о критических параметрах потенциала, среднее значение которого несколько больше нуля (только тогда удастся вытеснить связанное состояние в одномерном случае для локального потенциала!). Полагая $\kappa = 0$, имеем уравнение

$$\hbar^2 \int U(x) dx = -m \iint U(x) U(x') |x - x'| dx dx'.$$

Применение этой и других формул рассматриваемой задачи вы найдете в § 11. Иным методом данная задача решена в § 35, п. 9.

17. Используя трехмерную резольвенту и соответствующую функцию Грина для связанных состояний $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = m \exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) / 2\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Получаем для сферической потенциальной ямы на основании результатов предыдущей задачи вариационную оценку критической глубины (или радиуса)

$$A^{-1} = \iint_Q d\mathbf{r} d\mathbf{r}' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') / \int_Q d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2;$$

$$A \equiv mU_0/2\pi\hbar^2.$$

Если положить $\Psi = \text{const}$ внутри сферы, то $A^{-1} = 8\pi R^2/5$, что приводит к относительной ошибке $+1,3\%$ (точное значение $A^{-1} = 16R^2/\pi$). Если же пробную функцию внутри сферы выбрать в виде $\Psi(\mathbf{r}) = Br^{-1/4}$, то $A^{-1} = 160\pi R^2/99$. Это дает относительную ошибку для критической глубины U_0 , равную $+0,3\%$.

Вас, видимо, заинтересует вопрос, как это удалось подобрать такую степень радиуса в пробной функции, которая обеспечила столь высокую точность. Секрет прост: рассмотрите класс функций $\Psi = Br^s$ и реализуйте программу вариационных поисков до конца. Вы убедитесь, что оптимальное значение показателя степени близко к $-1/4$, а наименьшая относительная ошибка, хотя и несколько меньше (как и должно быть), но практически та же ($+0,3\%$). Сравните также варьируемые функции с истинной волновой функцией основного состояния сферической ямы из точного решения. Если вас увлекла эта задача, то поставьте аналогичные, чтобы составить представление об общей эффективности метода интегральных уравнений для описания свойств связанных стационарных состояний.

§ 38. ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И ВИРИАЛЬНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Крупное научное открытие дает решение крупной проблемы, но и в решении любой задачи присутствует крупица открытия.

Д. Поля

1. Согласно основному соотношению параметрического варьирования (о ПВ см. в § 15) $\partial E_n / \partial \lambda = \langle \partial \hat{H} / \partial \lambda \rangle_n$. Если гамильтониан частицы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{U}(x)$ записать в координатном представлении: $\hat{H} = -\hbar^2 (2m)^{-1} \partial^2 / \partial x^2 + U(x)$, то $\hbar \partial \hat{H} / \partial \hbar = 2\hat{T}$ и $\hbar \partial E_n / \partial \hbar = 2 \langle T \rangle_n$. В импульсном же представлении $\hat{H} = p^2/2m + U(i\hbar \partial / \partial p)$, так что $\hbar \partial \hat{H} / \partial \hbar = \hat{x} \hat{U}'(x)$, а $\hbar \partial E_n / \partial \hbar = \langle x U' \rangle_n$. Таким образом, получаем теорему вириала: $2 \langle T \rangle_n =$

$= \langle xU' \rangle_n$. Такой вывод эквивалентен масштабному преобразованию координат. Сравните также с обычным способом получения ТВ (см. вывод вириальных соотношений в последующих задачах этого параграфа, где ТВ служит частным случаем). Заметьте, что в процессе разобранного вывода получаются и явные выражения для $\partial E_n / \partial \hbar$ (они используются в задачах следующего параграфа).

Для простоты мы ограничились одномерным случаем. Обобщения на трехмерный (и вообще на многочастичные системы) не должны вызвать затруднение.

2. Если выбрать отсчет энергии и координаты так, чтобы $U(x) = U_0 \cdot [\theta(x-L) + \theta(-x)]$, то искомые величины (кроме ТВ, применяйте параметрическое варьирование) будут равны: граничная плотность вероятности координат $\rho_n(0) = \rho_n(L) = E_n/U_0 \times (L + 2x^{-1})$; средняя сила

$$\langle F(0) \rangle_n = -\langle F(L) \rangle_n = E_n/(L + 2x^{-1});$$

$\hbar x = \sqrt{2m(U_0 - E_n)}$; средняя кинетическая энергия $\langle T \rangle_n = LE_n/(L + 2x^{-1})$; средняя потенциальная энергия

$$\langle U \rangle_n = E_n/(1 + xL/2).$$

Обдумайте физический смысл полученных общих зависимостей. Рассмотрите предельные случаи глубокой (широкой) и мелкой (узкой) ямы. Не забудьте, что в последнем случае всегда имеется один уровень энергии, и используйте явный вид выражения для него. Сопоставьте решение с помощью нефункциональных методов ТВ и ПВ с вычислением на основе волновых функций стационарных состояний, чтобы почувствовать изящество и простоту первого пути.

3. Кроме ТВ, используйте параметрическое варьирование. Что получается для симметричного потенциала ($\alpha=0$)? Запишите явный вид уровней энергии в соответствующем приближении (см., например, [1, с. 167]). Покажите, что численные значения $\langle U \rangle_n$ остаются такими же, как и у гармонического осциллятора (в принятом приближении).

4. См. задачу 1.

5. Примените результат предыдущей задачи. Какие значения допустимы для показателей степени в кинетической и потенциальной энергиях? Какие частные случаи, представляющие особый интерес, охватываются предложенным гамильтонианом? Укажите использование найденных соотношений. Дайте свои примеры гамильтонианов.

6. Начните со случая, когда нет других полей, кроме постоянного однородного магнитного поля. Освойтесь с задачами о движении зарядов в магнитном поле (§ 7). Не забывайте о выделении финитной ветви движения.

9. Продифференцируйте предложенную величину и преобразуйте результат к виду

$$2E \left\langle \frac{\partial f}{\partial x} \right\rangle = \left\langle \left(\frac{\partial U}{\partial x} f + 2U \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right\rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \left\langle \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right\rangle.$$

10. См. задачу 9 при выборе $f = x^k + 1$.

11. Записывайте окончательные результаты в виде функций как от полной энергии, так и от квантового числа (числа квантов). Например,

$$\langle x^4 \rangle = \frac{3}{2m^2\omega^4} \left[E^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \right] = \frac{3\hbar^2}{2m^2\omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right).$$

Посмотрите, что получается в основном состоянии (вакуумные средние) и в классическом пределе. Сгруппируйте величины по виду квантовых поправок к классическим выражениям. Теперь найдите все эти величины прямым способом на основании волновых функций осциллятора в координатном представлении. Где можно использовать полученные средние значения? Как учесть ангармонизмы при расчете этих же средних?

13. $\langle p^2 \rangle_n = 2mE_n/3$; $\langle x^2 \rangle_n = 8E_n^2/15\hbar^2$. Какой смысл имеет величина β ? Что получится в классическом пределе? Каков явный вид уровней энергии? Где может встретиться такая задача практически? Что получается для нулевых колебаний? Каков физический смысл полученных величин? Предложите свои вопросы.

17. Ход рассуждений такой же, как и в задаче одномерной (см. пп. 9 и 10).

$$18. \quad 2 \langle r^2 \rangle = a^2 n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]; \quad 2 \langle r \rangle = a [3n^2 - l(l+1)]; \quad \langle r^{-3} \rangle = a^{-3}/n^3 l(l+1/2)(l+1);$$

$$\langle r^{-4} \rangle = 2a^{-4} [3n^2 - l(l+1)]/n^3 (l+1/2) [4l(l+1) - 3].$$

Здесь $a = \hbar^2/m\alpha$ (каков смысл этой величины?), а n — главное квантовое число (что оно нумерует?). Вспомните, какие возможны значения l при заданном n . Можно ли при вычислении предложенных в задаче величин ограничиться только вириальными рекуррентными соотношениями? При каких значениях момента полученные выражения имеют смысл? Объясните ограничения. Для чего нужны найденные средние значения? Получите дисперсию $D_r = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$. Найдите условие минимума ее (при заданной энергии) и само минимальное значение. Каков физический смысл этого условия? Вычислите отношение неопределенности Δr к $\langle r \rangle$ в таких состояниях. О чем говорит поведение этого отношения при больших n ?

19. Можно ли ограничиться только вириальными соотношениями при нахождении положительных четных степеней усредняемого радиуса? А для отрицательных четных степеней? Какие ограничения накладываются на возможные значения момента? Можно ли нефункциональным способом получить сред-

ние значения от нечетных степеней радиуса? Где можно использовать полученные средние значения? Исследуйте условие «круговых орбит» для обсуждаемого осциллятора. Учитывайте аналогию с задачей 18, но рассмотрите дисперсию квадрата радиус-вектора.

20. См. подобную задачу 17. Для состояний с определенной энергией, проекцией момента импульса частицы на ось симметрии z (магнитным квантовым числом m) и проекцией импульса на эту ось p_z получаем вириальное соотношение следующего вида:

$$2(k+1)\left(E - \frac{p_z^2}{2\mu}\right) \langle \rho^k \rangle - \left\langle \left[\frac{\partial U}{\partial \rho} \rho + 2(k+1)U \right] \rho^k \right\rangle + \frac{\hbar^2 k}{4\mu} (k^2 - 4m^2) \langle \rho^{k-2} \rangle = 0.$$

Здесь масса частицы обозначена буквой μ , а ρ — расстояние до оси (цилиндрическая координата). Для чисто двумерного случая (поле круговой симметрии) нужно положить $p_z = 0$.

21. Основывайтесь на предыдущей задаче и на аналогии с задачей 18. Предварительно ознакомьтесь с общим решением задачи о двумерном кулоновом поле (например, см. [16]).

23. В каком случае возможна полная аналогия с вириальными соотношениями для степеней координат? В чем трудности общего случая? Рассмотрите, как выглядели бы вириальные соотношения координатного типа в случае четверного закона дисперсии, например. Какие можно сделать выводы?

24. Сравните с прямым расчетом с помощью волновой функции. Что дает теорема вириала для частицы в δ -яме?

26. Как иначе можно было бы найти эту величину?

§ 39. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ВАРИИРОВАНИЕ

Решение задач дает возможность... не только проверить свои знания, но, главное, тренирует... в умении прикладывать теоретические знания к решению практических проблем.

П. Л. Капица

1. Главное в этой задаче, конечно, не вывод формулы, а знакомство с основами метода ПВ. Какие именно параметры λ вы можете назвать? Обратите внимание, что параметром может быть и время, если гамильтониан явно зависит от времени. Дайте соответствующие конкретные примеры. Существуют ли в таком случае стационарные состояния? А как обстоит дело с законом сохранения энергии?

Что является аналогом основного соотношения ПВ в статистической физике?

Заметьте, что чаще всего на практике обсуждаемое равенство читается в обратном направлении: интересующее вас среднее значение как раз определяется оператором производной гамильтониана по некоторому параметру (правой частью соотношения), а получаете вы его простым дифференцированием уровня энергии. А когда же функционирует соотношение ПВ в прямом направлении (т. е. при обычном прочтении соотношения слева направо)?

Еще одно замечание касается параметра, по которому также можно варьировать уровни энергии, но эта операция не входит в основное соотношение ПВ. Речь идет о квантовых числах. Например, в одномерном случае этот вопрос связан с мерами структуры энергетического спектра и так называемыми квантовыми частотами (см. § 9).

2. А если зависимость кинетической энергии от импульса имеет иной вид?

3. См. задачу § 14.

4. Имеется в виду ступенчатая функция Хевисайда, дополненная значением $1/2$ в нуле: $\theta(x) = 1$ ($x > 0$), $\theta(x) = 0$ ($x < 0$), $\theta(0) = 1/2$. Убедитесь предварительно в справедливости предложенного в задаче равенства, используя энергетическое представление для явной записи шпура. Освойте обращение с δ -функцией (см. § 17). Нельзя ли таким же путем получить вторую производную энергии по параметру λ ?

6. Не забудьте об эффективной потенциальной энергии радиального движения. Что показывает знак полученного выражения? Где непосредственно применяется найденное соотношение? Приведите конкретные примеры для тех случаев, когда известны уровни энергии. Помните, что квантовое число l должно фигурировать явно в значениях энергии (наряду с радиальным квантовым числом, а не в объединении с ним в главное квантовое число, например).

7. См. пояснения к предыдущей задаче. Сравните результаты этих двух задач. Какие возможны многомерные обобщения?

8. Запишите гамильтониан осциллятора в виде $H = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Тогда в вашем распоряжении два явных параметра: масса m и классическая частота ω , но имеется и неявный параметр — постоянная Планка $\hbar$, входящая в уровни энергии $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Что же получается при дифференцировании по массе? А что по частоте? По поводу постоянной Планка см. задачу 3 данного параграфа (а также 1 из § 14). Сколько получается независимых соотношений? Что показывает каждое из них? Используйте найденные значения для иллюстрации свойств квантовых колебаний. Рассмотрите нулевые колебания и классический предел. Как вы справитесь с задачей в случае другой формы записи потенциальной энергии: $H = p^2/2m + kx^2/2$? Дайте подробное объяснение.

9. Используйте приближенные значения уровней энергии

(см., например, [1, с. 167]). Опирайтесь на опыт решения предыдущей задачи. Не ограничивайтесь формальным расчетом производных.

10. Сколько параметров в вашем распоряжении? Если возникло затруднение с одним из параметров, то рассмотрите сначала конечную яму, а затем перейдите к пределу ямы бесконечной глубины (см. следующую задачу).

11. По сравнению с предыдущей задачей появляется новый параметр — глубина ямы. Самый интересный результат получается именно при варьировании этого параметра. Пользуйтесь записью уронеи энергии в яме в неявном виде (см. модель 5 прил. 1). Каков физический смысл вариации по глубине ямы? Рассмотрите предельные случаи глубокой (широкой) и узкой (мелкой) ямы. В последнем случае будьте осторожны — записывайте уровень энергии в явном (приближенном) виде. Подведите итоги решения двух последних задач. Опишите, какие результаты могут быть перенесены на ямы произвольного профиля.

12. Уровни энергии можете найти в задачнике [16], например.

13. См. п. 14 прил. 1. Не спешите дифференцировать: вначале разберите роль имеющихся в вашем распоряжении параметров. Это поможет вам, закончив расчеты, объяснить полученные результаты.

14. См. п. 11 прил. 1, а также пояснения к предыдущей задаче.

15. Опирайтесь на п. 15 прил. 1.

16. Уровни энергии найдете в п. 16 прил. 1.

Попытайтесь теперь проанализировать, каким образом все те результаты, которые были легко получены путем ПВ, можно «добыть» стандартной процедурой вычисления средних значений с помощью волновых функций стационарных состояний. Обратите внимание, что если в задачах о конечной и бесконечной ямах это еще сравнительно просто сделать (хотя и здесь уже вы можете зафиксировать преимущества ПВ), то в других моделях волновые функции имеют гораздо более сложный вид (см., например, задачи в [15]). Выберите какой-нибудь случай из перечисленных и попытайтесь выполнить расчеты до конца (не останавливаясь перед ужасающим видом интегралов).

17. Сколько имеется параметров? Сколько получается независимых результатов?

18. Не забывайте выделять явно радиальное и азимутальное квантовые числа. Какое из них отвечает требованиям ПВ? А как быть с другим? Где используются полученные выражения? Каков их физический смысл?

19. См. пояснения к предыдущей задаче.

23. Какие еще параметры вы можете привлечь в этой задаче? Проследите за изменением неопределенностей координаты

и импульса под влиянием δ -потенциала (как в случае $u > 0$, так и в случае $u < 0$). Постарайтесь заготовить значения уровней энергии (точные и приближенные).

24. Используйте это соотношение для выражения соответствующего термодинамического потенциала в виде интеграла по параметру λ , входящему линейно в гамильтониан: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{A}$. Если же подобного параметра нет, то как обобщить это соотношение, введя параметр искусственным образом? Как запишется линейная по возмущению поправка к соответствующему термодинамическому потенциалу? О каких именно потенциалах идет речь?

25. Пусть гамильтониан системы равен $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{A}$, тогда $\Omega = -\beta^{-1} \text{Sp} \exp(-\beta \hat{H}^{(*)})$; $\hat{H}^{(*)} = \hat{H} - \mu \hat{N}$. Отсюда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} &= \left\langle \frac{\partial \hat{H}^{(*)}}{\partial \lambda} \right\rangle = \langle \hat{A} \rangle; \quad \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{A} \rangle = \\ &= \beta \langle \hat{A} \rangle^2 + Z^{-1} \text{Sp} \left(\hat{A} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta \hat{H}^{(*)}} \right) = \beta \langle \hat{A} \rangle^2 - \\ &- \int_0^\beta d\tau \langle \hat{A}(\tau) \hat{A} \rangle; \quad \hat{A}(\tau) = e^{\beta \hat{H}^{(*)}} \hat{A} e^{-\beta \hat{H}^{(*)}}; \quad Z = \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}^{(*)}}. \end{aligned}$$

(Будьте внимательны при дифференцировании экспоненты!) Если ввести скалярное произведение двух операторов по правилу

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \beta^{-1} \int_0^\beta d\tau \langle \hat{A}^+(\tau) \hat{B} \rangle,$$

то в силу положительной определенности (убедитесь сами) $(\hat{B}, \hat{B}) \geq 0$, где равенство нулю возможно лишь при $\hat{B} = 0$, имеем $\partial^2 \Omega / \partial \lambda^2 = -\beta (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \leq 0$.

Таким образом, беря найденные производные для невозмущенной системы, получаем разложение $\Omega = \Omega_0 + \lambda \langle \hat{A} \rangle_0 - 2^{-1} \lambda^2 \beta [(\hat{A}, \hat{A})_0 - \langle \hat{A} \rangle_0^2] + \dots$, в котором фигурирует не только требуемый знак, но и явный вид второй поправки. А теперь покажите, что и в общем случае, когда $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, ряд для Ω -потенциала имеет вид $\Omega = \Omega_0 + \langle \hat{H}_1 \rangle_0 - 2^{-1} \beta [(\hat{H}_1, \hat{H}_1)_0 - \langle \hat{H}_1 \rangle_0^2] + \dots$.

При каких условиях вторая поправка может обратиться в ноль? Как выглядит аналогичное разложение свободной энергии в случае канонического ансамбля? Сравните с соответствующим рядом стационарной теории возмущений для уровней энергии (рядом Рэлея — Шредингера).

Какой знак имеет полное приращение $(\Omega - \Omega_0)$, если среднее значение возмущения по невозмущенному состоянию равно нулю?

§ 40. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

... Решающий должен научиться сохранять равновесие между смутными ощущениями и ясными доводами.

Д. Пойа

1. Для всех уровней энергии

$$E_n = \langle H \rangle_n = \langle p^2 \rangle_n / 2m + \beta \langle x^4 \rangle_n > \frac{\hbar^2}{8m \langle x^2 \rangle_n} + \beta \langle x^2 \rangle_n^2 \geq \left(\frac{\hbar^2}{8mD} + \beta D^2 \right)_{\min} = \frac{3}{4} \hbar^{4/3} \beta^{1/3} (2m)^{-2/3}.$$

Значит, и для основного уровня энергии получаем оценку снизу $E_0 \approx 3\hbar^{4/3}\beta^{1/3}/4 (2m)^{2/3}$.

Какова относительная ошибка такой аппроксимации (точное значение найдете в п. 20 прил. 1)? Сравните с оценками ВКБ-приближения (первого и второго), а также с вариационной оценкой на основе гауссовой пробной функции.

Найдите способ аналогичной оценки для первого возбужденного уровня энергии (подсказка — используйте связь с соответствующей трехмерной задачей). И в этом случае сравните достигаемую точность (убедитесь, что относительная ошибка такой оценки для первого возбужденного уровня вдвое меньше, чем для основного) с обеспечиваемой другими способами расчета этой энергии. Суммируйте выводы. Примените этот метод оценки на основании соотношения неопределенностей (не забудьте в написанной цепочке неравенств в начале этих пояснений обосновать каждый шаг) к другим, найденным самостоятельно примерам.

2. На основании вириальных соотношений получаем дисперсию координаты,

$$D = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2 = 4(E_n/\beta)^2/45.$$

Тогда с помощью теоремы вириала и соотношения неопределенностей имеем

$$\frac{1}{3} E_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_n > \frac{\hbar^2}{8mD} = \frac{45}{32} \cdot \frac{\hbar^2 \beta^2}{m E_n^2},$$

так что и для основного уровня энергии

$$E_0 > 3 \cdot 5^{1/3} \hbar^{2/3} \beta^{2/3} / 2^{4/3} (2m)^{1/3}$$

устанавливается оценка снизу. Какую это дает точность (см. п. 17 прил. 1)? Сравните с вариационным методом и квазиклас-

сическим приближением. Вернитесь к задаче 1 и получите в ней оценку рассмотренным в данной задаче способом. Убедитесь в их эквивалентности.

3. Об оценке с помощью СН см. пояснения к задаче 1. Покажите, что между указанными оценками сверху и снизу не остается промежутка, так что получается точная формула для энергии нулевых колебаний. Объясните, почему это произошло. Можно ли надеяться на такой же успех в других случаях?

4. Получив результат, используйте для определения энергии соответствующих нулевых колебаний способ предыдущей задачи. Объясните ответ. Каков физический смысл нулевых колебаний в данном случае?

5. Обратите внимание, что обычно общий вывод СН основывается на неравенстве Шварца (получается оно при другом выборе α и β — каком именно? — в фигурирующем в условии задачи скалярном произведении), которое подвергается некоторому преобразованию. Сравните оба способа. Отметьте преимущества и недостатки каждого, имея в виду возможность обобщения СН (см., в частности, следующую задачу).

6. Покажите, что из неравенства Шварца непосредственно вытекает искомое соотношение неопределенностей, учитывающее корреляционное влияние на статистический разброс двух величин (наряду с их возможной физической несовместимостью квантовой природы):

$$\Delta f \Delta g \geq \sqrt{D_{fg}^2 + n^2} < \{\hat{f}, \hat{g}\} >^2/4.$$

Кроме перечисленных примеров, рассмотрите случаи, когда величины не коммутируют (имеются в виду их операторы, конечно), но среднее значение коммутанта равно нулю (в каком случае это может быть конкретно?). Что будет для пары — энергия и интеграл движения? Подыщите свои примеры, в которых нет вклада от коммутаторного члена в СН. Какой результат получается при переходе к классическому пределу?

7. Рассмотрите вопрос о знаке равенства в СН предыдущей задачи. Запишите соответствующее уравнение для минимизирующего состояния (корреляционный момент считается фиксированным). Запишите его явно и решите для пары импульс — координата. Подробно объясните, что представляет собой найденное решение. Повторите поиски, используя импульсное представление. Какие связи существуют между входящими в явное выражение для волновой функции параметрами? Восстановите явную зависимость от времени всех параметров (это касается и ответа предыдущей задачи). Какие частные случаи представляют особый интерес? Когда они реализуются фактически?

8. См. пояснения к задаче 6.

9. Вводим скалярное произведение операторов по правилу $(\hat{F}, \hat{G}) \equiv \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{F}^+ \hat{G}) = \langle \hat{F}^+ \hat{G} \rangle$. Убедитесь, что такая величина

удовлетворяет всем требованиям, накладываемым на скалярное произведение. Особое внимание обратите на свойство $(\hat{F}, \hat{F}) \geq 0$. Когда возможен знак равенства, если операторы эрмитовы? Зафиксируйте этот важный момент.

Далее рассматриваем неравенство Шварца, выбирая в качестве пары операторов интересующие нас величины, отсчитанные от их средних значений: $\hat{F} = \hat{f} - \langle f \rangle$, $\hat{G} = \hat{g} - \langle g \rangle$. Тем самым задача сводится, как говорится, «к предыдущей», т. е. все последующие шаги повторяют то, что делается в чистых состояниях (включая и учет корреляции, так что внешне ответ не будет отличаться от формулы задачи 6).

10. До сих пор, как это обычно делается при рассмотрении СН, мы считали, что величины берутся в один и тот же момент времени. А как быть, если нас интересует СН разновременное? В таком случае картина Шредингера описания состояния во времени (физические величины изображаются независимыми от времени операторами, а вся эволюция временная «нагружена» на вектор состояния) непосредственно не дает возможности найти средние значения типа $\langle f(t_1)g(t_2) \rangle$ (если $t_1 \neq t_2$, то в какой момент времени брать вектор состояния?). В таких случаях мы отдаем предпочтение картине Гейзенберга, где вектор состояния (или матрица плотности в случае смешанных состояний) фиксирован, а временная зависимость физических величин позволяет рассматривать их в различные моменты времени в характеристиках отмеченного вида (корреляционного).

Таким образом, трактуя все величины предыдущей задачи в представлении Гейзенберга, приходим к неравенству Шварца, в котором каждый из операторов берется для своего временного аргумента. Далее можно ограничиться только чистыми состояниями без корреляции, получив обобщение обычного СН на разновременные величины. Можно считать состояние смешанным. Можно учесть и корреляцию величин. В самой общей форме вы получите ответ, выписанный в виде обобщенного СН для следующей задачи.

11. См. пояснения к предыдущей задаче. Окончательное выражение удобно записать в следующем виде:

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq \sqrt{D_{fg}^2(t_1, t_2) + \hbar^2 \varphi_{fg}^2(t_1, t_2)/4}.$$

Напомним, что функция корреляции флуктуаций величин f и g в соответствующие моменты времени t_1 и t_2 есть центральный корреляционный момент второго порядка (см. § 22). Величина

же $\varphi_{fg}(t_1, t_2) = \langle \{\hat{f}(t_1), \hat{g}(t_2)\} \rangle$ носит название функции последдействия и определяет в квантовой теории неравновесных процессов (см. § 23, 24) линейную реакцию величины f в момент времени t_1 под действием единичного импульса обобщенной силы в момент t_2 при обобщенной координате g . Подчеркнем еще раз,

что фигурные скобки используются для обозначения квантовых скобок Пуассона: $\{f, g\} \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})$.

12. Пользуйтесь мерами движения осциллятора для указанных условий из задач § 5.

15. Рассмотрите прямое варьирование произведения дисперсий в общем виде, а затем уже полученное общее уравнение примените для пары импульс — координата.

16. Посмотрите на оглавление книги. Проверьте, как фактически используются эти методы в предлагаемых далее в этом параграфе задачах. Отметьте наиболее эффективные.

17. Для стационарных состояний осциллятора $\Delta p \Delta x = \hbar (n + 1/2)$. Что означает результат при больших n ? А при $n = 0$? Чему равно это произведение неопределенностей для осциллятора в термостате? Что получается при низких и высоких температурах? Какова величина этого произведения для вынужденных колебаний осциллятора при исходном смешанном стационарном состоянии?

18. $\Delta p_n \Delta x_n = \hbar \pi n \sqrt{1 - 6/\pi^2 n^2} / 2 \sqrt{3}$, $n = 1, 2, \dots$ Для нулевых колебаний и при высоком возбуждении сравните с оценкой, даваемой СН Гейзенберга. В случае δ -ямы для единственного связанного состояния $\Delta p \Delta x = \hbar \sqrt{2}$.

20. $\Delta p \Delta x \sim \hbar / k_0 L \gg \hbar$, где L характеризует пространственные размеры ямы, а U_0 — глубину, $\hbar k_0 = \sqrt{2mU_0}$. Сравните с результатами предыдущей задачи.

21. Имеется в виду не только случай слабой ямы, но и случай сильной (многоуровневой) ямы, где нужно рассмотреть уровни мелкого залегания.

22. Основывайтесь на прил. 1, однако не ограничивайтесь этим. Обратите особое внимание на оценку неопределенности координаты. К какому выводу можно прийти, суммируя результаты последних пяти задач? Сравните с оценкой, даваемой СН Гейзенберга.

23. Никаких интегралов не вычисляйте! Пользуйтесь только известным выражением для уровней энергии. Рассмотрите интересные частные случаи s -состояний и наиболее близких к классическим круговым орбитам состояний (когда магнитное, орбитальное и главное квантовые числа связаны соотношением $1 \ll |m| = l = n - 1$).

24. Отметьте частные случаи $l = 1, 2, 4$ и $l \gg 1$, а также предельные для числа возбуждений. Что вы заметили для нулевых колебаний? Как улучшить результаты?

25. Выразите ответ через энергию, а затем используйте явное выражение для уровней энергии через корни соответствующих функций Эйри. Рассмотрите частные случаи нулевых колебаний (используя численные значения корней из п. 17 прил. 1) и больших квантовых чисел (где можно сразу использовать

квазиклассические значения уровней энергии, впрочем, как и для нулевых колебаний).

26. Особое внимание уделите нулевым колебаниям. Как влияет асимметрия? Сопоставьте результаты с тем, что наблюдалось для других типов (сильной) нелинейности в предыдущих задачах. Выявите общие свойства нелинейных нулевых колебаний.

27. А чему равно произведение неопределенностей энергии и координаты в когерентном состоянии? Как это произведение укладывается в общее соотношение неопределенностей?

28. Зависит ли результат от вида закона дисперсии? Какую роль играют корреляционные величины? Приведите конкретный пример начального состояния, свободное движение которого вам известно. Как влияет на движение (расплывание пакета — квантовую диффузию) однородное переменное силовое поле? Что можно сказать о состояниях осциллятора (произвольных, нестационарных)?

29. Попробуйте выбрать при тех же величинах и том же дискретном представлении другие векторы состояния.

30. Проведите соответствующие численные оценки в конкретных примерах движения частицы (или обратитесь к такому в учебниках по квантовой механике), чтобы ощутить порядки величин в атомных явлениях и макроскопических. Обратите внимание на то, что во всех предыдущих задачах соотношение неопределенностей работало количественно (либо использовалось неравенство, либо вычислялось произведение исследуемых величин и т. п.). Знакомство с количественной стороной должно помочь вам также представить себе, насколько надежны ориентировочные оценки качественного типа (использование оценки для произведения неопределенностей координаты и импульса, например, в виде постоянной Планка).

Не ограничивайтесь парой величин импульс — координата.

§ 41. СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Когда задачу решает другой, все ясно, когда решаешь сам, ничего не выходит.

Л. Эйлер

1. См. предыдущий параграф.

2. Воспользуйтесь тождеством [78] $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}\lambda^{-1} \times \text{th } \lambda) \exp([\hat{B}, \hat{A}]\lambda^{-2} \ln \text{ch } \lambda) \exp(\hat{B}\lambda^{-1} \text{th } \lambda)$, справедливым при $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = -2\lambda^2 \hat{A}$; $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 2\lambda^2 \hat{B}$.

Покажите, что

$$\rho_{xx'} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \text{th} \frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega}{4\hbar} \text{th} \frac{\hbar\omega\beta}{2} (x+x')^2 - \frac{m\omega}{4\hbar} \text{cth} \frac{\hbar\omega\beta}{2} (x-x')^2\right].$$

Другим способом эта задача решена в [18, с. 108]. Как перейти к импульсному представлению без специальных расчетов? Получите функцию распространения для осциллятора (без дополнительных вычислений).

3. Базируйтесь на результатах предыдущей задачи. Рассмотрите случаи высоких и низких температур. Сделайте выводы. Используйте полученные выражения для расчета неопределенностей координаты и импульса.

4. См. предыдущую задачу. В качестве меры амплитуды колебаний выбирайте неопределенности координаты и импульса.

5. См. § 6.

6. См. § 6.

7. Какой смысл имеет эта величина в случае дискретного спектра f ? Что получится, если собственные значения f вырождены?

8. Что можно сказать о свойствах начального и последующих состояний?

12. Опирайтесь на результат задачи 11. Используйте преобразование Лапласа.

13. См. задачу 12.

14. Записав статоператор микроканонического ансамбля в виде

$$\hat{\rho}_E = \frac{1}{\nu(E)} \int_{-i\infty+\sigma}^{i\infty+\sigma} \frac{d\beta}{2\pi i} e^{\beta(E-\hat{H})} \quad (\sigma \rightarrow +0)$$

и воспользовавшись обычной формой тождества Кубо, получаем формальное выражение искомого соотношения

$$\{\hat{A}, \hat{\rho}_E\} = \frac{1}{\nu(E)} \int_0^{\partial/\partial E} d\lambda \hat{A}(i\hbar\lambda) \hat{\rho}_E \nu(E).$$

Здесь $\nu(E)$ — энергетическая плотность состояний, $\hat{A}$ — некоторый оператор, а $\hat{A}(z)$ — его производная по времени в гейзенберговском представлении (которая затем берется для мнимого значения временного аргумента). Ответ удобно представить также в иной, более явной форме

$$\{\hat{A}, \hat{\rho}_E\} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(i\hbar)^{k-1}}{k! \nu(E)} \cdot \frac{\partial^k}{\partial E^k} \left[\{\hat{H}, \{\hat{H}, \dots, \{\hat{H}, \hat{A}\} \dots\}\} \hat{\rho}_E \nu(E) \right].$$

Нужно иметь в виду, конечно, что это не есть квазиклассическое разложение, поскольку каждое слагаемое в сумме является оператором и даст после усреднений величину, которая также подлежит (если это необходимо) разложению по степеням постоянной Планка.

Где можно использовать полученное соотношение? Какой вид имеет квазиклассическое разложение энергетической плотности состояний (речь идет о системе со многими степенями свободы)?

15. Не спешите с формальными расчетами. Подумайте, чего следует ожидать.

16. Как учесть влияние среды на движение системы?

18. Сформулируйте более точно возможные начальные условия, а также вид гамильтониана естественного движения (без возмущения).

19. Вспомните критерий чистоты состояния.

23. Можно ли то же самое сказать о функции Терлецкого — Блохинцева

$$\rho_1(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d\mathbf{R} \langle \mathbf{r} | \hat{\rho} | \mathbf{R} \rangle \exp [i\mathbf{p}(\mathbf{R} - \mathbf{r})/\hbar]?$$

24. См. пояснения к задаче 2. Сохраняется ли мультипликативное свойство квантовой функции распределения для осциллятора в представлении Терлецкого — Блохинцева?

27. Учítывая, что (см. пояснения к задаче 2)

$$\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh}(\hbar\omega\beta)} \right]^{1/2} \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega\beta}{2} \right),$$

получаем (уровни энергии нужно еще найти!)

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta \hat{H}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \frac{1}{2} \operatorname{sh}^{-1}(\hbar\omega\beta/2).$$

Тогда на основании результатов задач 20 и 21 из § 9 приходим к точному правилу квантования

$$\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin \frac{2\pi k E}{\hbar\omega} = n + \frac{1}{2}.$$

Пусть $E/\hbar\omega = N + \delta$, где N — целое число. Если $-1/2 < \delta < 1/2$, то слева получаем N (сумма — разрывная функция!), а в правой части правил стоит полуцелое число, так что остается предположить, что $\delta = 1/2$ (а если $\delta = -1/2$?). Отсюда $N = n$, а для энергии получаем известный результат $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

Таким образом, вы познакомились не только с еще одним «нефункциональным» способом получения энергетических уровней гармонического осциллятора, но и с одним из приложений интересного соотношения задачи 20 из § 9 (в том же параграфе даны другие применения).

Вам понравилась предыдущая задача? А ее решение вам понравилось? Тогда исследуйте ближайшую окрестность — вы нашли на дереве спелое и вкусное яблоко, но ведь их может быть и несколько.

Д. Поля

1. Разъясните, каким должен быть нижний предел интегралов по энергии. Для ферми-газа на шкале температур имеется характерная точка, при которой обращается в ноль химический потенциал. Есть ли у бозе-газа такая же или подобная опорная температура?

2. Обобщите на случай потенциальных полей в квазиклассическом приближении и покажите, что для функции Гамильтона, однородной по отношению к импульсам (однородная функция l -го порядка) и по отношению к координатам (S -го порядка), в случае n измерений при v циклических координатах

$$\Gamma(E) \sim E^{n/l + (n-v)/S}.$$

3. Где используется это соотношение? Приведите примеры конкретных значений величины α .

4. См. более общие задачи в § 19.

8. Доведите задачу до численного расчета.

12. Для обычного (трехмерного и с квадратичным законом дисперсии) ферми-газа $T_0 = 0,99\varepsilon_F$.

16. По поводу формулы для теплоемкости см. работу [86, с. 873]. Как запишется в том же приближении добавка ΔE к энергии при нулевой температуре? Объясните смысл знаков $\Delta\varepsilon_F$ и ΔE .

18. Около $1 \cdot 10^9$.

20. Характер фазовых переходов в таком газе можно установить на основе исследования при $\xi \ll 1$ интегралов типа

$$\int_0^\infty dz z^{\alpha-1} / [e^{z+\xi} - 1],$$

определяющих (см. задачу 1) термодинамические величины бозе-газа вблизи точки возможного фазового перехода. Результаты сводятся к следующему. В случае $\alpha > 1$ при $T < T_0$ имеется конденсат с относительным числом частиц $N_0/N = 1 - (T/T_0)^\alpha$, где температура бозе-эйнштейновской конденсации T_0 находится из соотношения $N = B\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)T_0^\alpha$, где $\Gamma(\alpha)$ — гамма-функция, $\zeta(\alpha)$ — дзета-функция Римана, $\nu(E) = B\varepsilon^{\alpha-1}$.

В области значений $1 < \alpha < 3/2$ теплоемкость и ее первая производная по T не имеют скачков при T_0 . Вообще говоря, при $\frac{1}{n-1} < \alpha - 1 \leq \frac{1}{n-2}$ существуют менее интересные фазовые переходы n -го рода с $n > 3$. В случае $\alpha = 3/2$ (например, в обычном

трехмерном бозе-газе при квадратичном законе дисперсии) возникает фазовый переход 3-го рода с изломом теплоемкости и скачком ее производной $\Delta C'(T_0) = -3,66N/T_0$ [18]. В области значений $3/2 < \alpha \leq 2$ фазовый переход третьего рода характеризуется бесконечным скачком производной теплоемкости (она степенным образом растет при $T \rightarrow +T_0$ для $\alpha \neq 2$ и логарифмически — для $\alpha = 2$). При этом для всех $1 < \alpha \leq 2$ $C(T_0) = N\alpha(\alpha+1)\zeta(\alpha+1)/\zeta(\alpha)$. В случае же $\alpha > 2$ появляется скачок самой теплоемкости $\Delta C(T_0) = -N\alpha^2\zeta(\alpha)/\zeta(\alpha-1)$, сопровождаемый для $2 < \alpha \leq 3$ растущей при $T \rightarrow +T_0$ производной, а для $\alpha > 3$ — конечной.

Итак, при $0 < \alpha \leq 1$ особенностей в поведении бозе-газа нет, а при $1/(n-1) < \alpha - 1 \leq 1/(n-2)$ ($n = 2, 3, \dots$) возникает конденсация с фазовым переходом n -го рода.

Следует подчеркнуть, что качественные особенности фазового перехода зависят от поведения плотности состояний при $\epsilon \rightarrow 0$, в частности от показателя степени α в числе состояний $\Gamma(\epsilon) = A\epsilon^\alpha$, а количественные характеристики определяются плотностью состояний в интервале энергий $0 < \epsilon \ll T$.

Каким областям значений обратных показателей степени δ_k^{-1} в законах дисперсии $\epsilon(\mathbf{p}) = \sum_{k=1}^n \beta_k p_k^{\delta_k}$ отвечают различные фазовые переходы? Изобразите графически в координатах $\delta_1^{-1}, \delta_2^{-1}, \dots$

Что наблюдается в случае $\epsilon(\mathbf{p}) = \beta_1 p_1^2 + \beta_2 \sqrt{p_2^2 + p_3^2}$ (при малых значениях импульсов)?

В отличие от вырожденного ферми-газа, основные свойства которого не зависят, вообще говоря, от конкретного вида плотности состояний (термодинамика строится в общем виде при произвольном $\nu(\epsilon)$), общие черты поведения бозе-газа весьма чувствительны к виду $\nu(\epsilon)$ при малых энергиях.

21. См. пояснения к предыдущей задаче.

22. Для двумерных газов при обычном законе дисперсии частиц со спином s и массой m получаем следующие выражения средних значений энергии и числа частиц:

$$E = gmAT^2 \int_0^\infty \frac{x dx}{\exp(x - \mu/T) \pm 1}, \quad N = \pm gmAT \ln(1 \pm e^{\mu/T}),$$

где верхний знак отвечает ферми-газу, а нижний — бозе-газу; $g = 2s + 1$; $A = \sigma/2\pi\hbar^2$; σ — площадь. Используя тождество (см. работу Мэя [98])

$$\int_0^\infty \frac{x dx}{\xi e^x + 1} = \int_0^\infty \frac{x dx}{(\xi + 1)e^x - 1} + \frac{1}{2} \left[\ln \left(1 + \frac{1}{\xi} \right) \right]^2 \quad (\xi > 0)$$

и исключая химический потенциал μ из уравнений для энергии и числа частиц, получаем для ферми-газа энергию как функцию от температуры $E^F = E_0^F + NT\varphi(N/gm^FAT)$; $E_0^F = N^2/2gm^FA$,

$$\varphi(z) \equiv \frac{1}{z} \int_0^{\infty} \frac{x dx}{(1 - e^{-x})^{-1} e^x - 1},$$

а для бозе-газа $E^B = NT\varphi(N/gm^B AT)$. Отсюда вытекает одинаковый температурный ход теплоемкостей ферми- и бозе-газов:

$$C_\sigma^F = N^F f(N^F/g^F m^F AT); C_\sigma^B = N^B f(N^B/g^B m^B AT);$$

$$f(z) \equiv \varphi(z) - z\varphi'(z).$$

При заданной температуре и равном числе частиц $N^F = N^B$ теплоемкости ферми- и бозе-газов равны только при выполнении соотношения $g^F m^F = g^B m^B$, а теплоемкости на одну частицу — при условии $N^F/N^B = g^F m^F/g^B m^B$.

Рассмотрите случай линейного закона дисперсии. Сохраняется ли подобное свойство для других парастатистик?

24. На графике зависимости теплоемкости от температуры постройте аномальную кривую данной задачи и сравните с обычным ходом теплоемкости ферми-газов, а также с типичными случаями для бозе-газа.

25. Не рассчитывайте на быстрый успех. Сначала решите вопрос упрощенно. Сделайте предварительные эскизы хода химического потенциала в зависимости от температуры, а уже затем проделайте все выкладки. Чем можно объяснить такую любопытную аномалию? В каком случае еще возможно аналогичное поведение ферми-газа (в терминах энергетической плотности состояний)? Как проявляется эта аномалия в термодинамических свойствах ферми-газа? Проведите графическое сопоставление с ходом химического потенциала для нормальных случаев. Еще раз подчеркнем, что речь идет не только о качественной стороне, но и о количественной (нужно вычислить температуру аномалии, значение самого химического потенциала в этой точке и т. п.). См. также предыдущую задачу.

Сопоставьте рассматриваемое явление с проявлением особых свойств одномерного случая в вопросе образования связанных состояний и с проблемой бозе-эйнштейновской конденсации.

26. См. пояснения к задаче 22.

27. Опирайтесь на результаты решения задачи 22.

28. Не забывайте о предельном переходе от ограниченного вначале некоторым «ящиком» к свободному фону движения. Сравните роль фиксированной щели между основным уровнем энергии в δ -яме и нижней границей предельного непрерывного спектра энергии и роль щелей между слабозвужденными уровнями энергии квазидискретного спектра.

Сопоставьте с пояснениями к задачам 20 данного параграфа и 32 из § 35.

31. Завершите переходом к парастатистике.

Выискивайте в вашей задаче то, что может пригодиться при решении других задач, — за данной конкретной ситуацией старайтесь обнаружить общий метод.

Д. Поля

1. Фермиевская форма записи:

$$n^p(\epsilon) = [e^{(\zeta-\epsilon)/T} + 2e^{2(\zeta-\epsilon)/T} + \dots + re^{r(\zeta-\epsilon)/T}] / [1 + e^{(\zeta-\epsilon)/T} + e^{2(\zeta-\epsilon)/T} + \dots + e^{r(\zeta-\epsilon)/T}].$$

Бозевская форма:

$$n^p(\epsilon) = \left[\exp \frac{\epsilon - \zeta}{T} - 1 \right]^{-1} - (r+1) \left[\exp \frac{(r+1)(\epsilon - \zeta)}{T} - 1 \right]^{-1}.$$

Освойте различные способы вывода этих выражений. Изобразите на графике функции $n^p(\epsilon)$ переход от предельного значения $r=1$, соответствующего статистике Ферми, к другому предельному случаю $r=\infty$, отвечающему статистике Бозе. Обычно подчеркиваются различия между этими статистиками, тогда как здесь вы имеете возможность наблюдать их общность и взаимопереходы.

2. Если в предыдущей задаче при некоторой температуре рассматривалось изменение максимального значения чисел заполнения r , то в данной задаче уже изменяется температура при фиксированном r .

Старайтесь на одном и том же графике переходить от одной кривой к другой плавно, создавая не застывшую, а динамичную картину.

3. Вот некоторые формулы:

$$\Omega = - \int \Gamma(\epsilon) n^p(\epsilon) d\epsilon; \quad E = \int \epsilon n^p(\epsilon) d\epsilon; \quad N = \int n^p(\epsilon) d\epsilon.$$

Объясните, как именно ведется построение термодинамики в конкретном случае. Какую роль играет химический потенциал ζ ? В чем преимущества большого канонического ансамбля? В каких случаях необходимо прибегать к каноническому ансамблю?

4. Как используется это соотношение? Дайте примеры конкретных значений величины α . Чему она равна для свободного p -мерного газа с изотропным l -степенным законом дисперсии?

5. Как совершается переход к предельным статистикам? В каких случаях такая форма записи имеет преимущества? Посмотрите работы Румера (ссылки — в замечаниях к этому параграфу).

Как выглядит аналогичная формула для числа частиц (уравнение для химического потенциала)?

6. Температурная шкала естественным образом разбивается на три области двумя опорными точками — граничной энергией

ϵ_F (при $r = 1$ это энергия Ферми ϵ_F), равной химическому потенциалу при нулевой температуре, и температурой T_0 обращения в нуль химического потенциала. Убедитесь, что для обычного ферми-газа с $\alpha = 3/2$ выполняется любопытное соотношение $T_0 = 0,99\epsilon_F$.

7. Объясните требование плавности интегрируемой функции. Приведите примеры. Когда появляются осциллирующие функции? К чему сведется интеграл в этом последнем случае? Выпишите явно следующий член ряда по температуре (четверной). Обратите внимание на асимптотичность этого ряда. В чем различие асимптотических и сходящихся рядов? В каких задачах вам уже встретились асимптотические ряды?

8. В частности, запишите разложение для свободной энергии. Из какого уравнения определяется граничная энергия ϵ_F ?

12. Какие ограничения налагаются на энергетическую зависимость такой добавки к числу состояний? Заметьте, что это одна из форм теории возмущений. Приведите конкретные примеры таких добавок в энергетическую плотность состояний и найдите соответствующие сдвиги граничной энергии и поправки к теплоемкости. О каких именно теплоемкостях идет речь? См. пояснения к задаче 16 из § 18.

13. После этого обратитесь к обычному двумерному газу. Сравните свойства дву- и трехмерного газа. Каков физический смысл двумерного случая?

14. Уточните, о каких именно температурах идет речь. Есть ли такая температурная область у бозе-газа?

$$16. E = \alpha NT \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha + O(T^{-2\alpha}) \right]; T' = \frac{1}{2} \left(\frac{N}{\alpha! A} \right)^{1/\alpha}; \Gamma(\epsilon) = A\epsilon^\alpha.$$

Верхний знак для ферми-газа ($r = 1$), а нижний — для всех других ($r \geq 2$).

17. Воспользуйтесь соотношением из задачи 4.

18. Зависимость химического потенциала от температуры и содержащихся в коэффициенте A из числа состояний $\Gamma(\epsilon) = A\epsilon^\alpha$ параметров

$$\frac{\zeta}{T} = -\alpha \ln \frac{T}{2T'} \pm \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha + O(T^{-2\alpha})$$

говорит об общем характере правила $\zeta \sim -T \ln T$ при $T \rightarrow \infty$ (знак плюс относится к случаю $r = 1$, а знак минус — для $r \geq 2$).

19. Для теплоемкости при постоянных внешних параметрах λ выпишем высокотемпературное разложение с большей точностью, чем для энергии в задаче 16:

$$\frac{c_\lambda}{\alpha N} = \begin{cases} 1 \mp \frac{\alpha-1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha - (2\alpha-1) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{4}{3} \right)^{\alpha+1} \right] \left(\frac{T'}{T} \right)^{2\alpha}, & r \neq 2; \\ 1 + \frac{\alpha-1}{2} \left(\frac{T'}{T} \right)^\alpha - (2\alpha-1) \left[1 + \left(\frac{4}{3} \right)^{\alpha+1} \right] \left(\frac{T'}{T} \right)^{2\alpha}, & r = 2; \end{cases}$$

$$T' = \frac{1}{2} \left(\frac{N}{a! A} \right)^{1/\alpha}.$$

Здесь знак минус в верхней строке относится к случаю $r = 1$, а знак плюс — к случаю $r > 2$. Отброшены члены порядка $T^{-3\alpha}$.

Предельному классическому случаю соответствует равная α теплоемкость на одну частицу, что обобщает известный закон о равномерном распределении [18] ($1/2$ на каждый квадратичный член в функции Гамильтона и т. п.). Что касается обменных поправок в теплоемкости, то они еще раз иллюстрируют бозонный характер всех парагазов с $r > 1$, а учет членов более высокого порядка температурного разложения на фоне этой общности уже выделяет парагаз с $r = 2$ (такая сепарация парагазов с разными r продолжается и далее с ростом порядка приближения).

20. Если $\alpha = 3/2$ (например, обычный трехмерный газ), то получаем, не выписывая вкладов более высокого порядка,

$$C_\lambda = \frac{3}{2} N \left(1 \mp \frac{N}{6 \sqrt{2\pi} A} T^{-3/2} \right).$$

Здесь и в следующем примере верхний знак относится к $r = 1$, а нижний — к $r > 1$. Интересен также случай $\alpha = 1/2$ (обычный одномерный газ, например), когда пропадают члены второго порядка в разложении для высоких температур:

$$C_\lambda = \frac{N}{2} \left[1 \pm \frac{N}{2 \sqrt{2\pi} A} T^{-1/2} + O(T^{-3/2}) \right].$$

При этом теплоемкость ферми-газа превышает предельное классическое значение, имея необычный температурный ход с максимумом (в области промежуточных температур).

21. Наиболее любопытен случай $\alpha = 1$ (в частности, обычный двумерный газ), когда исчезают первые обменные поправки в высокотемпературном разложении для теплоемкости:

$$\frac{C_\lambda}{N} = 1 - \frac{1}{36} \left(\frac{N}{AT} \right)^2 \begin{cases} 1, & r \neq 2; \\ 25, & r = 2. \end{cases}$$

22. Статистическая характеристика — квадратичная флуктуация числа частиц — подтверждает вывод о бозонных тенденциях парагазов с $r \geq 2$. Вычисление этой величины дает

$$D_N = N \left[1 \mp \frac{N}{2^{\alpha} a! A} T^{-\alpha} + O(T^{-2\alpha}) \right].$$

Здесь минус — для $r = 1$, плюс — для $r \geq 2$. По сравнению с классическим результатом $D_N = N$ в ферми-газе ($r = 1$) флуктуации сдерживаются принципом Паули, однако аналогичный запрет с $r = 2$ в принятом приближении дает то же, что и $r = \infty$, т. е. запреты типа $r \geq 2$ фактически становятся неограничительными.

23. Таким образом, если при низких температурах все промежуточные ($1 < r < \infty$) парагазы ведут себя подобно ферми-газу (у бозе-газа нет такой области температур), то при высо-

ких температурах они имеют бозонный характер. Объясняется это тем, что при низких температурах реализуется возможность заполнения одночастичных состояний и любое r — ограничение чисел заполнения проявляется полностью, блокируя дальнейшую заселенность. При высоких температурах разброс по большому интервалу состояний не дает почувствовать такой потолок заполнения с $r \geq 2$ из-за очень малой вероятности попадания нескольких частиц в одно и то же состояние, когда проявляется их статистическое взаимодействие.

Запреты типа $r \geq 2$ при высоких температурах переходят в свою противоположность, становясь разрешениями. На запрет $n_k > r$ можно смотреть как на разрешение $n_k \leq r$.

Отметим общность квантовых обменных членов для всех парастатистик (различие наблюдается лишь в знаке и численном коэффициенте).

Весьма любопытен немонотонный характер перехода от ферми- к бозе-газу при изменении r (см., например, задачу 21).

Несмотря на малость высокотемпературных квантовых поправок, они содержат важные, существенно новые свойства газов по сравнению с классическими. Так, появляется зависимость энергии идеального газа от внешних параметров (например, объема), характерная для неидеального газа (сравните с энергией и уравнением состояния газа Ван-дер-Ваальса).

Поучительно, что в отличие от низкотемпературного парагаза, общие свойства которого (как и у ферми-газа) не зависят от конкретного вида плотности состояний, для исследования свойств парагаза при высоких температурах нужно знать явный вид $\nu(\epsilon)$ (подобно бозе-газу для всех T).

§ 44. ГРАНИЧНЫЕ И РАЗМЕРНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

Студент может по мере своих склонностей и способностей неограниченно углубляться в изучение поставленного вопроса.

П. Л. Капица

1. Начните с освоения формулы суммирования Пуассона. Например, в данной задаче удобна такая форма записи этой формулы:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi(n) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \varphi(x) e^{2\pi i l x} dx - \frac{1}{2} \varphi(0).$$

Рассмотрите другие варианты (различные нижние пределы интеграла, конечные суммы, разрывные функции, функции от полуцелых чисел и т. д.). Как перейти к формуле суммирования Эйлера?

В данной задаче одномерная ветвь движения в перпендикулярном к слою (стенки — параллельные плоскости) направлении отвечает финитному движению с уровнями энергии

$$\epsilon_{n\perp} = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2mL^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Используя упомянутую формулу суммирования и учитывая ветвь движения вдоль слоя, получаем энергетическую плотность состояний

$$\nu(\epsilon) = \nu_0(\epsilon) \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\hbar}{L\sqrt{2m\epsilon}} + \frac{\hbar}{L\sqrt{2m\epsilon}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\sin[2\pi l n(\epsilon)]}{l} \right\},$$

в которой $n(\epsilon) = \sqrt{2m\epsilon}L/\pi\hbar$, $\nu_0(\epsilon)$ — плотность состояний в неограниченном случае, L — толщина слоя. Такая форма записи плотности состояний удобна, так как позволяет в термодинамических величинах, например, выделять осциллирующие вклады. Перейдите к расчету этих величин для вырожденного электронного газа.

2. См. пояснения к предыдущей задаче. Используйте неявную запись квантования энергии в перпендикулярном к слою направлении (см. также задачу 10 из § 9): $\epsilon_{\perp} = \pi^2 \hbar^2 [n - \gamma(\epsilon_{\perp})]^2 / 2mL^2$, $n = 1, 2, \dots$ В данной модели функция размытия (почему можно говорить о размытии, хотя модель потенциала имеет резкие границы?) равна

$$\gamma(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{\epsilon}{U_0}}.$$

Переходя к энергетической плотности состояний, получаем

$$\nu(\epsilon) = \nu_0(\epsilon) \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\hbar}{L\sqrt{2m\epsilon}} [1 - 2\gamma(\epsilon)] + \frac{\hbar}{L\sqrt{2m\epsilon}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\sin[2\pi l n(\epsilon)]}{l} \right\}; \quad n(\epsilon) = \sqrt{2m\epsilon}L/\pi\hbar + \gamma(\epsilon).$$

Как далее использовать полученный результат?

3. См. пояснения к двум предыдущим задачам. Покажите, что общий вид энергетической плотности состояний остается тем же, что и в ответе задачи 2, но функция размытия $\gamma(\epsilon)$ уже не задана явно (можно ее ввести чисто феноменологически, причем даже вне рамок потенциальных моделей, а можно считать функционалом профиля пленочного потенциала и моделировать различными конкретными сглаженными потенциальными ямами). Продолжайте исследование, переходя к конкретным применениям, например для вырожденного электронного газа. Однако помните, что от формального расчета термодинамических величин такого газа в рассматриваемых моделях с размерным квантованием энергии до реальных приложений к свойствам металлических пластин предстоит нелегкий путь учета

специальных факторов (электронейтральность, детали структуры границ атомных остатков и пр.). В каких случаях одной энергетической плотности недостаточно для вырожденного электронного газа, а требуется знание числа состояний (речь идет, конечно, о термодинамических величинах, так как в других случаях необходимо знать детали движения, а не только структуру энергетического спектра)?

4. См. пояснения к предыдущим задачам.

5. В данном случае можно приближенно разделить переменные в перпендикулярном к оси направлении. Покажите это, используя теорию возмущений. Запишите потенциальную энергию явно с помощью ступенчатых функций Хевисайда и выделите аддитивную часть и мультипликативную добавку, которая и послужит возмущением. Оцените точность аддитивного приближения, найдя поправку к уровням энергии. Затем переходите к энергетической плотности состояний.

6. См. пояснения к задачам 1—5.

9. Попробуйте учесть также размытие границ в рамках модели задачи 3. Выделите особые магнитопленочные осцилляции.

10. См. § 9. Не увлекайтесь возможностью точного решения, а займитесь свойствами движения в стационарных состояниях и нестационарных пакетных состояниях в критическом диапазоне энергий.

11. Когда такое граничное условие может встретиться реально?

12. Вдали от классической точки поворота, в классически доступной области, волновая функция стационарного состояния финитного или инфинитного в одном направлении движения частицы в обычном квазиклассическом приближении может быть записана в виде

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_{b_l}^x k dx - \alpha_l\right),$$

где $\hbar k(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}$, b_l — левая точка поворота, α_l — левая граничная фаза. Аналогично для правой точки поворота

$$\Psi(x) = \frac{B}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^{b_p} k dx - \alpha_p\right).$$

Когда точка поворота удалена от особой точки потенциала, граничная фаза $\alpha = \pi/4$, а в случае непроницаемой границы $\alpha = \pi/2$. Вблизи же критической энергии, соответствующей особенности потенциала (максимум, излом и т. п.), граничная фаза α принимает различные значения в зависимости от энергии и вида особенности. Зависимость α от энергии определяет время отражения пакета стационарных состояний — квантовое время отражения $t_{\text{кв}} = t_{\text{кл}} - 2\hbar da/dE$, где $t_{\text{кл}}$ — классическое время движения до точки поворота и обратно. См. пояснения к задаче 19 из § 9.

Чисто квантовая добавка $2\hbar d\alpha/dE$ в случае классически недостижимых точек поворота (максимум при критической энергии) компенсирует расходимость классического времени отражения, а в случае классически достижимых (излом) — сглаживает особенности $t_{\text{кл}}$.

В случае потенциальной ямы с граничными особенностями, характеризуемыми левой α_l и правой α_n граничными фазами, сшивание двух указанных выражений для волновой функции приводит к правилам квантования

$$\int_{b_l}^{b_n} k dx = \pi n + \alpha_l + \alpha_n,$$

или $\oint k dx = 2\pi [n + (\alpha_l + \alpha_n)/\pi]$, так что фазовая добавка γ в правилах квантования получается сложением граничных фаз $\gamma = (\alpha_l + \alpha_n)/\pi$, а ее энергетическая зависимость имеет простой смысл. С одной стороны, она входит в энергетическую плотность состояний, так как

$$\hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d}{dE} (\alpha_l + \alpha_n) = \tau_{\text{кл}} - \hbar \frac{d\gamma}{dE},$$

а с другой стороны, определяет пакетное время колебаний в яме: $\tau = \tau_{\text{кл}} - \hbar d\gamma/dE$. Приведем выражения для граничной фазы в случае граничного условия непроницаемости. При линейном ходе потенциала $U(x) = -\beta x$ ($x > 0$) $\alpha = \pi/4 + \arg \{ \exp [- i 2\lambda^{3/2} \theta \times (\lambda)/3] w(-\lambda) \}$, где $\lambda = E(2m/\hbar^2 \beta^2)^{1/3}$; $w = u + iv$ — фоковские функции Эйри. При квадратичном поведении потенциала $U(x) = -\beta x^2$ ($x > 0$) $\alpha = 3\pi/8 - (\lambda/4) \ln(|\lambda|/4e) + \arg \Gamma(3/4 + i\lambda/4)$; $\lambda = E(2m/\hbar^2 \beta)^{1/2}$, Γ — гамма-функция. Получите аналогичные выражения для граничного условия обращения в ноль производной волновой функции. Рассмотрите вид граничных фаз при больших и малых энергиях (отсчет энергии ведется от критического значения). Приведем еще результат для граничных фаз в критическом диапазоне энергий (условие непроницаемости): в случае линейной особенности $\alpha = 5\pi/12 + \lambda^{3/2} \Gamma^2(2/3)/4\pi - 2\lambda^{3/2} \theta(\lambda)/3 + O(\lambda^2)$; в случае квадратичной $\alpha = 3\pi/8 - (\lambda/4) \ln|\lambda| + \lambda(1 + \pi/2 - C - \ln 2)/4 + O(\lambda^3)$, где C — постоянная Эйлера.

Используйте результаты задач 17 и 18 из § 12.

13. См. пояснения к задаче 28 из § 9, а также к задачам 17 и 18 из § 12.

14. См. формулу (16) в пояснениях к § 9.

15. Рассмотрите случай потенциала, состоящего из двух ям и барьера между ними, предполагая, что он симметричен (одинаковые ямы).

20. Обоснуйте переход к двумерному (по поверхности цилиндра) движению.

22. Приведите другие примеры параметрического возбуждения систем (кроме вынужденных колебаний осциллятора).

Сравните такого типа нестационарные состояния (сильная нестационарность) с пакетами стационарных состояний системы в постоянных внешних условиях (слабая нестационарность).

§ 45. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Решая задачу, вы не должны быть чересчур педантичны, но не должны и раббрасываться.

Д. Поля

1. Считайте, что фермионы имеют половинный спин. Вначале выразите основные величины в общем виде через число и плотность состояний. Основное внимание уделите граничной энергии Ферми, теплоемкости, магнитному моменту и дифференциальной магнитной восприимчивости. Для расчета вклада в теплоемкость за счет слабого магнитного поля используйте формулу Недорезова (см. задачу 16 из § 18). Рассмотрите обычный случай трехмерного газа с квадратичным законом дисперсии (вырожденный газ, высокотемпературное поведение и окрестность температуры обращения в ноль химического потенциала), переходя сразу к предельным случаям слабых и очень сильных магнитных полей (по сравнению с чем?).

Для каждого случая постройте графики зависимости всех рассматриваемых величин от магнитного поля. Какие особенности возникают в пределе нулевой температуры (абсолютного вырождения) и как они сглаживаются с ростом температуры? Попытайтесь объяснить полученные закономерности. Перейдите к двумерному случаю, а затем и к указанным более общим случаям (вплоть до степенной зависимости числа состояний от энергии или, когда это возможно, для произвольной зависимости).

2. Начните с рассмотрения температуры конденсации. Изобразите на графике ее изменение в зависимости от величины магнитного поля, выбрав подходящие безразмерные переменные. Затем перейдите к теплоемкости. Далее основное внимание уделите поведению дифференциальной магнитной восприимчивости. Какие особенности ее температурного хода вам удалось обнаружить? При каких магнитных полях они наиболее ярко выражены?

5. Сравните с обычным случаем трехмерного газа.

9. Считайте, что магнитное поле направлено по одной из главных осей тензора обратных эффективных масс.

12. Как вы уже заметили, функции Грина для частиц с зарядом e в постоянном однородном магнитном поле H не обладают трансляционной симметрией по координатам. Однако эта пространственная неоднородность содержится в некотором фазовом множителе. Так, для одночастичной функции Грина, отвлекаясь от временных или температурных переменных, можно записать

$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, где множитель неоднородности Φ определяется выбором векторного потенциала $\mathbf{A}$. При этом достаточно найти вид Φ для какого-то определенного $\mathbf{A}$, так как при градиентном преобразовании $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f$ одночастичная функция Грина преобразуется по правилу $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow \exp\{i(e/\hbar c) \times [f(\mathbf{r}_1) - f(\mathbf{r}_2)]\} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Покажите это.

Пусть векторный потенциал выбран в виде $\mathbf{A} = [\mathbf{H}\mathbf{r}]/2$. Тогда преобразованию координат $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ соответствует градиентное преобразование с $f = \mathbf{r}[\mathbf{H}\mathbf{a}]/2$, при котором $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow G(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{a}) = \exp\{i(e/\hbar c)[\mathbf{H}\mathbf{a}](\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, что приводит к уравнению для фазового множителя $\Phi(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{a}) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp\{i(e/\hbar c)[\mathbf{H}\mathbf{a}](\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}$. Решение последнего есть $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\{-i(e/2\hbar c)\mathbf{H}[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2]\}$.

При выборе оси z вдоль магнитного поля $A_x = -yH/2$, $A_y = xH/2$, $A_z = 0$ и $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\{-i(eH/2\hbar c)(x_1y_2 - y_1x_2)\}$. Если же выбрать векторный потенциал в форме $A_x = -yH$, $A_y = A_z = 0$, чему соответствует $f = -xyH/2$ при переходе от предыдущей формы, то $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\{-i(eH/2\hbar c)(x_1 - x_2) \times (y_1 + y_2)\}$. Таким же образом при $A_y = xH$, $A_x = A_z = 0$ $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\{i(eH/2\hbar c)(x_1 + x_2)(y_1 - y_2)\}$.

Еще раз подчеркнем, что речь идет не об одночастичной функции Грина идеального газа («нулевой», невозмущенной), а о полной функции в системе частиц со взаимодействием, вид которой в целом зависит от этого взаимодействия и не может быть установлен в общем случае, но фазовый множитель такой функции удастся установить (точнее, множитель неоднородности).

17. Используйте формулу Румера для парагаза (см. задачу 5 из § 19).

§ 46. КОРРЕЛЯЦИЯ ФЛУКТУАЦИЙ

Ненасытная жажда вычислений должна умеряться периодами бездействия, когда машина полностью разбирается для новой сборки. Это — проветривание мозга.

Дж. Синг

1. Свяжите центральный корреляционный момент второго порядка с фазой волновой функции. Если фаза волновой функции квадратично зависит от координат, то какой смысл имеют коэффициенты при квадратном и линейном членах? Как фаза «управляет» потоками? Влияет ли фаза волновой функции координатного представления на распределение вероятностей импульса?

2. Матрица таких моментов для одновременных величин определяется с помощью гейзенберговских операторов (см. пояснения к задаче 10 из § 16): $D_{AB}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{A}_T(t_1), \hat{B}_T(t_2)]_+ \rangle - \langle \hat{A}_T$

$\times (t_1) > \langle \hat{B}_\Gamma(t_2) \rangle$. В случае совпадающих временных аргументов (одновременные корреляции) будем применять обозначения: $D_{AB} \equiv D_{AB}(t, t)$; $D_{AB}^0 \equiv D_{AB}(0, 0)$.

Найдите производные $\dot{D}_{xx}$, $\dot{D}_{xp}$, $\dot{D}_{pp}$. Составьте цепочку уравнений движения для корреляций. В каких случаях такая бесконечная цепочка замыкается на уравнениях только для отмеченных корреляционных моментов? Что можно сказать о корреляционных моментах в стационарных смешанных состояниях?

3. См. предыдущую задачу. Разберите случай свободного движения. В чем особенность квантовой диффузии, если в начальный момент времени $D_{xp} < 0$? Приведите конкретные примеры пакетов.

Сравните квантовую диффузию с обычной классической. Какая величина является аналогом коэффициента диффузии? Сравните функции распространения.

4. Имеется в виду свободное движение при произвольной зависимости кинетической энергии частицы от импульса. Составьте динамические уравнения для корреляционных моментов координат и импульсов. Проинтегрируйте их. Сделайте выводы.

5. Используйте уравнения движения для корреляционных моментов (задача 2). Постройте корреляционные моменты на основании гейзенберговских операторов координаты и импульса. Сравните оба пути.

Ответ: $D_{xx} = D_{xx}^0 \cos^2(\omega t) + D_{xp}^0 \sin(2\omega t)/m\omega + D_{pp}^0 \sin^2(\omega t)/m^2\omega^2$;
 $D_{xp} = D_{xp}^0 \cos(2\omega t) + (D_{pp}^0 - m^2\omega^2 D_{xx}^0) \sin(2\omega t)/2m\omega$.

Дисперсия импульсов аналогична дисперсии координат.

Что получается в стационарных состояниях осциллятора?

8. Получите результаты непосредственно из ответа задачи 5. Проанализируйте выводы.

9. Имеется в виду действие однородного переменного силового поля на гармонический осциллятор.

10. См. § 16.

11. См. § 16.

12. В частности, рассмотрите случай гауссова распределения для импульса.

15. Ограничимся обычными газами (трехмерными и с квадратичным изотропным законом дисперсии). После усреднения по углам, которое можно выполнить в общем виде (почему?), приходим к соотношению

$$D \equiv D_{\substack{2\ 2 \\ p_x p_y}} = \langle p^4 \rangle / 15 - \langle p^2 \rangle^2 / 9.$$

Проверьте, что распределение Максвелла приводит к равной нулю корреляции, как и должно быть для независимых величин. Таким образом, мы имеем дело с чисто квантовым обменным эффектом.

При низких температурах для ферми-газа $D = -2p_F^4/175$. Для бозе-газа при температурах ниже точки конденсации $D = (mT)^2 \times [\zeta(7/2)\zeta(3/2) - \zeta^2(5/2)]/\zeta^2(3/2) = 0,17(mT)^2$.

Что получится при температуре обращения в ноль химического потенциала для ферми-газа и при температуре бозе-эйнштейновской конденсации для бозе-газа? Затем перейдите к высоким температурам.

Видно ли из полученных формул для корреляции, что перед нами квантовый эффект? Чем объяснить температурную зависимость рассматриваемой корреляции? Изобразите на графиках температурный ход для обоих газов. Что означают рассматриваемые величины квадратов компонент импульса? Как трактовать знаки корреляционных моментов для ферми- и бозе-газов?

16. Рассмотрите центральный корреляционный момент второго порядка для плотности числа частиц в различных точках пространства и так называемую функцию корреляции (см. [18]). Специально отметьте случай идеальных газов. Попытайтесь учесть также спин частиц, выбирая в качестве двух величин локальные плотности частиц с определенной проекцией спина на некоторое направление.

17. См. предыдущую задачу, а также о корреляциях флуктуаций в идеальных газах в книге [18]. Запишите функцию корреляции с учетом указанных условий на размерность пространства (фактически можно ограничиться одно-, дву- и трехмерными случаями) и зависимость энергии от импульса. Разберите поведение функции корреляции абсолютно вырожденного газа на больших расстояниях. Подведите итоги.

18. См. пояснения к двум предыдущим задачам.

21. Для функции спектральной плотности $I_{AB}(\omega)$, которая является фурье-преобразованием корреляционной функции $F_{AB}(t) = \langle \hat{A}(t) \hat{B} \rangle$, вместо температурной симметрии канонического ансамбля $I_{BA}(-\omega) = I_{AB}(\omega) \exp(-\hbar\omega/T)$ в микроканоническом случае получаем (см. § 17)

$$I_{BA}(-\omega) = \frac{1}{v(E)} \exp\left(-\hbar\omega \frac{\partial}{\partial E}\right) [v(E) I_{AB}(\omega)].$$

Как иначе записать этот результат, учитывая смысл экспоненциального оператора (конечного сдвига)? Какая связь (приближенная) с каноническим ансамблем сохраняется?

Переходя к матрице корреляции флуктуаций, получаем ($\langle A \rangle = 0$):

$$D_{AB}(\omega) = \frac{1}{2} [I_{AB}(\omega) + I_{BA}(-\omega)] = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{v(E)} \exp\left(-\hbar\omega \frac{\partial}{\partial E}\right) v(E) \right] I_{AB}(\omega).$$

Как это соотношение связано с возможностью распространения флуктуационно-диссипационных теорем на случай системы с микроканоническим распределением?

§ 47. МЕТОД КУБО. ОБОБЩЕННЫЕ ВОСПРИИЧИВОСТИ

Процесс решения задачи представляет собой поиск выхода из затруднения или пути обхода препятствия, — это процесс достижения цели, которая первоначально не кажется сразу доступной.

Д. Пойа

1. Это — вводная задача для напоминания общей постановки проблемы, введения обозначений и т. д. Как всегда, операторные величины без специальных обозначений относятся к картине Шредингера. В задаче есть физически выделенный момент времени t_0 , когда нам известно состояние системы и когда включается возмущение (вообще говоря, оно может включаться и позднее). В некоторых случаях момент наблюдения t отстоит от момента включения далеко, так что можно полагать $t_0 \rightarrow -\infty$, в частности при адиабатическом включении возмущения. Параметр совпадения представлений (Шредингера, Гейзенберга и Дирака) будем выбирать равным $t_0 = 0$.

Напоминаем, что для любых операторных величин (операторов физических характеристик, статоператора, полевых операторов рождения и уничтожения частиц или квазичастиц) переход от картины Шредингера к картине Дирака (взаимодействия) имеет вид $\hat{A}_d(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0)$, где для явно независимого от времени гамильтониана естественной эволюции $\partial \hat{H}_0 / \partial t = 0$ получаем соответствующий пропагатор $\hat{U}_0(t_1, t_2) = \exp \{ -i(t_1 - t_2) \hat{H}_0 / \hbar \}$. Как уже указано, в дальнейшем выбираем параметр совпадения всех представлений $t_0 = 0$, так что в таком конкретном представлении взаимодействия, обозначаемом тильдой, операторы равны $\tilde{\hat{A}}(t) = e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{A} e^{-it\hat{H}_0/\hbar}$. В частности, для начального условия в выбранном представлении статоператор $\tilde{\hat{\rho}}(t_0) = e^{it_0\hat{H}_0/\hbar} \hat{\rho}(t_0) e^{-it_0\hat{H}_0/\hbar} = \hat{\rho}(t_0) \equiv \hat{\rho}_0$ оказывается таким же, как и в картине Шредингера (отметьте, чем это вызвано и к каким упрощениям в дальнейшем приводит).

Таким образом, уравнение Лиувилля и начальное условие к нему записываются в форме

$$\frac{\partial \tilde{\hat{\rho}}(t)}{\partial t} = - \{ \tilde{\hat{H}}_1(t), \tilde{\hat{\rho}}(t) \}; \quad \tilde{\hat{\rho}}(t_0) = \hat{\rho}_0.$$

или в виде интегрального уравнения

$$\hat{\tilde{\rho}}(t) = \hat{\rho}_0 - \int_0^t dt_1 \{ \hat{H}_1(t_1), \hat{\tilde{\rho}}(t_1) \}.$$

Отсюда методом итераций в первом приближении

$$\hat{\tilde{\rho}}(t) = \hat{\rho}_0 - \int_0^t dt_1 \{ \hat{H}_1(t_1), \hat{\rho}_0 \},$$

во втором приближении

$$\hat{\tilde{\rho}}(t) = \hat{\rho}_0 - \int_0^t dt_1 \{ \hat{H}_1(t_1), \hat{\rho}_0 \} + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \{ \hat{H}_1(t_1), \{ \hat{H}_1(t_2), \hat{\rho}_0 \} \}$$

и т. д. В общем виде результат можно записать так:

$$\hat{\tilde{\rho}}(t) = \hat{\rho}_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \{ \hat{H}_1(t_1), \{ \hat{H}_1(t_2), \dots, \{ \hat{H}_1(t_k), \hat{\rho}_0 \} \dots \} \}.$$

Найденный ряд Кубо для статоператора эквивалентен точному решению кинетического уравнения, однако имеет слишком общий вид в силу избыточной информации, содержащейся в статоператоре для всей системы, тогда как фактически нас обычно интересуют свойства какой-то части системы (требуются свертки статоператора по избыточным переменным и т. п.). В данной задаче полученный ответ для решения самого общего кинетического уравнения — уравнения Лиувилля — промежуточное звено: главным же является вычисление реакции системы, т. е. среднего значения некоторой физической характеристики всей системы или только ее части.

2. На основании полученного в задаче 1 ряда для статоператора в представлении взаимодействия имеем

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle &= \text{Sp} [\hat{f}(t) \hat{\tilde{\rho}}(t)] = \text{Sp} [\hat{f}(t) \hat{\rho}_0] + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_0^t dt_1 \times \\ &\times \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \text{Sp} [\hat{f}(t) \{ \hat{H}_1(t_1), \{ \hat{H}_1(t_2), \dots, \{ \hat{H}_1(t_k), \hat{\rho}_0 \} \dots \} \}]. \end{aligned}$$

Первое слагаемое — среднее значение рассматриваемой величины в исходном состоянии:

$$\text{Sp} [\hat{f}(t) \hat{\rho}_0] = \text{Sp} (e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{f} e^{-it\hat{H}_0/\hbar} \hat{\rho}_0) = \text{Sp} (\hat{f} \hat{\rho}_0) = \langle f \rangle_0.$$

В дальнейшем символом $\langle \dots \rangle_0$ обозначаем усреднение по начальному (стационарному, в частности равновесному, состоянию). Преобразование остальных членов (в сумме) к таким средним

проводится на основе известного свойства циклической перестановки операторов под знаком шпура $\text{Sp}(\hat{a}\{\hat{b}, \hat{c}\}) = \text{Sp}(\{\hat{a}, \hat{b}\}\hat{c})$. Так, линейный член преобразуется следующим образом:

$$\text{Sp}[\hat{f}(t)\{\hat{H}_1(t_1), \hat{\rho}_0\}] = \text{Sp}[\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}\hat{\rho}_0] = \langle \{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\} \rangle_0.$$

Аналогично квадратичный член подвергается этой процедуре «вытеснения» оператора $\hat{\rho}_0$ из скобок Пуассона дважды:

$$\begin{aligned} \text{Sp}[\hat{f}(t)\{\hat{H}_1(t_1), \{\hat{H}_1(t_2), \hat{\rho}_0\}\}] &= \text{Sp}[\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}\{\hat{H}_1(t_2), \hat{\rho}_0\}] = \\ &= \text{Sp}[\{\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}, \hat{H}_1(t_2)\}\hat{\rho}_0] = \langle \{\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}, \hat{H}_1(t_2)\} \rangle_0 \end{aligned}$$

и т. д. Окончательное выражение для реакции системы на внешнее механическое воздействие имеет вид суммы среднего по исходному состоянию и добавки за счет действия возмущения, записанной в виде ряда теории возмущений:

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle &= \langle f \rangle_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \\ &\dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \langle \dots \{\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}, \hat{H}_1(t_2)\}, \dots, \hat{H}_1(t_k)\} \rangle_0. \end{aligned}$$

Полученное выражение является основным в методе Кубо. Удобно сохранить множитель $(-1)^k$ под знаком суммы (а как его исключить?), так как он фактически компенсируется обычно знаком минус в соответствующем конкретном выражении оператора возмущения (см. примеры зондов). В частности, линейная реакция равна

$$\Delta_1 \langle f \rangle = - \int_{t_0}^t dt_1 \langle \{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\} \rangle_0,$$

а квадратичная —

$$\Delta_2 \langle f \rangle = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle \{\{\hat{f}(t), \hat{H}_1(t_1)\}, \hat{H}_1(t_2)\} \rangle_0.$$

3. Расчет средних значений можно провести более коротким путем с помощью метода канонических преобразований. В представлении взаимодействия связь операторов в различные моменты времени осуществляется S -оператором (см. § 10), так что решение уравнения Лиувилля задачи 1 можно записать в виде

$$\hat{\rho}(t) = \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{S}^{-1}(t, t_0) = \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{S}^{-1}(t, t_0).$$

Тогда для среднего значения получаем

$$\begin{aligned}\langle f(t) \rangle &= \text{Sp} [\hat{f}(t) \hat{\rho}(t)] = \text{Sp} [\hat{f}(t) \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{S}^{-1}(t, t_0)] = \\ &= \text{Sp} [\hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{f}(t) \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}_0],\end{aligned}$$

$$\text{или } \langle f(t) \rangle = \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{f}(t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0.$$

Это выражение эквивалентно полученному ряду Кубо из предыдущей задачи (нужно перемножить соответствующие ряды для $\hat{S}^{-1}$ и $\hat{S}$, однако попытайтесь найти компактный способ такого умножения, чтобы сразу был виден каждый член получаемого нового ряда). Такую форму записи можно считать более общей, так как не предполагается разложение в ряд по степеням возмущения: для $\hat{S}$ -оператора, удовлетворяющего уравнению

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_1(t) \hat{S},$$

можно строить другие приближения (или решать задачу точно, если это возможно, — приведите известные вам примеры).

Приведем еще вывод формулы канонического преобразования с помощью гейзенберговского представления:

$$\begin{aligned}\langle f(t) \rangle &= \text{Sp} [\hat{f}_T(t) \hat{\rho}_T] = \text{Sp} [\hat{S}^{-1}(t, 0) \hat{f}(t) \hat{S}(t, \\ &0) \hat{S}(0, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{S}^{-1}(0, t_0)] = \text{Sp} [\hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{f}(t) \hat{S}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0)] = \\ &= \langle \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{f}(t) \hat{S}(t, t_0) \rangle_0.\end{aligned}$$

Здесь для величины f использован переход от картины Гейзенберга к картине Дирака, а для статистического оператора — связь

$\hat{\rho}_T = \hat{\rho}(0)$ (вспоминаем, что все представления совпадают при $t = 0$) и эволюция в представлении Дирака (переход от момента времени t_0 к моменту времени нулевому).

Обсудите результаты. См. в связи с этим другие задачи данного параграфа. Читайте указанную литературу в замечаниях к § 23.

Отметьте, как представление взаимодействия позволяет в чистом виде представить влияние возмущения (на фоне естественной эволюции системы). Каким образом структура ряда Кубо отражает идею генерации движения оператором $\hat{H}_1(t)$? Как повлиял запаздывающий характер реакции на ступенчатое

интегрирование по временным аргументам? Всегда ли полученный ряд является разложением по степеням возмущения? Как перейти к пределу классической статистики? Как учесть возможность выключения возмущения до момента наблюдения? Что собой представляют нелинейные члены? Всегда ли можно пользоваться таким приближением (разложением в ряд)? Что можно сказать о термических возмущениях? Какие обобщения метода Кубо вы можете предложить? В чем общность метода Кубо и метода статсуммы в статистике? Как учтено влияние термостата (если таковой имеется)? Учитывается ли обратная связь с источником воздействия на рассматриваемую систему? Как внедрить функции Грина в рассматриваемый подход?

4. Помните о необходимости гейзенберговской картины (см. пояснения к задаче 10 из § 16). Общий ход решения аналогичен рассмотренному в предыдущей задаче. Приведем полный ответ:

$$D_{AB}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{S}^{-1}(t_1, t_0) \hat{A}(t_1) \hat{S}(t_1, t_0) \hat{S}^{-1}(t_2, t_0) \hat{B}(t_2) \hat{S}(t_2, t_0)]_+ \rangle_0.$$

Выпишите результат в линейном приближении.

5. Ответ звучит так: все выражения для средних значений (и для рассмотренных в предыдущей задаче корреляционных моментов) сохраняют внешне ту же форму, что была получена методом Кубо, но знак усреднения $\langle \dots \rangle_0$ нужно понимать как усреднение по такому состоянию, какое было бы у системы к моменту времени $t=0$ без воздействия извне, т. е. при естественной эволюции статоператора шредингеровской картины.

Обсудите возможности практической реализации найденных выражений. Приведите конкретные примеры как для начальных состояний, так и для переменной естественной эволюции системы.

7. В представлении взаимодействия уравнение Лиувилля с указанным членом

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \frac{\hat{\rho} - \hat{\rho}_0}{\tau} = - \{ \hat{H}_1(t), \hat{\rho} \}$$

и начальным условием (см. задачу 1) $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0$ сводится к интегральному уравнению

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 - \int_{t_0}^t dt_1 e^{-(t-t_1)/\tau} \{ \hat{H}_1(t_1), \hat{\rho}(t_1) \}.$$

Далее примените тот же метод, что и в задачах 1, 2. Сформулируйте результат теории возмущений как для статоператора, так и для средних.

Попытайтесь обосновать разумность введения рассматриваемого члена в уравнение для статистического оператора. Как учитывать взаимодействие с термостатом более последовательно? Что получится, если одновременно с включением возмущения отключается и контакт с термостатом?

Рассмотрите более подробно влияние рассматриваемой аппроксимации (приближения времени релаксации) на линейные члены. В частности, что изменится в выражениях для функций последдействия и обобщенных восприимчивостей? Вспомните смысл функции последдействия и отметьте релаксационную роль τ . Рассмотрите конкретные примеры.

10. Для примера возьмите гамильтониан возмущения в виде суммы двух членов. Сравните с линейным приближением. Что можно сказать о термических возмущениях?

12. Обычно в методе Кубо исходят из начального равновесного состояния системы. Более того, ряд результатов линейной теории реакции тесно связывается с экспоненциальной формой статистического оператора (большого) канонического ансамбля. Например, тождество Кубо, формула Кубо для адмиттансов, флуктуационно-диссипационная теорема. Фактически же, как вы могли убедиться по первым задачам этого параграфа, многие достижения теории Кубо остаются в силе и для произвольного вида смешанных стационарных начальных состояний. В частности, свойства симметрии адмиттансов, возможность спектрального представления всех двухвременных характеристик (их зависимость только от разности временных аргументов), связь адмиттансов с функциями последдействия.

Естественно, что при этом некоторые соотношения будут усложняться или не выполняться вовсе. Так, флуктуационно-диссипационная теорема сохраняет свою силу, если можно ввести эффективную (например, отрицательную) температуру стационарного состояния, а формула Кубо верна в несколько измененном виде (см. задачу 14 из § 17) и для микроканонического ансамбля равновесной системы. Применение полевых методов при конкретных вычислениях адмиттансов также связано с введением температурного представления и аналога S -оператора. Как выйти из положения в случае микроканонического ансамбля?

Настоящие замечания имеют целью обратить ваше внимание на то, что обычно излагаемые результаты теории реакции системы на внешнее воздействие явно опираются на конкретный вид статистического оператора равновесного состояния (экспоненциальный для канонического ансамбля). В то же время многие из них сохраняют свою силу для исходных стационарных состояний самого общего вида, т. е. имеют более широкую область применения. Интересно также и перенесение многих результатов на случай равновесного микроканонического ансамбля.

14. Подразумевается точное решение, а не ряд теории возмущений. Считайте, что время действия зонда предельно мало (можно формально использовать δ -функцию Дирака). Приведите конкретные примеры.

15. Для функции последействия $\varphi_{kl}(t) \equiv \langle \hat{A}_k(t), \hat{A}_l \rangle_0$ на основании тождества Кубо получают такие выражения:

$$\begin{aligned} \varphi_{kl}(t) &= \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_l \hat{A}_k(t + i\hbar\lambda) \rangle_0 = \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_k(t) \hat{A}_l(i\hbar\lambda) \rangle_0 = \\ &= - \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_k(t) \hat{A}_l(i\hbar\lambda) \rangle_0 = - \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_l \hat{A}_k(t + i\hbar\lambda) \rangle_0. \end{aligned}$$

Запишите аналогичные представления через квантовые корреляторы для обобщенных восприимчивостей (адмиттансов). Затем перейдите к случаю системы с микроканоническим ансамблем (см. также задачу 14 из § 17).

22. Имеются в виду величины $\varphi_{\rho_\alpha \rho_\beta}(t)$ и $\chi_{\rho_\alpha \rho_\beta}(\omega)$, для которых $\mathbf{P}_\beta$ — компоненты вектора поляризации $\mathbf{P} = \sum_a e_a \mathbf{r}^a$.

23. Например, $\varphi_{xx}(t) = \sin(\omega_0 t)/m\omega_0$. Как получить остальные величины непосредственно из этого выражения? Приведите примеры использования всех найденных характеристик.

34. Рассмотрим кратко обычный ход рассуждений при выводе формулы Кубо для обобщенных восприимчивостей (адмиттансов). Для всякой характеристики системы $\hat{A}_l$ (явно не зависящей от времени) и канонического статоператора $\hat{\rho}_\beta = Z^{-1}(\beta) \exp(-\beta \hat{H})$ скобки Пуассона можно представить в виде

$$\langle \hat{A}_l, \hat{\rho}_\beta \rangle = \int_0^\beta d\lambda \hat{A}_l(i\hbar\lambda) \hat{\rho}_\beta, \quad (21)$$

удобном для последующего вычисления средних значений. Здесь аргумент указывает, что операторная величина берется в представлении взаимодействия (гейзенберговском для системы самой по себе), а точка означает производную по временному аргументу (в данном случае — чисто мнимому). Тождество Кубо (21) относится также и к большому каноническому распределению, но для определенности будем говорить о каноническом. С помощью

формулы (21) для функций последействия $\varphi_{kl}(t) \equiv \langle \hat{A}_k(t), \hat{A}_l \rangle$, определяющих линейную реакцию системы ($k-l$ процесс) на единичный импульс обобщенной силы (среднее значение $\langle \dots \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}_\beta \dots)$ берется по исходному каноническому ансамблю), получаем следующее выражение: $\varphi_{kl}(t) = \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle$ (см. задачу 15). Отсюда в силу связи адмиттансов $\chi_{kl}(\omega)$, опи-

сывающих линейную реакцию системы при монохроматическом зондировании с частотой ω , с функциями последействия $\chi_{kl}(\omega) = \int_0^\infty dt \varphi_{kl}(t) \exp(i\omega t)$ вытекает формула Кубо

$$\chi_{kl}(\omega) = \int_0^\infty dt \exp(i\omega t) \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle. \quad (22)$$

Обратимся теперь к случаю микроканонической системы со стат-оператором $\hat{\rho}_E = \nu^{-1}(E) \delta(E - \hat{H})$, где $\nu(E) = \text{Sp} \delta(E - \hat{H})$ имеет смысл энергетической плотности состояний, и перейдем к преобразованию Лапласа:

$$\nu(E) \hat{\rho}_E = \delta(E - \hat{H}) \doteq \exp(-\beta \hat{H}) = Z(\beta) \hat{\rho}_\beta.$$

Тогда все микроканонические средние $\langle \dots \rangle_E$ будут связаны со средними значениями $\langle \dots \rangle_\beta$ для условной канонической системы с тем же гамильтонианом соотношениями $\nu(E) \langle \dots \rangle_E \doteq Z(\beta) \langle \dots \rangle_\beta$. В частности, для функций последействия это дает зависимость

$$\nu(E) \varphi_{kl}^E(t) \doteq Z(\beta) \varphi_{kl}^\beta(t),$$

а для адмиттансов имеем правило

$$\nu(E) \chi_{kl}^E(\omega) \doteq Z(\beta) \chi_{kl}^\beta(\omega). \quad (23)$$

Учитывая, что при обратном преобразовании Лапласа β переходит в $\partial/\partial E$, можем переписать соотношение (23) непосредственно, используя условную запись с помощью интеграла, подобного (22) и содержащего производную по энергии:

$$\chi_{kl}^E(\omega) = \nu^{-1}(E) \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \int_0^{\partial/\partial E} d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle_{E\nu}(E). \quad (24)$$

К этому выражению можно прийти и иначе, записывая аналог тождества Кубо для микроканонического статоператора (см. также задачу 14 из § 17):

$$\{\hat{A}_l, \hat{\rho}_E\} = \nu^{-1}(E) \int_0^{\partial/\partial E} d\lambda \hat{A}_l(i\hbar\lambda) \hat{\rho}_{E\nu}(E) \quad (25)$$

и сообразно понимая параметрическое дифференцирование.

Таким образом, возникают две возможности практического расчета адмиттансов $\chi^E(\omega)$ для микроканонической системы. Первый путь отвечает предварительному нахождению адмиттанса $\chi^\beta(\omega)$ для соответствующего гамильтониану системы гипотетического канонического распределения при всех требуемых значениях температурной переменной β . После этого совершается переход к оригиналу преобразования Лапласа по правилу (23). Другой путь — применение формального выражения (24), запи-

санного в стиле обычной формулы Кубо (22) с сохранением ее общей структуры или в виде коммутаторного ряда

$$\chi_{kl}^E(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\hbar)^{n-1}}{n! \nu(E)} \cdot \frac{\partial^n}{\partial E^n} \left[\nu(E) \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{A}_k(t) \hat{A}_l^{(n)}(0) \rangle_E \right]. \quad (26)$$

Разумеется, это не квазиклассическое разложение, поскольку каждый член ряда также может быть разложен по степеням постоянной Планка.

Заметим, что использованная предельная форма через δ -функцию Дирака для микроканонического статоператора не обязательна: и для $\hat{\rho}_E = \Delta(E - \hat{H})/\Delta\Gamma(E)$, где $\Delta\Gamma(E) = \text{Sp } \Delta(E - \hat{H})$ статистический вес системы, а функция Δ отлична от нуля только в некотором энергетическом слсе вблизи E , все соотношения останутся справедливыми с умножением статсуммы $Z(\beta)$ на образ Лапласа функции Δ в формулах типа (23) и заменой $\nu(E)$ на $\Delta\Gamma(E)$ в (24) — (26). Убедитесь в этом.

35. Вначале отметим, что формула Кубо для канонической системы (см. предыдущую задачу) может быть построена и без использования тождества Кубо. Идея заключается во введении температуры не «на уровне заселенностей» (в виде параметра статоператора), а «на уровне корреляций». Пусть фурье-образы вспомогательных корреляционных функций (см. задачи 1 и 2 из § 24)

$$\langle \hat{A}_k(t) \hat{A}_l \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{kl}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega / 2\pi -$$

так называемые спектральные интенсивности $I_{kl}(\omega)$ — связаны между собой соотношениями

$$\exp(-\hbar\omega\beta) = I_{lk}(-\omega)/I_{kl}(\omega). \quad (27)$$

Здесь β не зависит от ω (например, для равновесной канонической системы или для неравновесной стационарной подсистемы с отрицательной эффективной температурой). Тогда появляется свойство симметрии корреляторов во временном представлении

$\langle \hat{A}_l \hat{A}_k(t) \rangle = \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\beta) \hat{A}_l \rangle$, которое позволяет записать функции последействия в виде параметрического интеграла Кубо:

$$\begin{aligned} \varphi_{kl}(t) &= i[\langle \hat{A}_k(t) \hat{A}_l \rangle - \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\beta) \hat{A}_l \rangle] / \hbar = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\beta} d\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle = -\int_0^{\beta} d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle = \\ &= \int_0^{\beta} d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle. \end{aligned} \quad (28)$$

Этот прямой вывод формулы Кубо без применения тождества Кубо наталкивает на мысль, что она обладает большей общно-

стью, чем тождество. Действительно, распространение ее на более общий случай возможно для таких неравновесных стационарных систем, в которых выполняется соотношение (27), однако вместо β входит соответствующий элемент матрицы эффективных температур β_{kl} — величина, зависящая от процесса ($k-l$), но по-прежнему не зависящая от частоты возбудителя ω . Физический смысл введения такой матрицы отвечает установлению связи корреляции спонтанных флуктуаций с диссипацией энергии в возбуждаемой системе, обобщающей флуктуационно-диссипационную теорему (см. задачу 25 из § 24). Тогда вывод (28) сохраняет силу, а формула Кубо принимает вид

$$\chi_{kl}(\omega) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\beta_{kl}} d\lambda \langle \hat{A}_k(t - i\hbar\lambda) \hat{A}_l \rangle, \quad (29)$$

где температурный параметр β в верхнем пределе интеграла заменяется на соответствующий элемент β_{kl} матрицы эффективных температур.

§ 48. ФУНКЦИИ ГРИНА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В решении проблем исследователь укрепляет свои силы, находит новые методы и новые точки зрения, открывает более широкие и свободные горизонты.

Д. Гильберт

1. Запаздывающие

$$G_{AB}^{\eta}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) \langle [\hat{A}(t_1), \hat{B}(t_2)]^{\eta} \rangle,$$

опережающие

$$G_{AB}^{\eta}(t_1, t_2) = -\theta(t_2 - t_1) \langle [\hat{A}(t_1), \hat{B}(t_2)]^{\eta} \rangle$$

и причинные

$$G_{AB}^{\eta}(t_1, t_2) = \langle T_{\eta} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle = \theta(t_1 - t_2) \langle \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle + \\ + \eta \theta(t_2 - t_1) \langle \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) \rangle.$$

функции Грина выражаются через корреляционную функцию

$$F_{AB}(t_1, t_2) = \langle \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle.$$

В обобщенном коммутанте $[\hat{A}, \hat{B}]^{\eta} \equiv \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A}$ знак коммутаторности принимает значения $\eta = 0, \pm 1$ (для причинных функций $\eta = \pm 1$). Операторы будем считать независимыми явно от времени и взятыми в представлении взаимодействия (т. е. в гейзенберговском представлении для системы самой по себе), а усреднение — производимым по стационарному смешанному со-

стотнию. Именно такие функции Грина фактически используются в задачах кинетики (см. § 23). Однако дополнительных значков (тильда над операторами и ноль у средних) писать не будем. Такие функции зависят лишь от разности временных аргументов (покажите это), так что используем краткое обозначение

$$G(t) \equiv G(t_1, t_2); t = t_1 - t_2.$$

Фурье-преобразование по временному аргументу выбираем следующим образом:

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t}, \quad f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t}.$$

Функцией спектральной интенсивности (плотности) будем называть фурье-образ корреляционной функции: $I_{AB}(\omega) \equiv F_{AB}(\omega)$. Учитывая фурье-разложение ступенчатой функции Хевисайда

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega + i\varepsilon} e^{-i\omega t},$$

где (и в дальнейшем) $\varepsilon \rightarrow +0$, и пользуясь теоремой о сдвиге для выбранного преобразования, получаем для запаздывающей (верхние знаки) и опережающей функций Грина спектральные представления

$$G_{AB}^{ar}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega' - (\omega \pm i\varepsilon)} [I_{AB}(\omega') - \gamma_1 I_{BA}(-\omega')],$$

записанные в виде предельных значений интегралов типа Коши и содержащие в общем случае две функции спектральной интенсивности.

В какие области комплексной плоскости частот могут быть непосредственно аналитически продолжены эти функции? Каковы их свойства? В каком случае спектральные представления определяются только одной функцией спектральной плотности? Почему эта последняя носит именно такое название? Укажите прямую связь рассмотренных функций Грина с кинетическими задачами.

Не забывайте о причинной функции.

2. Удобно иллюстрировать свойства симметрии функции спектральной интенсивности $I_{AB}(\omega)$ (см. задачу 1), записывая ее в форме двойной суммы по полному набору квантовых чисел, характеризующих чистые стационарные состояния (т. е. в представлении, где диагонален гамильтониан, а также статоператор): $I_{AB}(\omega) = \sum_{n, m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} 2\pi \delta(\omega_{mn} - \omega)$; $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$. Убедитесь в

справедливости данного соотношения. Отсюда следует свойство эрмитовой симметрии $I_{AB}^*(\omega) = I_{B+A}(\omega)$.

Объясните происхождение этого свойства. Покажите также, что в случае (большого) канонического ансамбля справедливо

еще одно важное свойство симметрии (температурная симметрия): $I_{AB}(-\omega) = I_{BA}(\omega) \exp(-\hbar\omega/T)$. Какую форму принимает это свойство в случае микроканонического ансамбля (см. также задачу 21 из § 22)? Какова природа этого свойства? Какую роль играет это свойство в кинетических задачах?

Наконец, существует свойство симметрии онзагеровского типа. Рассмотрите операцию обобщенной инверсии времени, при которой $t \rightarrow -t$ и $i \rightarrow -i$ (а также изменяют знак внешние параметры типа напряженности магнитного поля) в применении к корреляционной функции и покажите, что $I_{AB}^*(\omega) = \pm I_{AB}'(\omega)$.

Здесь штрих показывает изменение знака упомянутых внешних параметров, а знаки относятся: плюс — к случаю одинаково преобразующихся величин A и B (обе величины типа скорости или типа координаты), минус — к случаю различно преобразующихся величин. Эта симметрия совместно с эрмитовой симметрией дает свойство $I_{AB}(\omega) = \pm I_{B+A}'(\omega)$. В каком случае функция спектральной плотности вещественна (мнимая)? Что получается для физических величин A и B ? Переходите к функциям Грина. Отметьте значение каждого из свойств симметрии.

3. См. пояснения к предыдущей задаче. Обратите внимание, что температурная симметрия не влияет на свойства симметрии рассматриваемых функций Грина (эти свойства установите самостоятельно в предыдущей задаче), однако очень важна в установлении связи с корреляцией флуктуаций (флуктуационно-диссипационная теорема), а также в аналитическом продолжении в область комплексного времени (мацубаровское представление для функций Грина).

8. См. определения величин в задачах этого и предыдущего параграфов.

13. Пусть в начальный момент времени $t = 0$ состояние замкнутой (или находящейся в постоянных внешних условиях) системы определяется вектором состояния Ψ_0 , где индекс ноль одновременно отвечает некоторому полному набору физических величин, характеризующих начальное состояние. Тогда к моменту времени t

эволюция системы приведет к состоянию $\Psi(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) \Psi_0$, так что вероятность наблюдения исходного полного набора (исходного состояния) — вероятность распада — равна

$$L(t) = |\langle \Psi_0, \Psi(t) \rangle|^2 = |\langle \Psi_0, \exp(-it\hat{H}/\hbar) \Psi_0 \rangle|^2,$$

что в энергетическом представлении при отсчете непрерывной части спектра от $E = 0$ и без реализации возможной дискретной

части спектра энергии дает $L(t) = \left| \int_0^\infty dE |\Psi_0(E)|^2 e^{-itE/\hbar} \right|^2$, где плотность распределения по энергии $\rho(E) = |\Psi_0(E)|^2$ остается постоянной при движении системы. Таким образом, закон распада непосредственно связан через преобразование Фурье с распреде-

лением по энергии: $L(t) = \left| \int_0^\infty dE \rho(E) e^{-itE/\hbar} \right|^2$. Этот результат известен как теорема Фока—Крылова. Далее переходите к поставленному вопросу (см. литературу в замечаниях к § 24).

15. См. пояснения к задаче 13. При малых t , раскладывая $\rho(t) = \int_0^\infty dE \rho(E) e^{-itE/\hbar}$ по степеням t , получаем $\rho(t) \simeq 1 - it\bar{E}/\hbar - t^2\bar{E}^2/2\hbar^2$, а вероятность нераспада (закон распада) $L(t) = |\rho(t)|^2 \simeq 1 - t^2[\bar{E}^2 - (\bar{E})^2]/\hbar^2$. Входящая сюда дисперсия энергии (как быть, если она бесконечна?) определяется свойствами функции $\Gamma(E)$. Вычисление дает $\bar{E}^2 - (\bar{E})^2 = \pi^{-1} \int_0^\infty \Gamma(E) dE + O(\Gamma^2)$.

Вообще говоря, удобнее оставить в выражении для закона распада при малых временах дисперсию в общем виде.

В основном интервале времени можно при вычислении $\rho(t)$ деформировать контур интегрирования в плоскости комплексных энергий так, чтобы учесть основной вклад за счет вычета подинтегральной функции в полюсе, лежащем в нижней полуплоскости (изобразите такой контур, помня, что функция $\rho(E)$ может иметь и другие особенности, лежащие ниже полюса). Тогда вы получите (с учетом вклада от части контура, идущей по отрезку мнимой оси) следующее разложение:

$$\rho(t) = \exp[-itE_0/\hbar - t\Gamma(E_0)/\hbar] - i\hbar\Gamma(0)/\pi E_0^2 t,$$

так что при больших t $L(t) = \exp[-2t\Gamma(E_0)/\hbar]$, а при очень больших t $L(t) = \hbar^2\Gamma^2(0)/\pi^2 E_0^4 t^2$.

Итак, для закона распада получен ответ:

$$L(t) = \begin{cases} 1 - \pi^{-1}\hbar^{-2}t^2 \int_0^\infty \Gamma(E) dE, & t \rightarrow 0; \\ \exp[-2t\Gamma(E_0)/\hbar]; & \\ \hbar^2\Gamma^2(0)/\pi^2 E_0^4 t^2, & t \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Оцените более точно временной интервал, в пределах которого закон распада экспоненциален.

Что получится в случае $\Gamma = \text{const}$ (распределение Лоренца)? А что в случае $\Gamma(0) = 0$?

Познакомьтесь с работами по теории распада (см. литературу в замечаниях к § 24). Свяжите закон распада с вопросом о квазиуровнях (§ 3). Обратите внимание на примеры распределений по энергии, встретившиеся при рассмотрении конкретных квазистационарных состояний.

21. См. примеры в задачах предыдущего параграфа.

25. Рассмотрите, в частности, среднюю диссипируемую мощность в системе, на которую действуют зонды монохроматические. Проиллюстрируйте влияние фазовых соотношений на при-

мере синфазных зондов и зондов со случайными фазами. Какие именно части адмиттансов определяют усредненную по всем параметрам мощность? Приведите конкретные примеры. Запишите и объясните различные формы флуктуационно-диссипационных теорем. Читайте литературу по методу функций Грина и методу Кубо (см. замечания к § 24, 23).

26. Если на систему действуют монохроматические зонды, т. е. гамильтониан возмущения имеет вид

$$\hat{H}_1(t) = -\hat{A}_k \operatorname{Re} [F_k^0 \exp(-i\omega t)],$$

то средняя выделяемая в системе мощность, усредненная по периоду действия зондов, в приближении времени релаксации (см. задачу 7 из § 23) равна

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = \frac{i\omega}{4} [\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega)] F_l^{0*} F_k^0, \quad (30)$$

где обобщенные восприимчивости (адмиттансы) $\chi_{kl}^*(\omega)$ связаны с соответствующими функциями последействия

$$\varphi_{kl}(t) = \langle \{\hat{A}_k(t), \hat{A}_l\} \rangle \exp(-t/\tau)$$

соотношением

$$\chi_{kl}^*(\omega) = \int_0^\infty dt \varphi_{kl}(t) \exp(i\omega t).$$

Эту же связь можно выразить на языке функций Грина: адмиттансы определяются аналитическим продолжением в верхнюю полуплоскость частот запаздывающих коммутаторных функций Грина

$$\chi_{kl}^*(\omega) = \frac{i}{\hbar} C_{kl}^{\eta=1} \left(\omega + \frac{i}{\tau} \right).$$

Входящая в формулу (30) разность адмиттансов в силу спектрального представления функций Грина (см. задачу 1) содержит скачок функций Грина на вещественной оси частот:

$$\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' (\pi\tau)^{-1}}{(\omega' - \omega)^2 + \tau^{-2}} [I_{lk}(\omega') - I_{kl}(-\omega')], \quad (31)$$

размытый интегральным преобразованием по вещественной оси ω в интервале порядка τ^{-1} . С другой стороны, матрица корреляции спонтанных флуктуаций в частотном представлении также может быть представлена через вспомогательные функции спектральной интенсивности $I_{kl}(\omega)$:

$$D_{kl}(\omega) = [I_{kl}(\omega) + I_{lk}(-\omega)]/2. \quad (32)$$

В случае температурной симметрии $I_{lk}(-\omega) = I_{kl}(\omega) \exp(-\hbar\omega\beta)$ с помощью формулы (31) получаем возможность выразить дисси-

пацию энергии (30) непосредственно через корреляцию спонтанных флуктуаций (32) в размытой области частот:

$$\overline{\frac{d}{dt} \langle E \rangle} = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' (\pi\tau)^{-1}}{(\omega' - \omega)^2 + \tau^{-2}} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega'\beta}{2} D_{lk}(\omega') F_l^{0*} F_k^0. \quad (33)$$

Явная же связь адмиттансов со спектральным составом корреляции флуктуаций записывается в виде интеграла типа Коши (а не его предельного значения, как при $\tau \rightarrow \infty$):

$$\chi_{kl}^*(\omega) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega' - \omega - i\tau^{-1}} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega'\beta}{2} D_{kl}(\omega'). \quad (34)$$

Наконец, спонтанные флуктуации определяются идеальными адмиттансами в пределе $\tau^{-1} \rightarrow 0$:

$$D_{lk}(\omega) = \frac{i\hbar}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega\beta}{2} [\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}^*(\omega)]_{\tau \rightarrow \infty}. \quad (35)$$

Таким образом, благодаря аналитическим свойствам адмиттансов все соотношения флуктуационно-диссипационной теоремы (см. формулы (33) — (35)) сохраняются, несколько видоизменяясь. Так, зависимость (33) диссипации от корреляций содержит размытие по интервалу частот порядка τ^{-1} — локальные по частотам соотношения заменяются интегральными.

Некоторые потенциальные модели

Приводятся основные характеристики стационарных состояний: уровни энергии, коэффициенты прозрачности T , отражения R и т. п.

1. δ -яма (рис. 3):

$$U(x) = -u\delta(x); \quad T^{-1} = 1 + |E_0|/E, \quad E > 0; \quad E_0 = -mu^2/2\hbar^2;$$

$$\psi_0(x) = \kappa^{1/2} \exp(-\kappa|x|); \quad \kappa = (2m|E_0|)^{1/2}/\hbar = mu/\hbar^2.$$

2. δ -барьер (рис. 4):

$$U(x) = u\delta(x); \quad T^{-1} = 1 + |E_0|/E.$$

3. Гармонический осциллятор (рис. 5):

$$U(x) = m\omega^2 x^2/2; \quad E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots;$$

$$\psi_n(x) = (m\omega/\hbar)^{1/4} \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi), \quad \xi = x(m\omega/\hbar)^{1/2}.$$

4. Параболический барьер Кембла (рис. 6):

$$U(x) = -\beta x^2; \quad T^{-1} = 1 + \exp(-\pi\lambda), \quad \lambda = E(2m/\hbar^2\beta)^{1/2}.$$

5. Прямоугольная яма (рис. 7):

$$U(x) = U_0 \cdot [\theta(x-L) + \theta(-x)];$$

$$T^{-1} = 1 + \frac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \sin^2(kL), \quad E > U_0, \quad \hbar k = (2mE)^{1/2};$$

$$kL = \pi n - 2\arcsin \sqrt{E/U_0}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad E < U_0.$$

6. Прямоугольный барьер (рис. 8):

$$U(x) = U_0 \theta(x) \theta(L-x);$$

$$T^{-1} = \begin{cases} 1 + \frac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \sin^2(kL), & E \geq U_0, \quad \hbar k = \sqrt{2m(E-U_0)}; \\ 1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0-E)} \operatorname{sh}^2(\kappa L), & E < U_0, \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0-E)}. \end{cases}$$

7. Несимметричная прямоугольная яма (рис. 9):

$$U(x) = U_1 \theta(-x) + U_2 \theta(x-L);$$

$$kL = \pi n - \arcsin \sqrt{E/U_1} - \arcsin \sqrt{E/U_2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

8. Бесконечная прямоугольная яма (рис. 10):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in (0, L); \\ \infty, & x \notin (0, L); \end{cases}$$

$$E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2mL^2; \quad \psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(\pi n x / L), \quad n = 1, 2, \dots$$

9. Прямоугольная ступенька (рис. 11): $U(x) = U_0 \theta(x)$;

$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right)^2, \quad E > U_0.$$

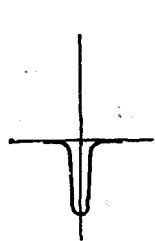


Рис. 3

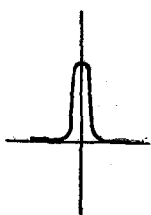


Рис. 4

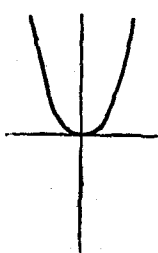


Рис. 5

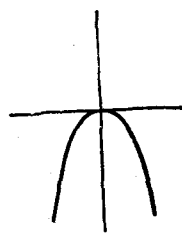


Рис. 6

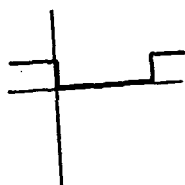


Рис. 7

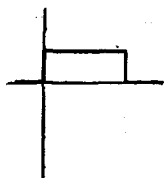


Рис. 8

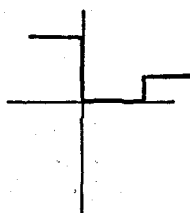


Рис. 9

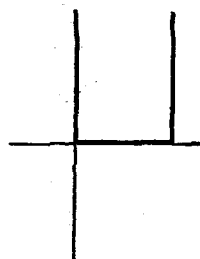


Рис. 10

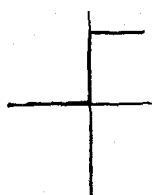


Рис. 11

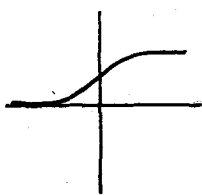


Рис. 12

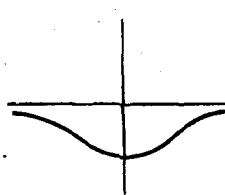


Рис. 13

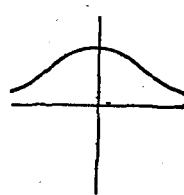


Рис. 14

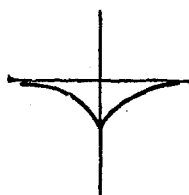


Рис. 15

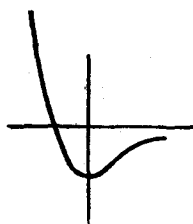


Рис. 16

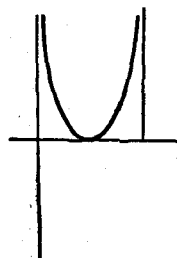


Рис. 17

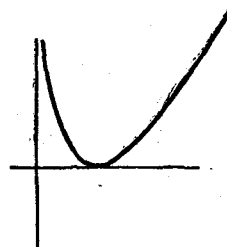


Рис. 18

10. Сглаженная ступенька (рис. 12): $U(x) = U_0(1 + e^{-x/a})^{-1}$;

$$R = \frac{\text{sh}^2[\pi a(k-x)]}{\text{sh}^2[\pi a(k+x)]}, \quad \hbar k = \sqrt{2mE};$$

$$\hbar x = \sqrt{2m(E - U_0)}, \quad E > U_0.$$

11. Яма (рис. 13):

$$U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2}(x/a);$$

$$T^{-1} \text{sh}^2(\pi k a) = \text{sh}^2(\pi k a) + \cos^2[\pi(N + 1/2)], \quad E > 0, \quad \hbar k = \sqrt{2mE};$$

$$E_n = -\hbar^2(N-n)^2/2ma^2, \quad n = 0, 1, \dots < N = \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2 + 1/4} - 1/2.$$

12. Барьер (рис. 14):

$$U(x) = U_0 \text{ch}^{-2}(x/a);$$

$$T^{-1} \text{sh}^2(\pi k a) = \text{sh}^2(\pi k a) + \begin{cases} \text{ch}^2\left(\pi \sqrt{k_0^2 a^2 - 1/4}\right), & 2k_0 a > 1; \\ \cos^2\left(\pi \sqrt{1/4 - k_0^2 a^2}\right), & 2k_0 a < 1; \end{cases}$$

$$\hbar k_0 = \sqrt{2mU_0}, \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

13. Экспоненциальная яма (рис. 15):

$$U(x) = -U_0 \exp(-2|x|/L).$$

Нечетные уровни энергии определяются корнями функций Бесселя: $J_{xL}(k_0 L) = 0$, а четные — корнями их производных:

$$J'_{xL}(k_0 L) = 0; \quad \hbar x = \sqrt{2m|E|}, \quad \hbar k_0 = \sqrt{2mU_0}.$$

14. Яма Морза (рис. 16):

$$U(x) = U_0(e^{-2x/a} - 2e^{-x/a});$$

$$E_n = -\hbar^2(N-n)^2/2ma^2, \quad n = 0, 1, \dots < N = a\sqrt{2mU_0}/\hbar - 1/2.$$

15. Яма (рис. 17):

$$U(x) = U_0 \text{ctg}^2(\pi x/a); \quad E_n = \pi^2 \hbar^2(n + \delta)^2/2ma^2 - U_0,$$

$$n = 0, 1, \dots; \delta = \sqrt{2mU_0a^2/\pi^2 \hbar^2 + 1/4} + 1/2.$$

16. Яма (рис. 18):

$$U(x) = U_0(x^2 - a^2)^2/a^2 x^2; \quad E_n = (n + \delta) \hbar \omega, \quad \omega = 2\sqrt{2U_0/m}/a,$$

$$n = 0, 1, \dots; \delta = 1/2 + (\sqrt{8mU_0a^2/\hbar^2 + 1} - \sqrt{8mU_0a^2/\hbar^2})/4.$$

17. Симметричная линейная яма (рис. 19): $U(x) = \beta|x|$. Нечетные уровни энергии определяются корнями v -функции Эйри

$$E_{2n+1} = \hbar^{2/3} \beta^{2/3} (2m)^{-1/3} \lambda_n, \quad v(-\lambda_n) = 0; \quad \lambda_0 = 2,33811;$$

$$\lambda_1 = 4,08795; \quad \lambda_2 = 5,52056; \quad \lambda_3 = 6,78671,$$

а четные — корнями ее производной:

$$E_{2n} = \hbar^{2/3} \beta^{2/3} (2m)^{-1/3} \lambda'_n, \quad v'(-\lambda'_n) = 0; \quad \lambda'_0 = 1,01879;$$

$$\lambda_1' = 3,24820; \lambda_2' = 4,82010; \lambda_3' = 6,16331.$$

18. Симметричный линейный барьер (рис. 20): $U(x) = -\beta |x|$;

$T^{-1} = \{u^2(-\lambda) + v^2(-\lambda)\} \{[u'(-\lambda)]^2 + [v'(-\lambda)]^2\}$, $\lambda = E(2m/\hbar^2\beta^2)^{1/3}$,
 u и v — функции Эйри по Фоку.

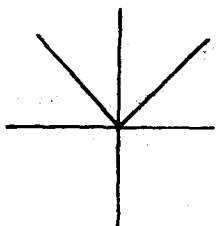


Рис. 19

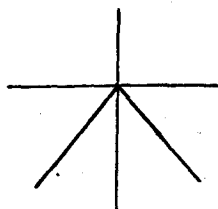


Рис. 20

19. Степенной симметричный барьер (рис. 21): $U(x) = -\beta |x|^l$.
 При критической энергии $E = 0$

$$T_0 = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2.$$

20. Четверная яма (рис. 22):

$$U(x) = \beta x^4; E_n = \hbar^{4/3} \beta^{1/3} (2m)^{-2/3} \lambda_n^4;$$

$$\lambda_0 = 1,06036; \lambda_1 = 3,79967; \lambda_2 = 7,45570; \lambda_3 = 11,64475.$$

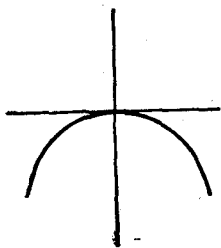


Рис. 21

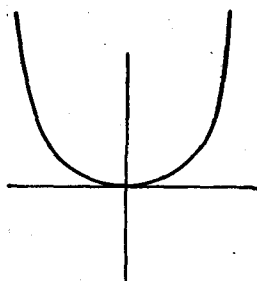


Рис. 22

21. Сферическая бесконечная яма:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < R; \\ \infty, & r > R. \end{cases}$$

Значения энергии при некотором l определяются корнями функций Бесселя:

$$J_{l+1/2}(kR) = 0; \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

22. Кулоново поле: $U(r) = -a/r$;

$$E_n = -ma^2/2\hbar^2 n^2; n = 1, 2, \dots, a > 0.$$

Дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma/d\Omega = (a/4E)^2 \sin^{-4}(\theta/2), E > 0, a \leq 0.$$

23. Модель Кронига—Пенни (рис. 23):

$$U(x) = U_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(x - nL) \theta(a - x + nL);$$

$$\cos \kappa b \cos ka - \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \sin \kappa b \sin ka = \cos \frac{pL}{\hbar}, \quad E > U_0;$$

$$\operatorname{ch} \kappa b \cos ka + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \operatorname{sh} \kappa b \sin ka = \cos \frac{pL}{\hbar}, \quad E < U_0;$$

$$\hbar k = \sqrt{2mE}; \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E - U_0|}; \quad L = a + b; \quad |p| < \pi \hbar / L.$$

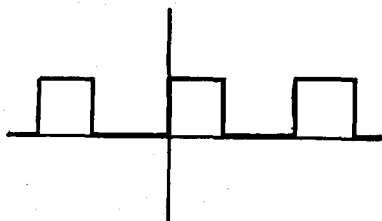


Рис. 23

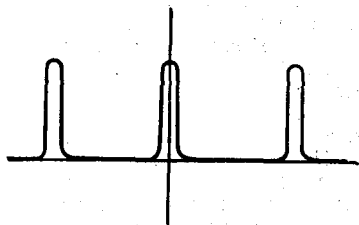


Рис. 24

24. «Гребенка» Дирака (рис. 24):

$$U(x) = u \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL);$$

$$\cos kL + \frac{mu}{\hbar^2 k} \sin kL = \cos \frac{pL}{\hbar}; \quad |p| < \pi \hbar / L, \quad \hbar k = \sqrt{2mE}.$$

Замечания

1. Более подробные сведения о большинстве моделей вы сможете почерпнуть из книг [1, 15].

Таблица корней одной из функций Эйри и ее производной (п. 17) взята из монографии [36], а таблица уровней энергии четверного потенциала (п. 20) — из работы [94].

Советуем читать о точно решаемых моделях потенциальных полей в книге [9, т. 2, с. 620], а также в задачнике [17].

2. Дополните это приложение. Укажите для каждой новой модели физический смысл и область применения.

3. Обратите внимание на изображение δ -образных моделей потенциальных полей (п. п. 1, 2, 24). Хотя эти модели относятся к предельному короткодействующему, однако они обладают конечными эффективными размерами — шириной и глубиной (высотой). Проиллюстрируйте это утверждение на примерах из задач рассеяния и связанных состояний. Об аналогичных многомерных моделях полей малого радиуса действия см. в монографии [32].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2.

Методические указания к исследованию в задачах

В некоторых задачах говорится, что нужно «исследовать то-то и то-то». Какой смысл вкладывается в эту емкую формулировку? Попытаемся кратко охарактеризовать содержание и цель исследования (в учебных рамках).

Желательно при решении задач обратить внимание на следующие моменты.

1. Этап знакомства с задачей. Не спешите заглядывать в ответ. Еще раз вчитайтесь в условие задачи. Из-за неверно понятого условия вы можете не решить задачи вовсе или отклониться в сторону от предложенной, зайдя в тупик (очень редко такие ошибки открывают новый путь). Осознайте цель задачи, вникните в проблему, создайте, как говорят психологи, «поисковую зону».

Обязательно отразите на схематическом рисунке физическую ситуацию задачи. Например, найдите эффективный потенциал, изобразите график его изменения; сформулируйте в самых общих чертах особенности движения.

При уяснении условия задачи, кроме основных, явных данных, вносите новые, внешние. Многие стандартные задачи формулируются слишком детально. Жесткая фиксация требований сужает русло поисков только в заданном направлении.

При обращении к ответу не читайте решение или указания полностью. Может быть, вам будет достаточно небольшой подсказки. Решайте самостоятельно.

2. Качественный, предварительный этап исследования составляют наметки, интуитивные соображения, предвидения результата.

Не забывайте о методе размерностей. Он поможет проверить и вычисления на промежуточных стадиях, и окончательные формулы. Кроме того, часто удается при небольшом числе параметров задачи предсказать вид искомой величины, ее зависимость от отдельных параметров. Однако помните, что в размерной оценке численный коэффициент иногда изменяет величину на порядок (см. пояснения к задаче 3 из §1).

На этом этапе иногда полезно пересмотреть первоначальные представления, предложить изменения в формулировке задачи. Здесь может оказаться уместным объединение усилий нескольких решающих (дискуссия, критика, обоснование своего пути решения).

3. Нужно, чтобы решающий умел представить не только математическую, но и пояснительную часть решения. Например, редко встречается студенческая работа, выполненная с необходимыми объяснениями. Чаще дело ограничивается записью последовательных преобразований, в лучшем случае сопровождаемых замечаниями типа «отсюда, подставляя, получаем, имеем, следовательно». Аргументировать свои действия, делать выводы и т. п. удается немногим.

Важно уметь «свести задачу к предыдущей». Этот прием дает существенное продвижение в решении сложной задачи, проясняет то, что до этого было неясным, неопределенным.

Даже в самых простых задачах, допускающих точное решение, обычно выходные (или промежуточные) формулы все же достаточно громоздки. Удобнее сразу же установить малые (большие) параметры задачи и искать приближенное решение. Не забывайте при этом отмечать физический смысл используемого приближения.

Поищите аналоги. Вспомните другие задачи. Найдите общие места. Эти взаимосвязи могут сыграть роль наводящих соображений. Такая каталитическая роль произвольных подсказок из вашего прошлого опыта или из найденных аналогов хорошо известна психологам (подсказка помогает после того, как вы уже столкнулись с трудностью, озадачены, и совершенно нейтральна до этого). М. Планк указал, что «в основе творческого мышления лежит отождествление идей или явлений, которые до сих пор считались совершенно различными, несопоставимыми» (см. Мостепаненко А. М. Методологические и философские проблемы современной физики. Л., Изд-во Ленингр. ун-та, 1977, с. 23).

В процессе аналитического этапа решения физика задачи отодвинута у вас временно на задний план. Вы увлечены преобразованиями, добираетесь до ответа. Вас подстерегает опасность так и не восстановить физическую цель задачи: вы целиком во власти математических расчетов, они вас увлекли, отняли много сил. Тут-то самое время попытаться зафиксировать

физический смысл результата, в «пылу математических страстей» не потерять физическую почву.

4. Чрезвычайно важно сопровождать решение графиками: не только достигается большая наглядность, но могут открываться новые, неожиданные области параметров, первоначально выпущенные из виду. Создается целостная картина явления. График дает пищу для новых вопросов.

Часто после получения ответа наступает «угасание удивления» (Д. Пойа отмечает: «Даже очень хорошие учащиеся, получив ответ и тщательно изложив ход решения, закрывают тетрадь и переходят к другим делам» [Пойа Д. Как решать задачу / Пер. с англ. В. Г. Звонаревой и Д. Н. Белла. Под ред. Ю. М. Гайдюка. 2-е изд. М., Учпедгиз, 1961, с. 24]). Получив формулу, не спешите, внимательно рассмотрите ее, обдумайте, какие новые, интересные факты она открывает. Такой анализ иногда умышленно откладывают, чтобы результат «дозрел». История знает много примеров, когда новое открывал не автор, так и не сумевший извлечь интересное из полученного результата («прозевавший» открытие), а другие, более пытливые, любопытствующие исследователи, люди с более богатой фантазией, более широким кругозором. Например, многие важнейшие открытия были сделаны именно при тщательном обдумывании результата с целью подачи его в наиболее простой и ясной форме студентам (см. примеры из книги: Капица П. Л. Эксперимент, теория, практика. М., Наука, 1974. 287 с.).

Сравнение — вот один из главных приемов исследования. Ориентир в физике, возможность осознания значимости результата, величины эффекта, места среди других явлений. Именно «все познается в сравнении».

Аналогия имеет свою полезную противоположность. Представьте себе обратную в каком-либо отношении ситуацию. Это также часто дает новую картину движения. Посмотрите, как повлияет на результат изменение знака основных параметров. Часто по отношению к данной задаче можно поставить несколько обратных. Среди них могут оказаться очень интересные и неожиданные. Это — метод «от противного», или «оборотень», как иногда говорят изобретатели.

Очень важно почувствовать, какие черты найденных закономерностей связаны с видом закона дисперсии, какие определяются размерностью пространства, что зависит от локального поведения поля, а что — от его общего профиля и т. п.

Соедините то, что вам было известно раньше, с открывшимся в процессе решения данной задачи.

Если вы решили задачу самостоятельно (а не под надзором преподавателя, не дающего обычно отклоняться от оптимального пути получения результата), то знаете, что процесс этот весьма неровный, негладкий. Сопровождается он попытками подойти к решению с разных сторон, применением разных методов (словом, имеет место метод «проб и ошибок» в таких случаях). Поучительно затем воссоздать ход решения еще раз, уже набело пробежав по всем этапам. И не столько затем, чтобы в аналогичной ситуации (которая может и не встретиться вам) не повторять ошибок, сколько затем, чтобы зафиксировать общую картину поисков, охватить решение целиком, извлечь уроки. Тогда легче перейти от процесса решения, который психологически будет завершен, к уяснению места и роли задачи в целом, включая ее результат.

5. Далее следует качественно более сложная ступень исследования. Она требует достаточного кругозора, знания общих проблем рассматриваемой области физики, ориентировки в современных работах и т. п.

Вы, видимо, заметили, что здесь раскрывается не только само исследование, но и общая структура решения. Это естественно: одно не существует в отрыве от другого. Все же давайте отметим, чем же задачи на исследование отличаются от стандартных задач с заранее запрограммированным решением.

Во-первых, формулировка задачи не является жесткой. Вопросы вы должны сами ставить перед собой: выбрать поле деятельности, методы, конкретные цели. Во-вторых, на этапе предварительного решения вы уже проводите предварительный анализ. В-третьих, вы все время сопровождаете

решение наглядными картинками, графиками. В-четвертых, еще в процессе решения вы стараетесь фиксировать исследовательские моменты. В-пятых, получив ответ, вы не считаете дело сделанным, а сознательно погружаетесь в собственно исследовательскую завершающую стадию. В-шестых, вы анализируете общую роль задачи (для вас и для физики).

Попробуйте выявить те трудности, которые были преодолены в процессе решения задачи.

Окончательный ответ проверяйте на частных случаях, что также позволит вам представить степень новизны полученного в сопоставлении с известным ранее. Другая возможность — предельные случаи, для которых результат часто настолько упрощается, что затем он может быть воссоздан целиком по своим предельным свойствам (правда, можно потерять какую-то существенную черту, если в промежуточной области будет особенность, — интерполировать нужно не менее осмотрительно, чем экстраполировать).

Проверьте, чувствуете ли вы красоту формулы, прелесть результата. Не всем дается сразу эта сторона решения, но учитесь постигать и ее.

Можно порекомендовать такой прием фиксации результатов ваших усилий при решении задачи. Поставьте перед собой следующие вопросы и попробуйте дать на них краткие ответы.

Что (объект) рассмотрено в задаче? Для чего (цель) велись вычисления? Как (метод) получен результат? Почему (физический смысл) получился такой ответ? Где (место в системе задач) встречается разобранная ситуация?

*Я рассказал им, Кто, Когда
И Почему, и Отчего,
Сказал Откуда и Куда,
И Как, и Где, и Для чего;*

*Что было Раньше, что Потом,
И Кто Кого, и Что к Чему,
И что подумали о Том,
И Если Нет, то Почему?*

А. Милн

Закончив со всеми вопросами исследования, посмотрите замечания к параграфу. В них вы найдете ссылки на работы, в которых развиваются и находят конкретные физические применения рассматриваемые в задачах вопросы.

6 Не смущайтесь тем обстоятельством, что даже при самом идеальном решении, при выполнении всех рекомендуемых и самостоятельно вами введенных элементов исследования у вас остается ощущение неясности, сомнений. Чем больше вы углубляетесь в задачу, тем больше новых вопросов возникает перед вами. Это вполне естественный процесс вскрытия новых аспектов. Очень хорошо, если вы уйдете далеко от исходной задачи. Она послужила толчком самостоятельным шагам в постановке и решении уже ваших собственных вопросов, побудила вас к поискам истоков встретившихся закономерностей. Тогда цель решения задач может считаться достигнутой полностью. Задача помогла развитию ваших творческих способностей, это — главное. Конечно, существенна и другая сторона решения — закрепление теоретических знаний, контроль умения применять эти знания, знакомство с новым кругом применения теории и т. д.

Здесь исследование уже носит творческий характер. Его черты отражают общие закономерности творческого процесса, где логические элементы (классификация, план и т. д.) переплетены с эвристическими (гипотеза, ассоциации, интуиция и т. п.).

Важный творческий элемент: перестройте задачу, измените формулировку так, чтобы задача звучала иначе, заинтересовала своей новой гранью, поставьте новые вопросы, найдите подобные задачи. Это также элементы творчества, правда, в меньшей степени, чем создание оригинальной задачи, но начните с малого.

Попытайтесь зафиксировать для себя то новое, что вошло после решения данной задачи в ваш багаж знаний о рассматриваемом разделе физики, конкретном вопросе, явлении и т. п. Но не останавливайтесь на этом — расширяйте рамки своих представлений.

Как писал Декарт: «Если рассуждение это покажется слишком длинным для прочтения за один раз, то его можно разделить на шесть частей» (Декарт Р. Рассуждение о методе. М., Изд-во АН СССР, 1953, с. 9).

Итак, основные рекомендации по исследованию:

- а) уясните данные и условия задачи;
- б) предварительно сформулируйте цель (что найти);
- в) сделайте набросок общей картины (рисунки, чертеж-схему и т. п.);
- г) постарайтесь дать предварительный ответ;
- д) наметьте путь решения (составьте план);
- е) решайте уравнения и т. п.; фиксируйте в ходе решения интересные моменты; корректируйте первоначальные представления; уточняйте, что нужно отыскать; строите графики;
- ж) выделите и проверьте ответ;
- з) сделайте чистовую «пробезку» по решению, отмечайте поучительные моменты методического и физического плана;
- и) исследуйте полученный результат; сопоставьте с начальной формулировкой задачи, наметьте связи с другими задачами, рассмотрите физический смысл, объясните зависимость от отдельных параметров, сделайте выводы и обобщения, сформулируйте правила, вскройте происхождение установленных закономерностей, сделайте численные оценки для характерных значений параметров, разберите предельные случаи; нарисуйте графики, переберите интересные частные случаи; отложите анализ результата на некоторое время, а затем вернитесь к нему вновь;
- к) попытайтесь уяснить общую роль вашей задачи в системе задач, связь ее с другими вопросами;
- л) поставьте перед собой новые вопросы в рамках задачи; развивайте проблему дальше, отталкиваясь от данной задачи; сформулируйте самостоятельно новые или аналогичные задачи.

Замечания

1. Если вас интересуют творческие аспекты исследования, обратитесь к монографии [121]. Об общих принципах решения задач читайте в [122] и другой книге Д. Пойа, упомянутой в приложении. Много полезных наблюдений приведено в [123]. Обязательно прочитайте [124]. См. работу [125].

В перечисленных книгах есть много ссылок на литературу по общим основам и отдельным моментам процесса решения задач. Отметим также интересные статьи [126].

2. В данном приложении названы лишь некоторые элементы исследования. Дополните их, дайте им условные образные наименования, введите классификацию приемов исследования.

Быть может, для вас окажется полезной шахматная аналогия: сопоставьте этапы решения задач и стадии шахматной партии (дебют, миттельшпиль, эндшпиль и т. п.), или сравнение с фотографическим процессом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. 3-е изд., перераб. и доп. при участии Л. П. Питаевского. М., Наука, 1974. 752 с.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика. 2-е изд., перераб. М., Наука, 1973. 704 с.
3. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. 5-е изд., перераб. М., Наука, 1976. 664 с.
4. Шифф Л. Квантовая механика /Пер. с англ. Г. А. Зайцева. 2-е изд. М., Изд-во иностр. лит., 1959. 473 с.
5. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики / Пер. с 4-го англ. изд. Ю. Н. Демкова и Г. Ф. Друкарева. Под ред. В. А. Фока. М., Физматгиз, 1960. 434 с.
6. Елютин П. В., Кривченко В. Д. Квантовая механика (с задачами) / Под ред. Н. Н. Боголюбова. М., Наука, 1976. 336 с.
7. Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М. Квантовая механика. 2-е изд., испр. и доп. М., Просвещение, 1965. 638 с.
8. Фок В. А. Начала квантовой механики. 2-е изд., доп. М., Наука, 1976. 376 с.
9. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики /Пер. с англ. В 2-х т. М., Изд-во иностр. лит. Т. 1, 1958. 930 с.; т. 2, 1960. 886 с.
10. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. 2-е изд., испр. и доп. М., Наука, 1971. 544 с.
11. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. М., Наука, 1975. 336 с.
12. Бом Д. Квантовая теория /Пер. с англ. Л. А. Шубиной. Под ред. С. В. Вонсовского. 2-е изд., испр. М., Наука, 1965. 727 с.
13. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям /Пер. с англ. Э. М. Барлита и Ю. Л. Обухова. Под ред. В. С. Барашенкова. М., Мир, 1968. 382 с.
14. Коган В. И., Галицкий В. М. Сборник задач по квантовой механике. М., Гостехиздат, 1956. 416 с.
15. Гольдман И. И., Кривченко В. Д. Сборник задач по квантовой механике. М., Гостехиздат, 1957. 275 с.
16. Сборник задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. М., Высшая школа, 1972. 336 с.
17. Флюгге З. Задачи по квантовой механике / Пер. с англ. Б. А. Лысова. Под ред. А. А. Соколова. В 2-х т. М., Мир, 1974. Т. 1. 341 с.; Т. 2. 315 с.
18. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, ч. 1. 3-е изд., доп. Е. М. Лифшицем и Л. П. Питаевским. М., Наука, 1976. 584 с.
19. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М., Наука, 1971. 416 с.
20. Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М., Наука, 1972. 400 с.
21. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Физматгиз, 1962. 443 с.
22. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., Физматгиз, 1961. 312 с.
23. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. 2-е изд., испр. и доп. М., Наука, 1975. 527 с.
24. Займан Дж. Современная квантовая теория /Пер. с англ. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Мир, 1971. 288 с.
25. Лифшиц И. М., Каганов М. И. Некоторые вопросы электронной теории металлов.— УФН, 1959, т. 69, № 3, с. 419—458; 1962, т. 78, № 3, с. 411—461.
26. Абрикосов А. А. Введение в теорию нормальных металлов. М., Наука, 1972. 288 с.

27. Давыдов А. С. Теория твердого тела. М., Наука, 1976. 639 с.
28. Вопросы квантовой теории необратимых процессов. Сб. статей / Пер. с англ. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Изд-во иностр. лит., 1961. 365 с.
29. Физический энциклопедический словарь. В 5-ти т. М., Сов. энцикл., 1960—1966.
30. Бейтмен-Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции /Пер. с англ. Н. Я. Виленина. В 3-х т. М., Наука, 1965—1967.
31. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. 5-е изд. М., Наука, 1971. 1108 с.
32. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., Изд-во Ленингр. ун-та, 1975. 240 с.
33. Лифшиц И. М. О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем.—УФН, 1964, т. 83, № 4, с. 617—663.
34. Трикоми Ф. Интегральные уравнения /Пер. с англ. И. Н. Векуа. М., Изд-во иностр. лит., 1960. 299 с.
35. Виленин Н. Я. Специальные функции и теория представлений групп. М., Наука, 1965. 588 с.
36. Фок В. А. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн. М., Сов. радио, 1970. 517 с.
37. Грин Х. Матричная квантовая механика /Пер. с англ. Б. А. Лысова. Под ред. А. А. Соколова. М., Мир, 1968. 163 с.
38. Маслов В. П. Теория возмущений и асимптотические методы. М., Изд-во Моск. ун-та, 1965. 553 с.
39. Кумар К. Теория возмущений и проблема многих тел для атомного ядра / Пер. с англ. А. Г. Миронова. Под ред. С. В. Тябликова. М., Мир, 1964. 294 с.
40. Като Т. Теория возмущений линейных операторов / Пер. с англ. Г. А. Воропаевой и др. Под ред. В. П. Маслова. М., Мир, 1972. 740 с.
41. Ситенко А. Г. Лекции по теории рассеяния. Киев, Вища школа, 1971. 260 с.
42. Ахиезер А. И., Померанчук И. Я. Некоторые вопросы теории ядра. 2-е изд., перераб. М.—Л., Гостехиздат, 1950. 416 с.
43. Бродский А. М., Гуревич Ю. Я. Теория электронной эмиссии из металлов. М., Наука, 1973. 256 с.
44. Бреховских Л. М. Волны в слоистых средах. 2-е изд., перераб. и доп. М., Наука, 1973. 343 с.
45. Демков Ю. Н. Вариационные принципы в теории столкновений. М., Физматгиз, 1958. 168 с.
46. Скобов В. Г. Рассеяние электрона малой энергии на короткодействующем потенциале в сильном магнитном поле.—ЖЭТФ, 1959, т. 37, № 5, с. 1467—1469.
47. Мотт Н., Мессии Г. Теория атомных столкновений /Пер. с англ. Под ред. Е. Е. Никитина. 3-е изд., перераб. и доп. М., Мир, 1969. 756 с.
48. Крылов Н. С., Фок В. А. О двух основных толкованиях соотношения неопределенности для энергии и времени.—ЖЭТФ, 1947, т. 17, № 2, с. 93—107.
49. Проблемы теоретической физики. Сб. статей /Квантовая механика. Л., Изд-во Ленингр. ун-та, вып. 1, 1974. 328 с.
50. Войтович Н. Н., Каценеленбаум Б. З., Сивов А. Н. Обобщенный метод собственных колебаний в теории дифракции.—УФН, 1976, т. 118, № 4, с. 709—736.
51. Займан Дж. Принципы теории твердых тел /Пер. с англ. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Мир, 1974. 472 с.
52. Займан Дж. Электроны и фононы / Пер. с англ. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Изд-во иностр. лит., 1962. 488 с.
53. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры /Пер. с англ. В. П. Широковского. Под ред. С. В. Вонсовского. М., Мир, 1969. 360 с.

54. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах /Пер. с англ. Под ред. Б. Т. Коломийца. М., Мир, 1974. 472 с.
55. Дэвисон С., Левин Дж. Поверхностные (таммовские) состояния /Пер. с англ. Под ред. Д. А. Киржница. М., Мир, 1973. 232 с.
56. Голубев Л. В., Леонов Е. И. Сверхрешетки. М., Знание, 1977. 62 с.
57. Бриллюэн Л., Пароди М. Распространение волн в периодических структурах /Пер. с франц. Л. М. Коврижных и А. Н. Лебедева. Под ред. П. А. Рязина. М., Изд-во иностр. лит., 1959. 457 с.
58. Квантовые кристаллы. Сб. статей /Пер. с англ. Под ред. С. В. Вонсовского. М., Мир, 1975. 275 с.
59. Каганов М. И., Лифшиц И. М. Квазичастицы, М., Наука, 1976. 80 с.
60. Мошинский М. Гармонический осциллятор в современной физике: от атомов до кварков /Пер. с англ. Ю. Ф. Смирнова. М., Мир, 1972. 149 с.
61. Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., Наука, 1972. 280 с.
62. Квантовая радиофизика. 2-е изд., перераб. и доп. В 2-х т. Т. 1. Файн В. М. Фотоны и нелинейные среды. М., Сов. радио, 1972. 472 с.
63. Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц.—Швингер Ю. Броуновское движение квантового осциллятора /Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1962. 168 с.
64. Колебания молекул /М. В. Волькенштейн, Л. А. Грибов, М. А. Ельашевич, Б. И. Степанов. 2-е изд., перераб. М., Наука, 1972. 699 с.
65. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики /Пер. с англ. Под ред. С. А. Ахманова. М., Мир, 1970. 428 с.
66. Квантовая оптика и квантовая радиофизика /Пер. с англ. и франц. Под ред. О. В. Богданкевича и О. Н. Крохина. М., Мир, 1966. 452 с.
67. Когерентные состояния в квантовой теории. Сб. статей /Пер. с англ. В. И. Манько. М., Мир, 1972. 232 с.
68. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. 3-е изд., перераб. М., Наука, 1969. 623 с.
69. Кресин В. Э. Макроскопические квантовые явления. М., Знание, 1976. 64 с.
70. Питаевский Л. П. Макроскопические квантовые явления.—УФН, 1966, т. 90, № 4, с. 623—629.
71. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов. (Метод ВКБ) /Пер. с англ. М. В. Федорюка. Под ред. В. П. Маслова. М., Мир, 1965. 238 с.
72. Фреман Н., Фреман П. У. ВКБ-приближение /Пер. с англ. Б. А. Лысова. Под ред. А. А. Соколова. М., Мир, 1967. 168 с.
73. Ульянов В. В. О квазиклассическом движении в особых случаях.—УФЖ, 1973, т. 18, № 11, с. 1848—1859.
74. Эсаки Л. Путешествие в страну туннелирования.—УФН, 1975, т. 116, № 4, с. 569—583.
75. Маттук Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел /Пер. с англ. Г. Л. Краско и Р. А. Суриса. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Мир, 1969. 366 с.
76. Бабинов В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. 2-е изд., испр. и доп. М., Наука, 1976. 287 с.
77. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория, ч. 2. М., Наука, 1971. 288 с.
78. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц. М., Госатомиздат, 1963. 344 с.
79. Исихара А. Статистическая физика /Пер. с англ. Д. Н. Зубарева и А. Г. Башкирова. М., Мир, 1973. 471 с.
80. Таулес Д. Квантовая механика систем многих частиц /Пер. со 2-го англ. изд. И. Н. Михайлова и А. Г. Миронова. Под ред. С. В. Тябликова. М., Мир, 1975. 379 с.
81. Честер Дж. Теория необратимых процессов /Пер. с англ. А. Г. Башкирова. Под ред. Д. Н. Зубарева. М., Наука, 1966. 111 с.

82. Цлаф Л. Я. Вариационное исчисление и интегральные уравнения. Справочное руководство. 2-е изд., перераб. М., Наука, 1970. 191 с.
83. Полак Л. С. Вариационные принципы механики, их развитие и применения в физике. М., Физматгиз, 1960. 599 с.
84. Нейман И. Математические основы квантовой механики /Пер. с нем. М. К. Поливанова и Б. М. Степанова. Под ред. Н. Н. Боголюбова. М., Наука, 1964. 368 с.
85. Ульянов В. В. О соотношении неопределенностей.— Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 2, с. 146—148.
86. Недорезов С. С. О поверхностных эффектах в термодинамике электронов проводимости.— ЖЭТФ, 1966, т. 51, № 3, с. 868—877.
87. Кемпфер Ф. Основные положения квантовой механики /Пер. с англ. Ю. В. Конобеева и В. А. Павлинчука. Под ред. Д. А. Киржница. М., Мир, 1967. 392 с.
88. Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика /Пер. с англ. Н. М. Плакиды. Под ред. Д. Н. Зубарева. М., Мир, 1964. 256 с.
89. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов. М., Наука, 1971. 331 с.
90. Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц /Пер. с англ. Под ред. А. А. Рухадзе. М., Мир, 1967. 515 с.
91. Гуров К. П. Основания кинетической теории. М., Наука, 1966. 352 с.
92. Халфин Л. А. К теории распада квазистационарного состояния.— ЖЭТФ, 1957, т. 33, № 6, с. 1371—1382.
93. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спинные волны. М., Наука, 1967. 368 с.
94. Krieger J. B., Lewis M. L., Rosenzweig C. Use of the WKB Method for Obtaining Energy Eigenvalues.— J. Chem. Phys., 1967, v. 47, № 8, p. 2942—2945.
95. Argyres P. N. The Bohr—Sommerfeld Quantization Rule and the Weyl Correspondence.— Physics, 1965, v. 2, № 3, p. 131—139.
96. Goldberg A., Schey H. M., Schwartz J. L. Computer—Generated Motion Pictures of One—Dimensional Quantum—Mechanical Transmission and Reflection Phenomena.— Amer. J. Phys., 1967, v. 35, № 3, p. 177—186.
97. Журнов Н. И. Второе приближение обобщенного ВКБ-метода. II.— Изв. вузов СССР, Физика, 1968, № 9, с. 25—30.
98. May P. M. Quantum Statistics of Ideal Gases in Two Dimensions.— Phys. Rev., 1964, v. 135, № 6 A, p. 1515—1518.
99. Румер Ю. Б. К теории магнетизма электронного газа.— ЖЭТФ, 1948, т. 18, № 12, с. 1081—1095.
100. Физика твердого тела. Электронные свойства твердых тел /Пер. с англ. В. К. Федянина, Под ред. Г. С. Жданова. М., Наука, 1972. 168 с.
101. Вонсовский С. В. Магнетизм. М., Наука, 1971. 1032 с.
102. Хайкин М. С. Магнитные поверхностные уровни.— УФН, 1968, т. 96, № 3, с. 409—440.
103. Термодинамика необратимых процессов /Пер. с англ. Н. М. Плакиды и др. Под ред. Д. Н. Зубарева. М., Изд-во иностр. лит. 1962. 426 с.
104. Канер Э. А., Скобов В. Г. Электромагнитные волны в металлах в магнитном поле.— УФН, 1966, т. 89, № 3, с. 367—408.
105. Недорезов С. С. К теории эффекта де Гааза-ван Альфена в пластине.— ЖЭТФ, 1974, т. 67, № 4, с. 1544—1551.
106. Фудзита С. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику /Пер. с англ. А. Г. Башкирова. Под ред. Д. Н. Зубарева и Н. М. Плакиды. М., Мир, 1969. 207 с.
107. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций /Пер. с англ. Под ред. Ю. А. Чизмадзе. М., Мир, 1973. 280 с.
108. Дзялошинский И. Е. Диаграммная техника для вычисления кинетических коэффициентов в статистической физике при конечных температурах.— ЖЭТФ, 1962, т. 42, № 4, с. 1126—1134.
109. Константинов О. В., Перель В. И. Графическая техника для вычисления кинетических величин.— ЖЭТФ, 1960, т. 39, № 1, с. 197—208.

110. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. Некоторые вопросы статистической механики. М., Высшая школа, 1975. 352 с.
111. Статистическая физика и квантовая теория поля. Сб. статей /Под ред. Н. Н. Боголюбова. М., Наука, 1973. 456 с.
112. Фок В. А. Квантовая физика и строение материи. Л., Изд-во Ленингр. ун-та, 1965. 30 с.
113. Блохинцев Д. И. Принципиальные вопросы квантовой механики. М., Наука, 1966. 160 с.
114. Фейнман Р. Статистическая механика /Пер. с англ. Н. М. Плакиды и Ю. Г. Рудого. Под ред. Д. Н. Зубарева. М., Мир, 1975. 407 с.
115. Толмачев В. В. Теория бозе-газа. М., Изд-во Моск. ун-та, 1969. 411 с.
116. Толмачев В. В. Теория ферми-газа. М., Изд-во Моск. ун-та, 1973. 353 с.
117. Лайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах /Пер. с англ. Ю. В. Гуляева. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., Мир, 1965. 383 с.
118. Ульянов В. В. О прозрачности цепочки одинаковых потенциальных барьеров.— УФЖ, 1974, т. 19, № 12, с. 2046—2048.
119. Кубо Р. Статистическая механика /Пер. с англ. Под ред. Д. Н. Зубарева. М., Мир, 1967. 452 с.
120. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. М., Наука, 1965. 572 с.
121. Пономарев Я. А. Психология творчества. М., Наука, 1976. 303 с.
122. Поля Д. Математическое открытие /Пер. с англ. В. С. Бермана. Под ред. И. М. Яглома. 2-е изд. М., Наука, 1976. 448 с.
123. Эсаулов А. Ф. Психология решения задач. М., Высшая школа, 1972. 216 с.
124. Адамар Ж. Исследование психологии процесса изобретения в области математики / Пер. с франц. М. А. Шаталовой и О. П. Шаталова. Под ред. И. Б. Погребыского. М., Сов. радио, 1970. 152 с.
125. Богоявленская Д. Б. Об одном из подходов к исследованию интеллектуального творчества.— Вопросы психологии, 1976, № 4, с. 69—79.
126. Мигдал А. Б. О психологии научного творчества.— Наука и жизнь, 1976, № 2, с. 100—107; № 3, с. 100—107.

Замечания.

В связи с ограничением общего числа ссылок (120) в список литературы вошли лишь некоторые основные книги по квантовой механике, а журнальные статьи — только те, которые тесно связаны с отдельными задачами. В список включена литература, вышедшая до 1977 года.

Владимир Владимирович Ульянов

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ

Редактор Л. Е. Малышенко

Оформление художника В. Б. Мартыняка

Художественный редактор В. Е. Петренко

Технический редактор Г. П. Александрова

Корректоры М. Ф. Христенко, Л. П. Пипенко

Информ. бланк № 3208

Сдано в набор 28.06.79. Подп. в печать 25.12.79. БЦ 09294. Формат 60×90/16. Бумага типогр. № 1. Лит. гарн. Выс. печать. 13,5 усл. печ. л. 15,2 уч.-изд. л. Тираж 3000 экз. Изд. № 670. Зак. 9-275. Цена 75 к.

Издательство при Харьковском государственном университете издательского объединения «Вища школа», 310003, Харьков-3, ул. Университетская, 16.

Харьковская книжная фабрика «Коммунист» республиканского производственного объединения «Полиграфкинг» Госкомиздата УССР, 310012, Харьков-12, ул. Энгельса, 11.

72. xcn.

