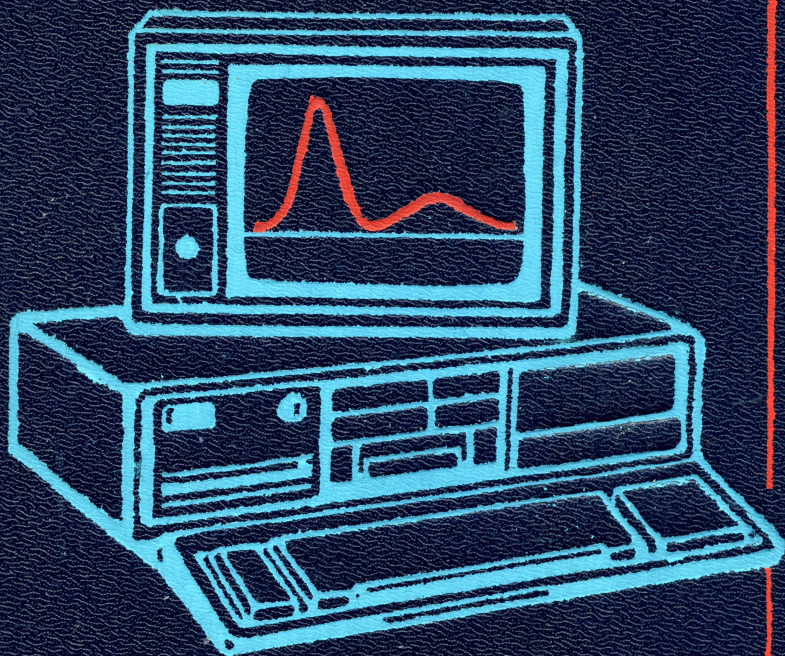


В. В. УЛЬЯНОВ

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ КИНЕТИКИ



»ВУЗШКОЛА«

В. В. УЛЬЯНОВ

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ КИНЕТИКИ

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ,
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ,
СОЛИТОННАЯ ФИЗИКА,
НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ

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

ХАРЬКОВ
ИЗДАТЕЛЬСТВО ПРИ ХАРЬКОВСКОМ
ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ
ИЗДАТЕЛЬСКОГО ОБЪЕДИНЕНИЯ
«ВИЩА ШКОЛА»

1987

ББК22.314
У51

УДК 530.145 : 536.7

В учебном пособии рассмотрен широкий круг вопросов современной квантовой теории нестационарных состояний и неравновесных процессов. Изложены принципиально новые элементы: численное моделирование; разностные схемы; солитонные вопросы; вычислительные эксперименты, особенно важные при обучении в режиме постоянного контакта с ЭВМ. В каждом параграфе содержатся методические указания, упражнения на закрепление материала и задачи для самостоятельной работы. Даются рекомендации по организации машинных методов исследования.

Нормативные материалы приведены по состоянию на 1 января 1987 г.

Для студентов физических специальностей вузов, аспирантов, научных работников и преподавателей, интересующихся квантовой теорией кинетических явлений.

Ил. 6. Библиогр.: 121 назв.

Рецензенты: канд. физ.-мат. наук *Ф. Т. Васько*
(Институт полупроводников АН УССР), канд. физ.-мат. наук, доц. *А. М. Попель*
(Львовский государственный университет)

Редакция литературы по естественным наукам и филологии
Зав. редакцией *Е. П. Иващенко*

ПРЕДИСЛОВИЕ

В учебном пособии отражены некоторые современные методы и направления обширного раздела квантовой теории — квантовой кинетики. Предметом ее изучения являются нестационарные состояния микросистем (чистые и смешанные) и неравновесные явления в макросистемах (как близкие к состоянию равновесия, так и далекие), а также процессы релаксации.

В основу книги положены лекционные курсы, читавшиеся автором в течение ряда лет на физическом факультете Харьковского университета («Дополнительные главы квантовой механики», «Квантовая статистика», «Методы квантовой теории неравновесных процессов», «Вычислительные методы теоретической физики»), а также задания, предлагавшиеся студентам на практических занятиях, в курсовых и дипломных работах.

Пособие является дополнением к имеющимся монографиям и учебникам по квантовой теории.

Книга содержит три раздела. В первом рассмотрены общие методы квантовой кинетики и некоторые явления в чистых нестационарных состояниях. Для иллюстрации отобраны достаточно простые явления и эффекты, не требующие громоздких расчетов.

Второй раздел посвящен применению численных методов. В связи с бурным развитием вычислительной физики и появившимися возможностями реализации численных методов на доступных быстродействующих ЭВМ в диалоговом режиме приобретают особую актуальность вопросы численного моделирования и машинного эксперимента. В последние годы проблемы нелинейных волн все шире затрагивают различные области физики. Многие вопросы солитонной физики тесным образом связаны с квантовой кинетикой, часть из них описана в книге.

Во втором разделе обсуждаются методы дискретизации, вводится интервал движения с некоторыми граничными условиями (кинетический полигон), удобный для изучения явлений квантовой кинетики и постановки демонстрационных экспериментов. Кинетические уравнения (квантовые и солитонные) решаются на основе разностных схем. Подробно готовятся вычислительные эксперименты исследовательского характера.

Третий раздел продолжает тему первого и посвящен в основном неравновесным процессам в макросистемах, исследуемым с помощью теории реакции системы на внешние воздействия, основным аппаратом которой являются квантовые корреляторы и функции Грина (метод Кубо, обобщенные восприимчивости и т. п.).

Для решения задач квантовой кинетики традиционно привлекали методы, разработанные в рамках классической кинетики. Существен-

ный прогресс связан с успехами теории возмущений, развитой на основе методов квантовой теории поля. Исторически почти одновременно эти методы стали проникать и в статистику, и в кинетику (метод Мацубары и метод Кубо). Метод Кубо позволил сформулировать в замкнутом виде общие правила получения кинетических коэффициентов, однако реализовать их на практике сложно. К тому же линейная теория не может удовлетворить всех потребностей кинетических задач, особенно в условиях интенсивного развития нелинейных направлений. Новая эра сильной нелинейности началась с прогресса солитонной теории и привела к формированию широкого фронта исследований, объединивших различные направления, — родилась синергетика.

В приложениях содержатся: сводка некоторых функций Грина нестационарного уравнения Шредингера, некоторые свойства решений операторных эволюционных уравнений, краткие сведения из стационарной теории одномерного рассеяния, а также расчеты некоторых интегралов.

Каждый параграф снабжен серией упражнений. Некоторые из них заключаются в проверке сделанных утверждений и выполнении опущенных выкладок. Другие состоят в проведении расчетов, аналогичных приведенным в параграфе и преследующих цель закрепления материала. Однако имеются и более сложные задания, рассчитанные на значительную долю самостоятельности. Кроме того, содержится достаточно много задач, связанных с численным моделированием и машинными экспериментами.

Отметим, что в книге некоторые важные методы только упомянуты или бегло описаны. В то же время больше внимания уделено разностным схемам, нестационарной теории рассеяния, пакетному движению, резонансным явлениям, численному моделированию, связи кинетических задач с солитонной физикой и другим вопросам, которые в литературе обычно не затрагиваются или рассматриваются недостаточно полно.

Преподающих квантовую теорию должны заинтересовать рекомендации по созданию демонстрационных экспериментов и мультфильмов по квантовой кинетике.

Книга написана в форме единого курса, а не отдельных фрагментов, между параграфами имеется тесная связь, изложение идет от простых систем, методов и явлений к более сложным.

Насколько известно автору, в литературе, по крайней мере отечественной, еще не было книг с разделами, посвященными численному моделированию и машинному эксперименту в курсах теоретической физики.

Все замечания будут приняты автором с благодарностью.

Книга адресована в первую очередь физикам: студентам и аспирантам, преподавателям и молодым научным работникам, а также специалистам смежных наук, интересующимся современными методами квантовой теории и машинными методами исследования.

Автор выражает глубокую признательность сотрудникам кафедры теоретической физики ХГУ за постоянную поддержку и практические советы.

Сердечная благодарность И. П. и Н. В. Ульяновым за помощь при подготовке рукописи.



НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

1.1. МЕТОД УНИТАРНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДВИЖЕНИЯ. КАРТИНЫ ШРЕДИНГЕРА, ГЕЙЗЕНБЕРГА И ДИРАКА

Самым общим кинетическим уравнением квантовой теории является волновое уравнение Шредингера для чистых состояний

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \quad (1.1)$$

с начальным условием $\Psi(t_0) = \Psi_0$ или соответствующее уравнение Лиувилля для смешанных состояний $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\{\hat{H}, \hat{\rho}\}$; $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0$. В первом разделе будут рассматриваться в основном чистые состояния.

Главная задача квантовой кинетики чистых состояний системы с заданным гамильтонианом $\hat{H}$ — решение уравнения (1.1). Однако даже в случае простых одночастичных квантовых систем точное решение этого уравнения удастся получить лишь в особых случаях, так что необходима разработка приближенных аналитических и численных методов. Некоторые численные методы решения уравнения (1.1) рассмотрим в разделе 2. Общие же свойства решений уравнения (1.1) обычно удобно изучать на основе перехода к интегральной форме, пользуясь методом операторов Грина:

$$\Psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(t_0), \quad (1.2)$$

где оператор движения $\hat{U}(t, t_0)$ удовлетворяет уравнению $\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}$ с начальным условием $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$. Общие свойства таких операторов (пропагаторов) рассмотрены в прил. 2. В частности, оператор движения является унитарным $\hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}^+(t, t_0)$, что формально вытекает из антиэрмитовости генератора движения $-i\hat{H}/\hbar$ и физически означает сохранение во времени вероятностного описания системы (постоянства скалярного произведения).

Заметим, что переход к интегральной форме осуществляется для уравнений Шредингера и Лиувилля одновременно, поскольку $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^+(t, t_0)$, в чем нетрудно убедиться непосредственно (см. также прил. 2).

Рассмотренное описание, при котором вектор состояния зависит от времени, а операторы большинства физических величин явно от времени не зависят (исключением, в частности, является гамильтониан системы, находящейся в переменных внешних условиях), называется картиной Шредингера, или представлением Шредингера.

В квантовой кинетике часто более удобным является другое представление, в котором зависимость от времени переносится на операторы физических величин, тогда как вектор состояния оказывается постоянным. Это описание называется картиной Гейзенберга. В качестве фиксированного вектора состояния можно выбрать $\Psi(t_0)$ в картине Шредингера. В этом случае уравнение (1.2) приобретает двойной смысл, описывая эволюцию в картине Шредингера и унитарное преобразование перехода от одного представления к другому. В соответствии с общей теорией унитарных (канонических) преобразований [2], если векторы состояния преобразуются по правилу $\Psi' = \hat{U}\Psi$, то операторные величины преобразуются соответственно: $\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}$.

Таким образом, переход от картины Шредингера к картине Гейзенберга (Γ) можно записать в виде соотношений

$$\Psi_{\Gamma} = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \Psi(t); \hat{A}_{\Gamma}(t) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0). \quad (1.3)$$

Величины в представлении Шредингера специальными значками отмечать не будем.

В некоторых случаях гамильтониан системы целесообразно разбить на две части: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, из которых $\hat{H}_0$ в некотором смысле является основной (невозмущенной), а $\hat{H}_1$ — дополнительной (возмущением, взаимодействием). Тогда и полный пропагатор можно записать в виде произведения двух пропагаторов (см. прил. 2):

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) \hat{S}(t, t_0), \quad (1.4)$$

где $\hat{U}_0(t, t_0)$ описывает эволюцию с невозмущенным гамильтонианом $\hat{H}_0$, а S -оператор определяется взаимодействием $\hat{H}_1$, и его смысл будет выяснен ниже. Тем самым появляется возможность промежуточного описания, когда переход от картины Шредингера к новому представлению (картине Дирака, или представлению взаимодействия) совершается по формулам, аналогичным (1.3), но с заменой $\hat{U}$ на $\hat{U}_0$:

$$\Psi_{\mathrm{D}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \Psi(t); \hat{A}_{\mathrm{D}}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0). \quad (1.5)$$

Таким образом, в представлении Дирака операторные величины приобретают зависимость от времени по закону естественной эволюции с $\hat{H}_0$, а вектор состояния — в соответствии с добавкой к гамильтониану $\hat{H}_1$, что непосредственно вытекает и из связи представлений Гейзенберга и Дирака, получаемой подстановкой выражения (1.4) в формулы (1.3) с учетом соотношений (1.5):

$$\Psi_{\Gamma} = \hat{S}^{-1}(t, t_0) \Psi_{\mathrm{D}}(t); \hat{A}_{\Gamma}(t) = \hat{S}^{-1}(t, t_0) \hat{A}_{\mathrm{D}}(t) \hat{S}(t, t_0). \quad (1.6)$$

Если переписать эти формулы, выразив дираковские величины через гейзенберговские:

$$\Psi_{\mathrm{D}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_{\Gamma}; \hat{A}_{\mathrm{D}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \hat{A}_{\Gamma}(t) \hat{S}^{-1}(t, t_0), \quad (1.7)$$

то видно, что S -оператор имеет смысл оператора движения в картине Дирака, поскольку в силу $\Psi_{\mathrm{D}}(t_0) = \Psi_{\Gamma}$ первое уравнение в (1.7) можно

записать в виде

$$\Psi_D(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_D(t_0). \quad (1.8)$$

В развиваемой схеме при $t = t_0$ все величины в трех представлениях соответственно совпадают, так что совокупность представлений определяется некоторым временным аргументом t_0 , выбор которого в общем случае произволен. Впрочем, можно ввести разные гейзенберговские (и дираковские) представления, различающиеся по этому временному параметру.

Итак, трем представлениям (картинам Шредингера, Гейзенберга и Дирака) отвечают три гриновских оператора $\hat{U}$, $\hat{U}_0$ и $\hat{S}$. Каждый из них является и оператором движения, и вспомогательным оператором перехода от одного представления к другому. Ввиду особой важности для дальнейшего повторим еще раз кратко распределение ролей этих пропагаторов.

Пропагатор $\hat{U}(t_2, t_1)$ является прежде всего оператором движения в картине Шредингера (1.2) и, кроме того, $\hat{U}(t, t_0)$ осуществляет переход от представления Гейзенберга к представлению Шредингера (обратный переход описывается обратным оператором).

Пропагатор $\hat{U}_0(t_2, t_1)$ также описывает движение в картине Шредингера, но для системы с гамильтонианом $\hat{H}_0$ (естественная эволюция). Помимо этого, $\hat{U}_0(t, t_0)$ определяет переход от представления Дирака к представлению Шредингера (обратный переход согласно (1.5) дает обратный оператор).

Наконец, пропагатор $\hat{S}(t_2, t_1)$ является оператором движения в картине Дирака, а $\hat{S}(t, t_0)$ реализует переход (1.7) от представления Гейзенберга к представлению Дирака (обратный переход выполняет $\hat{S}^{-1}$).

Для закрепления материала изобразите схему трех картин с переходами между ними в прямом и обратном направлениях.

Подчеркнем, что все три пропагатора являются решениями одностипных эволюционных уравнений с одинаковыми начальными условиями (единичный оператор), но с различными генераторами движения: для U -оператора это — $i\hat{H}/\hbar$, для U_0 -оператора это — $i\hat{H}_0/\hbar$, а для S -оператора генератором является гамильтониан взаимодействия в представлении Дирака: $-i\hat{H}_{1d}(t)/\hbar$. Последнее вытекает из выражения (1.4) и эволюционных уравнений для $\hat{U}$ и $\hat{U}_0$, а также непосредственно следует из мультипликативного представления пропагаторов для суммы параметрических операторов, рассмотренного в прил. 2.

Одним из важных примеров точного решения уравнения Шредингера является случай, когда система находится в постоянных внешних условиях. При этом гамильтониан не зависит от времени, т. е. $\partial H/\partial t = 0$, а пропагатор в картине Шредингера можно записать в виде операторной экспоненты (см. прил. 2):

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp[-i(t - t_0)\hat{H}/\hbar]. \quad (1.9)$$

Зависимость пропагатора только от разности временных аргументов отражает однородность времени. Если в начальный момент времени система находилась в состоянии с определенной энергией E_k (полный набор квантовых чисел k) $\Psi(t_0) = \psi_k$, то согласно (1.2) и (1.9) изменение вектора состояния со временем будет заключаться только в изменении фазового множителя: $\Psi(t) = \psi_k \exp[-i(t - t_0)E_k/\hbar]$. Следовательно, энергия в каждый момент времени будет иметь определенное значение (исходное), а все характеристики системы будут постоянными, поскольку такой фазовый множитель не влияет на вероятности и средние значения. В связи с этим состояния с определенной энергией получили название стационарных состояний. Эффект стабильности собственных значений гамильтониана является одним из проявлений закона сохранения энергии в квантовой механике. Заметим, что между различными состояниями с данной энергией в случае вырождения переходы также отсутствуют. На языке пропагаторов это отражается в том, что согласно (1.9) пропагатор $\hat{U}$ диагонален в представлении k :

$$\langle k | U | k' \rangle = \delta_{kk'} \exp[-i(t - t_0)E_k/\hbar]. \quad (1.10)$$

Аналогичными свойствами обладает $\hat{U}_0$ при $\partial \hat{H}_0 / \partial t = 0$.

Отметим, что стационарные состояния образуют чрезвычайно важный класс состояний квантовых систем. В книгах по квантовой механике [1—10] им отводится значительное место. В условиях сохранения энергии, однако, будут и более общие, нестационарные состояния — пакеты стационарных состояний. В соответствии с (1.9) движение таких пакетов будет заключаться в изменении со временем фазовых множителей отдельных составляющих пакета: если $\Psi(t_0) = \sum_k c_k \psi_k$,

то $\Psi(t) = \sum_k \exp[-i(t - t_0)E_k/\hbar] c_k \psi_k$. В отличие от стационарных состояний, влияние этих фазовых множителей весьма существенно: они приводят к зависимости от времени вероятностей и средних значений всех величин, кроме интегралов движения. Возникают собственно кинетические явления, процессы, переменные характеристики. Примеры таких состояний будут рассмотрены в следующих параграфах.

Условно пакетные нестационарные состояния можно отнести к слабой нестационарности. В таких состояниях энергия не имеет определенного значения, а закон сохранения энергии проявляется в том, что остаются постоянными среднее значение энергии и распределение вероятностей энергии.

Другой класс нестационарных состояний возникает в условиях переменных внешних воздействий, когда гамильтониан системы (или его часть) зависит от времени. В такой ситуации стационарных состояний нет, энергия не сохраняется (собственные значения переменного гамильтониана могут оказаться полезными, но обычно играют второстепенную роль). Эти нестационарные состояния также являются одним из главных объектов изучения в квантовой кинетике.

Знакомство с методами исследования нестационарных состояний мы начинаем с применения S -оператора в стандартной теории нестационарных возмущений.

1.2. МЕТОДЫ ТЕОРИИ ПЕРЕМЕННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Рассмотрим несколько типичных постановок кинетической задачи.

Пусть в начальный момент времени t_0 система находится в состоянии, характеризуемом полным набором квантовых чисел n_0 : $\Psi(t_0) = \Psi_{n_0}$. Найти распределение вероятностей этих же величин n (или другого набора) в любой момент времени t . В соответствии со статистическим принципом квантовой теории такая вероятность равна $W_{n_0 n} = |\langle \Psi_n, \Psi(t) \rangle|^2$. Используя пропагатор $\hat{U}$, получаем в силу $\Psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi_{n_0}$, что

$$W_{n_0 n} = |\langle \Psi_n, \hat{U}(t, t_0) \Psi_{n_0} \rangle|^2 = |\langle n | U(t, t_0) | n_0 \rangle|^2. \quad (1.11)$$

Эту величину обычно называют вероятностью перехода. Таким образом, матричные элементы пропагатора приобретают простой физический смысл — это амплитуды соответствующих вероятностей переходов.

Другая постановка задачи: в начальный момент времени задана волновая функция системы в координатном (для определенности) представлении $\psi(x, t_0)$. Найти волновую функцию в том же (или каком-либо другом) представлении в момент времени t . Вновь из $\Psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(t_0)$ вытекает, что в соответствии с правилами действия операторов «на индекс представления» матричные элементы пропагатора следующим образом определяют искомую величину:

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 U_{xx_0}(t, t_0) \Psi(x_0, t_0). \quad (1.12)$$

Приведенные примеры поясняют, почему матричные элементы пропагаторов часто называют функцией распространения. В дальнейшем будем использовать для функции распространения специальное обозначение:

$$U(n, t; n_0, t_0) \equiv \langle n | U(t, t_0) | n_0 \rangle \equiv U_{nn_0}(t, t_0). \quad (1.13)$$

Наконец, еще один вариант постановки конкретной кинетической задачи, приближающийся к теме возмущений.

Пусть в начальный момент времени система с постоянным гамильтонианом $\hat{H}_0$ находится в стационарном состоянии с энергией E_{n_0} (полный набор n_0), а затем подвергается переменному воздействию, описываемому добавкой к гамильтониану $\hat{H}_1(t)$. К моменту времени наблюдения, когда возмущение уже перестало тревожить систему, нас интересует распределение вероятностей величин из того же набора интегралов движения невозмущенной системы n . Другими словами, мы имеем дело с вероятностью перехода (1.11), но в более конкретных физических условиях.

Поскольку естественная эволюция не вызывает переходов среди состояний с различными n , ясно, что в данном случае основную роль будет играть S -оператор. Действительно, подставляя в формулу (1.11) выражение $\hat{U} = \hat{U}_0 S$ согласно (1.4) и пользуясь тем, что $\hat{U}_0$

диагонален в n -представлении, а его диагональные элементы единичны по модулю, получаем формулу

$$W_{n_0 n} = |\langle n | S(t, t_0) | n_0 \rangle|^2, \quad (1.14)$$

устанавливающую непосредственный физический смысл матричных элементов S -оператора и дающую правило вычисления искомых вероятностей переходов.

Чтобы продвинуться далее, необходимо сделать дополнительные предположения относительно характера возмущения $\hat{H}_1$. Полагаем, что результат его воздействия на систему мал, так что вероятности переходов будут малы, т. е. применим метод возмущений. Согласно прил. 2 пропагаторы связаны с Т-экспонентами. В частности при $t > t_0$

$$\hat{S}(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{1D}(t_1) dt_1 \right]. \quad (1.15)$$

В первом приближении $\hat{S}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{1D}(t_1) dt_1$, так что $\langle n | S(t,$

$t_0) | n_0 \rangle = \delta_{nn_0} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | H_{1D}(t_1) | n_0 \rangle dt_1$. Если нас интересует именно

переход, т. е. $n \neq n_0$ (поскольку под n подразумевается, вообще говоря, несколько величин, достаточно несовпадения начального и конечного значений хотя бы для одной из них), то учитывая, что $\hat{H}_{1D}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{H}_1(t) \hat{U}_0(t, t_0)$, а пропагатор $\hat{U}_0(t, t_0) = \exp[-i(t - t_0) \times \hat{H}_0/\hbar]$ диагонален в n -представлении, приходим к окончательному выражению для искомой вероятности перехода в первом приближении теории возмущений:

$$W_{n_0 n} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t \langle n | H_1(t_1) | n_0 \rangle \exp(i\omega_{nn_0} t_1) dt_1 \right|^2, \quad (1.16)$$

где частоты перехода $\omega_{nn_0} = (E_n - E_{n_0})/\hbar$.

Полученный результат является весьма общим. Различные частные случаи и многочисленные примеры применения подробно рассматриваются в книгах по квантовой механике (см., например, [1—3]): адиабатические, внезапные, периодические по времени возмущения, переходы в непрерывном спектре энергии и т. д. Здесь же мы ограничимся несколькими простыми замечаниями.

Вероятности переходов квадратичны по возмущению и определяются соответствующим преобразованием Фурье. Для больших энергетических интервалов $E_n - E_{n_0}$ они малы, так что переходы происходят в основном между состояниями с близкими энергиями. Если вероятность перехода равна нулю (матричный элемент возмущения обращается в нуль), то говорят, что переход запрещен в данном приближении. В таком случае в S -операторе можно учесть члены более высо-

кого порядка по степеням возмущения. В случае вырождения энергии можно вычислить вероятности переходов между состояниями с одной и той же энергией. Таким способом выводится формула для сечения в борновском приближении стандартной теории рассеяния [1—3], когда в качестве возмущения рассматривается потенциальная энергия.

Для совпадающих начального и конечного полных наборов вероятности «неперехода» вычисляется по формуле $W_{n_0 n_0} = 1 - \sum_{n \neq n_0} W_{n_0 n}$.

В качестве конкретного примера рассмотрим задачу о вынужденных колебаниях гармонического осциллятора, основываясь на результатах элементарной теории в представлении чисел заполнения (см., например, [2]).

Пусть на гармонический осциллятор с гамильтонианом $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m + m\omega^2 \hat{x}^2/2 = \hbar\omega (\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2)$ (операторы рождения $\hat{a}^+$ и уничтожения $\hat{a}$), находящийся в состоянии с n_0 квантами (фононами, фотонами и т. д.), т. е. имеющий энергию $E_{n_0} = (n_0 + 1/2)\hbar\omega$, действует переменное однородное силовое поле $f(t)$. Гамильтониан возмущения при этом равен $\hat{H}_1(t) = -f(t)\hat{x} = -f(t)\Delta x_0(\hat{a}^+ + \hat{a})$, где $\Delta x_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ — неопределенность координаты в состоянии нулевых колебаний. Необходимо найти вероятности переходов и приращение средней энергии осциллятора в первом приближении теории возмущений.

Прежде всего выясняем, какие именно переходы возможны в этом приближении. Матричные элементы возмущения $\langle n | H_1(t) | n_0 \rangle = -f(t)\Delta x_0 \langle n | \hat{a}^+ + \hat{a} | n_0 \rangle$ отличны от нуля лишь в двух случаях: когда $n = n_0 + 1$ (вклад от $\hat{a}^+$) и когда $n = n_0 - 1$ (вклад от $\hat{a}$). Таким образом, происходят только одноквантовые процессы. В первом случае в системе появляется еще один квант — этот процесс можно назвать излучением, тогда как во втором случае число квантов уменьшается на единицу — это процесс поглощения.

Для излучения $\langle n_0 + 1 | \hat{a}^+ | n_0 \rangle = \sqrt{n_0 + 1}$ и $\omega_{n_0+1 n_0} = \omega$, так что вероятность согласно (1.16) равна

$$W_{n_0 n_0+1} = \frac{n_0 + 1}{2m\hbar\omega} \left| \int_{t_0}^t f(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 \right|^2. \quad (1.17)$$

Для поглощения $\langle n_0 - 1 | \hat{a} | n_0 \rangle = \sqrt{n_0}$ и $\omega_{n_0-1 n_0} = -\omega$, так что

$$W_{n_0 n_0-1} = \frac{n_0}{2m\hbar\omega} \left| \int_{t_0}^t f(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 \right|^2 \quad (1.18)$$

(учтена вещественность $f(t)$).

Сравнение выражений (1.17) и (1.18) показывает, что излучение является более вероятным процессом. Причем вероятность излучения естественным образом разбивается на две части. Первая пропорциональна числу имевшихся квантов n_0 . Она отвечает так называемому индуцированному излучению, при котором чем больше существует квантов, тем более вероятно появление новых, что вообще характерно для бозонов. Вторая часть существует и в случае отсутствия квантов

в начальном состоянии. Она отвечает спонтанному излучению. Процесс же поглощения, описываемый формулой (1.18), совершается с вероятностью, пропорциональной числу имевшихся квантов (в отсутствие квантов нечего и поглощать).

Для полного решения поставленной задачи необходимо вычислить среднее значение энергии осциллятора, возникшее в результате действия возмущающей силы. В соответствии с общим правилом вычисления средних значений на основании известных вероятностей собственных значений

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n W_{n_0 n} \approx E_{n_0} (1 - W_{n_0 n_0+1} - W_{n_0 n_0-1}) + \\ + E_{n_0+1} W_{n_0 n_0+1} + E_{n_0-1} W_{n_0 n_0-1}.$$

Искомое приращение средней энергии имеет типичный вид уравнения баланса: $\Delta \langle E \rangle \equiv \langle E \rangle - E_{n_0} \approx (E_{n_0+1} - E_{n_0}) W_{n_0 n_0+1} - (E_{n_0} - E_{n_0-1}) \times W_{n_0 n_0-1} = \hbar \omega (W_{n_0 n_0+1} - W_{n_0 n_0-1})$. В силу (1.17) и (1.18) имеем окончательную формулу

$$\Delta \langle E \rangle = \frac{1}{2m} \left| \int_{t_0}^t f(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 \right|^2. \quad (1.19)$$

Любопытно, что этот результат является точным, хотя получен с помощью приближенных формул теории возмущений. Как нередко случается, при аналитических и численных расчетах погрешности компенсируются, приводя к неожиданно хорошим приближениям. В данном случае при вычислении средней энергии не учитывались, во-первых, многоквантовые переходы, а во-вторых, вероятности одноквантовых переходов вычислялись в первом приближении.

Не менее интересно, что результат для средней энергии совпадает с классическим (что видно уже из того, что ответ не содержит постоянной Планка). Аналогичная ситуация возникает еще в одной задаче: дифференциальное сечение рассеяния в кулоновом поле, рассчитанное по теории возмущений (в борновском приближении), не отличается от полученного строгим квантовым вычислением и совпадает с классической формулой Резерфорда (в случае рассеяния тождественных частиц друг на друге учет обменных эффектов приводит к формуле Мотта [1]).

Далее, существенно, что приращение средней энергии > 0 , т. е. система с гармоническими колебаниями является поглотителем, отсасывателем энергии (усиление, отдачу энергии могут давать системы с ангармоническими колебаниями). Так на простой одномодовой модели демонстрируются важные физические следствия.

Результат для приращения энергии (как и вероятности переходов) зависит от длительности действия силы и от ее величины. Так, если время действия силы τ значительно больше периода классических колебаний осциллятора, т. е. если $\omega \tau \gg 1$, влияние осциллирующего множителя $\exp(i\omega t)$ будет столь велико, что интеграл в (1.19) станет очень мал, хотя величина силы может быть значительной (адиабатический случай). В другом пределе $\omega \tau \ll 1$ экспоненциальный множитель можно заменить единицей, так что интеграл сведется к полному

импульсу силы и не зависит от частоты осциллятора. Существенны и величина силы, и характер включения ее. В связи с этим различают сильные и слабые, адиабатические и резко изменяющиеся воздействия (ударные, импульсные, внезапные и т. п. [1, 18, 19]).

Рассмотренная задача о вынужденных колебаниях гармонического осциллятора допускает точное решение. Впервые она была решена Шредингером в период создания волновой механики, а в современной квантовой теории послужила основой метода когерентных состояний [20—23]. К вопросу о точном решении мы еще вернемся.

Подчеркнем еще раз, что этот пример кинетической задачи поучителен во многих отношениях. Так, продемонстрировано, каким образом вероятности переходов дают представление о происходящих в системе процессах (качественно и количественно), а также непосредственно используются, «работают» в расчете средней энергии. Фактически результаты относятся к отдельному главному колебанию (моду) системы с большим числом степеней свободы, в частности к электромагнитному полю. Задача по существу является фрагментом теории излучения. У последовательной теории излучения необходимо квантовым образом описывать и электромагнитное поле, и атомную систему. В упрощенном, полуклассическом подходе рассматривают излучающую систему квантовым образом, а поле классически. В данной же задаче разобран другой подход, когда поле квантовано, а возбуждающая его система описывается классически (моделирование процесса излучения, так сказать, с полевого конца). Добавим, что точные формулы для вероятностей переходов при вынужденных колебаниях гармонического осциллятора получены Швингером (см., например, [24]).

В заключение для закрепления материала этого параграфа предлагаем упражнение.

Получите формулу для вероятностей перехода во втором приближении и найдите вероятности двухквантовых процессов для вынужденных колебаний гармонического осциллятора.

1.3. МЕТОД УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

При переходе к уравнениям движения в картинах Гейзенберга и Дирака пользуемся общим определением операторов производных по времени $\widehat{\frac{dA}{dt}}$ (скоростей). Для всех представлений они вводятся соотношением

$$\left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle. \quad (1.20)$$

Поскольку в картине Шредингера среднее значение $\langle A \rangle = (\Psi(t), \hat{A} \Psi(t))$ зависит от времени, прежде всего, через вектор состояния $\Psi(t)$, а также в общем случае и через $\hat{A}$, дифференцирование с учетом (1.1) дает в соответствии с (1.20) выражение для скорости

$$\widehat{\frac{dA}{dt}} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} + \{\hat{H}, \hat{A}\}. \quad (1.21)$$

Поскольку операторы физических величин чаще всего явно от времени не зависят, расчет скоростей сводится к вычислению скобок Пуассона $\{\hat{H}, \hat{A}\}$.

В картине Гейзенберга среднее значение $\langle A \rangle = (\Psi_\Gamma, A_\Gamma(t) \Psi_\Gamma)$ зависит от времени только через оператор $\hat{A}_\Gamma(t)$, так что на основании (1.20)

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_\Gamma = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_\Gamma. \quad (1.22)$$

С другой стороны, непосредственный переход от шредингеровской производной (1.21) согласно каноническому преобразованию (1.3) дает правило расчета скоростей

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_\Gamma &= \hat{U}^{-1} \frac{d\hat{A}}{dt} \hat{U} = \hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U} + \hat{U}^{-1} \{\hat{H}, \hat{A}\} \hat{U} = \\ &= \hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U} + \{\hat{H}_\Gamma, \hat{A}_\Gamma\}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Для краткости временные аргументы опускаем.

Наконец, в картине Дирака зависимость от времени средних значений вновь определяется и оператором, и вектором состояния: $\langle A \rangle = (\Psi_D(t), \hat{A}_D(t) \Psi_D(t))$, а поскольку согласно (1.7) $\frac{\partial \Psi_D}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{1D} \times \Psi_D$, получаем

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_D = \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_D + \{\hat{H}_{1D}, \hat{A}_D\}. \quad (1.24)$$

Переход же от шредингеровской формулы (1.21) в соответствии с каноническим преобразованием (1.5) дает следующее правило вычисления скоростей на основе шредингеровских величин, считающихся отправными:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\hat{A}}{dt}\right)_D &= \hat{U}_0^{-1} \frac{d\hat{A}}{dt} \hat{U}_0 = \hat{U}_0^{-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}_0 + \hat{U}_0^{-1} \{\hat{H}, \hat{A}\} \hat{U}_0 = \\ &= \hat{U}_0^{-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}_0 + \{\hat{H}_D, \hat{A}_D\}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Так как $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, из (1.24), (1.25) получаем соотношение

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_D = \hat{U}_0^{-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \hat{U}_0 + \{\hat{H}_{0D}, \hat{A}_D\}. \quad (1.26)$$

Напомним, что шредингеровские величины специальных значков не имеют.

Чаще всего в картине Шредингера операторы физических величин и встречающиеся вспомогательные операторы типа рождения и уничтожения явно от времени не зависят, т. е. в полученных формулах $\partial \hat{A} / \partial t = 0$. Для таких величин уравнения движения приобретают

следующий вид. В представлении Гейзенберга из формул (1.22), (1.23) вытекает дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_\Gamma = \{\hat{H}, \hat{A}\}_\Gamma, \quad (1.27)$$

которое и служит основой метода уравнений движения в этой картине. Подобным же образом в представлении Дирака соотношение (1.26) дает уравнения движения

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_\text{д} = \{\hat{H}_0, \hat{A}\}_\text{д}. \quad (1.28)$$

В обоих случаях практическая сторона заключается в том, что вначале вычисляются скобки Пуассона $\{\hat{H}, \hat{A}\}$ или $\{\hat{H}_0, \hat{A}\}$ для шредингеровских величин, а затем в полученных выражениях переходят к соответствующему представлению, что и дает правую часть операторных эволюционных уравнений (1.27), (1.28). Что касается начального условия, то им служит совпадение всех величин в трех представлениях: для уравнения (1.27) это означает, что $\hat{A}_\Gamma(t_0) = \hat{A}$, а для уравнения (1.28) $\hat{A}_\text{д}(t_0) = \hat{A}$. Таким образом, после интегрирования уравнений движения ответ для гейзенберговских операторов будет выражен через шредингеровские величины, а вычисление средних значений сведется к усреднению по начальному состоянию, поскольку $\Psi_\Gamma = \Psi(t_0)$. Для картины Дирака необходимо, однако, вычислять еще и вектор состояния $\Psi_\text{д}(t)$ (или построить S -оператор).

Заметим также, что в тех случаях, когда операторные уравнения движения (1.27), (1.28) оказываются линейными, можно воспользоваться общими свойствами их решений, рассмотренными в прил. 2.

Прежде чем переходить к конкретным применениям уравнений движения, выполните следующее упражнение.

Выведите все формулы для скоростей, рассматривая смешанные состояния, для которых средние значения вычисляются по правилу $\langle A \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{A})$.

Иллюстрации к методу уравнений движения начнем со случая одномерного движения частицы с квадратичным законом дисперсии в потенциальном поле. Гамильтониан системы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{U}(x, t)$. В качестве исследуемых величин берем канонически сопряженные переменные: координату x и импульс p . Вычисляем скобки Пуассона

$$\{\hat{H}, \hat{x}\} = \hat{p}/m; \quad \{\hat{H}, \hat{p}\} = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x}.$$

Следовательно, гейзенберговские уравнения движения имеют вид

$$\dot{\hat{x}}_\Gamma = \hat{p}_\Gamma/m; \quad \dot{\hat{p}}_\Gamma = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \quad (1.29)$$

(точкой обозначены частные производные по времени). Отсюда, в частности, вытекают в силу (1.22), (1.20) так называемые теоремы Эренфеста для средних значений:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}; \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle. \quad (1.30)$$

Если движение свободное, т. е. $U = 0$, то второе уравнение в (1.29) дает закон сохранения импульса $\hat{p}_r = \text{const}$, после чего интегрируем первое уравнение и, используя начальные условия, получаем окончательный ответ

$$\hat{x}_r = \hat{x} + (t - t_0) \hat{p}/m; \quad \hat{p}_r = \hat{p}. \quad (1.31)$$

Это есть полное решение задачи, так как все характеристики движения можно выразить через x и p . Отсюда, в частности, следует, что результат для средних значений координаты и импульса при любых начальных условиях совпадает с классическим (чего нельзя сказать, разумеется, о всех характеристиках свободного движения).

Аналогично решаются уравнения и в случае однородного постоянного силового поля F :

$$\hat{x}_r = \hat{x} + (t - t_0) \hat{p}/m + (t - t_0)^2 F/2m; \quad \hat{p}_r = \hat{p} + (t - t_0) F. \quad (1.32)$$

В виде упражнения проинтегрируйте гейзенберговские уравнения движения для однородного переменного силового поля и для свободного движения с произвольным законом дисперсии. Обобщите все результаты на случай трехмерного движения.

Еще одним примером системы, для которой уравнения движения легко интегрируются, является гармонический осциллятор, когда $\hat{U} = m\omega^2 \hat{x}^2/2$, а уравнения (1.29) сводятся к системе

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_r &= \hat{p}_r/m; & \ddot{\hat{x}}_r + \omega^2 \hat{x}_r &= 0; \\ \dot{\hat{p}}_r &= -m\omega^2 \hat{x}_r; & \ddot{\hat{p}}_r + \omega^2 \hat{p}_r &= 0. \end{aligned}$$

Интегрируя, получаем с учетом начальных условий ответ в виде

$$\begin{aligned} \hat{x}_r &= \hat{x} \cos \omega(t - t_0) + (\hat{p}/m\omega) \sin \omega(t - t_0); \\ \hat{p}_r &= \hat{p} \cos \omega(t - t_0) - m\omega \hat{x} \sin \omega(t - t_0). \end{aligned} \quad (1.33)$$

Одним из следствий является важный вывод о том, что у гармонического осциллятора средние значения координаты (и импульса) изменяются со временем по гармоническому закону с частотой классических колебаний ω при любых начальных условиях:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle x \rangle_0 \cos \omega(t - t_0) + (\langle p \rangle_0/m\omega) \sin \omega(t - t_0) = \\ &= A \cos(\omega t + \alpha). \end{aligned} \quad (1.34)$$

Знаком $\langle \dots \rangle_0$ обозначено усреднение по начальному состоянию. Исключением (или тривиальным частным случаем) являются стационарные состояния, когда все эти средние равны нулю.

В качестве упражнения проинтегрируйте гейзенберговские уравнения движения в случае параболического потенциала отталкивания $\hat{U} = -m\kappa^2 \hat{x}^2/2$ ($\kappa > 0$). Исследуйте изменение со временем среднего значения координаты $\langle x \rangle$ при различных начальных условиях.

Прделаем теперь расчет для гармонического осциллятора еще раз, используя представление вторичного квантования, т. е. выражая все величины через операторы рождения и уничтожения. Эта задача имеет

самостоятельное значение в общем методе вторичного квантования для системы бозе-частиц. Гамильтониан осциллятора имеет вид $\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$, так что с учетом бозевских перестановочных соотношений $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ требуемые скобки Пуассона легко вычисляются:

$$\begin{aligned}\{\hat{H}, \hat{a}^+\} &= i\omega\hat{a}^+[\hat{a}, \hat{a}^+] = i\omega\hat{a}^+; \\ \{\hat{H}, \hat{a}\} &= i\omega[\hat{a}^+, \hat{a}]\hat{a} = -i\omega\hat{a},\end{aligned}$$

приводя к гейзенберговским уравнениям движения

$$\dot{\hat{a}}_T^+ = i\omega\hat{a}_T^+; \dot{\hat{a}}_T = -i\omega\hat{a}_T.$$

Разумеется, в данной задаче уравнения для операторов рождения и уничтожения разделяются, так что достаточно рассмотреть только одно из них. В более сложных случаях получаются системы связанных между собой уравнений для операторов рождения $\hat{a}_k^+$ и уничтожения $\hat{a}_k$ частиц в определенных состояниях k .

Дифференциальные уравнения легко интегрируются:

$$\hat{a}_T^+ = \hat{a}^+ \exp[i\omega(t - t_0)]; \hat{a}_T = \hat{a} \exp[-i\omega(t - t_0)]. \quad (1.35)$$

Отсюда, в частности, можно получить результаты (1.33), так как

$$\dot{x} = \Delta x_0 (\hat{a}^+ + \hat{a}); \dot{p} = i\Delta p_0 (\hat{a}^+ - \hat{a}), \quad (1.36)$$

где неопределенности нулевых колебаний осциллятора

$$\Delta x_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}; \Delta p_0 = \sqrt{\hbar m\omega/2}.$$

Еще раз подчеркнем, что формулы (1.35) или (1.33) полностью решают квантовую задачу о свободных колебаниях гармонического осциллятора, так как любые характеристики движения выражаются через операторы $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ или $\dot{x}$, $\dot{p}$.

Покажем, каким образом методом гейзенберговских уравнений движения точно решается задача о вынужденных колебаниях гармонического осциллятора. Теперь гамильтониан осциллятора играет роль невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0 = \hbar\omega (\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$, а возмущение, уже встречавшееся в предыдущем параграфе, имеет вид

$$\hat{H}_1(t) = -f(t) \Delta x_0 (\hat{a}^+ + \hat{a}). \quad (1.37)$$

Этап вычисления скобок Пуассона;

$$\{\hat{H}, \hat{a}\} = \{\hat{H}_0, \hat{a}\} + \{\hat{H}_1, \hat{a}\} = -i\omega\hat{a} + \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 f(t)$$

(на сей раз ограничиваемся уравнением для оператора уничтожения). Так как второе слагаемое в правой части гейзенберговского уравнения движения

$$\dot{\hat{a}}_T = -i\omega\hat{a}_T + \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 f(t)$$

есть c — число, интегрирование не составляет труда (см. также прил. 2):

$$\hat{a}_T = \hat{a} \exp[-i\omega(t-t_0)] + \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 \int_{t_0}^t f(t_1) \exp[-i\omega(t-t_1)] dt_1.$$

Окончательный ответ, присоединяя сопряженный оператор, запишем в виде

$$\hat{a}_T = (\hat{a} + z) \exp[-i\omega(t-t_0)]; \quad \hat{a}_T^\dagger = (\hat{a}^\dagger + z^*) \exp[i\omega(t-t_0)], \quad (1.38)$$

где комплексная величина

$$z = \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 \int_{t_0}^t f(t_1) \exp[i\omega(t_1-t_0)] dt_1. \quad (1.39)$$

Эти формулы и дают точное решение поставленной задачи, хотя, разумеется, подсчет различных конкретных физических характеристик требует дополнительных усилий. В качестве простого примера применения найденных гейзенберговских операторов вычислим среднее значение энергии осциллятора:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle H_0 \rangle = \hbar\omega \langle \hat{a}_T^\dagger \hat{a}_T + 1/2 \rangle_0 = \hbar\omega \langle (\hat{a}^\dagger + z^*)(\hat{a} + z) + 1/2 \rangle_0 = \\ &= \hbar\omega \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2 \rangle_0 + \hbar\omega |z|^2 + \hbar\omega \langle z \hat{a}^\dagger + z^* \hat{a} \rangle_0. \end{aligned}$$

Первое слагаемое имеет смысл средней энергии в начальном состоянии. Если это состояние было чистым стационарным, то средние значения

$$\langle a^\dagger \rangle_0 = \langle a \rangle_0 = 0, \quad (1.40)$$

так как диагональные элементы операторов рождения и уничтожения равны нулю в представлении чисел заполнения. В таком случае приращение средней энергии $\Delta \langle E \rangle = \hbar\omega |z|^2$. Учитывая (1.39), убеждаемся, что это выражение совпадает с полученным ранее (1.19) на основании теории возмущений. При этом результат справедлив и для начального смешанного стационарного состояния, когда матрица плотности диагональна в энергетическом представлении, так что всякое среднее значение $\langle A \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) = \sum_n \rho_{nn} A_{nn}$ является линейной комбинацией средних по чистым стационарным состояниям. В этом случае вновь выполняется условие (1.40).

Таким образом, формула для приращения энергии (1.19) оказывается не только точной, но и имеющей более широкую область применимости (для любых смешанных стационарных состояний, включая состояние термодинамического равновесия). Как часто бывает, результат имеет в действительности более широкую область применения, чем предполагается при его получении.

В качестве упражнения вычислите средние значения координаты и импульса вынуждаемого осциллятора. Запишите также гейзенберговские уравнения движения для заряда в электромагнитном поле

с векторным потенциалом A и скалярным потенциалом ϕ . Указание: гамильтониан $\hat{H} = \left(\hat{P} - \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 / 2m + e\hat{\phi}$, где $\{P_k, x_l\} = \delta_{kl}$; $k, l = 1, 2, 3$.

В заключение этого параграфа рассмотрим, как решается все та же задача о вынужденных колебаниях осциллятора в представлении взаимодействия. Сразу же заметим, что дираковские уравнения движения (1.28) совпадают с гейзенберговскими (1.27) для свободных колебаний (вообще, для любых систем дираковские величины являются гейзенберговскими для естественной эволюции). Тем самым первая часть задачи — нахождение операторов рождения и уничтожения в картине Дирака — уже решена при гейзенберговском подходе, т. е. ответ пишем по формулам (1.35):

$$\hat{a}_D = \hat{a} \exp[-i\omega(t - t_0)]; \quad \hat{a}_D^\dagger = \hat{a}^\dagger \exp[i\omega(t - t_0)]. \quad (1.41)$$

Вторая часть задачи — построение S -оператора, который удовлетворяет эволюционному уравнению $\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{1D}(t) \hat{S}$, где согласно (1.37) $\hat{H}_{1D}(t) = -\Delta x_0 f(t) (\hat{a}_D^\dagger + \hat{a}_D)$, а дираковские операторы рождения и уничтожения берем из (1.41). Интегрирование такого уравнения рассмотрено в упражнении 4 прил. 2. Фигурирующая там функция η равна в данном случае

$$\eta(t) = \frac{i}{\hbar} \Delta x_0 f(t) \exp[i\omega(t - t_0)],$$

другая величина χ вещественна и равна

$$\chi(t) = \frac{1}{2m\hbar\omega} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 f(t_1) f(t_2) \sin[\omega(t_1 - t_2)],$$

а окончательный ответ записан в следующей компактной форме:

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{i\chi} e^{z\hat{a}^\dagger - z^* \hat{a}}, \quad (1.42)$$

где величина z определена в (1.39).

Как уже отмечалось, при общем обсуждении метода уравнений движения в картине Дирака формулы (1.41), (1.42) дают полное решение поставленной задачи.

В качестве примера приложения результатов рассмотрим важный случай начальных условий, когда осциллятор находится в состоянии нулевых колебаний Ψ_0 (вакуум квантов). Тогда в картине Дирака состояние осциллятора в любой момент времени будет определяться вектором $\Psi_D(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_0$. Факторизуя S -оператор (1.42) согласно тождеству из упражнения 2 в прил. 2

$$\hat{S}(t, t_0) = e^{i\chi - |z|^2/2} e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^* \hat{a}}, \quad (1.43)$$

получаем в результате последовательного действия операторных экспонент, правая из которых не изменяет вакуумного вектора:

$$\Psi_D(t) = e^{i\lambda - |z|^2/2} e^{z\hat{a}^+} \psi_0 = e^{i\lambda - |z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \psi_n,$$

где учтено, что $(\hat{a}^+)^n \psi_0 = \sqrt{n!} \psi_n$.

Таким образом, в представлении взаимодействия вектор состояния при вакуумном начальном условии с точностью до фазового множителя равен вектору так называемых когерентных состояний:

$$|z\rangle \equiv e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{z\hat{a}^+} |0\rangle. \quad (1.44)$$

В данном случае удобно перейти к обозначениям Дирака для векторов состояния.

Метод когерентных состояний широко используется в различных разделах квантовой теории. Подробное изложение его основ и приложений в квантовой оптике дано в книге [20], применения и обобщения изложены в [21; 22], теоретико-групповому подходу к построению обобщенных когерентных состояний и их приложениям посвящен обзор Переломова [23]. Задачи по теме когерентных состояний содержатся в книге [16, § 6]. Здесь же мы ограничимся краткими замечаниями о когерентных состояниях.

В задаче о вынужденных колебаниях осциллятора комплексная величина z зависит от вынуждающей силы согласно (1.39). В общем случае когерентные состояния (1.44) рассматриваются на всей плоскости комплексного z . Они образуют полную систему векторов (даже сверхполную, но неортогональную). Вектор $|z\rangle$ является собственным вектором оператора уничтожения: $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$ (в чем полезно убедиться непосредственно). В z -состояниях произведение неопределенностей координаты и импульса, которые равны вакуумным $\Delta x = \Delta x_0$; $\Delta p = \Delta p_0$, принимает наименьшее принципиально возможное значение $\hbar/2$. Убедитесь в этом, попутно вычислив также средние значения координаты и импульса в состояниях (1.44).

Из записи когерентных состояний в виде суперпозиции стационарных состояний (1.44) видно, что вероятности числа квантов распределены по Пуассону:

$$W_n = \exp(-|z|^2) |z|^{2n}/n!.$$

При этом среднее значение числа квантов равно дисперсии, так что $\langle n \rangle \equiv \bar{n} = |z|^2$, а $\Delta n = \sqrt{\bar{n}} = |z|$. Убедитесь в этом также непосредственным вычислением. Тем самым степень классичности когерентных состояний ($\bar{n} \gg \Delta n \gg 1$) определяется удаленностью его изображающей точки от начала координат в плоскости z , т. е. условием $|z| \gg 1$.

Возвращаясь к вынужденным колебаниям осциллятора из состояния вакуума, отметим, что в картине Дирака эволюции отвечает

траектория на плоскости z согласно (1.39), выходящая из начала координат — единственной точки, которой соответствует определенное число квантов (нулевое). Если вынуждающая сила перестает действовать, то изображающая точка не движется (временная зависимость остается только у операторных величин). В картине Шредингера вектор состояния получается согласно каноническому преобразованию (1.5):

$$\Psi(t) = \hat{U}_0(t, t_0) \Psi_D(t).$$

Поскольку для осциллятора $\hat{H}_0 = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2)$ и пропагатор естественной эволюции

$$\hat{U}_0(t, t_0) = \exp[-i\omega(t - t_0)(\hat{n} + 1/2)], \quad (1.45)$$

в результате непосредственного действия на собственные векторы оператора числа частиц в (1.44) получаем

$$\Psi(t) = e^{i[\chi - \omega(t - t_0)/2]} e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(t - t_0)n} \psi_n.$$

Значит, в представлении Шредингера вектор состояния вынужденных колебаний осциллятора также относится к когерентным состояниям (с точностью до фазового множителя). При этом осцилляторный параметр когерентных состояний $z \exp[-i\omega(t - t_0)]$ отличается только фазой от соответствующей дираковской величины. Другими словами, в комплексной плоскости z изображающая шредингеровскую эволюцию точка сдвинута относительно дираковской по фазе по часовой стрелке в каждый момент времени, а после выключения вынуждающей силы она движется по окружности с постоянной угловой скоростью (свободные колебания).

Завершая тему вынужденных колебаний, отметим, что для гармонического осциллятора точное решение возможно и в случае переменной частоты $\omega(t)$. Теория подробно изложена в [11].

В качестве упражнения выведите формулы для дираковских операторов (1.41) по правилу (1.5) с пропагатором (1.45) методом коммутаторного ряда (упражнение 1 из прил. 2).

То же методом прямого действия операторов $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ как операторов рождения и уничтожения числа квантов.

1.4. МЕТОД ДИНАМИКИ ФЛУКТУАЦИЙ И КОРРЕЛЯЦИЙ

Изучение динамики корреляционных характеристик начнем с простых одночастичных систем. Будем рассматривать центральные корреляционные моменты второго порядка для величин A и B пока в один и тот же момент времени t :

$$D_{AB}(t) = \overline{(A - \bar{A})(B - \bar{B})}.$$

В квантовом случае при этом необходимо брать симметризованное произведение соответствующих операторов исследуемых величин, т. е.

антикоммутатор $D_{AB}(t) = 1/2 \langle [\hat{A} - \bar{A}, \hat{B} - \bar{B}]_+ \rangle = 1/2 \langle [\hat{A}, \hat{B}]_+ \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$. При $A = B$ корреляционная мера сводится к дисперсии, т. е. квадратичной мере флуктуации, а неопределенность $\Delta A = \sqrt{D_{AA}}$.

Можно указать два направления исследований: интегрирование дифференциальных уравнений движения для дисперсий и корреляций и построение корреляционных величин на основе решения операторных эволюционных уравнений.

Иллюстрацией первого направления может служить цепочка дифференциальных уравнений для корреляций при одномерном движении частицы с квадратичным законом дисперсии в потенциальном поле.

В силу билинейности корреляционных величин производные по времени выражаются через соответствующие корреляции со скоростями $\dot{D}_{AB} = D_{AB} + D_{AB}$. Вследствие теоремы Эренфеста производная по времени от дисперсии координаты связана с корреляцией координаты и импульса:

$$\dot{D}_{xx} = \frac{2}{m} D_{xp}. \text{ Аналогично } \dot{D}_{xp} = \frac{1}{m} D_{pp} + D_{xF}; \dot{D}_{pp} = 2D_{pF} \text{ и т. д.}$$

Решение такой бесконечной цепочки возможно при каких-то дополнительных предположениях либо дающих замкнутую систему уравнений, либо позволяющих расцепить, оборвать приближенным образом эту цепочку.

Рассмотрим несколько простых примеров точного решения. Первый относится к свободному движению, когда цепочка обрывается. Замкнутая система дифференциальных уравнений

$$\dot{D}_{xx} = \frac{2}{m} D_{xp}; \dot{D}_{xp} = \frac{1}{m} D_{pp}; \dot{D}_{pp} = 0$$

легко интегрируется:

$$\begin{aligned} D_{xx} &= D_{xx}^0 + \frac{2t}{m} D_{xp}^0 + \frac{t^2}{m^2} D_{pp}^0; \\ D_{xp} &= D_{xp}^0 + \frac{t}{m} D_{pp}^0; \\ D_{pp} &= D_{pp}^0. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Далее полагаем $t_0 = 0$ и отмечаем нулевым индексом начальные значения.

Особый интерес представляет ответ для дисперсии координаты. Он показывает, что при любых начальных условиях наблюдается эффект расплывания пакета в координатном пространстве: при $t \rightarrow \infty$ неопределенность координаты линейно растет со временем $\Delta x \sim t \Delta p^0 / m$. Однако в случае начальной отрицательной корреляции координаты и импульса дисперсия увеличивается немонотонно: вначале она уменьшается, достигая минимального значения, $D_{xx}^{\min} = D_{xx}^0 - D_{xp}^0 / D_{pp}^0$ при $t_{\min} = -m D_{xp}^0 / D_{pp}^0$. Разумеется, $D_{xx}^{\min} > 0$ в силу неравенства

$$D_{xx} D_{pp} \geq D_{xp}^2 + \hbar^2 / 4,$$

вытекающего из обобщенного соотношения неопределенностей (см. [25, § 13]). Если $D_{xp}^0 = 0$, то время расплывания пакета Δt , т. е. время, за которое второй член в дисперсии координат (1.46) становится порядка начальной дисперсии, $\Delta t \sim m\Delta x^0/\Delta p^0$, а с учетом соотношения неопределенностей получаем оценку $\Delta t \sim mD_{xx}^0/\hbar$ (1.47). Результат означает неустойчивость начальной координатной локализации: чем уже по координате начальный пакет, тем быстрее он расширяется.

Что касается корреляции координаты и импульса, то она согласно (1.46) растет линейно со временем. Даже при $D_{xp}^0 = 0$ возникает положительная корреляция между x и p , так как большим p соответствуют большие x (частица с большим импульсом успевает продвинуться дальше).

Наконец, дисперсия импульса постоянна, что отвечает закону сохранения импульса в рассматриваемых условиях.

Вторым примером может служить движение в однородном переменном силовом поле. Любопытно, что результаты (1.46) остаются в силе. Покажите это в качестве упражнения.

Третий пример — гармонический осциллятор, для которого $\hat{F} = -m\omega^2\hat{x}$. Цепочка уравнений для корреляций в этом случае также замыкается:

$$\dot{D}_{xx} = \frac{2}{m} D_{xp}; \quad \dot{D}_{xp} = \frac{1}{m} D_{pp} - m\omega^2 D_{xx}; \quad \dot{D}_{pp} = -2m\omega^2 D_{xp}.$$

Из первого и третьего уравнений вытекает интеграл $D_{xx} + D_{pp}/m^2\omega^2 = \text{const}$, а исключение D_{xp} из первого и второго дает уравнение

$$\ddot{D}_{xx} + 4\omega^2 D_{xx} = 2\omega^2 (D_{xx}^0 + D_{pp}^0/m^2\omega^2).$$

Отсюда получаем для основных корреляционных характеристик свободных колебаний гармонического осциллятора следующие выражения:

$$D_{xx} = D_{xx}^0 \cos^2 \omega t + D_{xp}^0/m\omega \sin 2\omega t + D_{pp}^0/m^2\omega^2 \sin^2 \omega t; \quad (1.48)$$

$$D_{xp} = D_{xp}^0 \cos 2\omega t + (D_{pp}^0 - m^2\omega^2 D_{xx}^0)/2m\omega \sin 2\omega t;$$

$$D_{pp} = D_{pp}^0 \cos^2 \omega t - m\omega D_{xp}^0 \sin 2\omega t + m^2\omega^2 D_{xx}^0 \sin^2 \omega t.$$

Никакого расплывания нет. Более того, если средние значения линейных характеристик (1.34) изменяются с частотой ω , то все корреляционные меры изменяются по гармоническому закону с удвоенной частотой. Заметим также, что в стационарных состояниях дисперсии должны быть постоянны, а $D_{xp} = 0$. Уравнения (1.48) дают такой результат, поскольку для осциллятора в этих состояниях $D_{pp} = m^2\omega^2 D_{xx}$.

В виде упражнения изучите пример квадратичного потенциала отталкивания с $\hat{F} = m\kappa^2\hat{x}$. Покажите, что во всех рассмотренных до сих пор случаях дифференциальные уравнения для корреляций обладают интегралом $D_{xx} D_{pp} - D_{xp}^2 = \text{const}$. Обобщите результаты для движения частицы в однородном силовом поле на трехмерный случай.

Получите закон изменения со временем дисперсии координаты в случае свободного движения частицы с произвольным законом дисперсии.

Второе направление исследований корреляционных характеристик проиллюстрируем на примере вынужденных колебаний гармонического осциллятора. Предварительно заметим, что хотя все три картины описания состояний во времени эквивалентны, однако при рассмотрении разновременных характеристик, в частности корреляционных моментов для двух величин, взятых в разные моменты времени,

$$D_{AB}(t_1, t_2) = \overline{[A(t_1) - \overline{A(t_1)}][B(t_2) - \overline{B(t_2)}]},$$

предпочтение следует отдать гейзенберговскому представлению. Ведь в картине Шредингера состояние системы определяется вектором в некоторый момент времени и нет рецепта вычисления разновременных величин. В картине же Гейзенберга вектор состояния остается неизменным, а временная зависимость содержится в операторах, что позволяет построить корреляционные характеристики согласно правилу:

$$D_{AB}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{A}_\Gamma(t_1) - \overline{A(t_1)}], \hat{B}_\Gamma(t_2) - \overline{B(t_2)} \rangle_0, \quad (1.49)$$

где усреднение производится с помощью фиксированного гейзенберговского вектора состояния, которым является начальный шредингеровский вектор.

Для вынужденных колебаний гармонического осциллятора гейзенберговские операторы строим на основании полученного ранее результата (1.38):

$$\begin{aligned} \hat{x}_\Gamma(t) &= \Delta x_0 [\hat{a}_\Gamma^+(t) + \hat{a}_\Gamma(t)] = \Delta x_0 (\hat{a}^+ e^{i\omega t} + \hat{a} e^{-i\omega t} + z^* e^{i\omega t} + z e^{-i\omega t}); \\ \hat{p}_\Gamma(t) &= i\Delta p_0 [\hat{a}_\Gamma^+(t) - \hat{a}_\Gamma(t)] = \\ &= i\Delta p_0 (\hat{a}^+ e^{i\omega t} - \hat{a} e^{-i\omega t} + z^* e^{i\omega t} - z e^{-i\omega t}). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Из вида операторов, отсчитанных от средних значений,

$$\begin{aligned} \hat{X}(t) &\equiv \hat{x}_\Gamma(t) - \langle \hat{x}_\Gamma(t) \rangle_0 = \Delta x_0 [(\hat{a}^+ - \langle \hat{a}^+ \rangle_0) e^{i\omega t} + (\hat{a} - \langle \hat{a} \rangle_0) e^{-i\omega t}]; \\ \hat{P}(t) &\equiv \hat{p}_\Gamma(t) - \langle \hat{p}_\Gamma(t) \rangle_0 = i\Delta p_0 [(\hat{a}^+ - \langle \hat{a}^+ \rangle_0) e^{i\omega t} - (\hat{a} - \langle \hat{a} \rangle_0) e^{-i\omega t}] \end{aligned}$$

делаем важный вывод, что на рассматриваемые корреляционные характеристики вынуждающая сила не оказывает никакого влияния, т. е. они изменяются со временем таким же образом, как и при свободных колебаниях осциллятора.

Будем считать, что в начальный момент времени состояние осциллятора было смешанным стационарным (достаточно общее предположение, включающее, в частности, чистые стационарные состояния и состояние термодинамического равновесия — осциллятор в термостате). Тогда для корреляции координат после несложных вычислений получаем

$$D_{xx}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{X}(t_1), \hat{X}(t_2)]_+ \rangle_0 = (\Delta x_0)^2 (2\langle n \rangle_0 + 1) \cos \omega(t_1 - t_2), \quad (1.51)$$

где $\langle n_0 \rangle$ означает среднее число квантов в начальном состоянии. Аналогичное выражение находим и для корреляции импульсов:

$$D_{pp}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{P}(t_1), \hat{P}(t_2)]_+ \rangle_0 = (\Delta p_0)^2 (2\langle n \rangle_0 + 1) \cos \omega(t_1 - t_2). \quad (1.52)$$

Таким же способом приходим к формуле для корреляции координат и импульсов:

$$D_{xp}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle [\hat{X}(t_1), \hat{P}(t_2)]_+ \rangle_0 = \Delta x_0 \Delta p_0 (2\langle n \rangle_0 + 1) \sin \omega(t_1 - t_2). \quad (1.53)$$

В этой формуле можно, конечно, учесть, что $\Delta x_0 \Delta p_0 = \hbar/2$, однако запись в виде произведения вакуумных неопределенностей сближает ее с другими формулами.

В качестве упражнения выведите формулы (1.52), (1.53) непосредственно из (1.51).

Полученные результаты для одновременных корреляций дополняют найденные ранее формулы (1.48). При совпадающих временных аргументах автокорреляции (1.51), (1.52) переходят в соответствующие дисперсии для стационарных состояний, причем с указанием явного их вида. Все величины изменяются по гармоническому закону с частотой ω . При определенных $t_1 - t_2$ корреляции обращаются в нуль. Зависимость только разности временных аргументов отражает однородность времени для свободных колебаний осциллятора.

К найденным величинам добавим еще одну близкую характеристику, так называемую функцию последействия, о важной роли которой в теории линейной реакции на внешние воздействия предстоит еще рассказ в соответствующем разделе пособия:

$$\Phi_{xp}(t_1, t_2) = \langle \{\hat{x}_\Gamma(t_1), \hat{p}_\Gamma(t_2)\} \rangle_0.$$

Вычисление с помощью формул (1.50) дает

$$\Phi_{xp}(t_1, t_2) = -\cos \omega(t_1 - t_2). \quad (1.54)$$

Величины (1.51)–(1.54) удовлетворяют неравенству, вытекающему из обобщенного соотношения неопределенностей для одновременных величин с учетом корреляции [25, § 13]:

$$D_{xx}(t_1, t_2) D_{pp}(t_2, t_2) \geq D_{xp}^2(t_1, t_2) + \hbar^2 \Phi_{xp}^2(t_1, t_2)/4.$$

Действительно, $D_{xx}(t_1, t_1) D_{pp}(t_2, t_2) - D_{xp}^2(t_1, t_2) = (\hbar^2/4) (2\langle n \rangle_0 + 1) \cos^2 \omega(t_1 - t_2)$, а $(\hbar^2/4) \Phi_{xp}^2(t_1, t_2) = (\hbar^2/4) \cos^2 \omega(t_1 - t_2)$. Равенство же достигается в случае вакуумного начального состояния с $\langle n \rangle_0 = 0$.

В заключение разберем вопрос о связи фазы Φ одночастичной волновой функции $\Psi = A \exp(i\Phi)$ координатного шредингеровского представления с корреляцией и средним значением импульса частицы. Прежде всего напомним, что именно фаза определяет вектор плот-

ности потока вероятности [1] — одну из основных характеристик процессов переноса:

$$j = \frac{\hbar}{m} A^2 \nabla \Phi, \quad (1.55)$$

а с нею и средние плотности потоков числа частиц, массы и заряда. Далее, среднее значение градиента фазы дает среднее значение импульса частицы:

$$\langle p \rangle = \hbar \langle \nabla \Phi \rangle. \quad (1.56)$$

Наконец, например в одном измерении, корреляция флуктуаций координаты и импульса выражается формулой

$$D_{xp} = \overline{\hbar (x - \bar{x}) \Phi'}. \quad (1.57)$$

Так, если фаза волновой функции $\Phi = \alpha x + \beta x^2$, то в силу (1.56) и (1.57)

$$\bar{p} = \hbar (\alpha + 2\beta \bar{x}); \quad D_{xp} = 2\hbar \beta D_{xx}. \quad (1.58)$$

Убедитесь прямым расчетом в справедливости указанных соотношений.

Завершая параграф о методе динамики корреляций, предлагаем выполнить упражнения. Получите результаты для разновременных одночастичных величин, аналогичные (1.46), с помощью гейзенберговских операторов при свободном движении и в однородном силовом поле. Вычислите следующие операторные величины для вынужденных колебаний гармонического осциллятора: $[\hat{a}_\Gamma(t_1), \hat{a}_\Gamma^\dagger(t_2)]; \{\hat{x}_\Gamma(t_1), \hat{x}_\Gamma(t_2)\}; \{\hat{p}_\Gamma(t_1), \hat{p}_\Gamma(t_2)\}$, где фигурные скобки, напомним, обозначают квантовые скобки Пуассона.

1.5. МЕТОД ФУНКЦИЙ РАСПРОСТРАНЕНИЯ

Функцией распространения будем называть, как уже было отмечено в 1.1, матричные элементы оператора эволюции (пропэгатора, оператора Грина) в картине Шредингера:

$$U(x, t; x_0, t_0) \equiv \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle.$$

Эту величину часто также называют пропэгатором и функцией Грина. Физический смысл функции распространения (ФР) заключается в том, что волновая функция в любой момент времени связана с начальной волновой функцией интегральным преобразованием, ядром которого является ФР:

$$\Psi(x, t) = \int U(x, t; x_0, t_0) \Psi(x_0, t_0) dx_0. \quad (1.59)$$

Для определенности пишем знаки координат и интегрирование, так как обычно координатное представление наиболее наглядно при описании свойств движения, хотя имеются в виду, конечно, любые полные наборы квантовых чисел, а интегрирование может заменяться суммированием.

Таким образом, знание функции распространения позволяет решить кинетическую задачу. Соответствующее интегральное преобразование можно записать и для матрицы плотности смешанных состояний.

На первом этапе ставится задача вычисления ФР для конкретных случаев движения. Можно указать несколько способов.

Во-первых, в постоянных внешних условиях, т. е. при $\partial \hat{H} / \partial t = 0$, пропагатор согласно (1.9) равен

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp[-i(t - t_0) \hat{H} / \hbar]. \quad (1.60)$$

Если решена задача о собственных значениях E_k и собственных волновых функциях $\psi_k(x)$ гамильтониана в x -представлении, то

$$U(x, t; x_0, t_0) = \sum_k \exp[-i(t - t_0) E_k / \hbar] \psi_k(x) \psi_k^*(x_0), \quad (1.61)$$

где k — полный набор квантовых чисел, классифицирующих стационарные состояния. Например, для свободного одномерного движения частицы с квадратичным законом дисперсии $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m$ ($k \equiv p$ и $p = \pm \sqrt{2mE}$) при $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$ интегрирование в (1.61) по импульсу

$$U(x, t; x_0, t_0) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} [-(t - t_0) p^2 / 2m + p(x - x_0)] dp$$

сводится к интегралам Френеля [26]. Ответ запишем, полагая здесь и в дальнейшем, если не оговорено противное, $t_0 = 0$:

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \frac{im(x - x_0)^2}{2\hbar t}. \quad (1.62)$$

Для свободного движения на полуоси $x < 0$ имеем:

$$\psi_k(x) = (2/\pi)^{1/2} \sin kx, \quad x \leq 0; \quad \psi_k(x) = 0, \quad x \geq 0; \quad \hbar k = \sqrt{2mE} > 0.$$

Вычисления в (1.61) сводятся к предыдущему случаю, если использовать формулу

$$2 \sin kx \sin kx_0 = \cos k(x - x_0) - \cos k(x + x_0).$$

В результате функция распространения полуограниченного движения оказывается равной

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \left[\exp \frac{im(x - x_0)^2}{2\hbar t} - \exp \frac{im(x + x_0)^2}{2\hbar t} \right] \quad (1.63)$$

при $x, x_0 \leq 0$ и $U(x, t; x_0, 0) = 0$ при $x, x_0 \geq 0$.

Подобным же образом на основе знания характеристик стационарных состояний можно получить функцию распространения гармонического осциллятора, если применить соответствующую формулу для производящих функций полиномов Эрмита из книги [27, с. 194].

В качестве упражнения покажите, что ФР гармонического осциллятора равна

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega t} [(x^2 + x_0^2) \cos \omega t - 2xx_0] \right\}. \quad (1.64)$$

Как и должно быть, при $\omega = 0$ это выражение переходит в (1.62).

Второй способ вычисления функций распространения с пропагатором вида (1.60) состоит в симметризации операторных экспонент. Существо этого приема разберем на примере движения частицы в однородном постоянном силовом поле. При этом гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}^2/2m - F\hat{x}$ естественным образом разбивается на основную часть для свободного движения, ФР которого уже считаем известной, и добавку в виде потенциала $-F\hat{x}$. Проще всего воспользоваться симметризацией из упражнения 2 в прил. 2, согласно которой пропагатор разбивается на операторные множители следующим образом:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{itF\hat{x}/2\hbar} \hat{U}_0(t, t_0) e^{itF\hat{x}/2\hbar} e^{-it^3F^2/24\hbar m}.$$

Такая симметризация значительно упрощает вычисление матричных элементов в координатном представлении, где диагональны обкладки свободного пропагатора $\hat{U}_0$, так что получаем с учетом (1.62) функцию распространения

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} [m(x - x_0)^2/2t + \\ + tF(x + x_0)/2 - t^3F^2/24m]. \quad (1.65)$$

Частным случаем этого способа можно считать точную факторизацию пропагатора, когда гамильтониан равен сумме коммутирующих операторов. Например, в случае трехмерного свободного движения частицы с квадратичным анизотропным законом дисперсии при выборе декартовых координат вдоль главных осей тензора обратных эффективных масс гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}_1^2/2m_1 + \hat{p}_2^2/2m_2 + \hat{p}_3^2/2m_3$, так что функция распространения сведется к произведению соответствующих множителей вида (1.62).

Существуют также специальные приемы. Например, в случае полуграниченного движения функцию распространения (1.63) можно было бы сразу построить с помощью (1.62) методом зеркального отражения. Функцию распространения в параболическом потенциале отталкивания с $\hat{F} = m\kappa^2\hat{x}$ можно записать на основе замены $\omega \rightarrow i\kappa$ в выражении для ФР гармонического осциллятора (1.64).

Заметим, что в силу начального условия для пропагатора $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ функции распространения при $t \rightarrow 0$ стремятся к дельта-функции, так что, например, из (1.62) вытекает следующее представление для дельта-функции:

$$\delta(x - x_0) = \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp [im(x - x_0)^2/2\hbar t]. \quad (1.66)$$

Еще одним важным направлением среди способов отыскания функций распространения является метод Фейнмана интегралов по траекториям [28—31], когда также используется факторизация пропагатора, однако на основе разбиения временного интервала на небольшие промежутки времени в соответствии со свойством, отмеченным в прил. 2:

$$\hat{U}(t_N, t_0) = \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0).$$

Затем используется вид ФР при малых Δt в случае потенциала V :

$$U(x, t + \Delta t; x_0, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} [m(x - x_0)^2 / 2\Delta t - V(x_0) \Delta t].$$

Предельный переход при $\Delta t \rightarrow 0$ дает континуальный (функциональный) интеграл, или интеграл по виртуальным траекториям, выражающий ФР через классическую функцию Лагранжа. Не вдаваясь в детали, заметим, что в современной квантовой теории метод Фейнмана получил широкое обобщение и разнообразные применения.

Наконец, добавим, что часто вычисление функции распространения по формуле (1.61) оказывается громоздким или сумма (интеграл) не вычисляется. В таких случаях обычно используется конкретный вид начальной волновой функции в k -представлении: из (1.59) и (1.61) следует, что

$$\Psi(x, t) = \sum_k \exp[-i(t - t_0) E_k / \hbar] \psi_k(x) \Psi(k, t_0). \quad (1.67)$$

Далее делается попытка вычислить сумму точно, приближенно аналитически или же численно.

В заключение предлагаем упражнения. Вычислите ФР для свободного движения частицы с квадратичным изотропным законом дисперсии в n измерениях. Найдите ФР для частицы в постоянном однородном силовом поле в трехмерном случае. Покажите, что ФР (1.62), (1.64), (1.65) имеют вид $U(x, t; x_0, t_0) = C(t - t_0) \exp \frac{i}{\hbar} S_{\text{кл}}(x, t; x_0, t_0)$, где $S_{\text{кл}}$ — классическое действие, выраженное через начальные и конечные значения координаты и времени.

1.6. ЭФФЕКТ РАСПЛЫВАНИЯ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

Хотя вопрос о расплывании волновых пакетов уже затрагивался в параграфе 1.4, этому интересному явлению квантовой кинетики следует уделить особое внимание. Эффект расплывания является самопроизвольным, не связанным с каким-либо внешним воздействием на систему. Причиной его возникновения являются неопределенность импульса и нелинейность закона дисперсии. В локализованном по координате пакете в силу соотношения неопределенностей присутствуют волны с различными импульсами, а значит, из-за нелинейной зависимости энергии от импульса, и с разными фазовыми скоростями. Быстрые волны с большой фазовой скоростью обгоняют медленные, так что в координатном пространстве происходит непрерывная перестройка волнового пакета.

Как уже отмечалось в 1.4, признаком распыливания является рост неопределенности координаты при больших t . Это — общий, так сказать, интегральный результат. Исследуем некоторые локальные свойства этого явления. Вначале рассмотрим одномерные пакеты произвольной начальной формы $\Psi(x, 0)$. Из формул (1.59), (1.62) вытекает, что в любой момент времени волновой пакет определяется выражением

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \int \exp [im(x - x_0)^2 / 2\hbar t] \Psi(x_0, 0) dx_0. \quad (1.68)$$

Если начальный пакет был сосредоточен в области $|x_0| \leq a$, то для $|x| \leq a$ при $t > ma^2/\hbar$ подынтегральную экспоненту в первом приближении можно заменить единицей, что дает грубую оценку поведения плотности вероятности координат в области начальной локализации $\rho(x, t) \approx \frac{m}{2\pi \hbar t} \left| \int \Psi(x_0, 0) dx_0 \right|^2$, $|x| \leq a$. Правило $\rho \sim t^{-1}$ при больших t вытекает и из условия нормировки $\int \rho(x, t) dx = 1$, если учесть, что $\Delta x \sim t$, а

$$\int \rho(x, t) dx \sim \rho(0, t) \Delta x.$$

Итак, установлены следующие предварительные закономерности конечной стадии процесса распыливания. Плотность вероятности координат в первом приближении не зависит от x и убывает по закону

$$\rho(x, t) \approx \frac{\tau}{t} \rho(0, 0), \quad (1.69)$$

где $\tau = ma^2/2\pi\hbar$ порядка времени распыливания пакета, а величина a введена определением $\int \Psi(x, 0) dx = a\Psi(0, 0) \neq 0$. Временная асимптотика и факт сглаживания пакета в области начальной локализации носят универсальный характер, т. е. не зависят от формы начального пакета.

Результаты непосредственно обобщаются на многомерный случай. Функция распространения для n измерений факторизуется (п. 1 из прил. 1), так что $\rho(x, t) \approx (\tau/t)^n \rho(0, 0)$. Столь быстрое распыливание многомерных пакетов объясняется необходимостью соблюдения нормировки, поскольку для всех направлений неопределенности координат растут линейно со временем, а $\int \rho(\mathbf{r}, t) dV \sim \rho(0, t) (\Delta x)^n$.

Более точную оценку для плотности вероятности координат получаем согласно (1.68) из выражения

$$\begin{aligned} \rho(x, t) = \frac{m}{2\pi \hbar t} \left\{ \left[\int \cos \frac{m(x - x_0)^2}{2\hbar t} \Psi(x_0, 0) dx_0 \right]^2 + \right. \\ \left. + \left[\int \sin \frac{m(x - x_0)^2}{2\hbar t} \Psi(x_0, 0) dx_0 \right]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (1.70)$$

в котором начальная волновая функция $\Psi(x, 0)$ считается вещественной. Раскладывая тригонометрические функции в ряды и сохра-

няя соответствующие члены, имеем

$$\rho(x, t) = \frac{\tau}{t} \rho(0, 0) \left\{ 1 - \pi^2 \left(\frac{\tau}{t} \right)^2 [\tilde{x}^4 - (\tilde{x}^2)^2 - 4x(\tilde{x}^3 - \tilde{x}\tilde{x}^2) + 4x^2\tilde{x}^2]/a^4 + O(t^{-4}) \right\}, \quad (1.71)$$

где тильдой обозначено особое усреднение по правилу

$$\tilde{x} = \int x \Psi(x, 0) dx / \int \Psi(x, 0) dx.$$

В случае четной начальной волновой функции линейный по координате член в (1.71) исчезает, как и должно быть в силу закона сохранения четности. Независящий от x поправочный член уточняет значение ρ в начале координат, а последний член дает слабую квадратичную зависимость от координаты.

В качестве конкретных примеров рассмотрим гауссов и прямоугольный начальные пакеты. Для начальной волновой функции в виде гауссиана

$$\Psi(x, 0) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp(-x^2/4D_0) \quad (1.72)$$

характерные величины равны $a = (4\pi D_0)^{1/2}$; $\tau = 2mD_0/\hbar$; $\rho(0, 0) = (2\pi D_0)^{-1/2}$. После вычисления требуемых средних значений $\tilde{x}^2 = 2D_0$; $\tilde{x}^4 = 12D_0^2$ формула (1.71) приобретает вид

$$\rho(x, t) = (\tau/t) \rho(0, 0) [1 - (\tau/t)^2 (1 + x^2/D_0)/2]. \quad (1.73)$$

Для начального прямоугольного пакета

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= a^{-1/2}, \quad |x| < a/2; \\ \Psi(x, 0) &= 0, \quad |x| > a/2 \end{aligned} \quad (1.74)$$

аналогичные величины вычисляются еще проще:

$$\tau = ma^2/2\pi\hbar; \quad \rho(0, 0) = a^{-1}; \quad \tilde{x}^2 = a^2/12; \quad \tilde{x}^4 = a^4/80,$$

так что в результате получаем следующую конкретизацию выражения (1.71):

$$\rho(x, t) = (\tau/t) \rho(0, 0) [1 - \pi^2 (\tau/t)^2 / 180 - \pi^2 (\tau/t)^2 x^2 / 3a^2]. \quad (1.75)$$

Найденные аппроксимации пригодны лишь для области начальной локализации по координатам (центр распределения). Для периферии же (крыльев распределения) можно также получить соответствующее приближение, записывая плотность вероятности координат согласно (1.68) в виде

$$\rho(x, t) = \frac{m}{t} \left| \int \Psi(x_0, 0) \exp [imx_0^2/2\hbar t - imxx_0/\hbar t] dx_0 / \sqrt{2\pi\hbar} \right|^2. \quad (1.76)$$

Смысл выражения под знаком модуля простой — это импульсное представление для функции $\Psi(x, 0) \exp [imx^2/2\hbar t]$, взятое при значении импульса $p = mx/t$. При $t > ma^2/\hbar$ экспоненциальный множитель заменяем единицей и находим приближенную формулу, связывающую

плотность вероятности координат с плотностью вероятностей импульсов,

$$\rho(x, t) \approx (m/t) \rho(p) \big|_{p=mx/t}, \quad (1.77)$$

пригодную для всех x . Умножая обе части равенства на δx и вводя $\delta v = \delta p/m = \delta x/t$, видим, что физический смысл полученного результата заключается в том, что вероятность обнаружить частицу с координатами в малом интервале δx вблизи точки x равна вероятности иметь соответствующие скорости в интервале δv вблизи v .

Таким образом, крылья распределения по координатам (большие x) определяются далекими Фурье-компонентами.

Для гауссова начального пакета (1.72) импульсное распределение не изменяется со временем (закон сохранения импульса) и имеет вид

$$\rho(p) = (2D_0/\pi\hbar^2)^{1/2} \exp(-2D_0 p^2/\hbar^2),$$

так что в соответствии с (1.77)

$$\rho(x, t) \approx (m/\hbar t) (2D_0/\pi)^{1/2} \exp(-2D_0 m^2 x^2/\hbar^2 t^2), \quad (1.78)$$

что согласуется с приближением (1.73), если учесть, что отброшены члены порядка t^{-3} , не зависящие от координаты x . При больших значениях x (крылья распределения) имеем гауссову форму: далекие импульсные компоненты функции без особенностей экспоненциально малы.

Для прямоугольного пакета (1.74) распределение по импульсам

$$\rho(p) = (a/2\pi\hbar) [\sin(ap/2\hbar)/(ap/2\hbar)]^2$$

приводит к аппроксимации для распределения по координатам

$$\rho(x, t) \approx (\tau/ta) [\sin(\pi\tau x/ta)/(\pi\tau x/ta)]^2. \quad (1.79)$$

Это выражение также переходит при малых x в (1.76) с указанной выше точностью. Таким образом, здесь крылья распределения имеют осцилляции с убывающей амплитудой: функция с особенностью в виде скачков при $x = \pm a/2$ имеет далекие Фурье-компоненты, убывающие по степенному закону (в среднем $\bar{\rho} \sim x^{-2}$).

Общая формула (1.68) показывает, что переход от начального момента времени к конечному определяется интегральным преобразованием (1.68), так что возможные особенности начального пакета сглаживаются. Однако на начальной стадии пакет с особенностями может претерпевать весьма существенные деформации.

Для малых t и начальных волновых функций без особенностей можно использовать формальный прием разложения по степеням t , вытекающий из явной записи свободного пропагатора $\hat{U}(t, 0) = \exp(-it\hat{H}/\hbar)$ в координатном представлении, где $\hat{H} = -(\hbar^2/2m) \times \partial^2/\partial x^2$, так что

$$\Psi(x, t) = \exp[i(\hbar t/2m) \partial^2/\partial x^2] \Psi(x, 0).$$

Отсюда из начального пакета в виде гауссиана (1.72) после несложных вычислений, которые советуем проделать как упражнение, имеем

$$\rho(x, t) = \rho(x, 0) [1 - t^2/2\tau^2 + x^2 t^2/2D_0 \tau^2 + O(t^4)]. \quad (1.80)$$

В качестве конкретных примеров начальных форм волновых пакетов выбираем гауссов и прямоугольный. Это вызвано тем, что, во-первых, для этих двух случаев можно получить точные решения при свободном движении. Во-вторых, эти примеры отвечают крайним случаям гладкой функции и функции с особенностями в виде скачков. В-третьих, приближенные формулы, рассмотренные выше, легко вычисляются для этих пакетов. Кроме того, их форма наглядна, а аналитическое выражение отличается особой простотой. Наконец, они имеют достаточно простой физический смысл и могут быть непосредственно приготовлены, т. е. созданы экспериментально (в большей степени это касается гауссиана).

Обсуждение точных решений начнем со случая начального гауссова пакета (1.72), который определяется единственным параметром — дисперсией координаты D_0 . В силу вещественности начальной волновой функции имеем согласно (1.55)–(1.57) бестоковое состояние $j_0 = 0$ с нулевым средним импульсом $\langle p \rangle_0 = 0$ и нулевой корреляцией $D_{xp}^0 = 0$. Дисперсия импульса при этом

$$D_{pp}^0 = \hbar^2/4D_0, \quad (1.81)$$

что непосредственно вытекает из соотношения неопределенностей, которое минимизирует гауссиан (1.72).

Для получения вида волновой функции в любой момент времени необходимо вычислить интеграл (1.68) для начального гауссиана (1.72). Он берется элементарно. Расчет предлагаем выполнить в виде упражнения. Результат можно записать в следующей форме:

$$\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-x^2/4D_0\gamma(t)], \quad (1.82)$$

где введена вспомогательная комплексная величина $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$.

Таким образом, вещественная начальная волновая функция превращается в комплексную, причем появляется зависящая от координаты фаза (помимо несущественного в данной задаче фазового множителя, зависящего только от времени)

$$\Phi(x, t) = (x^2/4D_0) \operatorname{Im} \gamma / |\gamma|^2 = \hbar t x^2 / 8mD_0 D(t), \quad (1.83)$$

где величина $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$ имеет смысл дисперсии координаты в соответствии с (1.46) и (1.81).

Вследствие этого появляются согласно (1.55) токи $j(x, t) = (\hbar/m) \times \times \rho F' = \hbar^2 t x \rho / 4m^2 D_0 D(t)$, т. е. распывание пакета сопровождается растеканием вероятности от центра пакета.

В силу сохранения импульса $\langle p \rangle = \langle p \rangle_0 = 0$, так что нет общего смещения центра пакета (эффект распывания рассматриваем в чистом виде).

В соответствии с (1.58) нарастает линейно со временем положительная корреляция координаты и импульса с учетом (1.81) по правилу $D_{xp}(t) = t D_{pp}^0 / m = \hbar^2 t / 4mD_0$.

Переходя к плотности вероятности координат

$$\rho(x, t) = [2\pi D(t)]^{-1/2} \exp[-x^2/2D(t)], \quad (1.84)$$

делаем важный вывод о том, что гауссовому начальному пакету удается сохранять свой вид — гауссиан остается гауссианом, хотя параметр гауссова распределения — дисперсия координаты — монотонно растет со временем. Стабильность гауссовой формы есть следствие квадратичности гауссова распределения в экспоненте и квадратичности закона дисперсии (в пропагаторной экспоненте). Таким образом, гауссово распределение инвариантно по форме не только при интегральном преобразовании перехода в импульсное пространство, но и при интегральном преобразовании движения с квадратичным законом дисперсии. Это особенно ясно видно из формулы (1.67) для свободного движения. Стабильность, как будет показано в дальнейшем, гауссовы пакеты проявляют не только при свободном движении, но часто и в условиях рассеяния.

Уже упоминавшееся точное выражение для дисперсии координаты

$$D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0 \quad (1.85)$$

позволяет дать более строгую трактовку введенного ранее времени распыливания пакета $\tau = 2mD_0/\hbar$. Видим, что это есть время увеличения вдвое дисперсии координаты.

С помощью масштаба времени распыливания τ и неопределенности координаты $\Delta x^0 = \sqrt{D_0}$ в начальный момент времени точную формулу (1.84) целесообразно записать в безразмерном виде, что особенно важно для численных оценок и графического изображения при работе с компьютером:

$$R(X, T) = [2\pi(1 + T^2)]^{-1/2} \exp[-X^2/2(1 + T^2)], \quad (1.86)$$

где $R = \sqrt{D_0} \rho$; $X = x/\sqrt{D_0}$; $T = t/\tau$.

Сравнение выражений (1.84) и (1.86) с приближенными формулами для больших времен (1.73) и (1.78), а также для малых (1.80) позволяет оценить точность этих аппроксимаций. Выведите указанные выражения из точной формулы и оцените времена, при которых относительная ошибка для ρ и соответствующих x не превышает 10 и 1 %.

Сопоставьте графики $\rho(x)$, построенные по точной формуле и с помощью указанных приближений, для различных моментов времени t .

Здесь впервые в нашем изложении материала появляется необходимость применения современных вычислительных устройств. Предложенные упражнения можно, конечно, выполнить с помощью простого калькулятора, построив графики по точкам на миллиметровой бумаге. Однако лучше начать даже на таком простом примере работать с персональным компьютером, обеспечивающим построение графических изображений на экране дисплея. Начните с непрерывного изменения профиля пакета (1.86), организовав смену изображений через определенное время, имитируя движение, наблюдая распыливание в реальном масштабе времени. Есть возможность ярко продемонстрировать эффект распыливания волновых пакетов, что должно иметь большое познавательное значение, а также доставлять эстетическое удовольствие. Прекрасная картина ожившего эффекта должна навсегда

запомниться. Кстати, можно много раз приблизительно рисовать гауссиан, но так и не познать его настоящего профиля (рис. 1).

Каковы первые впечатления? Наблюдение показывает, что расплывание происходит монотонно, нет четко выраженных стадий эффекта. Это видно из формул, это видно на экране. Такова особенность гауссиана. Все же характерные моменты времени есть. Зафиксируйте профиль, соответствующий моменту времени $T = 1$. Наложите на него начальный пакет. Сравните. Сделайте то же для момента времени $T = \sqrt{3}$, когда ширина пакета увеличивается вдвое. Обратите также внимание на кривизну распределения в центре пакета при достаточно больших T . Видно, как постепенно пакет уплощается в области на-

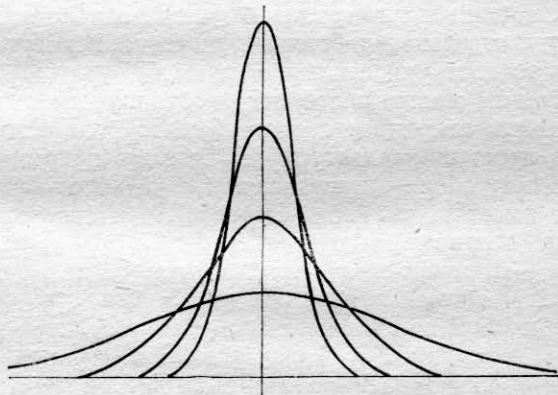


Рис. 1. Расплывание гауссова пакета

чальной локализации (накладывайте текущие изображения на фиксированный начальный профиль).

Первый демонстрационный эксперимент должен выработать навыки построения движущихся изображений. Кинетику желательно изучать не только с помощью формул и воображения, но и непосредственно наблюдая за развитием процессов, ставя машинный эксперимент, увеличивая то, что скрыто обычно в микромире до макроскопических размеров и временных интервалов.

В качестве второго примера с точным решением задачи о расплывании рассматриваем начальный волновой пакет прямоугольной формы (1.74). При расчете плотности вероятности координат согласно (1.70) вводим новую переменную интегрирования $y = (m/2\hbar t)^{1/2}(x - x_0)$, что дает

$$R(X, T) = \pi^{-1} \left[\left(\int_{y_1}^{y_2} \cos y^2 dy \right)^2 + \left(\int_{y_1}^{y_2} \sin y^2 dy \right)^2 \right],$$

$$y_{1,2} = (\pi/T)^{1/2} (X \mp 1/2), \quad (1.87)$$

где безразмерные величины определены соотношениями

$$R = ar; \quad X = x/a; \quad T = t/\tau = 2\pi\hbar t/ma^2.$$

В качестве упражнения запишите ответ непосредственно через интегралы Френеля $C(x)$ и $S(x)$, пользуясь определением из [26]. В частности, в центре пакета

$$R(0, T) = 2 [C^2(\sqrt{\pi/4T}) + S^2(\sqrt{\pi/4T})]. \quad (1.88)$$

Говоря о точном решении, мы имеем в виду возможность выражения ответа через элементарные или хорошо изученные специальные функции. Использование соответствующих свойств интегралов Френеля дает, в частности, оценку точности аппроксимаций (1.75) и (1.79). Однако для детального слежения за всеми этапами преобразований пакета в данном случае целесообразно опираться на выражение (1.87), имея в виду численные методы. Можно, конечно, обратиться к таблицам интегралов Френеля, однако это практически неудобно, хотя отдельные табличные значения помогут оценить правильность и точность численных методов.

Поскольку для наших целей нет необходимости вычислять плотность вероятности координат с очень большой точностью, достаточно использовать простую квадратурную формулу (например, Симпсона). В программе счет обоих интегралов в (1.87) ведется параллельно. Однако следует помнить, что при малых T (начальный этап распыления) центр интервала интегрирования $\bar{y} (y_1 + y_2)/2 = (\pi/T)^{1/2} X$ уже при $|X| \sim 1$ попадает в область частых осцилляций интегрируемых функций, а интервал интегрирования $y_2 - y_1 = (\pi/T)^{1/2}$ также достаточно велик. Внимательно следите за выбором шага интегрирования в соответствии с T и X (адаптивное интегрирование), контролируя точность сопоставлением результатов при уменьшении шага вдвое и проверяя правильность расчетов по табличным значениям интегралов Френеля [32]. Заметим, что интегралы Френеля в литературе определяются по-разному. Для наглядности советуем изобразить графики функций $\cos y^2$ и $\sin y^2$ и для каждого T и X отметить, где именно расположен интервал интегрирования.

Указанные расчеты можно выполнять с помощью программируемых микрокалькуляторов. Этого вполне достаточно для построения графиков при типичных значениях времени T (например, 0,1; 0,2; 0,35; 0,75; 1,5; 3,0). Однако целесообразнее, конечно, воспользоваться быстродействующим компьютером, позволяющим просчитать интегралы сразу для большого числа точек X при данном T и быстро вывести на экран графическое изображение. На начальном этапе распыления профиль пакета имеет много осцилляций в пространстве, так что расчетные точки X должны выбираться достаточно близко друг к другу. В силу симметрии пакета достаточно вести расчет только для положительных X .

Что же должно получиться в результате? Анализ машинного эксперимента покажет, что пакет, во-первых, не сохраняет своей формы. Это вытекает, разумеется, уже из приближенной формулы (1.79) для конечной стадии распыления. Во-вторых, данный пакет отличается чрезвычайной изменчивостью формы. В-третьих, можно указать несколько типичных стадий процесса распыления. На первом этапе появляются осцилляции, амплитуда которых со временем нарастает.

После некоторого критического момента времени $T \approx 0,35$ наступает этап монотонного убывания ρ в центре пакета, хотя общий профиль еще имеет осциллирующий вид. При $T \gtrsim 1$ пакет приобретает гладкую, колоколообразную форму, а остатки осцилляций смещаются в далекую периферийную область, где ρ уже очень мало. Таким образом, на первой стадии происходит перестройка профиля пакета, наблюдаются осцилляции, а собственно расплывание начинается позднее (рис. 2).

Особенности деформации пакета передаются поведением плотности вероятности координат в центре, где согласно (1.88) $R(0, T)$ пропор-

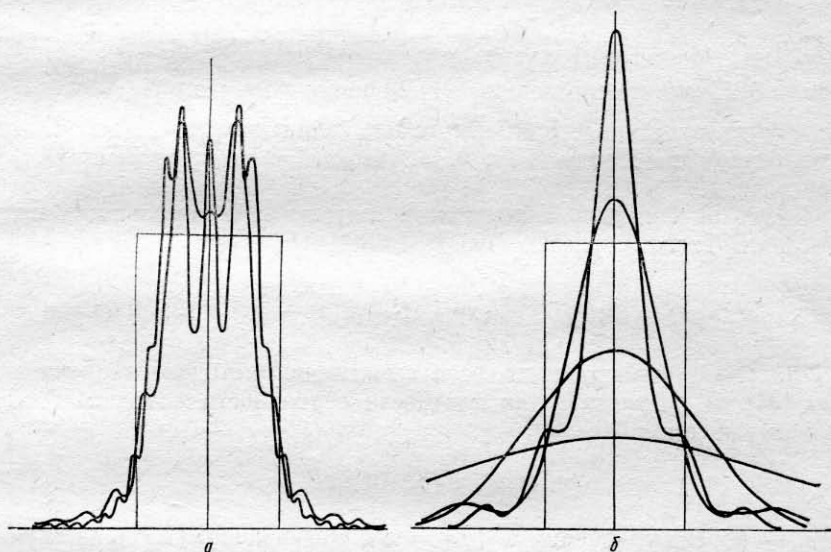


Рис. 2. Расплывание прямоугольного пакета:
а — начальная стадия; б — конечная стадия

ционально сумме квадратов интегралов Френеля. В связи с этим можно дать наглядную трактовку возникающим явлениям, используя так называемую спираль Корню [33], для точек которой квадрат расстояния до начала координат пропорционален $C^2 + S^2 = R(0, T)/2$, а соответствующий аргумент пропорционален аргументу интегралов Френеля в (1.88). Начальному значению $T = 0$ отвечает предельная точка, на которую навивается спираль. С увеличением T спираль раскручивается, что отвечает осцилляциям с увеличивающейся амплитудой. Затем при некотором значении параметра, отвечающего $T \approx 0,35$, точка на спирали максимально удаляется от начала координат, что соответствует максимуму амплитуды осцилляций $R(0, T) \approx 1,8$. Имеется также точка минимального значения $R_{\min}$ в докритический период расплывания. Дальнейшему увеличению T соответствует монотонное изменение — убывание $R(0, T)$. В качестве упражнения советуем убедиться в сказанном и найти момент времени с $R_{\min}$ в осцилляционной стадии расплывания пакета.

В качестве упражнений исследуйте распыление следующих волновых пакетов, заданных в начальный момент времени в координатном пространстве:

- а) $\Psi(x, 0) = A \exp(-\alpha |x|)$ (Лапласа);
- б) $\Psi(x, 0) = A/(1 + \alpha x^2)$ (Коши — Лоренца);
- в) $\Psi(x, 0) = A/\cosh^2 \alpha x$ (Эккарта);
- г) $\Psi(x, 0) = A \exp(-\alpha x^4)$ (четверной гауссиан);
- д) $\Psi(x, 0) = A(1 - \alpha |x|)$, $\alpha |x| < 1$;
 $\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > 1$ (треугольный);
- е) $\Psi(x, 0) = A \cos \alpha x$, $\alpha |x| < \pi/2$;
 $\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > \pi/2$ (полупериод синусоиды).

При выводе формул (1.69), (1.71) предполагалось, что $\int \Psi(x, 0) \times dx \neq 0$. Получите соответствующие оценки в случае $\int \Psi(x, 0) dx = 0$. Исследуйте конкретные примеры таких начальных профилей, в частности период синусоиды $\Psi(x, 0) = A \sin \alpha x$, $\alpha |x| < \pi$; $\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > \pi$.

Исходный волновой пакет можно задавать и в импульсном представлении. Тогда, согласно (1.67)

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \exp \frac{i}{\hbar} [-tE(p) + px] \Psi(p, 0) dp. \quad (1.89)$$

При $t \rightarrow \infty$ можно произвести вычисления методом стационарной фазы [34]. В результате для плотности вероятности координат получаем выражение

$$\rho(x, t) \approx |\Psi(p_0, 0)|^2 / t E''(p_0), \quad (1.90)$$

где p_0 — корень уравнения $E'(p_0) = x/t$, обобщающее (1.77) на случай произвольного закона дисперсии. Вычисления сделайте самостоятельно. Покажите, что квадратичная зависимость дисперсии координат от времени справедлива и в общем случае при больших t . Отметьте роль корреляции скоростей в явлении квантовой диффузии (распылении) пакета.

Форма записи (1.89) наглядно показывает, почему именно гауссов начальный пакет остается гауссовым в случае квадратичного закона дисперсии и какого результата следует ожидать при других законах дисперсии частицы $E(p)$ и начальных волновых функциях $\Psi(p, 0)$.

Изучите влияние закона дисперсии на характер распыления пакетов на примере четверного закона $E(p) = \beta p^4$ при различных конкретных формах начальных пакетов в импульсном пространстве. Рассмотрите случай, когда в области импульсов, где сосредоточен начальный пакет $\Psi(p, 0)$, закон дисперсии оказывается линейным.

Явление распыления волновых пакетов связано с общей проблемой распада нестационарного состояния. Предлагаем упражнение на оценку вероятности нераспада. Частица первоначально локализована в трехмерной области пространства. По какому закону изменится вероятность обнаружить ее в той же области при больших t ?

Найдите время распыливания пакета для электрона, первоначально локализованного в области порядка 10^{-8} см. Сопоставьте со временем распыливания для частицы с массой 10^{-10} г, локализованной в области размерами 10^{-4} см.

Покажите, что для явления распыливания справедливо соотношение неопределенностей для энергии и времени в виде $\Delta E \tau \sim \hbar$, где ΔE — неопределенность энергии, а τ — время распыливания. Вычислите неопределенность энергии для гауссиана (1.72), у которого $\tau = 2mD_0/\hbar$, и найдите точное значение произведения этих величин для распыливания гауссова пакета.

Можно отметить три направления детального исследования распыливания волновых пакетов. Во-первых, на основе точного решения в явной аналитической форме (как в случае гауссиана с элементарными функциями или в случае прямоугольного пакета, когда точное решение выражается через специальные функции). Во-вторых, с помощью функции распространения с вычислением интегралов в координатном или импульсном пространствах. В-третьих, самый общий подход непосредственного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера с применением разностных схем и машинного моделирования.

Поучительно сравнить закономерности обычной диффузии и квантовой диффузии (распыливания пакетов). Нетрудно установить аналогю и подметить различия (мнимый коэффициент диффузии, роль соотношения неопределенностей, временная зависимость дисперсии координат, связь наблюдаемых величин с квадратом модуля волновой функции, использование функций Грина и интегральной формы записи решения и т. д.).

Интересен вопрос об обратимости (сжатие пакета, генерирование корреляции и ее роль в обращении времени, пример гауссиана и т. д.).

Роль явления распыливания в истории развития квантовой теории (попытка связать волновую функцию со структурой частиц).

О создании пакетов. Гауссов — основное состояние гармонического осциллятора и когерентное состояние, получаемое в результате вынужденных колебаний из вакуума. Прямоугольный — суперпозиция вынужденных состояний в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Этим кратким перечислением некоторых вопросов, связанных с явлением распыливания, завершаем знакомство с квантовой диффузией.

1.7. РАСПЫЛИВАНИЕ ДВОЙНОГО ГАУССИАНА

Изученные особенности процесса распыливания пакета без общего смещения его центра сохраняются и в случае отличного от нуля среднего импульса частицы, а также при движении в постоянном однородном силовом поле. Многие черты распыливания присущи и более сложным внешним воздействиям, например при рассеянии. Основные закономерности явления распыливания могут считаться известными, что дает основание перейти к более сложным задачам. Одной из них явля-

ется расплывание двухпараметрического пакета в виде суперпозиции двух гауссианов, центры которых находятся в точках $\pm b$:

$$\Psi(x, 0) = A \left[e^{-\frac{(x-b)^2}{4D_0}} + e^{-\frac{(x+b)^2}{4D_0}} \right]. \quad (1.91)$$

Нормировочный коэффициент, как нетрудно убедиться, определяется соотношением $A^{-2} = 2(2\pi D_0)^{1/2} [1 + \exp(-b^2/2D_0)]$.

Как и ранее, рассматриваем пока вещественную в начальный момент времени волновую функцию без общего смещения центра пакета т. е. без перемещения пакета как целого. Пакет имеет симметричную форму и содержит два параметра (b, D_0). При обезразмеривании фактически остается одна величина — отношение b^2/D_0 , от величины которого зависят типичные начальные профили пакета. Покажите, что при достаточно удаленных центрах ($b > \sqrt{2D_0}$) пакет имеет характерную двугорбую, двуглавую форму, при $b < \sqrt{2D_0}$ гауссианы сливаются в единый одnogорбый профиль, а промежуточному случаю $b = \sqrt{2D_0}$ отвечает также одnogорбый критический профиль с уплощенной вершиной.

Вычисляя дисперсию координаты, получаем формулу

$$D_x(0) = D_0 + b^2 [1 + \exp(-b^2/2D_0)]^{-1}, \quad (1.92)$$

из которой видно, что параметр D_0 имеет смысл начальной дисперсии лишь в предельном случае $b = 0$. При малых расстояниях между центрами гауссианов $b \ll \sqrt{D_0}$ дисперсия приближенно равна $D_0 + b^2/2$, а в другом предельном случае удаленных центров $b \gg \sqrt{D_0}$ она состоит из основного вклада b^2 , отвечающего двум одинаковым узким уединенным распределениям, и добавки D_0 от уширения каждого из них: $D_x(0) \approx b^2 + D_0$.

Переходя к импульсному представлению для начальной волновой функции (1.91), выводим формулу для плотности вероятности (удобнее пользоваться представлением волнового числа $k = p/\hbar$)

$$\rho(k) = 8A^2 D_0 \exp(-2D_0 k^2) \cos^2 kb, \quad (1.93)$$

которая вследствие закона сохранения импульса не изменяется со временем. Несложный расчет дает дисперсию волнового числа

$$D_k = (4D_0)^{-1} \{ 1 - b^2 D_0^{-1} [1 + \exp(b^2/2D_0)]^{-1} \}, \quad (1.94)$$

которая при всех отношениях b^2/D_0 мало отличается от дисперсии для отдельного гауссиана $(4D_0)^{-1}$.

В качестве упражнения убедиться, что в соответствии с соотношением неопределенностей $4D_x(0)D_k \geq 1$. Зная дисперсию x в начальный момент времени и дисперсию k и учитывая, что в силу вещественности начальной волновой функции (1.91) $D_{xk}^0 = 0$, находим согласно (1.46) дисперсию координат в любой момент времени

$$D_x(t) = D_x(0) + \hbar^2 t^2 D_k / m^2.$$

Таким образом, не изучая еще деталей расплывания, можно установить, что растущий со временем член в дисперсии слабо зависит от b

и определяется в основном величиной D_0 . Поскольку, однако, первый член весьма чувствителен к отношению этих параметров, приходим к следующему результату для времени расплывания: при $b \ll \sqrt{D_0}$ оно практически не отличается от такового для отдельного гауссиана $\tau = 2mD_0/\hbar$, определяемого по увеличению дисперсии вдвое, а при $b \gg \sqrt{D_0}$ оно сводится к выражению $\tau = 2mb\sqrt{D_0}/\hbar$.

Перейдем теперь к более детальному исследованию изменения пакета со временем. Вследствие линейности канонического преобразования движения каждый из гауссианов в сумме (1.91) изменяется по уже известному закону (1.82) для отдельного гауссиана (сдвиг $\pm b$ центра гауссиана не влияет на вид преобразования). Этот прием позволяет сразу же написать ответ для волновой функции в любой момент времени t :

$$\Psi(x, t) = A\gamma^{-1/2}(t) \left[e^{-\frac{(x-b)^2}{4D_0\gamma(t)}} + e^{-\frac{(x+b)^2}{4D_0\gamma(t)}} \right], \quad (1.95)$$

где $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$, а также для распределения вероятностей координат:

$$R(X, T) = \frac{C}{\sqrt{1+T^2}} \exp \left[-\frac{B^2 + X^2}{2(1+T^2)} \right] \left(\operatorname{ch} \frac{BX}{1+T^2} + \cos \frac{BTX}{1+T^2} \right), \quad (1.96)$$

где введены безразмерные величины $R = \sqrt{D_0} \rho$; $C = 2A^2 \sqrt{D_0}$; $X = x/\sqrt{D_0}$; $B = b/\sqrt{D_0}$; $T = \hbar t/2mD_0$.

Классификацию различных начальных профилей пакета можно уточнить, рассматривая характер изменения плотности вероятности координат при $X = 0$, которая пропорциональна величине

$$Y(T) = \frac{R(0, T)}{R(0, 0)} = \frac{1}{\sqrt{1+T^2}} \exp \frac{B^2 T^2}{2(1+T^2)}.$$

Исследуя поведение этой функции, приходим к выводу, что в случае $B \leq 1$ происходит монотонное убывание $R(0, T)$, а в случае $B > 1$ изменение $R(0, T)$ оказывается немонотонным. Так, при малых T в первом приближении

$$\begin{aligned} Y(T) &= 1 + (B^2 - 1)T^2/2, \quad B \neq 1; \\ Y(T) &= 1 - T^4/4, \quad B = 1. \end{aligned}$$

Если $B > 1$, то плотность вероятности в центре пакета достигает максимума: $R_{\max}(0, T)/R(0, 0) = B^{-1} \exp [(B^2 - 1)/2] > 1$ при $T_{\max} = \sqrt{B^2 - 1}$, и только затем уже наступает собственно стадия расплывания — монотонное убывание $R(0, T)$. Это явление объясняется тем, что на первом этапе увеличение ширины каждого из достаточно удаленных гауссианов в пакете (1.95) приводит к временному возрастанию плотности вероятности координат между ними.

Таким образом, у пакетов с $B = b/\sqrt{D_0} > 1$ четко прослеживается стадия перестройки, когда их части сливаются в единое целое. Только после этого начинается расплывание. Хотя дисперсия координат при

этом монотонно увеличивается, однако на первой стадии добавка к начальной дисперсии еще мала.

Если пакет при $B > 1$ имеет одногорбый вид, то это еще не означает, что кинематически он не подлежит перестройке. На первом этапе может проявиться его скрытая двойная структура. Аналитически пакет во всех случаях складывается из двух гауссианов, но, как было показано, геометрически он может иметь и одногорбый вид. Кинематический же эффект монотонного расплывания зависит от соотношения параметров b и D_0 . Эта ситуация приводит к большому разнообразию профилей пакетов в процессе их расплывания, особенно при начальной двугорбой форме.

Далее основное внимание будет уделено именно случаю $B > \sqrt{2}$, когда поведение плотности вероятности координат в центре пакета носит немонотонный характер, а пакет имеет явный двугорбый вид. Начальную стадию в этом случае можно разбить на следующие этапы. На первом этапе начинается зарастание впадины между горбами. При $T_1 = \sqrt{(B^2 - 2)/(B^2 + 2)}$ наблюдается уплощение впадины (четверной минимум). На втором этапе на месте впадины появляется третий горб. При $T_2 \approx \sqrt{B^2/2,8 - 1}$ ($B^2 \gg 1$) он выравнивается по высоте с двумя остальными. На третьем этапе средний горб растет далее. При $T_3 = \sqrt{B^2 - 1}$ он достигает максимальной высоты. После этого наступает уже вторая, конечная стадия монотонного убывания среднего горба с постепенным размытием боковых горбов, как бы сползающих по его склону — стадия собственно расплывания пакета, принявшего стандартный одногорбый профиль с остатками начальных горбов-сателлитов.

Переходя к вопросам машинного моделирования, заметим, что формула для плотности вероятности координат (1.96) полностью готова для составления программы численного эксперимента с демонстрацией основных свойств расплывания двойного гауссиана. Поскольку она является точной и выражается через простые функции, есть возможность и строить графики с помощью простого вычислительного устройства, и показывать движущиеся картины на экране дисплея, что крайне желательно. Речь идет о серии демонстраций при различных значениях параметра B . Для каждого фиксированного B наблюдаем детали основных стадий процесса. В связи с этим повторим, каким значениям этого параметра отвечают наиболее интересные картины расплывания. В случае $B < 1$ начальный пакет имеет одногорбый профиль, а расплывание происходит монотонно. В случае $B = 1$ начальный профиль также одногорбый, а расплывание идет с уменьшением высоты горба вначале в несколько замедленном темпе. В случае $1 < B < \sqrt{2}$ по-прежнему есть только один горб, но его высота на начальном этапе увеличивается. В случае $B = \sqrt{2}$ все еще имеется один горб, но с уплощенной вершиной (четверным максимумом), которая затем превращается в обычную (с квадратичным максимумом) в процессе временного увеличения высоты горба. Наконец, в случае $B > \sqrt{2}$ процесс расплывания сопровождается наиболее интересными

явлениями в связи с перестройкой пакета, имеющего в начале наблюдения двугорбый профиль. В частности, на рис. 3 показаны характерные профили пакета для процесса расплывания при $B = \sqrt{2\pi}$ (a — начальный момент времени $T_0 = 0$, b — момент уплощения впадины $T_1 = 0,719$, $в$ — момент формирования трех горбов одинаковой высоты $T_2 = 1,06$ и $г$ — момент максимальной высоты центрального горба $T_3 = 2,30$).

В процессе демонстрации изображений на экране (а также при нанесении графиков ручным способом или с помощью графопостроите-

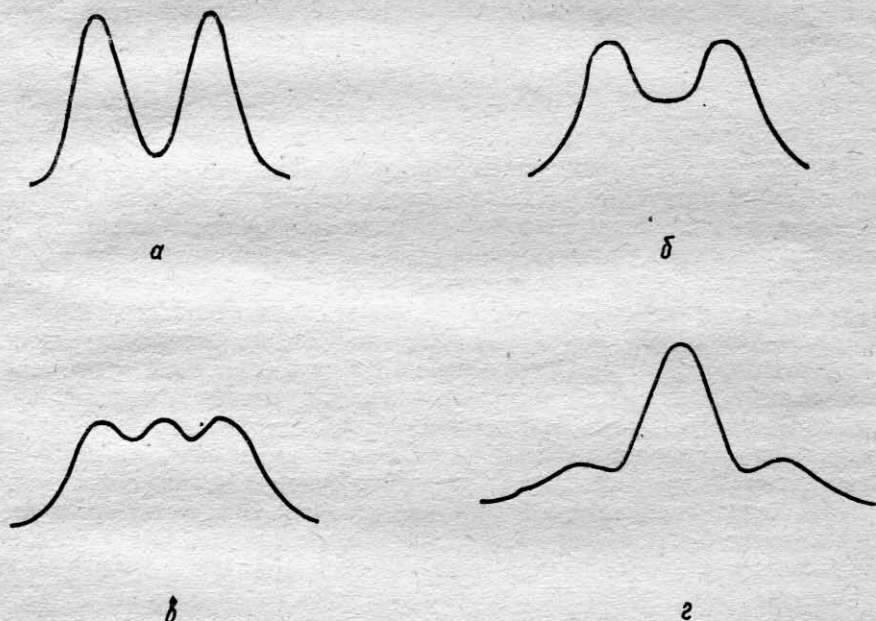


Рис. 3. Расплывание двойного гауссиана

ля) нормировочная постоянная C в формуле (1.96) выбирается из соображений удобства. Можно убедиться в сохранении условия нормировки, вычисляя соответствующий интеграл (например, по формуле трапеций) для разных моментов времени, а также численно проверить полученное аналитическое выражение для постоянной C .

Получите на основе импульсного представления (1.93) в соответствии с общей формулой (1.77) аппроксимацию для плотности вероятности координат при больших t и оцените точность приближения численным сравнением с результатами точной формулы (1.96).

Расплывание двойного гауссиана сопровождается некоторым взаимодействием его частей. При этом большое значение имеют фазовые соотношения. Исследуйте процесс расплывания пакета, состоящего в начальный момент времени из разности двух гауссианов. Этот пример должен наглядно показать роль разности фаз (гауссианы в противофазе).

В заключение этого параграфа сделаем одно общее замечание, относящееся ко всем применениям численных методов в книге.

Точное решение, получаемое в виде простой явной аналитической формулы, играет важную роль в численных экспериментах: оно служит тестовым примером для тех случаев, когда то же явление изучается при других условиях с помощью квадратурных формул. Осуществляется как грубая, качественная проверка, так и тонкая, количественная, устанавливается число правильных знаков в ответе и т. п.

В свою очередь, проверенные квадратурные формулы вместе с возможными явными аналитическими выражениями служат тестовыми примерами при описании явлений на основе метода разностных схем.

1.8. СТОЛКНОВЕНИЕ ДВУХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

Рассмотренная в предыдущем параграфе тема двойного волнового пакета имеет интересное продолжение в виде задачи о встрече двух движущихся пакетов, т. е. об их столкновении. Отличие от предыдущего случая будет состоять, во-первых, в предположении начальной уединенности пакетов, а во-вторых, — и это будет технически основным новым элементом, — в учете распространения волновых образований, перемещения пакетов как целого. Эффект же распыливания отходит на второй план. Обычно можно выбрать параметры задачи таким образом, чтобы за время столкновения пакеты распыливались слабо. Разумеется, речь фактически идет об одном пакете, разбитом вначале на две локализованные части. Задача имеет еще один важный аспект: ее можно сопоставить с задачей о взаимодействии солитонов, которая будет изложена во второй части книги. В качестве конкретного примера будут изучаться гауссовы пакеты, для которых решение записывается в простой явной аналитической форме.

Прежде всего исследуем распространение отдельного гауссиана в свободном движении. В отличие от рассмотренного ранее случая, теперь начальный пакет будет обладать средней скоростью (импульсом, волновым числом). Такой выбор начальных условий будет встречаться также и в задачах нестационарной теории рассеяния.

Пусть в начальный момент времени волновая функция в координатном пространстве имеет следующий вид:

$$\Psi(x, 0) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp[ik_0(x - b) - (x - b)^2/4D_0], \quad (1.97)$$

где параметры имеют простой физический смысл: b — положение центра пакета, т. е. $\langle x \rangle_0 = b$; D_0 — дисперсия координат; k_0 — среднее значение волнового числа согласно (1.56). Если перейти к представлению волнового числа, где

$$\Psi(k, 0) = (2D_0/\pi)^{1/4} \exp[-ikb - D_0(k - k_0)^2], \quad (1.98)$$

то в соответствии с (1.89) в любой момент времени координатная волновая функция определяется интегральным преобразованием

$$\Psi(x, t) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-itE(k)/\hbar + ikx] \Psi(k, 0) dk. \quad (1.99)$$

Учитывая, что пока ограничиваемся обычным квадратичным законом дисперсии $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$, вычисляем стандартный интеграл и приходим к следующему результату:

$$\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0/\hbar + ik_0(x-b) - (x-b-v_0t)^2/4D_0\gamma(t)], \quad (1.100)$$

где $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$, а также введено краткое обозначение $E_0 = E(k_0)$. Величина v_0 имеет смысл средней скорости. В соответствии с общими законами свободного движения $\langle x \rangle = b + v_0t$, т. е. центр пакета движется равномерно, по классическому закону. Если не выписывать несущественный для дальнейшего вклад за счет множителя $\gamma^{-1/2}(t)$ в (1.100), то фаза волновой функции

$$\Phi(x, t) = -tE_0/\hbar + k_0(x-b) + \hbar t(x-b-v_0t)^2/8mD_0D(t), \quad (1.101)$$

где

$$D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0 \quad (1.102)$$

есть дисперсия координаты в соответствии с общими закономерностями (1.46) при $D_{xk}^0 = 0$. Как видим, введение величины k_0 , приводит к существенному преобразованию фазы по сравнению с (1.83), что скажется на взаимодействии гауссианов, но не влияет на дисперсии координаты и волнового числа и на их корреляцию, которая согласно (1.57) равна

$$D_{xk}(t) = \hbar t / 4mD_0. \quad (1.103)$$

Амплитуда волновой функции определяет плотность вероятности координат

$$\rho(x, t) = [2\pi D(t)]^{-1/2} \exp[-(x-b-v_0t)^2/2D(t)]. \quad (1.104)$$

Теперь можно перейти к задаче о столкновении двух гауссианов, каждый из которых имеет вид (1.100) с соответствующими значениями параметров. Для простоты считаем, что дисперсии у них одинаковы, абсолютные величины скоростей также равны, а центры расположены симметрично относительно начала координат, чего всегда можно достичь его выбором. Итак, начальная волновая функция равна сумме гауссианов вида

$$\Psi(x, 0) = A \{ \exp[ik_0(x+b) - (x+b)^2/4D_0] + \exp[-ik_0(x-b) - (x-b)^2/4D_0] \}. \quad (1.105)$$

Первый член описывает пакет, локализованный вблизи точки $-b$ (считаем, что $b > 0$) и движущийся направо, а второй локализован вблизи точки b и движется налево. Нормировочная постоянная A , как нетрудно видеть, определяется выражением

$$A^{-2} = 2(2\pi D_0)^{1/2} [1 + \exp(-b^2/2D_0 - 2k_0^2 D_0)]. \quad (1.106)$$

Снова применяем способ почленного преобразования каждого из гауссианов в (1.105), уже использованный в предыдущем параграфе.

В соответствии с (1.100) это дает для волновой функции в любой момент времени формулу

$$\Psi(x, t) = A\gamma^{-1/2}(t) \exp(-itE_0/\hbar) \times \\ \times \{ \exp[ik_0(x+b) - (x+b-v_0t)^2/4D_0\gamma(t)] + \\ + \exp[-ik_0(x-b) - (x-b+v_0t)^2/4D_0\gamma(t)] \}, \quad (1.107)$$

где $v_0 = \hbar k_0/m > 0$. Отсюда вытекает выражение для распределения вероятностей координат

$$R(X, T) = \frac{C}{\sqrt{1+T^2}} e^{-\frac{(B-2KT)^2+X^2}{2(1+T^2)}} \times \\ \times \left[\operatorname{ch} \frac{(B-2KT)X}{1+T^2} + \cos \frac{(2K+BT)X}{1+T^2} \right], \quad (1.108)$$

подготовленное к численному моделированию введением безразмерных величин $R = \sqrt{D_0}\rho$; $C = 2A^2\sqrt{D_0}$; $X = x/\sqrt{D_0}$; $B = b/\sqrt{D_0}$; $K = k_0\sqrt{D_0}$; $T = \hbar t/2mD_0$ и обобщающее полученный ранее результат (1.96) на случай движущихся друг к другу гауссианов ($K \neq 0$).

Для наблюдения за столкновением гауссианов прежде всего нужно выбрать подходящие входные параметры. Чтобы исходные пакеты были разъединены, необходимо взять $B \gg 1$, а чтобы их расплывание было малым, нужно выбирать значения $K > B$. К концу наблюдения за процессом столкновений, когда пакеты поменяются местами, каждый из них пройдет расстояние $2B$ со скоростью $2K$, так что время процесса равно B/K , а время расплывания $T = 1$. Например, выбирая $B = 10$, $K = 50$, имеем время процесса $T = 0,2$. При этом уменьшение высоты пакетов, которая пропорциональна $(1+T^2)^{-1/2}$, за счет расплывания составит лишь 2 %. На старте расстояние между такими пакетами $2B = 20$, а полуширина каждого примерно равна 2 (в указанном выше масштабе).

Как обычно, машинный эксперимент осуществляется построением сменяющих друг друга картин. Стартовое положение гауссианов можно выбрать и за пределами выводимого на экран интервала. Тогда будут лучше видны детали самого столкновения, а пакеты будут постепенно входить в кадр с разных сторон. На первой стадии идет сближение первоначально уединенных гауссианов. Каждый из них движется равномерно, а очень слабым эффектом расплывания можно пренебречь (он практически не будет замечен на экране). Затем наступает вторая стадия, когда пакеты начинают перекрываться. Вначале вступают в контакт их хвосты, а потом и основные части. Взаимодействие происходит весьма интенсивно. Пакеты приобретают сильно изрезанную форму, появляется много осцилляций. Процесс слияния достигает апогея при $T = B/2K$, когда центр каждого из пакетов достиг бы середины расстояния между их начальными положениями при независимом распространении. В этот момент согласно (1.108) распределение вероятностей координат

$$R = \frac{2C}{\sqrt{1+T^2}} e^{-\frac{X^2}{2(1+T^2)}} \cos^2 KX. \quad (1.109)$$

Общий профиль отвечает модулированному гауссиану. Образуются стоячие волны, длина которых равна π/K . Значение плотности вероятности координат в максимуме (центральный всплеск) вдвое превышает наибольшее ее значение для отдельного гауссиана. Сопоставьте эти аналитические результаты с наблюдаемыми на экране (или на соответствующем графике).

Последующие картины движения повторяют в обратном порядке то, что происходило до слияния пакетов. Гауссианы вновь разделяются, принимая начальную форму, и расходятся. Никаких следов не остается от столь бурного взаимодействия. Это особенно ясно видно из формулы (1.107), которая наглядно показывает независимость удаленных пакетов как в начале процесса столкновения, так и в конце его. Каждый из вкладов в этих предельных случаях никак не связан с другим (практически нет перекрытия, хотя теоретически экспоненциально малое наложение хвостов, конечно, есть всегда). Формула же (1.108) удобна для описания стадии сближения пакетов и их непосредственного взаимодействия, слияния, интерференции.

Возможны различные варианты рассмотренной задачи о столкновении двух волновых пакетов. В качестве упражнения исследуйте взаимодействие двух гауссианов с разными параметрами. В частности, изучите случай, когда начальные гауссианы находятся в противофазе: в формуле (1.105) стоит не сумма, а разность. Рассмотрите столкновение гауссианов, которые догоняют друг друга, подобно солитонам уравнения Кортевега-де Фриза [35].

Попытаемся сопоставить столкновение гауссианов с аналогичным явлением для солитонов уравнения КДФ. Как уже отмечалось, после столкновения гауссианов никаких следов взаимодействия не остается, тогда как солитоны хранят память о столкновении в форме так называемого сдвига фаз. В результате столкновения быстрый солитон движется с опережением, а медленный с опозданием по сравнению со свободным распространением солитонов без взаимодействия.

Далее, у гауссианов наиболее интересной (как, впрочем, и у солитонов) является стадия непосредственного контакта пакетов, слияния, когда образуется стоячая волна и возникают интерференционные явления. Солитоны же сливаются плавно, без осцилляций. Добавим, что солитоны при слиянии имеют различные профили в зависимости от отношения их основных параметров — скоростей (одногогорбый волновой импульс с обычной или уплощенной вершиной, а также двугорбые формы [35]).

В случае солитонов речь идет о материальном волновом поле, тогда как гауссианы отвечают полю вероятностей. В связи с этим солитоны могут рассматриваться с большим основанием как отдельные физические объекты, тогда как гауссианы фактически образуют единое целое — волновую функцию одной частицы (описывая чисто квантовый эффект локализации одной частицы сразу в двух удаленных друг от друга областях). Различия в картине слияния связаны с комплексностью волновой функции в квантовом случае, приводящей к интерференционным явлениям, и вещественностью поля в случае солитонов уравнения КДФ. Еще одна деталь: гауссианы могут быть одинако-

выми, а солитоны нет. Гауссианы могут двигаться в разные стороны, навстречу друг другу, вдогонку, а два солитона — только в одну сторону (еще раз подчеркнем, что сравнение идет с наиболее простым видом солитонов уравнения КДФ [35—39]). Кроме того, скорость движения солитонов определяется их размерами, а для гауссианов такой связи нет. Наконец, солитоны строго сохраняют форму, тогда как гауссианы расплываются, оставаясь, впрочем, гауссианами.

В заключение, как обычно, несколько упражнений.

Исследуйте процесс столкновения пакетов в случае четверного закона дисперсии $E(k) = \beta k^4$.

Рассмотрите столкновение двух волновых пакетов какой-либо иной формы (примеры собраны в параграфе 1.6).

В рассмотренной задаче о столкновении двух гауссианов мы имели дело со случаем явного сужения общего, единого пакета на первой стадии процесса при сближении гауссианов. Вычислите соответствующие дисперсии и корреляцию координаты и скорости. Покажите, что они изменяются со временем по обычным для свободного движения правилам (1.46). Конечным результатом является, разумеется, эффект уширения при расхождении частей — гауссианов — на последней стадии процесса.

Завершая этот параграф, сделаем одно общее замечание о роли точных решений, особенно выраженных простыми явными аналитическими формулами. Такие решения позволяют сосредоточить внимание на физической стороне явления, а не на математических вопросах, связанных с уточнением области применимости аппроксимаций и т. п.

1.9. СТОЛКНОВЕНИЕ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА СО СТЕНКОЙ

Переходя к вопросам нестационарной теории рассеяния, рассмотрим вначале случай, занимающий промежуточное положение между свободным движением пакетов и рассеянием на локализованном потенциальном поле.

Если до сих пор при изучении распространения пакетов никаких ограничений не предполагалось, то теперь поставим задачу о движении частицы в полуограниченном пространстве (для определенности $x < 0$).

Считаем, что в начальный момент времени волновая функция частицы имеет вид гауссиана

$$\Psi(x, 0) = A \exp[ik_0(x + b) - (x + b)^2/4D_0], \quad x < 0; \quad \Psi(x, 0) = 0, \quad x > 0, \quad (1.110)$$

расположенного вблизи точки $-b$, удаленной от границы движения, т. е. выполняется неравенство $b^2 \gg D_0$ (в теории появляется большой параметр).

Основываясь на методе функций распространения, воспользуемся соответствующим выражением, полученным ранее и приведенным в п. 4

прил. 1. Тогда для любого момента времени волновая функция определяется интегральной формулой

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^0 \left[e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar t}} - e^{\frac{im(x+x_0)^2}{2\hbar t}} \right] \Psi(x_0, 0) dx_0, \quad x < 0; \quad (1.111)$$

$$\Psi(x, t) = 0, \quad x > 0.$$

Отличие от рассмотренных ранее аналогичных соотношений для неограниченного движения состоит, во-первых, в появлении разности пропагаторных экспонент, а во-вторых, интеграл берется только по полуоси $x < 0$. Здесь полезен прием, который часто будет применяться в теории рассеяния. Прибавим и вычтем интеграл по дополнительной полуоси $x > 0$. Тогда полученный интеграл по всей оси вычисляется точно (при $x > 0$ фигурирует то же выражение для $\Psi(x, 0)$, что и при $x < 0$), а добавку рассмотрим отдельно. Отбрасывая несущественный множитель перед интегралом в (1.111), оцениваем абсолютную величину добавочного интеграла:

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^{\infty} \left[e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar t}} - e^{\frac{im(x+x_0)^2}{2\hbar t}} \right] \Psi(x_0, 0) dx_0 \right| \leq \\ & \leq 2 \int_0^{\infty} |\Psi(x_0, 0)| dx_0 = 2A \int_0^{\infty} \exp[-(x_0 + b)^2/4D_0] dx_0 \sim \exp(-b^2/4D_0). \end{aligned}$$

В результате для $x < 0$ имеем

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = A\gamma^{-1/2}(t) \{ & \exp[ik_0(x+b) - (x+b-v_0t)^2/4D_0\gamma(t)] - \\ & - \exp[-ik_0(x-b) - (x-b+v_0t)^2/4D_0\gamma(t)] + O[\exp(-b^2/4D_0)] \}. \end{aligned} \quad (1.112)$$

где, как и ранее в аналогичных формулах, $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$ и $v_0 = \hbar k_0/m > 0$.

Фактическую точность аппроксимации можно проиллюстрировать, возвратившись к исходному моменту времени $t = 0$. Из формулы (1.112) вытекает, что для $x < 0$

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) \approx A \{ & \exp[ik_0(x+b) - (x+b)^2/4D_0] - \\ & - \exp[-ik_0(x-b) - (x-b)^2/4D_0] \}. \end{aligned}$$

Сравнение с исходным выражением (1.110) показывает, что добавка в области $x \approx -b$ оказывается порядка $\exp(-b^2/4D_0)$, т. е. гораздо меньше, чем предполагалось при оценке.

Что касается нормировочной постоянной A в (1.110), то она также незначительно отличается от соответствующей величины для уединенного гауссиана:

$$A = (2\pi D_0)^{-1/4} \{1 + O[\exp(-b^2/2D_0)]\}.$$

В качестве упражнения найдите явный вид поправки в первом приближении.

Результат (1.112) имеет простой физический смысл. Первый член описывает ту часть пакета, которая движется вправо, т. е. падающие волны. На начальной стадии движения второй член экспоненциально мал для всех $x < 0$. На конечной стадии (после взаимодействия со стенкой) наоборот: главным является второй член, описывающий часть пакета, движущуюся влево, т. е. отраженные волны, а центр первого вклада уходит за пределы области движения, так что его величина становится экспоненциально малой. На стадии же непосредственного контакта со стенкой, когда $t \approx b/v_0$, оба члена в (1.112) дают вклад одного порядка, возникает интерференция между падающими и отраженными волнами, формируется стоячая волна.

В выражении (1.112) нетрудно усмотреть аналогию со столкновением двух гауссианов, находящихся в противофазе (см. предыдущий параграф), однако один из них почти все время находится в области $x > 0$, являясь как бы мнимым перевернутым изображением другого гауссиана. В момент столкновения со стенкой они обмениваются ролями. Различие физических ситуаций находит выражение в нормировочных коэффициентах A : сравните с приведенным в формуле (1.106).

Для распределения вероятностей координат, наиболее наглядно показывающего существо процесса, получаем

$$R(X, T) = \frac{C}{\sqrt{1+T^2}} \times \\ \times e^{-\frac{(B-2KT)^2+X^2}{2(1+T^2)}} \left[\operatorname{ch} \frac{(B-2KT)X}{1+T^2} - \cos \frac{(2K+BT)X}{1+T^2} \right], \quad (1.113)$$

где безразмерные величины вводятся так же, как и при выводе формулы (1.108), и позволяют сразу же перейти к машинному моделированию. К моменту максимального сближения со стенкой $T=B/2K$ вероятности координат распределены по закону, подобному (1.109):

$$R = 2C(1+T^2)^{-1/2} \exp[-X^2/2(1+T^2)] \sin^2 KX,$$

что дает возможность представить себе некоторые детали взаимодействия, однако наиболее полную картину обеспечивает, конечно, только численный эксперимент.

Здесь имеются две возможности. Первая состоит в том, что на основе приближенной аналитической формулы (1.113) составляется программа, рассчитанная на вывод изображений на экран дисплея. Формула настолько проста, что даже медленно работающее вычислительное устройство обеспечит быструю смену картин — движущееся изображение пакета, который будет попадать в кадр слева, тогда как стенка располагается вблизи правой границы кадра.

Можно увидеть во всех подробностях, как постепенно при подходе пакета к стенке возникают искажения правой хвостовой части. Затем отраженных волн становится все больше, и интерференция охватывает уже основную часть пакета. Постепенно осцилляции опадают, вновь вырисовывается исходная гауссова форма. Вдребезги разбившись о стенку, гауссиан выходит целехонек, словно с ним ничего и не проис-

ходило. Только изменилось направление движения да слегка располз он и стал немного ниже ростом за счет эффекта расплывания.

Варьируйте начальные параметры. В вашем распоряжении — расстояние до стенки на старте и скорость (B и K). Старайтесь объяснить, почему получаются те или иные картины движения при различных начальных условиях. Следите, чтобы расчетных точек было достаточно много (не менее десяти на интервале длины волны π/K).

Для первого просмотра нужно выбрать медленную смену кадров, чтобы хорошо уловить все детали взаимодействия со стенкой, а затем желательно прокрутить процесс еще раз ускоренно, чтобы охватить явление в целом.

Зрелище производит сильное впечатление даже при грубой передаче отдельных «кадров» на графиках. Что уж и говорить о движущихся изображениях.

Вторая возможность заключается в численном решении задачи на основе расчета интеграла в формуле для $R(X, T)$, вытекающей из (1.111). Преобразуйте это выражение к введенным выше безразмерным переменным. Используя квадратурную формулу (достаточно формулы трапеций), составьте программу расчетов с целью демонстрации движущихся изображений, а также для проверки точности приближенной аналитической формулы (1.113).

Процесс столкновения гауссиана со стенкой дает представление о более сложном взаимодействии частиц, описываемом в задачах рассеяния на локализованных потенциальных полях, в условиях сильного отражения.

В качестве заключительного упражнения рассмотрите столкновение со стенкой пакетов иной формы на основе численного расчета по формуле (1.111).

1.10. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ ЧАСТИЦ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Кинетику процессов рассеяния начнем изучать с одномерной задачи в потенциальном поле, моделируемом дельта-потенциалом (случай предельной локализации, предельного короткодействия). Физический смысл задачи заключается в описании прохождения частиц сквозь плоскостную среду с тонкой прослойкой.

Теория нестационарного рассеяния на первых порах будет основываться на результатах стандартной стационарной теории, которую будем считать известной.

Здесь и в дальнейшем для определенности будем считать, что падающие волны движутся слева на рассеивающую область (в положительном направлении оси x). Решение стационарного уравнения Шредингера, отвечающее такой постановке задачи, с локализованным вблизи начала координат потенциалом можно записать асимптотически в виде

$$\begin{aligned}\Psi_k^{(+)}(x) &= (2\pi)^{-1/2} [\exp(ikx) + B(k) \exp(-ikx)], \quad x \rightarrow -\infty; \\ \Psi_k^{(+)}(x) &= (2\pi)^{-1/2} C(k) \exp(ikx), \quad x \rightarrow +\infty; \quad \hbar k = \sqrt{2mE} > 0. \quad (1.114)\end{aligned}$$

Вдали от рассеивателя слева имеются падающие и отраженные волны, а справа — прошедшие. Амплитуда отраженной волны $B(k)$ определяет коэффициент отражения $R(k) = |B(k)|^2$, а амплитуда прошедшей — коэффициент прохождения $T(k) = |C(k)|^2$. В случае вещественного потенциального поля уравнение непрерывности приводит к равенству $R + T = 1$.

Результаты стационарной теории рассеяния в дельта-поле с потенциалом

$$U(x) = u\delta(x) \quad (1.115)$$

хорошо известны. О них можно прочитать во многих руководствах по квантовой механике, однако советуем получить все ответы самостоятельно. Это позволит освежить в памяти технические детали стационарной теории рассеяния и понять особенности развиваемого нестационарного подхода. В частности, амплитуды отражения и прохождения в δ -поле (1.115) равны

$$B(k) = \kappa/(ik - \kappa); \quad C(k) = ik/(ik - \kappa), \quad (1.116)$$

где $\kappa = mu/\hbar^2$. Вид этих формул не зависит от знака u , однако, если в случае потенциала отталкивания ($u > 0$) имеется только непрерывный энергетический спектр с полюсами амплитуд (1.116) при $k = -i\kappa$, то потенциал притяжения приводит еще и к связанному состоянию с энергией и волновой функцией

$$E_0 = -mu^2/2\hbar^2; \quad \Psi_0(x) = |\kappa|^{1/2} \exp(-|\kappa x|). \quad (1.117)$$

(полнос амплитуд при $k = i|\kappa|$).

В общем случае при $E > 0$ уровни энергии двукратно вырождены, так что функции Ψ_k^+ (вместе с возможными Ψ_0) не образуют полной системы. К ним следует добавить линейно независимые решения, отвечающие падению волн справа на рассеиватель (см. прил. 3):

$$\Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{-1/2} [\exp(-ikx) + \tilde{B}(k) \exp(ikx)], \quad x \rightarrow +\infty; \quad (1.118)$$

$$\Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{1/2} \tilde{C}(k) \exp(-ikx), \quad x \rightarrow -\infty.$$

Можно показать, что амплитуды $\tilde{B}$ и $\tilde{C}$ связаны с B и C в (1.114) соотношениями (см. прил. 3)

$$\tilde{B} = -B^*C/C^*; \quad \tilde{C} = C. \quad (1.119)$$

Отсюда, в частности, вытекает независимость коэффициентов отражения и прохождения от направления падающих волн. В случае δ -потенциала (1.115) явный вид амплитуд (1.116) приводит к тому, что и $\tilde{B} = B$.

Этих сведений пока достаточно для перехода к указанной задаче. Как обычно, нестационарные состояния непрерывного спектра энергии описываем на основе начальных волновых пакетов в форме гауссиана. Во-первых, гауссиан сохраняет свою форму при свободном движении, так что можно в чистом виде проследить за влиянием, оказываемым рассеивателем, а не спонтанными деформациями пакета. Во-вторых, простота аналитического вида гауссиана способствует рас-

чету характерных интегралов при квадратичном законе дисперсии частиц.

Пусть начальная волновая функция

$$\Psi(x, 0) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp [ik_0(x + b) - (x + b)^2/4D_0] \quad (1.120)$$

сосредоточена вблизи точки $-b$, удаленной от области действия рассеивателя настолько, что

$$b/\sqrt{D_0} \gg 1 \quad (1.121)$$

(первый большой параметр теории).

В соответствии с общим результатом метода функций распространения (1.67), опирающимся на известные решения для стационарных состояний, получаем волновую функцию в любой момент времени в виде

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \int_0^\infty \exp [-itE(k)/\hbar] [\Psi_k^{(+)}(x) C_k^{(+)} + \\ & + \Psi_k^{(-)}(x) C_k^{(-)}] dk + \sum_n \exp (-itE_n/\hbar) \Psi_n(x) c_n, \end{aligned} \quad (1.122)$$

где величины c отвечают начальному волновому вектору $\Psi(0)$ в энергетическом представлении, т. е. в базисе непрерывного спектра энергии, асимптотики волновых функций которого определены формулами (1.114) и (1.118), а также возможного дискретного:

$$\begin{aligned} c_k^{(\pm)} = (\Psi_k^{(\pm)}, \Psi(0)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^{(\pm)}(x_0)^* \Psi(x_0, 0) dx_0; \\ c_n = (\Psi_n, \Psi(0)) &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x_0) \Psi(x_0, 0) dx_0. \end{aligned} \quad (1.123)$$

В полях отталкивания (потенциал $U > 0$), а также в специальных случаях потенциалов разного знака (см., например, [25]) связанных состояний нет, так что отсутствуют и суммы в выражении (1.122).

Вычисление величин $c_k^{(\pm)}$ можно провести в общем виде для начальной волновой функции (1.120) в предположении (1.121). Причем последнее требование нужно уточнить: локализация начального пакета должна попадать в область асимптотик (1.114) и (1.118). Тогда можно использовать прием приближенного вычисления интегралов в (1.123), подобный рассмотренному в предыдущем параграфе. Проиллюстрируем это на примере расчета $c_k^{(-)}$.

Считая потенциал локализованным, поместим начало координат на левой границе области его действия, так что левые асимптотики в (1.114) и (1.118) фактически будут справедливы для всех $x < 0$. В таком случае интеграл для $c_k^{(-)}$ в (1.123) разбивается на две части:

$$\begin{aligned} c_k^{(-)} = & (2\pi)^{-1/2} C^*(k) \int_{-\infty}^0 \exp(ikx_0) \Psi(x_0, 0) dx_0 + \\ & + \int_0^\infty \Psi_k^{(-)}(x_0)^* \Psi(x_0, 0) dx_0. \end{aligned}$$

Прибавляем и вычитаем соответствующий дополнительный интеграл:

$$c_k^{(-)} = (2\pi)^{-1/2} C^*(k) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx_0) \Psi(x_0, 0) dx_0 + \\ + \int_0^{\infty} [\Psi_k^{(-)}(x_0)^* - (2\pi)^{-1/2} C^*(k) \exp(ikx_0)] \Psi(x_0, 0) dx_0.$$

Первый интеграл вычисляется точно (фурье-преобразование гауссиана). Учитывая, что при $x > 0$ начальная волновая функция (1.120) экспоненциально мала, оцениваем второй интеграл и приходим к окончательному ответу

$$c_k^{(-)} = (2D_0/\pi)^{1/4} C^*(k) \exp[-ikb - D_0(k + k_0)^2] + O[\exp(-b^2/4D_0)]. \quad (1.124)$$

Аналогичным образом поступаем в случае $c_k^{(+)}$, где ответ имеет вид

$$c_k^{(+)} = (2D_0/\pi)^{1/4} \{ \exp[+ikb - D_0(k - k_0)^2] + \\ + B^*(k) \exp[-ikb - D_0(k + k_0)^2] \} + O[\exp(-b^2/4D_0)]. \quad (1.125)$$

Остается вопрос о соответствующих вкладах связанных состояний. Здесь можно пока поступить следующим образом. Во-первых, ограничиться, как уже отмечалось, потенциалами, у которых отсутствуют связанные состояния. Тогда таких вкладов нет вообще. Во-вторых, учитывая, что волновые функции возможных связанных состояний за пределами области действия потенциала экспоненциально убывают: $\Psi_n(x) \sim \exp(-\kappa_n |x|)$, $\hbar\kappa_n = \sqrt{2m|E_n|}$, можно дать грубую оценку c_n из (1.123) $c_n \sim \exp(-\kappa_n b)$ и полагать, что b столь велико, что этим вкладом можно пренебречь (дополнительное уточнение условия (1.121)). Разумеется, можно, вычислив c_n более точно, что предлагаем сделать в качестве упражнения.

Хотя дальнейшее развитие теории возможно и на основе полученных весьма точных выражений (1.124) и (1.125), однако из физических соображений следует считать, что начальная средняя скорость достаточно велика, так что

$$k_0^2 D_0 \gg 1 \quad (1.126)$$

(второй большой параметр теории). Физический смысл этого требования заключается в следующем. Во-первых, для исходного гауссиана дисперсия импульсов связана непосредственно с дисперсией координат точным соотношением $D_{pp}(0) = \hbar^2/4D_0$. В общем случае при произвольной форме начального пакета в силу соотношения неопределенностей $D_{pp}(0) \gtrsim \hbar^2/4D_0$. Условие (1.126) означает, что можно говорить практически об определенном начальном значении импульса и скорости, а также об определенном значении энергии (или волнового числа k), как будет ясно из дальнейшего. Другими словами, средние значения этих величин несут основную информацию об их реализации. В противном случае, при большом статистическом разбросе, средние в слабой степени характеризуют движение, указывая лишь

самые общие тенденции. Во избежание недоразумений, напомним, что в рассматриваемых условиях импульс не сохраняется (скорость пропорциональна импульсу), а интегралом движения является полная энергия E (или волновое число $k = \sqrt{2mE/\hbar}$). Значение же $\hbar k_0$ имеет смысл среднего импульса в начальный момент времени, однако при условии (1.126) распределение волновых чисел (и энергии) будет определяться только c_k^+ из (1.127), т. е. практически будет гауссовым с дисперсией $(4D_0)^{-1}$, так что и волновое число имеет узкое распределение вблизи значения k_0 , и энергия также имеет узкое распределение вблизи значения $E(k_0)$.

Во-вторых, расплывание пакета будет слабым в течение всего времени рассеяния $t = 2b/v_0$ при условии $T^2 = (\hbar t/2mD_0)^2 = (b/D_0 k_0)^2 \ll 1$, что с учетом (1.121) дает требование (1.126).

Итак, при указанных условиях (1.121) и (1.126) начальная волновая функция в представлении стационарных состояний (1.124) и (1.125) имеет с точностью до экспоненциально малых членов (напоминаем, что $k > 0$) практически гауссову форму

$$c_k^{(+)} = (2D_0/\pi)^{1/4} \exp[ikb - D_0(k - k_0)^2] + O[\exp(-k_0^2 D_0)]; \\ c_k^{(-)} = O[\exp(-k_0^2 D_0)]. \quad (1.127)$$

Следовательно, координатная волновая функция в любой момент времени в таком приближении имеет вид

$$\Psi(x, t) = (2D_0/\pi)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] \Psi_k^{(+)}(x) dk. \quad (1.128)$$

Дальнейшие шаги требуют знания явного вида решения стационарной задачи рассеяния $\Psi_k^+(x)$. В частности, в области асимптотических разложений (1.114), а значит, фактически за пределами области действия потенциала, т. е. в общем случае для начальной и конечной стадий процесса рассеяния, получаем согласно (1.114), (1.128) при $x < 0$ (вдали от потенциала)

$$\Psi(x, t) = (D_0/2\pi^3)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] [\exp(ikx) + B(k) \exp(-ikx)] dk. \quad (1.129)$$

Для вклада падающих волн интегрирование с той же точностью можно брать в пределах от $-\infty$ до $+\infty$, так что интеграл сводится к уже неоднократно встречавшемуся стандартному виду (см. также прил. 4). Вычисление вклада отраженных волн оказывается несколько более сложным и основывается на результатах прил. 4. Ответ записывается следующим образом:

$$\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp(-itE_0/\hbar) \times \\ \times \{\gamma^{-1/2}(t) \exp[ik_0(x+b) - (x+b-v_0 t)^2/4D_0\gamma(t)] + \\ + B(k_0) \gamma_B^{-1/2}(t) \exp[-ik_0(x-b) - \\ - (x-b+v_0 t - \varphi_B')^2/4D_0\gamma_B(t)]\}, \quad (1.130)$$

где $\varphi_B(k)$ — фаза амплитуды отражения: $B = |B| \exp i\varphi_B$, а также введены обозначения $\varphi'_B = d\varphi_B(k_0)/dk$; $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$; $\gamma_B(t) = \gamma(t) - i\varphi''_B(k_0)/2D_0$; $E_0 = E(k_0)$.

Первый член описывает свободное распространение гауссова пакета — падающие волны. Второй член имеет аналогичный вид и описывает также гауссов пакет, движущийся навстречу, — отраженные волны. Фактически второй пакет является частью первого на конечной стадии процесса рассеяния и только аналитическая запись сводит их в единую формулу. Действительно, на начальной стадии второй член экспоненциально мал в рассматриваемой области движения, так что им можно пренебречь в пределах принятой точности, а на конечной стадии по той же причине нужно отбрасывать первый член. Более детальное обсуждение результатов пока отложим и обратимся к прошедшим волнам. При $x > 0$ (вдали от области действия поля) на конечной стадии рассеяния из (1.128) и (1.114) имеем

$$\Psi(x, t) = (D_0/2\pi^3)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] C(k) \exp(ikx) dk. \quad (1.131)$$

Приближенный расчет интеграла согласно прил. 4 дает формулу

$$\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp(-itE_0/\hbar) C(k_0) \gamma_C^{-1/2}(t) \times \\ \times \exp[ik_0(x + b) - (x + b - v_0 t + \varphi'_C)^2/4D_0\gamma_C(t)], \quad (1.132)$$

где $\varphi_C(k)$ — фаза амплитуды прохождения: $C = |C| \exp i\varphi_C$, а $\varphi'_C = d\varphi_C(k_0)/dk$ и $\gamma_C(t) = \gamma(t) - i\varphi''_C(k_0)/2D_0$.

Этот гауссов пакет также является частью падающих волн, но на конечной стадии рассеяния. Он описывает прошедшие волны.

Сразу же подчеркнем, что при вычислении интегралов предполагалось, что модули амплитуд отражения и прохождения очень слабо зависят от k вблизи k_0 в интервале порядка $D_0^{-1/2}$ (основном интервале интегрирования по k), а фазы изменяются плавно. Учет же изменения модулей амплитуд дает сдвиг средней точки (см. прил. 4), что приводит к отличию скоростей движения отраженных и прошедших пакетов от скорости падающего. В качестве упражнения покажите, что этот обычно слабый эффект дает для отраженных и падающих волн скорости соответственно

$$v_B = v_0 + \hbar |B'|/2mD_0 |B|; \quad v_C = v_0 + \hbar |C'|/2mD_0 |C|. \quad (1.133)$$

В особых случаях (резонансное рассеяние) фазы могут сильно изменяться в основном интегральном интервале. Тогда нужно вести расчет более корректно. Резонансное рассеяние будет рассмотрено позднее.

Перейдем к обсуждению результатов. Прежде всего сопоставим выводы нестационарной теории с результатами стационарной. По-

следняя дает только интегральные характеристики рассеяния, устанавливая зависимость от имеющей строго определенное значение энергии (или волнового числа) коэффициентов отражения $R(k) = |B(k)|^2$ и прохождения $T(k) = |C(k)|^2$. Фазы же комплексных амплитуд отражения $B(k)$ и прохождения $C(k)$ не фигурируют вовсе. Предсказания нестационарной теории гораздо богаче физическими эффектами.

Во-первых, интегральную, глобальную картину рассеяния стационарной теории уточняет локальное координатное описание в виде пакетного движения.

Во-вторых, если проинтегрировать по соответствующим областям координат квадраты модулей волновых пакетов в (1.130) и (1.132), то в начале процесса получим единичную нормировку для падающего пакета. На конечной стадии соответствующие интегралы для отраженных волн дадут $|B(k_0)|^2$, а для прошедших $|C(k_0)|^2$, так что коэффициент отражения (прохождения) получает трактовку вероятности локализации частицы на конечной стадии процесса слева (справа) от рассеивателя. Условие же нормировки обеспечивается стационарным соотношением $R + T = 1$.

В-третьих, падающие, отраженные и прошедшие волны имеют устойчивую гауссову форму.

В-четвертых, распыление пакетов происходит по законам свободного движения, установленным в 1.6, с небольшими поправками у отраженных и прошедших пакетов, связанными с вторыми производными от фаз. Так, дисперсии координат в каждом из пакетов равны $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$ (падающие волны); $D_B(t) = D_0 + (\hbar t / m - \varphi_B'')^2 / 4D_0$ (отраженные волны); $D_C(t) = D_0 + (\hbar t / m - \varphi_C'')^2 / 4D_0$ (прошедшие волны). В-пятых, если стационарная теория не дает развития процесса во времени, поскольку энергия имеет строго определенное значение, то при нестационарном описании процесс разворачивается во времени, наблюдаются отдельные стадии, включая непосредственный контакт с рассеивателем.

В-шестых, движение пакетов характеризуется скоростями их центров и вне области действия потенциала происходит равномерно. Даже можно предсказать тонкий эффект различия скоростей согласно (1.133).

В-седьмых, первые производные от фаз определяют сдвиги по времени (запаздывание или опережение пакетов по сравнению с их соответствующим свободным движением). Положение центра прошедших волн в (1.132) определяется уравнением $x_C = -b + v_0 t - \varphi_C'$, так что сдвиги по координате и по времени равны

$$\Delta x_C = -\varphi_C'; \quad \Delta t_C = \varphi_C' / v_0. \quad (1.134)$$

Аналогично для отраженных волн в (1.130) $x_B = b - v_0 t + \varphi_B'$, а сдвиги по сравнению со свободным распространением при зеркальном отражении равны

$$\Delta x_B = \varphi_B'; \quad \Delta t_B = -\varphi_B' / v_0. \quad (1.135)$$

Знаки зависят от конкретного вида потенциального поля (либо запаздывание, задержка, либо опережение, убыстрение).

В-восьмых, именно пакетное движение отвечает переходу к классическому описанию.

В-девятых, теория описывает и наиболее яркую стадию рассеяния — непосредственный контакт пакета с рассеивателем. Для этого необходимо знать явный вид волновой функции стационарных состояний в области действия потенциала согласно (1.128).

В-десятых, при резонансном рассеянии, кроме отраженных и прошедших волн, которые из-за особенностей фаз имеют в таком случае более сложную форму, нежели одиночные гауссианы, могут временно появляться и захваченные волны, застрявшие в области действия потенциала.

Еще раз подчеркнем, что полученные результаты — общая формула (1.128) и асимптотики для конечной стадии рассеяния (1.130) и (1.132) — относятся к любым локализованным потенциальным полям (асимптотики получены вне резонанса). Есть, однако, особый случай, когда формулы (1.130) и (1.132) справедливы для всех значений координат и всех моментов времени. Это случай предельно локализованного δ -потенциала.

Начальные условия задачи были сформулированы в координатном пространстве — задавался начальный пакет вида (1.120). Можно формулировать начальные условия иначе — задавать начальную волновую функцию сразу в энергетическом представлении. Причем считать, что задана именно величина c_k^+ (другие же проекции $c_k^{(-)}$ и c_n строго равны нулю). Тогда построение теории начинается с исследования общего решения в соответствии с (1.122)

$$\Psi(x, t) = \int_0^{\infty} \exp[-itE(k)/\hbar] \psi_k^{(+)}(x) c_k^{(+)} dk. \quad (1.136)$$

Отсюда можно получить асимптотики при $t \rightarrow \infty$ на основе стационарных результатов (1.114) с помощью метода стационарной фазы [34] при весьма общих предположениях о $C_k^{(+)}$ либо задавая ее конкретный вид.

В качестве упражнения получите указанные временные асимптотики для начального пакета $c_k^{(+)}$ достаточно общего вида, сосредоточенного вблизи некоторого значения k_0 .

Обратимся теперь к конкретным потенциальным полям. Потенциал, для которого возможно наиболее полное решение, как уже отмечалось, есть δ -потенциал (1.115). При этом точные стационарные волновые функции имеют вид (1.114) не только асимптотически при $x \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow +\infty$), но и для всех $x < 0$ ($x > 0$). Амплитуды отражения и прохождения определяются выражениями (1.116). Модули амплитуд изменяются слабо (оцените все же эффект различия скоростей согласно (1.133)), а фазы

$$\begin{aligned} \varphi_B &= \arctg(k/\kappa) - \pi; \\ \varphi_C &= -\arctg(\kappa/k) \end{aligned} \quad (1.137)$$

с одинаковыми производными $\Phi_B = \Phi_C = \kappa/(\kappa^2 + k_0^2)$ дают слабый сдвиговой эффект координат: $|\Delta x_{B,C}|/V\overline{D_0} \leq (2k_0 V\overline{D_0})^{-1} < 1$ в силу условия (1.126). Таким образом, в поле отталкивания ($\kappa > 0$) возникает небольшая задержка пакетов с $\Delta x_C < 0$ и $\Delta x_B > 0$, а в поле притяжения ($\kappa < 0$) они движутся с опережением: $\Delta x_C > 0$ и $\Delta x_B < 0$. Физический смысл этого результата можно объяснить с классических позиций: в поле отталкивания частица движется медленнее, чем при свободном движении, так как в области действия потенциала ее скорость (кинетическая энергия) становится меньше, тогда как «над ямой» частица проходит быстро, поскольку ее кинетическая энергия становится большой. Это есть лишь наводящие соображения, поскольку в данном случае вообще рассматривается чисто квантовая предельно локализованная модель δ -потенциала.

Оценивая вклад вторых производных от фаз в дисперсию координат, приходим к выводу, что он совершенно незначителен для всех рассматриваемых энергий с (1.126):

$$\Phi_B'' = \Phi_C'' = -2k_0\kappa/(k_0^2 + \kappa^2)^2;$$

$$|\Phi_{B,C}''|/2D_0 = k_0\kappa/(k_0^2 + \kappa^2)^2 D_0 \leq (4k_0^2 D_0)^{-1} \ll 1,$$

так что им будем пренебрегать, как и добавками к скоростям в (1.133), имеющим тот же порядок малости.

Таким образом, при рассеянии гауссиана на δ -потенциале волновые функции согласно (1.130) и (1.132) в указанном приближении равны $\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0/\hbar + ik_0 b] f(x, t)$, где при $x < 0$ $f(x, t) = \exp[ik_0 x - (x + b - v_0 t)^2/4D_0 \gamma(t)] + [\kappa/(ik_0 - \kappa)] \times \exp\{-ik_0 x - [x - b + v_0 t - \kappa/(\kappa^2 + k_0^2)]^2/4D_0 \gamma(t)\}$, а при $x > 0$ $f(x, t) = [ik_0/(ik_0 - \kappa)] \exp\{ik_0 x - [x + b - v_0 t + \kappa/(\kappa^2 + k_0^2)]^2/4D_0 \times \gamma(t)\}$. Отсюда для плотности вероятности координат получаем формулу

$$R(X, T) = \frac{F(X, T)}{\sqrt{2\pi(1 + T^2)}}. \quad (1.138)$$

Если $X < 0$, то $F(X, T) = F_1^2 + F_2^2 - 2F_1 F_2 \cos F_3$, где

$$F_1 = \exp\left[-\frac{(X + B - 2kT)^2}{4(1 + T^2)}\right];$$

$$F_2 = \frac{Q}{\sqrt{Q^2 + K^2}} \exp\left\{-\frac{[X - B + 2KT - Q/(Q^2 + K^2)]^2}{4(1 + T^2)}\right\};$$

$$F_3 = 2KX - \arctg(K/Q) +$$

$$+ \frac{T[B - 2KT + Q/2(Q^2 + K^2)][X - Q/2(Q^2 + K^2)]}{1 + T^2}.$$

Если $X > 0$, то

$$F(X, T) = \frac{K}{\sqrt{Q^2 + K^2}} \exp\left\{-\frac{[X + B - 2KT + Q/(Q^2 + K^2)]^2}{4(1 + T^2)}\right\}.$$

Здесь введены безразмерные величины, большинство из которых уже встречалось в подобных расчетах:

$$R = \sqrt{D_0} \rho; \quad X = x/\sqrt{D_0}; \quad B = b/\sqrt{D_0}; \quad K = k_0 \sqrt{D_0}; \\ Q = \kappa \sqrt{D_0}; \quad T = \hbar t/2mD_0.$$

При $|Q| \rightarrow \infty$ формула переходит в полученное ранее выражение (1.113), описывающее процесс столкновения гауссиана со стенкой. Заметим, что этот предельный переход дает одинаковый результат независимо от знака Q , так что роль непроницаемой стенки играют как очень интенсивный δ -потенциал отталкивания, так и потенциал притяжения.

Формула (1.138) готова для численного моделирования процесса рассеяния гауссиана на δ -потенциале. Явная аналитическая запись, хотя и несколько более громоздкая, чем встречавшиеся ранее, позволяет быстро воспроизводить изображение на экране дисплея. Расчленение формулы (1.138) на фрагменты (F , F_1 , F_2 , F_3) облегчает программирование. Выбирая начальные значения входных параметров B , K , Q , нужно помнить, что явное аналитическое выражение удалось получить благодаря двум предположениям. Первое условие (1.121) сводится к неравенству $B^2 \gg 1$. Оно означает, что в начале расстояние до потенциала превосходит значительно ширину пакета. Смысл второго предположения (1.126) состоит в том, что параметр K также должен быть велик: $K^2 \gg 1$. Это значит, что можно говорить о почти определенном значении волнового числа (энергии), характеризуемом средним значением K . Еще одно условие нужно наложить, если вы хотите, чтобы за время процесса рассеяния, вплоть до возвращения отраженного пакета к месту старта, $T = B/K$ распыление пакета было малым. Для этого должно выполняться неравенство $T^2 \ll 1$, т. е. величина K должна несколько превосходить величину B : $K > B$, чтобы $K^2 \gg B^2$ (выбор слишком больших K означает большие энергии).

Наконец, параметр Q характеризует интенсивность потенциала. Если величины B , K уже выбраны, то ориентиром при выборе Q может служить выражение для коэффициента прозрачности потенциала $K^2/(Q^2 + K^2)$, так что при $Q = K$ падающий пакет превратится в два одинаковых гауссиана, движущихся в разных направлениях. Увеличивая Q , уменьшаем прозрачность и т. д.

Здесь уместны все те замечания относительно машинного моделирования, которые были высказаны в конце параграфа 1.9. Нужно только учесть, что наблюдение желательно вести одновременно за отраженным и прошедшим пакетами, так что начало координат необходимо расположить вблизи центра, несколько сместив его вправо (речь идет об экране дисплея), поскольку именно перед рассеивателем разыгрываются самые интересные события при непосредственном контакте с достаточно интенсивным потенциалом.

При наблюдении за процессом рассеяния еще раз обратите внимание на роль фаз амплитуд отражения и прохождения φ_B и φ_C , включая и их производные.

Постарайтесь уловить эффекты запаздывания и опережения, о которых шла речь при выводе формул (1.134) и (1.135).

В качестве упражнения оцените среднюю скорость всего волнового пакета в процессе рассеяния (напоминаем, что импульс не сохраняется при движении частицы в потенциальном поле), а также проследите за процессом рассеяния в импульсном пространстве.

Вторым примером потенциального поля, для которого можно получить не очень сложные аналитические выражения характеристик рассеяния в нестационарной теории, является прямоугольный потенциал

$$U(x) = U_0, \quad x \in [0, a]; \quad U(x) = 0, \quad x \notin [0, a]. \quad (1.139)$$

Для него волновые функции стационарных состояний (1.114) будут точными соответственно в областях $x < 0$ и $x > a$. При этом амплитуды отражения $B(k)$ и прохождения $C(k)$ равны: если $E > U_0$ (в частности, для потенциальной ямы, когда $U_0 < 0$),

$$B(k) = -\frac{i}{2} \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k} \right) \sin qa C(k) e^{ika};$$

$$C(k) = e^{-ika} \left[\cos qa + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k} \right) \sin qa \right] / \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k} \right)^2 \sin^2 qa \right], \quad (1.140)$$

где $\hbar k = \sqrt{2mE}$; $\hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)}$; если $E < U_0$ (результаты получаются из предыдущих заменой $iq \rightarrow \kappa$, где $\hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}$),

$$B(k) = -\frac{i}{2} \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right) \operatorname{sh} \kappa a C(k) e^{ika};$$

$$C(k) = e^{-ika} \left[\operatorname{ch} \kappa a + \frac{i}{2} \left(\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right) \operatorname{sh} \kappa a \right] / \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a \right]. \quad (1.141)$$

В области действия потенциала, т. е. для $0 < x < a$, интересующие нас волновые функции стационарных состояний в случае $E > U_0$ имеют вид

$$\Psi_k^{(+)}(x) = \left[\cos q(x-a) + i \frac{k}{q} \sin q(x-a) \right] C(k) e^{ika} / \sqrt{2\pi}, \quad (1.142)$$

а в случае $E < U_0$

$$\Psi_k^{(+)}(x) = \left[\operatorname{ch} \kappa(x-a) + i \frac{k}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa(x-a) \right] C(k) e^{ika} / \sqrt{2\pi}. \quad (1.143)$$

Этих сведений о стационарных характеристиках достаточно для построения нестационарной теории. Дальше есть несколько путей решения задачи. Можно использовать общие формулы (1.130) и (1.132), дополнив их аналогичным вычислением для области действия поля на основе (1.128), (1.142) и (1.143). При этом в случае $E < U_0$ (туннелирование сквозь барьер) фазы амплитуд отражения и прохождения, как видно из формул (1.141), плавно изменяются с энергией, но в случае $E > U_0$ эти фазы изменяются довольно быстро, что отвечает резо-

нансному рассеянию. Разумеется, можно построить начальный пакет таким образом, чтобы дисперсия энергии была мала даже по сравнению с характерными энергетическими интервалами изменения фаз, однако такой пакет будет слишком широким в координатном пространстве. К тому же явные точные формулы для первых производных от фаз достаточно громоздки. В связи с этим, оставив в виде упражнения реализацию этого направления теории, рассмотрим другие пути решения. Одно направление — аналитические расчеты для энергий в окрестности резонанса, а другое, более общее направление — численные эксперименты на основе формулы (1.128), сводящиеся к расчету однократного интеграла.

1.11. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ

Продолжая тему предыдущего параграфа, рассмотрим вначале решение задачи нестационарного рассеяния потенциалом прямоугольной формы в случае резонанса. Предположим, что средняя энергия (или среднее волновое число k_0) равна резонансному значению $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$, при котором в стационарной теории отражение отсутствует, т. е.

$$B(k_n) = 0. \quad (1.144)$$

Как видно из формулы (1.140), это происходит при условии $q_n a = \pi n$, или

$$E_n = U_0 + \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2ma^2, \quad (1.145)$$

где $n = 1, 2, \dots$ в случае потенциального барьера ($U_0 > 0$), а в случае ямы ($U_0 < 0$) n должно принимать такие значения, чтобы резонансный уровень энергии попадал в область $E_n > 0$. Из (1.145) видно, что E_n отвечают уровням энергии частицы, запертой в области $0 < x < a$ (прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины) с отсчетом энергии от U_0 . Явление полной прозрачности объясняется гашением волн, отраженных от резких границ в точках $x = 0$ и $x = a$. Это есть требование, чтобы на интервале a укладывалось целое число полувольт: $a/(\lambda_n/2) = n$; $\lambda_n = 2\pi/q_n$.

Переходя к нестационарному описанию, сразу же отметим, что полной прозрачности быть не должно в силу неопределенности энергии. Это предварительное качественное предсказание требует подкрепления количественным расчетом кинетики пакетного движения в условиях резонанса.

Основываясь на общем выражении (1.128) с начальным условием для волновой функции в k -представлении (энергетическом) вида

$$c_k^{(+)} = (2D_0/\pi)^{1/4} \exp[ikb - D_0(k - k_0)^2], \quad (1.146)$$

которое в координатной картине означает, как установлено в предыдущем параграфе, что исходный волновой пакет имеет гауссову форму с центром в точке $-b$, дисперсией координат D_0 и стартует вдали от рассеивателя со средней скоростью $v_0 = \hbar k_0/m$ при малой дисперсии

энергии. Последнее условие требует уточнения. Будем считать, что дисперсия энергии ΔE меньше расстояния между соседними резонансными квазиуровнями, т. е. $\Delta E \ll E_{n+1} - E_n$. Так как согласно (1.145) $E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ и $\Delta E = 2\Delta k E / k$, а $\Delta k = 1/2\sqrt{D_0}$, приходим к условию

$$a^2/D_0 \ll (2n + 1) \pi^2/k_0 V \overline{D_0}. \quad (1.47)$$

В этом случае можно применить следующий прием. При вычислении интегралов в (1.128) со стационарными волновыми функциями $\Psi_k^+(x)$, имеющими за пределами области действия потенциала вид (1.114), разложим амплитуды отражения и прохождения (1.140) в ряд по степеням отклонений от среднего значения k_0 , совпадающего с одним из резонансных значений k_n . Учитывая условие (1.144) и вычисляя производную амплитуды отражения в резонансной точке, получаем в первом приближении, что $B(k) = B'_n(k - k_0)$, где

$$B'_n \equiv B'(k_n) = -ia(k_n^2 - q_n^2)/2q_n^2. \quad (1.148)$$

Аналогичный расчет для амплитуды прохождения требует оставления квадратичных членов разложения. Кроме того, выделим множитель $\exp(-ika)$: $C = \tilde{C} \exp(-ika)$. Тогда $\tilde{C}(k) = \tilde{C}(k_n) + \tilde{C}'(k_n)(k - k_0) + \tilde{C}''(k_n)(k - k_0)^2/2$, где линейный член легко вычисляется непосредственно по формуле (1.140), а квадратичный проще найти из точного соотношения для амплитуд рассеяния $|C(k)|^2 + |B(k)|^2 = 1$ с учетом (1.148). В результате $\tilde{C}(k) = (-1)^n [1 + i\alpha(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2]$, где

$$\alpha = a(k_n^2 + q_n^2)/2q_n^2; \quad \beta = -a^2(k_n^4 + q_n^4)/4q_n^4. \quad (1.149)$$

Вначале рассмотрим поведение волн перед рассеивателем ($x < 0$). Согласно (1.128), (1.114) и (1.148) волновая функция в любой момент времени определяется интегралом

$$\Psi(x, t) = (D_0/2\pi^3)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] \times \\ \times [\exp(ikx) + B_n(k - k_0) \exp(-ikx)] dk. \quad (1.150)$$

Первый член вычисляется приближенно стандартным способом и приводит к падающим волнам

$$\Psi_{\text{пад}}(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0/\hbar + ik_0(x + b) - \\ - (x + b - v_0 t)^2/4D_0\gamma(t)], \quad (1.151)$$

где, как и ранее, $E_0 = E(k_0)$; $\gamma(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0$.

Второй член вычисляется аналогично с применением параметрического дифференцирования интеграла и описывает отраженные волны

$$\Psi_{\text{отр}}(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0/\hbar - ik_0(x - b)] \times \\ \times B_n i\partial/\partial x \exp[-(x - b + v_0 t)^2/4D_0\gamma(t)]. \quad (1.152)$$

Переходя к плотности вероятности координат, запишем результаты для такой стадии рассеяния, когда уже интерференцией между

падающими и отраженными волнами можно пренебречь (впрочем, для падающего пакета это не «уже», а «еще»). Волны падающие имеют форму обычного одиночного гауссиана

$$\rho_{\text{пад}}(x, t) = [2\pi D(t)]^{-1/2} \exp[-(x + b - v_0 t)^2 / 2D(t)], \quad (1.153)$$

где $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$, а самый интересный результат получаем для отраженных волн:

$$\rho_{\text{отр}}(x, t) = [2\pi D(t)]^{-1/2} |B'_n|^2 / 2D_0 [(x - b + v_0 t)^2 / 2D(t)] \times \\ \times \exp[-(x - b + v_0 t)^2 / 2D(t)], \quad (1.154)$$

где B'_n определено в (1.148).

Теперь можно сделать некоторые выводы относительно отраженных волн.

Во-первых, ясно, что отраженные волны имеются, так что полной прозрачности, как и ожидалось, в действительности нет.

Во-вторых, отраженный пакет в условиях резонанса имеет более сложный вид, нежели обычные одиночные гауссианы.

В-третьих, пакет имеет двугорбую симметричную устойчивую форму (с поправкой на расплывание, конечно).

В-четвертых, центр пакета находится во впадине между горбами и движется (как и весь пакет в целом) с постоянной скоростью $-v_0$. Плотность вероятности координат в центре пакета равна нулю.

В-пятых, пакет (волновая функция) представляет собой предельный случай разности двух гауссианов, соответствующих отражению от границ потенциала с эффективным расстоянием порядка a .

В-шестых, расстояние между максимумами горбов

$$\Delta(x_{\text{max}}) = 2\sqrt{2D(t)}. \quad (1.155)$$

В-седьмых, интегральный вклад, т. е. доля отраженных волн, или коэффициент отражения, составляет

$$\int \rho_{\text{отр}}(x, t) dx = |B'_n|^2 / 4D_0 = a^2 (k_n^2 - q_n^2) / 16q_n^4 D_0, \quad (1.156)$$

что с учетом малости a согласно (1.147) должно быть относительно малой величиной. В предельном случае при $D_0 \rightarrow \infty$ переходим к стационарному ответу полной прозрачности.

Нужно иметь в виду, конечно, что некоторые детали могут быть уточнены. Так, отраженный пакет фактически имеет несколько несимметричную двугорбую форму, а плотность вероятности координат обращается в нуль в центре пакета, хотя и является малой величиной. Центр пакета фактически движется с некоторой задержкой по сравнению с законом из (1.154).

Далее, в качестве среднего значения энергии нами был выбран резонансный уровень энергии стационарной теории, однако фактически минимум отражения (не равный, конечно, нулю) несколько сдвинут.

Все эти детали обнаруживаются при более точном расчете. Если до сих пор вычисления выполнялись с экспоненциально малыми погрешностями, то в этом параграфе пока аппроксимации имели степенной характер, так что не всегда следует ожидать большой точности

от формул (1.155) и (1.156). Тем не менее, основные выводы остаются в силе, а оценку точности дадут численные расчеты.

Таким же образом исследуется поведение волн и за рассеивателем, т. е. при $x > a$. Выражение для волновой функции прошедших волн будет, однако, несколько более громоздким, так как в разложении (1.149) нужно учитывать все три члена. В качестве упражнения выполните тщательно все расчеты тем же методом параметрического дифференцирования, что и при анализе отраженных волн, а затем получите формулу и для плотности вероятности координат. Не забудьте включить в интеграл множитель, отличающий C от $\bar{C}$. Сделайте соответствующие выводы о структуре прошедшего пакета в той же последовательности, что и для отраженного пакета.

Продолжая изучение нестационарного резонансного рассеяния, перейдем к рассмотрению волн, попадающих внутрь области действия потенциала. Вновь обращаясь к общей формуле (1.128) с учетом (1.146) и (1.142), получаем выражение

$$\Psi_{\text{захв}}(x, t) = (D_0/2\pi^3)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] \times \\ \times \left[\cos q(x - a) + i \frac{k}{q} \sin q(x - a) \right] \bar{C}(k) dk. \quad (1.157)$$

В первом приближении считаем, что два последних множителя в интегрируемой функции можно заменить их резонансными значениями, в частности, учтя, что $\bar{C}(k_n) = (-1)^n$ и $q_n a = \pi n$. Тогда оставшийся интеграл вычисляется стандартным образом, а

$$\Psi_{\text{захв}}(x, t) = [\cos q_n x + i(k_n/q_n) \sin q_n x] (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \times \\ \times \exp[-itE_0/\hbar + ik_0 b - (b - v_0 t)^2/4D_0 \gamma(t)].$$

Тем самым временная зависимость отделяется от координатной. Плотность вероятности координат $\rho_{\text{захв}}(x, t) = [1 + (k_n^2/q_n^2 - 1) \sin^2 q_n x] \times [2\pi D(t)]^{-1/2} \exp[-(b - v_0 t)^2/2D(t)]$ близка к получаемой для стационарных состояний при движении на интервале $0 < x < a$. По мере приближения пакета к области действия потенциала отталкивания со слабой проницаемостью (в этом случае $k_n^2 \gg q_n^2$) образуется довольно значительная волна, описывающая захваченные, застрявшие частицы. Наибольшей величины она достигает при $t = b/v_0$:

$$\rho_{\text{захв}}^{\text{max}}(x, t) = [1 + (k_n^2/q_n^2 - 1) \sin^2 q_n x] [2\pi D(t)]^{-1/2}.$$

В частности, для нечетных резонансов ($q_n a = \pi, 3\pi, \dots$) в средней точке $x = a/2$ плотность вероятности координат $\rho_{\text{захв}}^{\text{max}} = (k_n^2/q_n^2) \times [2\pi D(t)]^{-1/2}$ в несколько раз может превышать максимальное значение даже для падающей волны — острый всплеск на фоне плавной прошедшей части пакета и охваченной осцилляциями части перед рассеивателем, в которой интерферируют падающие и отраженные волны.

Постепенно захваченная волна опадает, рассасывается, затухает, релаксирует по экспоненциальному закону, подпитывая отходящие от рассеивателя отраженные и прошедшие волны.

Интегральный эффект описывается формулой

$$\int_0^a \rho_{\text{захв}}(x, t) dt = \frac{1}{2} \left(\frac{k_n^2}{q_n^2} + 1 \right) a \frac{e^{-\frac{(b-v_0 t)^2}{2D(t)}}}{\sqrt{2\pi D(t)}}.$$

В виде упражнения преобразуйте все найденные выражения для трех областей ($x < 0$, $0 < x < a$ и $x > a$) к безразмерному виду, не забывая учесть и интерференционный член при $x < 0$ в плотности вероятности координат. Составьте программу численного моделирования процесса резонансного рассеяния гауссиана на прямоугольном потенциале. Исследуйте в машинном эксперименте случаи различных значений параметров потенциала, уделите особое внимание сравнению особенностей рассеяния на барьере и на яме. Сопоставьте результаты для резонансов разного порядка n .

Теперь перейдем к более точному рассмотрению задачи нестационарного рассеяния на прямоугольном потенциале. Вновь обратимся к общей формуле (1.128) и начальному условию (1.146). Тогда ближайшей целью является вычисление волновой функции, определяемой интегралом

$$\Psi(x, t) = (2D_0/\pi)^{1/4} \int_0^\infty \exp[-itE(k)/\hbar + ikb - D_0(k - k_0)^2] \Psi_k^{(+)}(x) dk. \quad (1.158)$$

Здесь точное решение задачи рассеяния в стационарной теории $\Psi_k^+(x)$ описывается формулами (1.114), (1.142) и (1.143), где амплитуды отражения и прохождения задаются выражениями (1.140) и (1.141). Поскольку далее имеется в виду машинное моделирование, введем сразу же безразмерные переменные и перепишем все соотношения в удобном для программирования виде. Плотность вероятности координат разбивается на две части, соответствующие реальной и мнимой частям волновой функции:

$$R(X, T) = (2\pi^3)^{-1/2} (I_1^2 + I_2^2), \quad (1.159)$$

где интегралы однотипны и будут вычисляться параллельно

$$I_1 = \int_0^\infty dK \exp[-(K - K_0)^2] \operatorname{Re}[F(X) \exp iP];$$

$$I_2 = \int_0^\infty dK \exp[-(K - K_0)^2] \operatorname{Im}[F(X) \exp iP].$$

Фаза $P = (K - K_0)[B - T(K + K_0)]$, а функция $F(X)$ имеет различный вид в разных областях координат: если $X < 0$, то

$$F(X) = \exp(iKX) + G(K) \exp(-iKX);$$

если $X > A$, то

$$F(X) = C(K) \exp [iK(X - A)];$$

если $0 < X < A$, то

$$F(X) = C(K) Z(X).$$

Здесь для амплитуды отражения $B(k)$ введено обозначение $G(K)$ (обозначение B использовано для стартовой координаты пакета), а модифицированная амплитуда прохождения $\tilde{C}(k)$ обозначена $C(K)$. В случае $K^2 > V$ (потенциальная яма или надбарьерные энергии) амплитуды рассеяния имеют вид

$$G(K) = -\frac{i}{2} \left(\frac{K}{Q} - \frac{Q}{K} \right) \sin(QA) C(K);$$

$$C(K) = \left[\cos(QA) - \frac{i}{2} \left(\frac{K}{Q} + \frac{Q}{K} \right) \sin(QA) \right]^{-1},$$

а вспомогательная функция

$$Z(X) = \cos [Q(X - A)] + i \frac{K}{Q} \sin [Q(X - A)].$$

В случае $K^2 < V$ (подбарьерные энергии) амплитуды рассеяния определяются формулами

$$G(K) = -\frac{i}{2} \left(\frac{K}{Q} + \frac{Q}{K} \right) \operatorname{sh}(QA) C(K);$$

$$C(K) = \left[\operatorname{ch}(QA) - \frac{i}{2} \left(\frac{K}{Q} - \frac{Q}{K} \right) \operatorname{sh}(QA) \right]^{-1},$$

а вспомогательная функция

$$Z(X) = \operatorname{ch} [Q(X - A)] + i \frac{K}{Q} \operatorname{sh} [Q(X - A)].$$

При этом для всех энергий $Q = \sqrt{|K^2 - V|}$.

Физический смысл безразмерных величин следующий: $R = \rho \sqrt{D_0}$ — плотность вероятности координат (выходная величина); $K = k \sqrt{D_0}$ — волновое число (переменная интегрирования); $K_0 = k_0 \sqrt{D_0}$ — среднее волновое число (входная величина); $Q = q \sqrt{D_0}$, $\kappa \sqrt{D_0}$ — вспомогательное волновое число; $V = 2mU_0 D_0 / \hbar^2$ — высота потенциального барьера или глубина ямы (входная величина); $X = x / \sqrt{D_0}$ — координата; $A = a / \sqrt{D_0}$ — ширина барьера или ямы (входная величина); $B = b / \sqrt{D_0}$ — расстояние от стартовой точки до левой границы потенциала (входная величина); $T = \hbar t / 2mD_0$ — время.

Таким образом, основные преобразования связаны с комплексными величинами. Если используемый язык программирования не предусматривает операций с комплексными переменными, то необходимо предварительно преобразовать выражения в интегралах I_1 и I_2 . При практическом вычислении интегралов достаточно в качестве верхнего предела интегрирования взять величину $2K_0$.

Входные величины выбираются так, чтобы выполнялись следующие условия. Пакет удален от рассеивателя и четко локализован на старте слева от него: $B^2 \gg 1$. Практически можно говорить об определенном значении энергии (волнового числа), а ошибки аналитических вычислений, в частности при указанном выше обрезании верхнего предела интегрирования, будут экспоненциально малы: $K_0^2 \gg 1$. Время процесса от старта до возвращения на то же место отраженного пакета $T = 2B/2K = B/K$ должно быть достаточно малым: $T^2 \ll 1$, чем обеспечивается слабое распыление пакетов.

Дополнительные условия связаны с конкретными наблюдениями. Например, требование $VA^2 \gg 1$ обеспечивает слабую проницаемость барьера в области туннелирования и достаточную остроту надбарьерных резонансов прозрачности.

В данном случае для машинных экспериментов необходимо иметь компьютер среднего быстродействия (работающий приблизительно на два порядка быстрее, чем при выполнении экспериментов с простыми демонстрациями движущихся изображений на основе явных аналитических формул). На экране дисплея можно вначале показать всю картину в целом, отмечая общий эффект отражения и прохождения при различных значениях параметров пакета и потенциала. Затем желательно изменить масштаб координат, оставляя в кадре только область непосредственно перед левой границей потенциала, чтобы детально

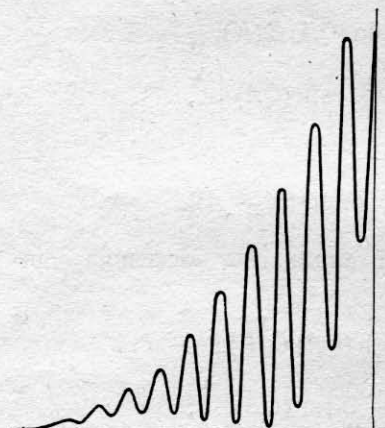


Рис. 4. Интерференция падающих и отраженных волн перед рассеивателем

рассмотреть осцилляции, возникающие вследствие интерференции падающих и отраженных волн. В случае резонансного рассеяния (рис. 4) кроме того, можно оставить в кадре только область действия потенциала ($0 < X < A$) и наблюдать за постепенным нарастанием пакета, а потом и за распадом временно возникшего квазисвязанного состояния (явление захвата и распада квазистационарного состояния).

На этапе отладки программы в качестве тестового примера могут служить полученные ранее более грубые результаты для рассеяния, включая резонансную ситуацию. В свою очередь, отлаженная программа счета позволит оценить точность этих расчетов.

Для ориентировки целесообразно отложить на шкале волновых чисел (и одновременно на оси энергий) характерные опорные точки и интервалы: значение высоты барьера $\sqrt{V}$ (или глубины ямы $\sqrt{-V}$), несколько резонансов $K_n = \sqrt{\pi^2 n^2 / A^2 + V}$, среднее значение для пакета K_0 и полную ширину пакета в K -пространстве $\delta K = 4\Delta K = 2$ (она может быть определена по убыванию в e^{-2} раз квадрата модуля плотности вероятности в K -пространстве), где неопределенность для

рассматриваемого гауссова пакета $\Delta K = 1/2$. Тем самым можно яснее представить себе, какую роль играют резонансные явления, как укладывается пакет в K -пространстве по отношению к стационарной кривой резонанса, какие следует подбирать параметры пакета и потенциала. Нужно также изобразить график зависимости от K стационарного коэффициента прозрачности $|C(K)|^2$ для данного потенциала, чтобы иметь представление о ширине резонансов и предсказываемой стационарной теорией прозрачности при различных значениях K . Одной из количественных целей данного машинного эксперимента является построение графика для нестационарного коэффициента прозрачности в зависимости от среднего волнового числа K_0 . Сравните его с соответствующей стационарной кривой. Для этого на конечной стадии рассеяния нужно в процессе расчета координатных точек для R производить вычисление координатных

интегралов $\int_{-\infty}^0 R(X, T) dX$ и

$\int_A^\infty R(X, T) dX$. Желательно эти вычисления производить и в течение всего процесса рассеяния, добавив также интеграл по обла-

сти действия потенциала $\int_0^A R(X, T) dX$. Это даст возможность характеризовать процесс не только на основе дифференциальной величины $R(X, T)$, но и на основе интегральных величин, а также позволит контролировать правильность расчетов по выполнению условия нормировки. Как обычно, оценивайте точность всех вычислений, уменьшая вдвое шаг интегрирования по K (DK).

В качестве конкретного примера выбора параметров для наблюдения резонансного рассеяния на барьере (рис. 5) можно предложить следующий вариант: $B = 6,25$; $K_0 = 40$; $V = 1600 - 16\pi^2$; $A = 0,25$; $DK = 0,2$; $K_{\min} = 35$; $K_{\max} = 45$.

В качестве упражнения на развитие темы численного моделирования процесса нестационарного рассеяния исследуйте случаи начальных пакетов отличной от гауссовой формы, вводя соответствующие функции в интегралах I_1 и I_2 формулы (1.159), заменяющие гауссовы и сосредоточенные вблизи точки K_0 в K -пространстве, не забывая при этом изменить нормировочный коэффициент.

1.12. РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ НА СОЛИТОНАХ

Предыдущий параграф посвящен тем случаям нестационарного резонансного рассеяния, когда стационарная теория предсказывает полную прозрачность при отдельных значениях энергии (квазиуровнях). В частности, такая ситуация возникает в плоскостойких средах

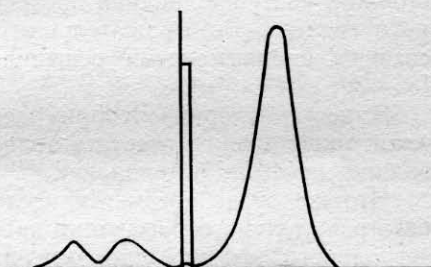


Рис. 5. Образование двугорбой отраженной волны при резонансном рассеянии

с прослойками, имеющими резкие границы и описываемыми кусочно-постоянными потенциалами или их предельными моделями в виде δ -потенциалов. В качестве упражнения исследуйте нестационарное резонансное рассеяние в случае двух δ -потенциалов (два барьера, две ямы, барьер и яма), когда возможно точное решение задачи о стационарных состояниях.

В стационарной теории точно решается и задача о безотражательных потенциальных полях, для которых отражение отсутствует при всех значениях энергии. Одним из примеров такого типа потенциальных полей является хорошо изученная потенциальная яма Эккарта. [1]. При некоторых значениях параметров этого потенциала, физический смысл которых состоит в появлении очередного связанного состояния, наступает полная прозрачность для всех энергий непрерывного спектра. Безотражательные потенциалы самым тесным образом связаны с солитонными решениями уравнения Кортевега-де Фриза [35—39].

В нестационарной теории рассеяния безотражательным потенциалом также должно отвечать полное прохождение волн (при фиксированном профиле потенциала).

Что же будет предметом исследования в случае нестационарного безотражательного рассеяния на солитонах? Во-первых, кроме интегрального эффекта прохождения есть закон перемещения пакета в данном потенциальном поле (локальные эффекты). Во-вторых, результатом прохождения области притяжения (солитона) будет явление запаздывания по сравнению со случаем полностью свободного движения. При этом представляет интерес сопоставить квантовую задержку с соответствующей классической. Любопытно, что задача допускает общее решение, независимо от числа солитонов и их формы. В этом отношении пример ямы Эккарта является лишь наиболее простым частным случаем, с которого и естественно начать изучение вопроса. Наконец, сама по себе постановка проблемы связи квантовой кинетики с солитоникой приводит к новым аспектам многообразных взаимоотношений нелинейных волновых явлений с квантовыми. К этим вопросам предстоит еще вернуться во втором разделе книги.

Итак, обратимся к потенциалу притяжения Эккарта

$$U(x) = -U_0 \operatorname{ch}^{-2} x/a. \quad (1.160)$$

Точное решение стационарной задачи рассеяния при произвольных параметрах потенциала приводит к интересующей нас волновой функции, выраженной через гипергеометрическую функцию следующим образом [1]:

$$\Psi_k^{(+)}(x) = A (\operatorname{ch} x/a)^{ika} F \times \\ \times (1 + s - ika, -s - ika; 1 - ika; (1 - \operatorname{th} x/a)/2), \quad (1.161)$$

где

$$s = (\sqrt{1 + 8ma^2 U_0/\hbar^2} - 1)/2.$$

Соотношение между параметрами потенциала

$$U_0 = N(N + 1)\hbar^2/2ma^2, \quad N = 1, 2, \dots \quad (1.162)$$

является критическим условием появления очередного связанного состояния (имеются N связанных состояний). Этот случай, как известно [35], отвечает N солитонам уравнения Кортевега-де Фриза (КДФ). При этом $s = N$, т. е. параметр s становится целым числом так что гипергеометрическая функция сводится к полиному Якоби [26] $P_N^{(\alpha, \alpha)}(z)$:

$$\Psi_k^{(+)}(x) = A 2^{-ika} e^{ikx} F(N+1, -N; 1-ika; (1 - \operatorname{th} x/a)/2) \sim e^{ikx} P_N^{(-ika, -ika)}(\operatorname{th} x/a), \quad (1.163)$$

а в асимптотике $\Psi_k^{(+)}(x)$ при $x \rightarrow -\infty$ исчезают отраженные волны:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(+)}(x) &= (2\pi)^{-1/2} \exp(ikx), \quad x \rightarrow -\infty; \\ \Psi_k^{(+)}(x) &= (2\pi)^{-1/2} C(k) \exp(ikx), \quad x \rightarrow +\infty, \end{aligned} \quad (1.164)$$

где амплитуда прохождения равна

$$C(k) = (-1)^N \frac{(1-ika)(2-ika) \dots (N-ika)}{(1+ika)(2+ika) \dots (N+ika)}. \quad (1.165)$$

Отсюда вытекает свойство аддитивности фазы прохождения

$$\varphi_C(k) = \pi N - 2 \left[\operatorname{arctg}(ka) + \operatorname{arctg} \frac{ka}{2} + \dots + \operatorname{arctg} \frac{ka}{N} \right]. \quad (1.166)$$

В качестве упражнения выполните все указанные математические выкладки, опираясь на свойства гипергеометрических функций [26].

Выпишем также явный вид точных решений в случае $N = 1$ (один солитон):

$$\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} (1+ika)^{-1} (ika - \operatorname{th} x/a) \exp(ikx), \quad (1.167)$$

и в случае $N = 2$ (два солитона):

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(+)}(x) &= (2\pi)^{-1/2} [(1+ika)(2+ika)]^{-1} \times \\ &\times (3\operatorname{th}^2 x/a - 3ika \operatorname{th} x/a - 1 - k^2 a^2). \end{aligned} \quad (1.168)$$

Поскольку фаза прохождения (1.166) является плавной функцией энергии, можно воспользоваться общей аппроксимацией для прошедших волн (1.132), если начальный пакет имеет гауссову форму с центром в точке $-b$, средней скоростью $v_0 = \hbar k_0/m$ и дисперсией координат D_0 :

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma_C^{-1/2}(t) C(k_0) \exp[-itE_0/\hbar + ik_0(x+b) - \\ &- (x+b-v_0 t + \varphi_C)^2/4D_0 \gamma_C(t)], \end{aligned} \quad (1.169)$$

где

$$\gamma_C(t) = 1 + i\hbar t/2mD_0 - i\varphi_C''(k_0)/2D_0.$$

В данном случае первые производные от фаз (1.166) равны

$$\begin{aligned} \varphi_C(k) &= -2a[(1+k^2 a^2)^{-1} + \\ &+ 2^{-1}(1+k^2 a^2/4)^{-1} + \dots + N^{-1}(1+k^2 a^2/N^2)^{-1}]. \end{aligned} \quad (1.170)$$

Отсюда для координатного сдвига прошедших волн (1.134) имеем эффект опережения $\Delta x_C = -\varphi_C'(k_0) > 0$, т. е. пакет оказывается дальше от потенциальной ямы после взаимодействия с ней, чем при свобод-

ном движении. С классической точки зрения это естественно, так как частица в области ямы разгоняется. Расчет соответствующего классического опережения для потенциала (1.160) дает $\Delta x_{\text{кл}} = a \ln \times \times (1 + U_0/E_0)$. Для безотражательного случая $\Delta x_{\text{кл}} = a \ln[1 + N \times \times (N + 1)/k^2 a^2]$. Сопоставив с результатом (1.170), убеждаемся, что при больших энергиях они дают одинаковый ответ. В виде упражнения выполните все указанные расчеты.

Вторые производные от фаз (1.166) входят в добавку к дисперсии координат в соответствии с (1.169). Оцените их влияние.

Переходя к машинному моделированию, запрограммируйте расчет плотности вероятности координат на основе точного выражения для фазы прохождения (1.166), сопоставив с приближением разложения фаз (1.169). С помощью точных формул для случаев одного солитона (1.167) и двух солитонов (1.168) моделируйте весь процесс движения пакета, детально проследив за изменением его формы при непосредственном контакте с солитонами, т. е. при движении в области действия потенциала.

Особый интерес вызывает возможность перенесения результатов на случай произвольного безотражательного потенциала (N солитонов). Для одного солитона безотражательные потенциалы всегда имеют вид ямы Эккарта, однако уже в случае двух солитонов потенциалы оказываются гораздо разнообразнее по форме (двойные ямы различных профилей) и лишь при определенных значениях параметров сводятся к яме Эккарта. Однако амплитуда прохождения, как показано в [36], в случае N солитонов всегда может быть записана в виде

$$C(k) = (-1)^N \prod_{n=1}^N (1 - ik/\kappa_n)/(1 + ik/\kappa_n),$$
 где κ_n — положительные вели-

чины (интегралы движения уравнения КДФ), отвечающие уровням энергии безотражательного потенциала: $E_n = -\hbar^2 \kappa_n^2/2m$. В частном случае безотражательного потенциала Эккарта $\kappa_n = n/a$, так что приходим к формуле (1.165). Это означает, что сохраняют силу с соответствующими уточнениями основные результаты, полученные для ямы Эккарта.

Завершая краткое обсуждение кинетики резонансного нестационарного рассеяния гауссиана на солитонах, повторим ее основные особенности. Отличие от других рассмотренных резонансных явлений в том, что обычный резонанс отвечает некоторому классу потенциалов с различными формами, а резонансу отвечает выделенная энергия (квази-уровни), тогда как в безотражательном случае энергии любые, а профиль только определенного вида. Безотражательные потенциалы соответствуют чисто солитонным решениям уравнения КДФ, так что можно говорить о рассеянии квантовой частицы на солитонах. Стационарная безотражательность сохраняется и в нестационарном случае, однако солитоны не являются «невидимками». Имеется эффект опережения — память о взаимодействии гауссиана с солитонами. Коэффициент прохождения равен единице, но фазы зависят от энергии и имеют универсальный вид, будучи аддитивными, для любых прозрачных потенциалов.

МЕТОДЫ ДИСКРЕТИЗАЦИИ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МАШИННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

2.1. ДВИЖЕНИЕ НА КОНЕЧНОМ ИНТЕРВАЛЕ

Второй раздел книги будет посвящен в основном вопросам применения численных методов в квантовой кинетике. С некоторыми простыми примерами исследования процессов на основе машинного моделирования, вычислительного эксперимента мы уже знакомились в первой части книги. Встретившиеся там задачи, однако, сводились либо к вычислению более или менее громоздких выражений в виде явных аналитических формул, либо, самое большее, к расчету несложных однократных интегралов. Разумеется, цели, которые при этом преследовались, не являлись вычислительными, а главной задачей с физической точки зрения была организация демонстрационных экспериментов с показом оживших кинетических явлений, движущихся изображений и т. д. В более сложных кинетических проблемах решение не сводится к квадратурам или, тем более, к явным аналитическим выражениям. Тогда на помощь приходят мощные средства решения кинетических дифференциальных уравнений в частных производных — численные методы, основанные на разностных схемах и реализуемые на быстродействующих вычислительных машинах в режиме диалога с выводом результатов на экран дисплея и т. д.

Общая идея методов, рассматриваемых во втором разделе книги, — это идея дискретизации. Как и обычно, начнем с более простых вопросов. Примеры нестационарных состояний, встречавшиеся в первом разделе при изучении различных кинетических эффектов, были связаны главным образом с непрерывным энергетическим спектром, а движение рассматривалось во всем координатном пространстве. Первым шагом на пути дискретизации будет введение искусственных граничных условий, т. е. переход к движению на некотором конечном интервале координат, что приводит к дискретизации энергетического спектра, к замене интегралов в энергетическом представлении на суммы и т. д. Важно, что возникающие при этом физические ситуации имеют самостоятельное значение, поскольку мы переходим к движению в реальных ограниченных пределах. Таким образом, введение искусственных граничных условий есть не только удобный прием, но и одновременно переход к некоторому классу движений, иногда более реальному, чем идеализированный неограниченный случай. Кроме того, такой метод дает возможность продемонстрировать новые эффекты: граничные, размерные и т. д. С расчетной же точки зрения он по-

звolyет более естественным образом вычислять физические характеристики. Ведь при вычислении интегралов на основе квадратурных формул все равно нужно переходить к суммированию. При этом нужно выбрать подходящий алгоритм, суметь оценить погрешности метода и пр., тогда как при вычислении сумм остается лишь вопрос об оценке отбрасываемых членов. Есть еще одно немаловажное обстоятельство: в одномерном непрерывном спектре инфинитного в обоих направлениях движения, отвечающего постановке задач рассеяния, значения энергии двукратно вырождены, так что возникает проблема выбора подходящего базиса. Уровни же энергии дискретного спектра не имеют вырождения в одномерном случае. Базис однозначно задается решением соответствующей стационарной задачи.

Существенно, что решения задачи о движении на интервале служат тестовыми примерами при отладке программ реализации разностных схем, поскольку в обоих случаях будут фигурировать одинаковые граничные условия. Чаще всего это будут условия непроницаемости, хотя иногда удобно рассматривать периодические граничные условия, которые также имеют определенный физический смысл.

Таким образом, вводную часть второго раздела книги посвятим вопросам дискретизации энергетического спектра, подготавливающим переход к более широкой дискретизации координат и времени в сеточных методах, когда кинетическое уравнение решается на основе разностных схем. Подчеркнем еще раз, что эти вводные задачи играют совершенно самостоятельную роль в кинетике.

Итак, начнем с рассмотрения движения частиц на конечном интервале $0 < x < L$ с граничными условиями непроницаемости

$$\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0. \quad (2.1)$$

Если никаких других внешних воздействий нет, то дискретный базис образуют хорошо известные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме:

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= (2/L)^{1/2} \sin(k_n x); \quad k_n = \pi n/L; \\ E_n &= \hbar^2 k_n^2 / 2m; \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Функция распространения имеет вид суммы

$$U(x, t; x_0, 0) = 2L^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-itE_n/\hbar) \sin(k_n x) \sin(k_n x_0). \quad (2.3)$$

Волновая функция нестационарных состояний в любой момент времени согласно методу функций распространения (см. параграф 1.5) определяется выражением

$$\Psi(x, t) = (2/L)^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-itE_n/\hbar) \sin(k_n x) c_n, \quad (2.4)$$

где C_n задаются начальными условиями — это есть начальный вектор состояния $\Psi(0)$ в энергетическом представлении:

$$c_n = (\Psi_n, \Psi(0)) = (2/L)^{1/2} \int_0^L \sin(k_n x_0) \Psi(x_0, 0) dx_0. \quad (2.5)$$

Пусть начальная волновая функция, как неоднократно бывало раньше (причина такого выбора уже обсуждалась), имеет вид гауссиана

$$\Psi(x, 0) = (2\pi D_0)^{-1/4} \exp[ik_0(x - b) - (x - b)^2/4D_0], \quad (2.6)$$

где область определения, разумеется, ограничена интервалом движения, который считаем достаточно широким, так что положение центра пакета b удалено от границ настолько, что $b^2 \gg D_0$ (2.7). Обратим внимание, что в задачах с неограниченным движением пакет обычно стартовал левее начала координат (в точке $-b$). Величина k_0 характеризует среднюю начальную скорость пакета $v_0 = \hbar k_0/m$, а D_0 является начальной дисперсией координат (все величины, включая нормировочный множитель, определены с точностью до экспоненциально малых членов вида $\exp(-b^2/2D_0)$).

Переходя к энергетическому представлению, получаем в том же приближении для начального пакета выражение

$$C_n = i(2\pi D_0)^{1/4} L^{-1/2} \{ \exp[-ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2] - \exp[ik_n b - D_0(k_n + k_0)^2] \}. \quad (2.8)$$

Вторым членом в скобках можно пренебречь в приближении малой дисперсии энергии $k_0^2 D_0 \gg 1$, (2.9) однако в некоторых задачах его нужно сохранять, например в случае покоящегося пакета с $k_0 = 0$ и

$$c_n = 2(2\pi D_0)^{1/4} L^{-1/2} \sin(k_n b) \exp(-D_0 k_n^2), \quad (2.10)$$

с которого начнем конкретные примеры. Тогда в любой момент времени волновая функция

$$\Psi(x, t) = 2^{3/2} (2\pi D_0)^{1/4} L^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-itE_n/\hbar) \times \\ \times \sin(k_n x) \sin(k_n b) \exp(-D_0 k_n^2) \quad (2.11)$$

приводит к следующей цепочке формул для плотности вероятности координат в безразмерных переменных:

$$R(X, T) = 2^{7/2} \pi^{1/2} L^{-2} (I_1^2 + I_2^2); \\ I_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \cos(K_n^2 T) F(K_n, X); \\ I_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \sin(K_n^2 T) F(K_n, X); \quad (2.12)$$

$$F(K_n, X) = \exp(-K_n^2) \sin(K_n X) \sin(K_n B),$$

где для безразмерной ширины интервала $L/\sqrt{D_0}$ сохраняем обозначение L , а остальные величины вводятся по уже встречавшимся пра-

вилам $R = \rho \sqrt{D_0}$; $X = x/\sqrt{D_0}$; $B = b/\sqrt{D_0}$; $T = \hbar t/2mD_0$; $K_n = k_n \sqrt{D_0} = \pi n \sqrt{D_0}/L$.

Таким образом, все подготовлено для численного моделирования процесса, который, как ясно из постановки задач, заключается в расплывании гауссова пакета. Вычисление сумм I_1 и I_2 выполняется параллельно; они имеют несложную структуру, так что для вычислений достаточно компьютера среднего быстродействия. Легко оценить ошибку, допускаемую при отбрасывании членов, когда суммы заменяются конечными. В пределе при $L \rightarrow \infty$ они переходят в интегралы и описывают распыление свободного гауссиана.

В данном случае не столько важно заново исследовать эффект распыления, сколько освоить сам метод дискретизации, а главное, подготовить тестовый пример для работы с разностными схемами.

Организуйте демонстрацию движущихся изображений на экране дисплея, оцените точность моделирования распыления в свободном движении методом дискретизации.

Заметим, что время расчета сумм можно сократить, если поместить центр пакета в середине интервала, так что в суммах вклады с четными n обратятся в нуль.

Другой аспект — самостоятельная роль задачи. Если начальный пакет задавать не в координатном, а в энергетическом представлении, то можно считать, что формула (2.10) задает начальные условия точно. Нужно только уточнить нормировку:

$$c_n = A \sin(k_n b) \exp(-D_0 k_n^2), \quad (2.13)$$

где нормировочный множитель определяется соответствующей суммой:

$$A^{-2} = \sum_{n=1}^{\infty} \sin^2(K_n B) \exp(-2K_n^2) \quad (2.14)$$

и в предельном случае больших интервалов переходит в выражение из формулы (2.10). В другом предельном случае малых интервалов (по сравнению с L) существен только первый член в сумме, так что $A \approx \approx \exp K_1^2 / \sin(K_1 B)$, а при локализации пакета в центре интервала $A \approx \exp(\pi^2 D_0 / L^2)$.

С учетом этого изменения нормировочного множителя расчеты проводятся по формулам (2.12), которые теперь описывают более общую ситуацию. Физический смысл придается движению именно на конечном интервале. Поучительно проследить, меняя длину интервала, т. е. ставя численные эксперименты при различных значениях L , как от распыления пакета, имеющего практически строго гауссову форму, переходим к устойчивому стационарному состоянию (основному) при синусоидальной форме пакета в случае малых L (во всех суммах остается только первый член). От квазинепрерывного спектра, моделирующего явления при неограниченном движении, постепенно можно перейти к одному единственному состоянию дискретного спектра. От распада к стабильности, от гауссовой формы к синусоидальной. От свободного движения, через постепенное усиление граничных влияний, к существенно ограниченному (к квантовому размерному эффекту).

Второй пример относится к моделированию перемещения пакета как целого. Если в первом примере полагали $k_0 = 0$, то теперь считаем, что величина k_0 настолько велика, что выполнено условие малой дисперсии энергии (2.9). Тогда в энергетическом представлении начальному пакету (2.6) отвечает

$$c_n = i(2\pi D_0)^{1/4} L^{-1/2} \exp[-ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2], \quad (2.15)$$

а волновая функция в любой момент времени в координатном пространстве будет определяться суммой вида

$$\Psi(x, t) = i2^{1/2} (2\pi D_0)^{1/4} L^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \exp[-itE_n/\hbar - ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2] \sin(k_n x). \quad (2.16)$$

Тогда аналогично (2.12) имеем для плотности вероятности координат соотношения

$$\begin{aligned} R(X, T) &= 2^{3/2} \pi^{1/2} L^{-2} (I_1^2 + I_2^2); \\ I_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \cos[K_n(B + K_n T)] F(K_n, X); \\ I_2 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sin[K_n(B + K_n T)] F(K_n, X); \\ F(K_n, X) &= \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin(K_n X), \end{aligned} \quad (2.17)$$

где к введенным ранее безразмерным величинам добавляется $K_0 = k_0 \sqrt{D_0}$. Во избежание недоразумений, напомним, что k_0 относится к начальным условиям, а номер стационарных состояний n не принимает нулевого значения.

Все подготовлено к численному моделированию движения. Программируйте, сопоставляйте с точными выражениями для свободного распространения гауссова пакета, оценивая точность дискретной аппроксимации и подготавливая тест для реализации разностных схем.

И снова пересматриваем трактовку результатов, используя формальные ограничения для иллюстрации физических граничных влияний: подбирая соответствующим образом начальные параметры, можно моделировать столкновение пакета со стенкой, роль которой играет правая граница движения (лучше всего в режиме слабого распыления пакета). Не останавливаясь на повторении всех советов при аналогичном вычислительном эксперименте, перейдем к третьему примеру.

Пусть в центре интервала находится δ -потенциал

$$U(x) = u\delta(x - L/2). \quad (2.18)$$

Для определенности пока будем считать, что $u > 0$. Дискретный базис (2.2) изменяется. Правда, состояния с четными n остаются теми же (объясните, чем это вызвано), а для остальных решаем задачу на собственные значения гамильтониана частицы в случае δ -барьера и граничных условий непроницаемости (2.1). Это дает следующие резуль-

таты: $\Psi_n(x) = A \sin(k_n x)$, $0 < x < L/2$; $\Psi_n(x) = A \sin[k_n(L - x)]$, $L/2 < x < L$, где уровни энергии находятся из уравнения

$$k_n L = \pi(n + 1) - 2 \arctg(k_n/\kappa), \quad n = 1, 3, \dots \quad (2.19)$$

$\kappa = m\mu/\hbar^2$, а нормировочный коэффициент определяется соотношением

$$A_n^{-2} = L/2 + \kappa/(\kappa^2 + k_n^2). \quad (2.20)$$

Для начальной волновой функции вида (2.6) в приближении широкого интервала (2.7) и больших энергий (2.9) в случае начального расположения пакета слева от δ -потенциала получаем в энергетическом представлении

$$c_n = i(\pi D_0/2)^{1/4} A_n \exp[-ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2]. \quad (2.21)$$

Для нечетных n множитель A_n задается формулой (2.20), а для четных согласно (2.2) он равен $A_n = \sqrt{2/L}$. Отсюда для координатной волновой функции в области $0 < x < L/2$ вытекает выражение

$$\Psi(x, t) = i(\pi D_0/2)^{1/4} \sum_{n=1}^{\infty} A_n \exp[-itE_n/\hbar - ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2] \sin(k_n x), \quad (2.22)$$

а в области $L/2 < x < L$ нужно для нечетных n заменить $\sin(k_n x)$ на $\sin[k_n(L - x)]$.

Окончательный ответ записываем для плотности вероятности координат в стандартном безразмерном виде

$$\begin{aligned} R(X, T) &= (\pi/2)^{1/2} (I_1^2 + I_2^2); \\ I_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \cos(P) F(K_n, X); \\ I_2 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sin(P) F(K_n, X); \\ P &= (K_n - K_0)[B + T(K_n + K_0)]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Для четных n $F(K_n, X) = 2L^{-1} \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin(K_n X)$, а для нечетных n в области $0 < X < L/2$

$$F(K_n, X) = A_n^2 \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin(K_n X),$$

а в области $L/2 < X < L$

$$F(K_n, X) = A_n^2 \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin[K_n(L - X)],$$

причем нормировочный коэффициент равен $A_n^2 = [L/2 + Q/(Q^2 + K_n^2)]^{-1}$, а уравнение для собственных значений энергии в случае нечетных n записывается в виде

$$K_n L = \pi(n + 1) - 2 \arctg(K_n/Q). \quad (2.24)$$

К ранее введенным переменным добавляется только одна — интенсивность δ -потенциала $Q = \kappa \sqrt{D_0}$.

Таким образом, все соотношения подготовлены для проведения численного моделирования. В отсутствие поля результаты сводятся к полученным во втором примере (немного перестроена фаза P). Вычислительная особенность данного примера состоит в том, что при расчете сумм нечетные вклады требуют предварительного нахождения корней уравнения (2.24), что можно довольно быстро выполнить с помощью метода итераций, однако общее расчетное машинное время несколько увеличивается.

Физический смысл — моделирование процесса рассеяния гауссова пакета на δ -барьере. Краткий сценарий картины, которая должна демонстрироваться на экране дисплея. Гауссиан стартует в левой половине интервала движения (можно выбрать $B = L/4$) в направлении потенциала. По мере приближения к середине интервала, при соприкосновении хвоста гауссиана с рассеивателем, возникают отраженные волны, интерферирующие с падающими, появляются характерные всплески волн и плавное нарастание прошедшей волны. Затем пакет выходит из зоны соприкосновения с потенциалом в виде двух гауссианов, движущихся в разных направлениях, пакет разбивается на две независимые части — отраженные и прошедшие волны (принадлежащие, однако, единой волновой функции частицы). Далее можно проследить за движением этих волн до их столкновения с границами движения. Потом можно наблюдать «нападение» сразу двух пакетов на рассеиватель или, убрав потенциал, столкновение двух пакетов.

Итак, данный пример иллюстрирует сразу несколько кинетических явлений: распыливание (в данном случае это второстепенный эффект); распространение одиночного пакета (свободное перемещение до соприкосновения с потенциалом); рассеяние — появление отраженных и прошедших волн, интерференция падающих и отраженных волн, превращение начального пакета в два пакета; столкновение пакетов со стенкой; рассеяние на потенциале одновременно двух пакетов; столкновение двух пакетов. Последнее явление моделируем так: когда пакеты после рассеяния удалены от середины интервала движения и заняты «штурмом» границ, потенциал убираем со сцены, полагая $Q = 0$.

Обратим внимание еще на один важный аспект. В задачах с применением разностных схем этот пример будет тестовым для узельной аппроксимации короткодействующего потенциала.

При моделировании непрерывно вычисляйте коэффициенты отражения и прохождения, интегрируя $R(X, T)$ по областям слева и справа от середины интервала движения, а также контролируйте выполненные условия нормировки. Установите фазовые задержки пакетов и сопоставьте их с полученными с помощью аппроксимации разложения фаз (1.134) и (1.135).

Завершая краткий обзор применений метода дискретизации введением искусственных граничных условий, предлагаем ряд задач, продолжающих эту тему.

Во-первых, распространите все полученные для δ -барьера результаты на случай δ -ямы, не забывая о существовании связанного состоя-

ния. Изучите также особый случай влияния поля на распыление пакета, когда центр его совпадает с местом локализации потенциала и $k_0 = 0$ (гауссиан «сидит» на δ -яме).

Во-вторых, исследуйте тем же методом рассеяние на прямоугольных потенциалах, решив вначале соответствующую задачу о стационарных состояниях на интервале.

В-третьих, изучите резонансное рассеяние гауссиана на двух δ -потенциалах одного или разных знаков — случай двусторонней потенциальной ловушки.

В-четвертых, предварительно решите задачу о стационарных состояниях для движения на интервале в случае, когда δ -потенциал находится не в середине интервала, а вблизи правой (для определенности) границы. При этом возникает новая резонансная ситуация, отвечающая односторонней ловушке. Рассмотрите задачу об отражении и захвате гауссиана такой ловушкой, а также о распаде состояния, первоначально локализованного в односторонней ловушке.

В-пятых, изучите свободное движение гауссиана при периодических граничных условиях.

2.2. МЕТОД РАЗНОСТНЫХ СХЕМ

Наиболее общими методами решения кинетических уравнений являются численные, среди которых наиболее универсальным можно считать метод разностных схем.

Кратко наметим схему изучения кинетических задач на основе этого метода. Вначале будет рассматриваться одномерное движение частицы с квадратичным законом дисперсии в потенциальном поле. Материал предыдущего параграфа уже подготовил почву для понимания общего способа дискретизации. Первым шагом является переход от нестационарного уравнения Шредингера — дифференциального уравнения в частных производных — к некоторой системе разностных уравнений на основе введения координатно-временной сетки. Интервал движения $[0, L]$ разбивается на малые отрезки длиной Δx , а временной промежуток $[0, t]$ — на малые отрезки времени Δt . При этом частные производные заменяются конечными разностями.

Что касается граничных условий, то выбираем условия непроницаемости, т. е. будем считать, что волновая функция обращается в нуль на концах интервала движения (возможен, конечно, и другой вариант граничных условий). Это не только дает определенные преимущества при реализации метода разностных схем, но и позволяет придать граничным условиям непосредственный физический смысл при изучении граничных влияний и размерных эффектов.

Так выбирается сцена, на которой предстоит разыгрываться события, — кинетический полигон, счетный интервал.

Следующий вопрос — описание внешних воздействий, помимо граничных условий. Внешние влияния будут моделироваться потенциальными полями, обычно локализованными на некотором участке координатного интервала и имеющими произвольную форму, постоянными и переменными, вещественными и комплексными.

Наконец, необходимо задать начальные условия. Чаще всего, в силу уже выясненных обстоятельств, начальная волновая функция будет выбираться в виде гауссова пакета (гауссиана).

Не ставя перед собой задачу изложения основ метода разностных схем (на этот счет имеется много хороших книг математического плана по теории и приложениям [40—44]), перейдем к непосредственному применению метода разностных схем для решения волнового уравнения Шредингера

$$\partial\Psi/\partial t = -i\hat{H}\Psi/\hbar \quad (2.25)$$

с начальным условием $\Psi(0)$ при $t = 0$.

Общая идея интегрирования этого уравнения первого порядка по времени заключается в переходе от некоторого момента времени t к $t + \Delta t$, когда в соответствии с (2.25)

$$\Psi(t + \Delta t) = \Psi(t) - i\Delta t \hat{H}\Psi(t)/\hbar + O[(\Delta t)^2], \quad (2.26)$$

и далее такая процедура повторяется, начиная с $t = 0$. Итерации приостанавливаются на некотором промежуточном значении времени, если мы наблюдаем за всеми стадиями процесса, или сразу доводятся до конечного момента времени, если нас интересует только окончательный результат.

Оказывается, что практически целесообразнее записать соотношение (2.26) в том же приближении в несколько ином виде, введя некоторую величину ω (вообще говоря, комплексную), называемую коэффициентом неявности схемы:

$$\begin{aligned} &\Psi(t + \Delta t) + \omega i\Delta t \hat{H}\Psi(t + \Delta t)/\hbar = \\ &= \Psi(t) - (1 - \omega) i\Delta t \hat{H}\Psi(t)/\hbar + O[(\Delta t)^2]. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Если уравнение (2.25) позволяет сразу найти $\Psi(t + \Delta t)$ по известной $\Psi(t)$ (явное выражение), то из уравнения (2.27) непосредственно найти $\Psi(t + \Delta t)$ нельзя (неявное выражение). Это особенно ясно видно при переходе от общих операторных выражений с гамильтонианом $\hat{H}$ к конкретному представлению, обычно координатному.

Введем нумерацию моментов времени (слоев) $t_n = n\Delta t$; $n = 0, 1, \dots, N$ (2.28) и перепишем уравнение (2.27) в виде двухслойной схемы с верхними временными индексами

$$\Psi^{n+1} + \omega i\Delta t \hat{H}\Psi^{n+1}/\hbar = \Psi^n - (1 - \omega) i\Delta t \hat{H}\Psi^n/\hbar. \quad (2.29)$$

В координатном представлении гамильтониан рассматриваемой системы $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{U}(x, t)$ сводится к дифференциальному оператору $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + U(x, t)$ (2.30). Вторую производную заменяем конечно-разностной аппроксимацией

$$\partial^2\Psi(x)/\partial x^2 = [\Psi(x + \Delta x) - 2\Psi(x) + \Psi(x - \Delta x)]/(\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^2]. \quad (2.31)$$

Используя нижние индексы для нумерации координатных узлов равномерной сетки $x_j = j\Delta x$; $j = 0, 1, \dots, I$ (2.32), записываем уравнение

(2.29) в виде

$$\begin{aligned} \Psi_j^{n+1} + i\omega(\Delta t/\hbar) [-(\hbar^2/2m)(\Psi_{j+1}^{n+1} - 2\Psi_j^{n+1} + \Psi_{j-1}^{n+1})/(\Delta x)^2 + \\ + U_j^{n+1}\Psi_j^{n+1}] = \Psi_j^n + i(1-\omega)(\Delta t/\hbar) [-(\hbar^2/2m)(\Psi_{j+1}^n - \\ - 2\Psi_j^n + \Psi_{j-1}^n)/(\Delta x)^2 + U_j^n\Psi_j^n]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Таким образом, приходим к двухслойной трехточечной неявной разностной схеме, в которой неизвестные величины Ψ_j^{n+1} удовлетворяют системе линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. Эта система эффективно решается методом так называемой прогонки. Если следовать обозначениям Рихтмайера и Мортонa [40] для системы уравнений

$$-A_j\Psi_{j+1}^{n+1} + B_j\Psi_j^{n+1} - C_j\Psi_{j-1}^{n+1} = D_j, \quad (2.34)$$

то коэффициенты согласно (2.33) равны $A_j = i\omega\hbar\Delta t/2m(\Delta x)^2$ (не зависит от j); $B_j = 1 + 2i\omega\hbar\Delta t/2m(\Delta x)^2 + i\omega\Delta t U_j/\hbar$; $C_j = i\omega\hbar\Delta t/2m(\Delta x)^2$ (совпадает с A_j). Для правой части уравнений (2.34) имеем формулы

$$\begin{aligned} D_j = \Psi_j^n [1 - 2i(1-\omega)\hbar\Delta t/2m(\Delta x)^2 - i(1-\omega)\Delta t U_j/\hbar] + \\ + i(1-\omega)\hbar\Delta t(\Psi_{j+1}^n + \Psi_{j-1}^n)/2m(\Delta x)^2. \end{aligned}$$

Все эти величины записываются компактнее через безразмерные характеристики: временной шаг $G = \hbar\Delta t/2m(\Delta x)^2$ и потенциал

$$V_j = 2mL^2 U_j/\hbar^2 = 2m(\Delta x)^2 I^2 U_j/\hbar^2, \quad (2.35)$$

где учтено, что $L = I\Delta x$.

Коэффициенты принимают вид

$$\begin{aligned} A_j = C_j = i\omega G; \\ B_j = 1 + 2i\omega G + i\omega G V_j/I^2; \\ D_j = \Psi_j^n [1 - 2i(1-\omega)G - i(1-\omega)G V_j/I^2] + \\ + i(1-\omega)G(\Psi_{j+1}^n + \Psi_{j-1}^n). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Метод прогонки в случае граничных условий $\Psi_0^{n+1} = \Psi_I^{n+1} = 0$ состоит в последовательном вычислении вспомогательных коэффициентов на основе рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned} E_j = A_j/(B_j - C_j E_{j-1}); \\ F_j = (D_j + C_j F_{j-1})/(B_j - C_j E_{j-1}), \end{aligned} \quad (2.37)$$

когда индекс j увеличивается от 1 до $I-1$ (прямая прогонка), а затем в расчете неизвестных значений волновой функции по правилу обратной прогонки

$$\Psi_j^{n+1} = E_j \Psi_{j+1}^{n+1} + F_j, \quad (2.38)$$

когда индекс j уменьшается от $I-1$ до 1.

На этом заканчивается подготовительный этап. Далее нужно переходить к программированию. Сделаем еще только один шаг, вводя

обозначения, более близкие к стандартным языкам программирования (ПЛ/1, ФОРТРАН и т. п.), а также кратко намечая схему расчетов. После задания всех параметров, включая ω , G и I , а также граничных значений соответствующих величин, определяем вспомогательные коэффициенты $A = i\omega G$; $A_1 = i(1 - \omega)G$; $A_2 = 1 - 2i(1 - \omega)G$; $A_3 = i(1 - \omega)G/I^2$; $B_2 = 1 + 2i\omega G$; $B_3 = i\omega G/I^2$. Затем для J от 1 до $I - 1$ задаем потенциал $V(J)$ и начальную волновую функцию $Y(J)$ (вводится обозначение $Y \equiv \Psi$), а также одновременно вычисляем коэффициенты

$$B(J) = B_2 + B_3 V(J).$$

Далее для каждого перехода к новому временному слою идет прямая прогонка с изменением J от 1 до $I - 1$: $D(J) = Y(J)[A_2 - A_3 V(J)] + A_1 [Y(J - 1) + Y(J + 1)]$; $B_1 = B(J) - AE(J - 1)$; $E(J) = A/B_1$; $F(J) = [D(J) + AF(J - 1)]/B_1$, и обратная прогонка с изменением J от $I - 1$ до 1: $Y(J) = E(J)Y(J + 1) + F(J)$.

После требуемого числа итераций приходим к последнему этапу — выводу результатов на печать или на экран дисплея в виде графического изображения квадрата модуля волновой функции на фоне сценических деталей (потенциал, границы). Еще раз подчеркнем, что описание расчетов дано очень схематично, чтобы не ограничивать читателя жесткими рамками готовой программы и выбором языка программирования. Важно дать возможность самостоятельно разработать программу, поскольку для понимания сути расчетов это гораздо полезнее, чем разбираться в чужой. Кроме того, программу пришлось бы сопровождать столь подробными комментариями, что ее распечатка заняла бы слишком много места. Алгоритм же описан достаточно подробно, а за математическими деталями обоснования следует обращаться к указанной литературе.

Особо отметим, что в обычных версиях ФОРТРАНа индекс массива не может принимать нулевого значения, поэтому необходимо сдвинуть границы массивов на единицу по отношению к установленным выше.

В программу обязательно нужно ввести вычисление нормировочного интеграла, сравнивая его значения к концу наблюдения с начальным (достаточно вычислить просто сумму квадратов модулей волновой функции на счетном интервале).

Основные операции при переходе с одного временного слоя на другой сосредоточены в прогоночных соотношениях (2.37) и (2.38). Для достижения высокой точности нужно интервал движения дробить на достаточно большое число шагов ($I \gtrsim 1000$), то же касается и временного промежутка, так что расчет занимает много машинного времени даже при работе на большой ЭВМ (порядка десятков минут на ЕС 1052).

Анализ показывает (см., например, [41, с. 296]), что случай симметричной неявной схемы типа Кранка—Николсона с $\omega = 1/2$ отвечает абсолютной устойчивости (при любых соотношениях между малыми величинами шагов Δx и Δt) и обеспечивает высокую точность.

Что касается априорных оценок точности типа $O[(\Delta x)^2]$, то они дают лишь самые общие представления об относительной точности

тех или иных разностных схем. Практически, как уже отмечалось, нужно пользоваться на этапе отладки программы сопоставлением с тестовыми примерами как для контроля общей правильности расчета, так и для детальной оценки точности. Нужно сравнивать результаты, выполненные при удвоении числа шагов, а также вести счет с двойной точностью (машинной). И еще: желательно начинать отладку с небольших значений параметров счетного интервала (брать небольшие $I \sim 100$ и пр.), что позволит заметить опасные тенденции переполнений, занулений и т. п.

Следует подчеркнуть, что существуют различные варианты разностных схем для нестационарного уравнения Шредингера (явные, многослойные и т. д.). Кроме того, реализация прогонки может быть различной (см., например, [41, с. 35, 597]), включая простейший вариант прогонки лишь в одном направлении. Все зависит от вида схемы и граничных условий.

Нужно иметь в виду, что в литературе чаще всего обсуждаются разностные схемы для уравнения теплопроводности (см., например, варианты схем в [40, с. 192]), а аналогичное уравнение Шредингера пользуется гораздо меньшим вниманием и часто дается с опечатками.

2.3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ НА КИНЕТИЧЕСКОМ ПОЛИГОНЕ

Подготовив программу расчетов, можно перейти к конкретным машинным экспериментам на изученном в предыдущем параграфе интервале движения — кинетическом полигоне. Начнем с простых примеров, которые позволят отладить программу, выбрать оптимальные для используемого компьютера параметры и т. д.

Первый эксперимент посвящен стационарным состояниям. Для рассматриваемого интервала с граничными условиями непроницаемости стационарные состояния частицы описываются волновыми функциями (2.2). В качестве начального условия выбираем волновую функцию основного состояния, что в удобных для программирования обозначениях и без нормировочного множителя дает

$$Y_0(J) = \sin(\pi J/I), \quad (2.39)$$

и наблюдаем за ее изменением с течением времени. При этом должен зависеть от времени только фазовый множитель, поскольку для стационарных состояний $\Psi(x, t) = \exp(-itE/\hbar)\Psi(x, 0)$, что в безразмерных величинах (2.35) с учетом (2.28) приводит к точному тестовому решению $Y(J) = \exp(-i\pi^2 NG/I^2) \sin(\pi J/I)$. Следовательно, появляется возможность, во-первых, следить за неизменностью квадрата модуля волновой функции, а во-вторых, наблюдать за изменением фазы. Тестовый пример позволяет оценить точность вычислений и выбрать оптимальные параметры. Пронаблюдайте, как влияет на точность увеличение числа координатных шагов (от $I = 1000$ можно перейти к $I = 2000$ и т. д.) и изменение коэффициента невязности ω . Убедитесь, что при $\omega < 0,5$ наступает резкая неустойчивость, и посмотрите, что получается при $\omega > 0,5$, сопоставив с рекомендован-

ным значением $\omega = 0,5$. Далее экспериментально изучите влияние мнимой части ω на точность расчетов. Затем варьируйте временной шаг G и время наблюдения N (число шагов по времени). Наконец, рассмотрите возбужденные стационарные состояния (2.2) в качестве начальных условий и установите, как влияет на точность расчетов степень энергетического возбуждения и увеличение числа узлов волновой функции.

Эксперимент можно расширить, выбирая другие точно решаемые примеры стационарных состояний. Так, рассматривая гармонический осциллятор, вводим в игру соответствующий потенциал, правда, ограниченный выбранным интервалом движения, так что необходимо учитывать влияние этого ограничения.

Второй эксперимент — распывание волновых пакетов. В качестве начальной волновой функции выбираем гауссов пакет с дисперсией координат D_0 (в новых безразмерных обозначениях ей будет соответствовать малая величина $D = D_0/L^2 \ll 1$), помещенный на середине интервала, подальше от нежелательных в данном случае граничных влияний:

$$Y(J) = \exp [-(J - I/2)^2/4DI^2]. \quad (2.40)$$

Тестовые примеры заготовлены при изучении свободного распывания (1.86) и распывания на интервале (2.12). В данном численном эксперименте можно уделить главное внимание оптимальному выбору временного шага G , изучая процесс распывания вплоть до увеличения дисперсии координат вдвое, что потребует DI^2/G итераций по времени. Это вытекает из закона распывания (в безразмерных обозначениях, принятых в предыдущем параграфе)

$$D(N) = D [1 + (NG/DI^2)^2]. \quad (2.41)$$

Например, если $I = 1000$, $D = 0,0025$ и $G = 2$, то время распывания соответствует $N = 1250$.

Для тестирования важно, что при распывании изменяется не только модуль волновой функции, но и фаза. Отладив программу на примере гауссиана, можно перейти к наблюдениям за другими пакетами. Конкретные виды волновых функций приведены в параграфе 1.6 (см. также двойной гауссиан в 1.7).

Третий эксперимент является развитием предыдущего и учитывает движение центра пакета, определяемое новым параметром $k_0 = K_0/L$:

$$Y_0(J) = \exp [iK_0(J - I/2)/I - (J - I/2)^2/4DI^2], \quad (2.42)$$

так что имеем возможность следить за перемещением пакета по пустой пока сцене интервала движения, сравнивая с соответствующими тестовыми примерами. Стартуя в середине счетного интервала, пакет дойдет до границы движения за время $N = I^2/4K_0G$. Чтобы при этом он слабо распылся, нужно согласно (2.41) наложить на новый параметр ограничение $4K_0D > 1$ (2.43). Имеется также ограничение и со стороны больших значений волнового числа в связи с дискретностью координатного пространства. Минимальной длине волны отвечает максималь-

ное волновое число, так что для проявления волновых, фазовых свойств необходимо выполнение неравенства $K_0/I < \pi$ (2.44).

Данный эксперимент также преследует вспомогательную цель отладить программу и подобрать оптимальные параметры, хотя, конечно, имеет и самостоятельное значение, демонстрируя эффект свободного перемещения пакета с сохранением его формы, а также эффект столкновения со стенкой.

Вновь в качестве обобщений предлагается рассматривать начальные пакеты самой разнообразной формы как в свободном перемещении, так и при столкновении с непроницаемой границей.

Четвертый эксперимент — столкновение двух пакетов. В качестве конкретного варианта выбираем одинаковые гауссианы, располагающиеся симметрично относительно середины интервала движения и движущиеся навстречу друг другу:

$$Y_0(J) = \exp[iK_0(J - I/4)/I - (J - I/4)^2/4DI^2] + \exp[-iK_0(J - 3I/4)/I - (J - 3I/4)^2/4DI^2]. \quad (2.45)$$

Соответствующий тестовый пример см. в параграфе 1.8. Разновидностью опыта может служить случай разности двух гауссианов. В качестве экспериментальных вариантов можно выбрать другие разности фаз стартующих пакетов, а также разные дисперсии и скорости перемещения. Словом, данный эксперимент также богат возможностями маневрирования. Понаблюдав за столкновением и убедившись в том, что гауссианы после столкновения остаются неизменными («выходят сухими из воды»), продолжаем наблюдения за столкновением гауссианов с границами, когда они также сохраняют свой профиль («как об стенку горох»). Затем можно вновь следить за «соударением» гауссианов и т. д.

Изменив знак перед K_0 в (2.45) получаем па-де-де: выход партнеров-гауссианов (антре), сольные вариации при столкновениях со стенками (адажио) и взаимодействие — соударение (кода).

Выбирая другие стартовые формы волновых функций, приходим к новым вариантам эксперимента. Подробности же кинетики обсуждались в параграфе 1.8.

Пятый эксперимент содержит совершенно новый элемент — узельную модель короткодействующего потенциала. Пусть гауссиан стартует слева от середины интервала движения с центром пакета в узле J_0 :

$$Y_0(J) = \exp[iK_0(J - J_0)/I - (J - J_0)^2/4DI^2]. \quad (2.46)$$

На сцене появляется новое действующее лицо — представитель внешних воздействий — короткодействующий потенциал, моделируемый одноузельным:

$$V(J) = 0, J \neq I/2; V(J) = V_0, J = I/2. \quad (2.47)$$

Величина V_0 может быть как положительной, так и отрицательной. Моделируется рассеяние на δ -потенциале. Постановка задачи отвечает обычной ситуации рассеяния. Соответствующие результаты для рассеяния гауссиана на δ -потенциалах см. в параграфах 1.10 и 2.1. Цель эксперимента — установить, способна ли узельная модель передать

все тонкости рассеяния на δ -потенциале, а если да, то каковы соотношения между их параметрами (величиной u для потенциала $U(x) = u\delta(x)$ и V_0 в (2.47)). Если одного узла мало, можно добавить еще.

Разновидности эксперимента — различные начальные профили волновых функций.

Шестой эксперимент — рассеяние гауссова пакета на прямоугольном потенциале. Пакет задается формулой (2.46), а потенциал определяется выражением

$$\begin{aligned} V(J) &= 0, \quad J < J_1 \text{ и } J > J_2; \\ V(J) &= V_0, \quad J_1 \leq J \leq J_2. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Снова тестовыми примерами могут служить на этапе отладки программы результаты параграфов (1.10) и (1.11), однако после отладки имеем обратную ситуацию: расчеты на основе разностных схем будут служить тестовыми примерами для оценки точности аппроксимаций из указанных параграфов (фазовая, квадратурная, резонансная).

Как в свое время было выяснено, задача имеет много вариантов, иллюстрирует разнообразные кинетические явления. Впервые результаты численного моделирования рассеяния гауссовых пакетов на прямоугольных потенциалах были опубликованы в работе [45], сопровождаемой серией картинок-кадров с изображением характерных стадий процесса. В те времена это производило очень сильное впечатление. Сейчас такие расчеты доступны все более широким кругам изучающих квантовую теорию благодаря появлению большого количества быстродействующих вычислительных машин, но и ныне они поражают воображение. Правда, само моделирование фактически возможно и без применения разностных схем с помощью достаточно простых аппроксимаций, рассмотренных в параграфах 1.10 и 1.11.

Меняя величину потенциала и его ширину, можно наблюдать за переходом от сильной прозрачности к слабой, изучать резонансные эффекты, включая формирование двугорбых отраженных пакетов и явление захвата части пакета областью действия потенциала, туннелирование, надбарьерное и надъямное отражение и т. п. Разумеется, необходим тщательный выбор основных параметров разностной схемы, физических характеристик потенциала и начальной волновой функции. В работе [45] можно найти более подробное обсуждение этих вопросов. Один из вариантов такого выбора в пересчете на наши обозначения следующий: параметры разностной схемы: $I = 1000$; $\omega = 0,5$; $G = 2$; параметры начального пакета: $J_0 = 250$; $D = 1,25 \cdot 10^{-3}$; $K_0 = 50\pi$; параметры потенциала:

$$V_0 = 2K_0^2; \quad J_2 - J_1 = 64. \quad (2.49)$$

Задача о рассеянии гауссовых пакетов на прямоугольных потенциалах имеет не только важное методическое значение, демонстрируя разнообразные кинетические эффекты и возможности метода разностных схем. Она, как уже отмечалось, имеет непосредственный практический, физический смысл в случае плоскостойких сред, а значит, и прикладное значение.

Как всегда, начальный пакет может быть выбран по-разному.

Седьмой эксперимент — моделирование рассеяния на различных одиночных локализованных потенциалах, среди которых можно указать потенциальный барьер Эккарта

$$V(J) = V_0 \operatorname{ch}^{-2} [(J - I/2)/AI], \quad (2.50)$$

потенциал гауссовой формы

$$V(J) = V_0 \exp [-(J - I/2)^2/A^2I^2], \quad (2.51)$$

а также другие аналогичные потенциалы плавной формы, параметры которых должны удовлетворять определенным требованиям. В частности, их ширина должна быть малой по сравнению с шириной интервала движения и в то же время содержать достаточно много координатных шагов, чтобы схема могла передать профиль потенциала. Например, для приведенных выше моделей можно выбирать $AI = 25$.

Восьмой эксперимент — распад и резонанс в двусторонних потенциальных ловушках. Моделируются процесс резонансного рассеяния с временным захватом части пакета ловушкой, аналогичный рассмотренному для прямоугольных барьеров в 1.11, и процесс распада квазистационарного состояния, которое первоначально было стационарным для частицы, запертой в ловушке. Экспериментальная кривая передает зависимость прозрачности ловушки от средней энергии рассеиваемого пакета, а в постановке задачи на распад — зависимость от времени вероятности обнаружения частицы внутри ловушки (вероятность нераспада). Потенциал ловушек можно построить из двух слабопроницаемых прямоугольных барьеров, находящихся на таком расстоянии друг от друга, чтобы подбарьерные квазиуровни были достаточно четко выделены на шкале энергий. В качестве еще более простого «строительного материала» можно предложить узельные модели (два узельных потенциала одного или разных знаков). Рассмотрите также потенциалы-ловушки в форме двугорбых гауссианов, аналогичных по профилю пакетам в параграфе 1.7.

Словом, в данном эксперименте мы встречаемся и с новой физической ситуацией (распад), и с новыми потенциальными формами — двусторонними ловушками.

Девятый эксперимент аналогичен предыдущему, но относится к полупространственному, полуограниченному движению (распад и резонанс в односторонних ловушках). Потенциал односторонней ловушки формируется из слабопроницаемого прямоугольного барьера, расположенного достаточно близко от правой (для определенности) границы интервала движения, чтобы достичь хорошего разрешения подбарьерных квазиуровней на энергетической шкале. Можно также использовать узельную модель потенциала отталкивания. Постановка задачи рассеяния (отражения) следующая. Гауссов пакет движется к ловушке. Вне резонанса возникает сильное отражение от барьера, так что в ловушку проникает лишь небольшая доля пакета, а в условиях резонанса значительная часть пакета свободно просачивается внутрь ловушки и на некоторое время захватывается ею. Постановка задачи распада: начальный пакет отвечает стационарному состоянию частицы, запертой в ловушке, т. е. барьер непрозрачен, имеет бесконечную высоту, а за-

тем внезапно высота барьера становится конечной. Начальное состояние теперь уже не является стационарным, пакет расплывается, «вытекая» из ловушки.

Рассмотрите резонансное отражение и распад вблизи различных квазиуровней. Замерьте время распада и ширину резонанса.

Десятый эксперимент — моделирование поглощения и испускания частиц с помощью комплексных потенциалов. В условиях шестого или седьмого экспериментов изучите случай, когда потенциальная энергия описывается комплексной функцией (разностная схема это допускает). Изменяя знак мнимой части потенциала, экспериментально установите характер эффекта. Измеряя коэффициенты отражения R и прохождения T , найдите изменение нормировки волновой функции и по нему коэффициент поглощения $1 - R - T$ (или испускания $R + T - 1$).

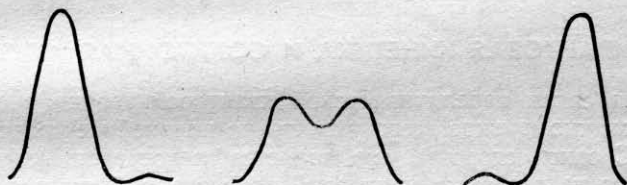


Рис. 6. Пакетные колебания для двух связанных стационарных состояний в потенциальной яме

Исследуйте влияние мнимой части потенциала на все кинетические эффекты при рассеянии. Рассмотрите случай, когда вещественная часть потенциала равна нулю.

Одиннадцатый эксперимент относится к явлениям сильной нестационарности, когда внешние воздействия оказываются переменными. Потенциал явно зависит от времени. Это накладывает определенные ограничения на разностную схему. В частности, изменение потенциала должно быть достаточно плавным, чтобы дискретные шаги во времени могли это улавливать. Например, может изменяться высота барьера и его ширина; потенциал может смещаться как целое, вибрировать, менять форму; поле может включаться и выключаться, постепенно и внезапно и пр.

Двенадцатый эксперимент — рассеяние на солитонах. Этот вопрос заслуживает специального внимания и будет рассмотрен в следующем параграфе вместе с другими аспектами связи квантовой кинетики с солитоникой. Некоторые задачи с аналитическим решением уже затрагивались в параграфе 1.12.

Добавим несколько общих замечаний. Желательно в процессе моделирования иметь картину в импульсном пространстве, что реализуется расчетом фурье-образа волновой функции, а также сопровождать эксперименты вычислением средних значений кинетической и потенциальной энергий и следить за сохранением полной энергии (в случаях переменных полей — за ее изменением). Иногда поучительно перейти к граничным условиям периодичности, изменив соответствующим образом прогонку в разностной схеме. Кроме локализованных потенциалов, можно рассмотреть и потенциалы типа ступеньки,

моделируя отражение на границе двух сред, включая резонансное, если в среде с большим значением потенциала есть дополнительная прослойка потенциала притяжения. В первом эксперименте можно моделировать нестационарные состояния, беря суперпозицию нескольких стационарных состояний (рис. 6). Следует помнить, что рассмотренные одномерные задачи являются фрагментами трехмерных движений в плоскостных средах (результат разделения переменных). Расчеты на основе разностных схем переносятся и на существенно трехмерные случаи, однако вычисления занимают слишком много времени даже на быстродействующих ЭВМ. В экспериментах не затрагивались задачи с нелокальными потенциалами, а также с моделированием случайных влияний. Заметим, что в операторно-разностных схемах шаги по времени могут сочетаться с точным координатным решением.

2.4. КВАНТОВАЯ КИНЕТИКА И СОЛИТОННАЯ ФИЗИКА

Отмечая связи нерелятивистской квантовой теории с солитонной физикой, можно прежде всего указать на нелинейное уравнение Шредингера. С одной стороны, оно является непосредственным обобщением одного из основных уравнений элементарной квантовой кинетики, определяя одномерное движение квазичастицы, обладающей свойством самодействия, потенциальная энергия которой целиком определяется ее состоянием (волновой функцией). С другой стороны, это уравнение описывает волновые явления в различных нелинейных средах [35—37], за редким исключением непосредственно не связанных с квантовой физикой. Тем самым это уравнение служит одним из мостов, соединяющих тематику квантовой кинетики с солитоникой. Второй мост — солитонные решения уравнения Кортевега-де Фриза (КдФ) и метод обратной задачи рассеяния (ОЗР). Нелинейное эволюционное уравнение КдФ, не имеющее формально прямого отношения к квантовой теории, может решаться с помощью квантовомеханических методов (ОЗР). Хотя последние не являются кинетическими, а связаны со стационарной теорией рассеяния, однако, во-первых, мы имеем связь кинетики вообще (КдФ) с квантовой теорией (ОЗР), а во-вторых, стационарная теория рассеяния есть некая аппроксимация нестационарной теории. Далее, можно рассматривать решения уравнения КдФ в качестве постоянных потенциалов в нестационарной теории рассеяния (в частности, так возникает задача о рассеянии гауссиана на солитонах). Наконец, возможна постановка задачи двойной кинетики, когда время уравнения КдФ становится реальным временем и для квантовой задачи, а решение уравнения КдФ служит переменным потенциалом в нестационарной теории рассеяния. В частности, возникает задача рассеяния на движущихся солитонах. Степень сложности задачи двойной кинетики зависит от начальных условий для уравнения КдФ: если они отвечают чисто солитонному решению, то тем самым половина задачи уже решена, так как зависимость потенциала от времени будет определяться достаточно простыми точными формулами солитонных решений уравнения КдФ, хотя и довольно сложными для аналитического решения кинетической задачи неста-

ционного рассеяния; если же начальные условия не являются солитонными, то необходимо, решив уравнение КдФ и «вставив» ответ в уравнение Шредингера (нестационарное), одновременно решать последнее. Наиболее эффективным способом решения в обоих случаях являются численные методы. Разумеется, возможен и случай самосогласованного решения, когда поведение квантовой частицы определяет свойства нелинейного эволюционного уравнения (с переменными коэффициентами). Других вопросов типа квантования нелинейных эволюционных уравнений и инстантонного направления затрагивать не будем.

Переходя к конкретным задачам, вначале обратимся к солитонным решениям уравнения КдФ. В теории солитонов принята стандартная форма этого уравнения вида

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (2.52)$$

где нижние индексы означают соответствующие производные, а u вещественно. Среди решений, убывающих на бесконечности, есть чисто солитонные, определяемые общей точной формулой для N солитонов [37], которую мы не будем выписывать, а приведем результаты для одного и двух солитонов. Односолитонное решение имеет вид

$$u(x, t) = -2\kappa^2 \operatorname{sech}^2 [\kappa(x - 4\kappa^2 t + \delta)]. \quad (2.53)$$

Амплитуда и ширина волнового всплеска характерной формы (солитона) задаются параметром κ . Он же определяет постоянную скорость движения солитона, а второй параметр δ (фаза) показывает начальное положение солитона. Это решение уравнения КдФ отвечает потенциалу Эккарта (1.160) с безотражательным соотношением параметров (1.162) в соответствующих безразмерных переменных.

Двухсолитонное решение уравнения КдФ (2.52) можно компактно записать [35] в виде

$$u(x, t) = -2(\kappa_2^2 - \kappa_1^2)(\kappa_2^2 \operatorname{cosech}^2 \gamma_2 + \kappa_1^2 \operatorname{sech}^2 \gamma_1) \times \\ \times (\kappa_2 \operatorname{cth} \gamma_2 - \kappa_1 \operatorname{th} \gamma_1)^{-2}, \quad (2.54)$$

где $\gamma_l = \kappa_l x - 4\kappa_l^3 t + \delta_l$; $l = 1, 2$; $\kappa_2 > \kappa_1$. Если $\kappa_2 = 2\kappa_1$ и $\delta_1 = \delta_2 = 0$, то два солитона также будут при $t = 0$ сливаться в единый волновой импульс, соответствующий потенциалу Эккарта с безотражательными параметрами:

$$u(x, 0) = -6\kappa_1^2 \operatorname{sech}^2(\kappa_1 x). \quad (2.55)$$

Заметим также, что в частном случае $\kappa_2 = 2$; $\kappa_1 = 1$; $\delta_1 = \delta_2 = 0$ общее выражение (2.54) переходит в часто цитируемую формулу

$$u(x, t) = -12[3 + \operatorname{ch}(4x - 64t) + 4 \operatorname{ch}(2x - 8t)] \times \\ \times [\operatorname{ch}(3x - 36t) + 3 \operatorname{ch}(x - 28t)]^{-2}. \quad (2.56)$$

Чисто солитонным решениям уравнения КдФ (2.52), т. е. убывающим при $|x| \rightarrow \infty$ и дробящимся при $|t| \rightarrow \infty$ на отдельные солитоны вида (2.53), соответствуют безотражательные потенциалы стационарного уравнения Шредингера

$$\Psi'' + [-\kappa^2 - u(x)] \Psi = 0. \quad (2.57)$$

И наоборот: все безотражательные потенциалы уравнения (2.57) образуют однопараметрический по t класс функций, удовлетворяющих нелинейному эволюционному уравнению относительно параметра t вида (2.52). Еще раз следует подчеркнуть, что параметр t является временным аргументом только для уравнения КдФ, а по отношению к стационарному уравнению Шредингера он играет роль формального параметра, так что безотражательность касается фиксированных, постоянных потенциалов в стационарной теории рассеяния.

Безотражательные потенциалы всегда имеют отрицательный знак

$$u(x, t) < 0 \quad \forall x, t, \quad (2.58)$$

хотя профили их достаточно разнообразны и существенно перестраиваются в зависимости от t . Так, двухсолитонный потенциал при $t \rightarrow \pm \infty$ разбивается на два солитона: $u(x, t) \approx -2\kappa_1^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_1 \mp \Delta) - 2\kappa_2^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_2 \pm \Delta)$; $2\Delta = \ln [(\kappa_2 + \kappa_1)/(\kappa_2 - \kappa_1)]$. Быстрый солитон (2) догоняет медленный (1), после столкновения вновь образуются быстрый и медленный солитоны с теми же параметрами, но со сдвигом фаз, который хранит память о взаимодействии солитонов. В этом отношении столкновение солитонов отличается от аналогичного столкновения гауссианов, рассмотренного в параграфе (1.8).

Таким образом, двухсолитонные безотражательные потенциалы могут иметь форму уединенных разных потенциальных ям-солитонов, которые способны объединяться в составную яму. Солитоны не могут быть одинаковыми. В квантовой механике это отвечает отсутствию вырождения уровней энергии связанных состояний в одномерном случае. Слияние солитонов при $t = 0$ в случае $\delta_1 = \delta_2 = 0$ (такой выбор фаз всегда возможен при соответствующем отсчете координат и времени) дает симметричную потенциальную яму, т. е. $u(-x, 0) = u(x, 0)$, а параметры солитонов κ_1 и κ_2 определяют уровни энергии $E_1 = -\kappa_1^2$ и $E_2 = -\kappa_2^2$, являющиеся интегралами уравнения КдФ (2.52).

При этом потенциал имеет вид одиночной ямы при условии $\kappa_2 > \sqrt{3}\kappa_1$ (в частности, при $\kappa_2 = 2\kappa_1$ сводится к яме Эккарта), при $\kappa_2 < \sqrt{3}\kappa_1$ образуется двойная потенциальная яма, а при $\kappa_2 = \sqrt{3}\kappa_1$ возникает яма с уплощенным дном (четверным минимумом). В этом легко убедиться, исследуя выражение (2.54).

Произвольно выбирая пару уровней энергии связанных состояний с κ_1 и κ_2 , всегда можно построить по правилу (2.54) целое семейство потенциалов с данными значениями энергии и соответствующими волновыми функциями стационарных состояний, которые также имеют достаточно простой явный вид (здесь мы их не приводим). Это означает, что копилка тестовых примеров с простыми точными решениями в квантовой механике существенно обогащается случаями локализованных потенциалов разнообразной формы с произвольно задаваемыми уровнями энергии и простыми явными формулами для волновых функций. Кроме локализованных потенциалов с точными решениями, существуют так называемые конечнотонные потенциалы, обладающие

И наоборот: все безотражательные потенциалы уравнения (2.57) образуют однопараметрический по t класс функций, удовлетворяющих нелинейному эволюционному уравнению относительно параметра t вида (2.52). Еще раз следует подчеркнуть, что параметр t является временным аргументом только для уравнения КдФ, а по отношению к стационарному уравнению Шредингера он играет роль формального параметра, так что безотражательность касается фиксированных, постоянных потенциалов в стационарной теории рассеяния.

Безотражательные потенциалы всегда имеют отрицательный знак

$$u(x, t) < 0 \quad \forall x, t, \quad (2.58)$$

хотя профили их достаточно разнообразны и существенно перестраиваются в зависимости от t . Так, двухсолитонный потенциал при $t \rightarrow \mp \infty$ разбивается на два солитона: $u(x, t) \approx -2\kappa_1^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_1 \mp \Delta) - 2\kappa_2^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_2 \pm \Delta)$; $2\Delta = \ln [(\kappa_2 + \kappa_1)/(\kappa_2 - \kappa_1)]$. Быстрый солитон (2) догоняет медленный (1), после столкновения вновь образуются быстрый и медленный солитоны с теми же параметрами, но со сдвигом фаз, который хранит память о взаимодействии солитонов. В этом отношении столкновение солитонов отличается от аналогичного столкновения гауссианов, рассмотренного в параграфе (1.8).

Таким образом, двухсолитонные безотражательные потенциалы могут иметь форму уединенных разных потенциальных ям-солитонов, которые способны объединяться в составную яму. Солитоны не могут быть одинаковыми. В квантовой механике это отвечает отсутствию вырождения уровней энергии связанных состояний в одномерном случае. Слияние солитонов при $t = 0$ в случае $\delta_1 = \delta_2 = 0$ (такой выбор фаз всегда возможен при соответствующем отсчете координат и времени) дает симметричную потенциальную яму, т. е. $u(-x, 0) = u(x, 0)$, а параметры солитонов κ_1 и κ_2 определяют уровни энергии $E_1 = -\kappa_1^2$ и $E_2 = -\kappa_2^2$, являющиеся интегралами уравнения КдФ (2.52).

При этом потенциал имеет вид одиночной ямы при условии $\kappa_2 > \sqrt{3}\kappa_1$ (в частности, при $\kappa_2 = 2\kappa_1$ сводится к яме Эккарта), при $\kappa_2 < \sqrt{3}\kappa_1$ образуется двойная потенциальная яма, а при $\kappa_2 = \sqrt{3}\kappa_1$ возникает яма с уплощенным дном (четверным минимумом). В этом легко убедиться, исследуя выражение (2.54).

Произвольно выбирая пару уровней энергии связанных состояний с κ_1 и κ_2 , всегда можно построить по правилу (2.54) целое семейство потенциалов с данными значениями энергии и соответствующими волновыми функциями стационарных состояний, которые также имеют достаточно простой явный вид (здесь мы их не приводим). Это означает, что копилка тестовых примеров с простыми точными решениями в квантовой механике существенно обогащается случаями локализованных потенциалов разнообразной формы с произвольно задаваемыми уровнями энергии и простыми явными формулами для волновых функций. Кроме локализованных потенциалов с точными решениями, существуют так называемые конечнозонные потенциалы, обладающие

еще более интересными свойствами и специфическими точными решениями [36, 37], которые мы не будем затрагивать.

Завершая краткий обзор требуемых для дальнейшего сведений об одно- и двухсолитонных решениях уравнения КдФ, предлагаем провести вводный, ознакомительный эксперимент, связанный с движением солитонов. Что касается односолитонного решения, то явное аналитическое выражение (2.53) выглядит настолько просто, что дает полное представление о всех свойствах отдельного солитона: амплитуда равна $2\kappa^2$, скорость перемещения вправо (всегда вправо) равна $4\kappa^2$, площадь равна 4κ (убедитесь в этом), полная ширина составляет приблизительно $4/\kappa$. Профиль характерный. Полезно воспроизвести его в крупном масштабе, сопоставив с гауссианом. Кстати, когда речь идет о солитонах, а не о соответствующих безотражательных потенциальных ямах, то лучше полагать $u(x, t) > 0$. Физически всплески волнового поля обычно положительны и лишь ради удобства записи соотношений ОЗР изменен знак в уравнении КдФ (2.52) и введен множитель 6.

Однако уже двухсолитонное решение, задаваемое также достаточно простой аналитической формулой (2.54), в общем случае требует расшифровки. Это можно сделать, организовав демонстрационный эксперимент с помощью несложного вычислительного устройства. Как уже отмечалось, выбором отсчета координаты и времени обращаем фазы δ_1 и δ_2 в нуль. Эксперимент состоит из двух частей. Первая демонстрация показывает столкновение, взаимодействие двух солитонов. Для отработки масштабов начинаем с $t = 0$, т. е. наблюдаем за развитием событий после слияния солитонов. Заглянув в будущее, имеем полное представление и о прошлом, поскольку задача симметрична относительно преобразования $t \rightarrow -t$; $x \rightarrow -x$ (при указанном выборе отсчета t и x). Это позволяет выбрать такой момент времени начала опыта $t < 0$, когда солитоны достаточно удалены друг от друга.

Итак, на старте два уединенных солитона: слева быстрый с параметром κ_2 , а правее от него находится медленный с κ_1 . Начинаются гонки, однако вопроса, догонит или не догонит, у зрителя не возникает. Интерес вызывает другое — стадия непосредственного контакта солитонов. Что же произойдет при их непосредственном столкновении? Однако, все совершается весьма буднично. Никаких особых потрясений, всплесков, как это было при встрече гауссианов, нет. Солитоны постепенно сливаются в одно волновое образование, а затем процесс идет в обратном порядке. При этом в силу законов сохранения уравнения КдФ (2.52) сохраняются общая площадь и скорость «центра масс» солитонов. Изменяя соотношение между скоростями солитонов, убеждаемся, что имеются разные режимы взаимодействия, и приходим к двум интерпретациям следующего содержания.

Первая — обгон через стадию полного слияния — подходит к случаям существенно различных солитонов (один — большой и быстрый, а другой — маленький и медленный). Солитоны — жители одномерного пространства — не могут обогнать друг друга иначе, чем через стадию объединения, слияния (сравните с программой ЭВМ пятого

поколения Японии, которая намерена «обогнать, не догоняя»). При этом большой солитон поглощает, поедает меньшего, образуется единый волновой импульс, а затем вновь вырисовывается контур большого солитона впереди и отставшего малого солитона. Результатом взаимодействия является некоторое опережение для большого солитона по сравнению со свободным движением и задержка для малого: на всем интервале движения

$$\begin{aligned}\Delta x_2 &= 2\kappa_2^{-1}\Delta = \kappa_2^{-1} \ln [(\kappa_2 + \kappa_1)/(\kappa_2 - \kappa_1)]; \\ \Delta x_1 &= -2\kappa_1^{-1}\Delta = -\kappa_1^{-1} \ln [(\kappa_2 + \kappa_1)/(\kappa_2 - \kappa_1)].\end{aligned}\quad (2.59)$$

Вторая трактовка — эстафетная передача параметров через стадию частичного объединения солитонов. Она адекватна в случае близких по параметрам солитонов. Солитоны обмениваются скоростями. Эстафетный механизм помогает лучше понять увеличение эффекта смещения (2.59) для почти одинаковых солитонов, у которых на стадии частичного слияния образуется двугорбый профиль волнового поля.

Разумеется, картина двух солитонов на стадии объединения есть большая условность. Индивидуализировать солитоны на этой стадии можно лишь с целью лучшего понимания происходящего.

Эффект опережения и задержки можно более наглядно показать, закрыв ширмой участок, на котором совершается соединение солитонов, и сопоставив движение взаимодействующих солитонов на конечной стадии с движением чисто свободным (ниже на экране).

Вторая демонстрация нацелена на более подробное знакомство с возможными профилями волнового поля в момент $t = 0$ наиболее полного объединения солитонов. При этом поучительнее перевернуть картинку «вверх ногами», т. е. вернуться к отрицательным значениям u и говорить о безотражательных потенциальных ямах. На экране целесообразно также отмечать положение уровней энергии (как принято на графиках потенциальной энергии, проводятся горизонтальные линии, отвечающие данной полной энергии).

Вначале рассматриваем большие значения κ_2/κ_1 . Потенциал имеет вид заостренной глубокой ямы, уровни разделены большим промежутком. Для солитонов имеем одnogорбый верблюжий профиль — «дромедар». Уменьшая отношение κ_2/κ_1 , получаем при $\kappa_2/\kappa_1 = 2$ характерный профиль ямы Эккарта (для солитона — «эккартон»), а далее, при $\kappa_2/\kappa_1 = \sqrt{3}$ приходим к случаю ямы с уплощенным дном (для солитона получаем характерный шляпный профиль — «наполеон»). После этого идут уже двойные ямы с достаточно малой энергетической щелью (для солитонов — двугорбые верблюжьи профили — типа «бактриан») и все более четко выраженными раздельными ямами (туннельное расщепление уровней энергии в симметричной двойной потенциальной яме).

На этом вводный эксперимент, позволяющий представить себе характер парного взаимодействия солитонов, а также познакомиться с некоторыми профилями безотражательных двухсолитонных потенциальных ям, заканчивается.

Второй эксперимент также является до некоторой степени вспомогательным. Он подготавливает почву для основного опыта и знакомит с общими решениями уравнения КдФ. Речь пойдет о численном интегрировании уравнения КдФ при произвольных начальных условиях, когда решение не сводится в общем случае к чисто солитонному, так что точных аналитических формул получить не удастся (для всех стадий движения волнового поля). В принципе задача решается на основе ОЗР, однако в случае непрозрачных потенциалов фактическое решение интегрального уравнения ОЗР не удастся получить в явном виде. Исторически именно численные эксперименты Крускала и Забуски дали толчок современной теории солитонов и способствовали развитию метода ОЗР.

Итак, рассматриваем решение уравнения КдФ с помощью разностных схем. Существуют различные подходы к построению разностных схем для такого типа уравнений. С ними можно познакомиться, в частности, в книге [46]. В данном случае нашей целью является моделирование, а не построение самих схем, так что приведем два примера готовых достаточно простых разностных схем.

Первая схема — двухшаговая явная схема Лакса—Вендрофа [46, с. 39] типа предиктор—корректор, записанная для уравнения КдФ в форме $u_t + uu_x + u_{xxx} = 0$. Ответ для уравнения (2.52) получается делением результатов интегрирования на -6 . В стандартных обозначениях схема имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} u_{j+1/2}^{n+1/2} = & \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_j^n) - \frac{\tau}{4h} [(u_{j+1}^n)^2 - (u_j^n)^2 + \\ & + \frac{2}{h^2} (u_{j+2}^n - 3u_{j+1}^n + 3u_j^n - u_{j-1}^n)]; \\ u_j^{n+1} = & u_j^n - \frac{\tau}{2h} [(u_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (u_{j-1/2}^{n+1/2})^2 + \\ & + \frac{2}{h^2} (u_{j+3/2}^{n+1/2} - 3u_{j+1/2}^{n+1/2} + 3u_{j-1/2}^{n+1/2} - u_{j-3/2}^{n+1/2})], \end{aligned} \quad (2.60)$$

где $h \equiv \Delta x$; $\tau \equiv \Delta t$. Неравенство $\Delta t \leq (\Delta x)^3/4$ обеспечивает устойчивость этой схемы.

Удобно сохранить стандартные для нашего испытательного полигона граничные условия обращения в нуль искомого решения за пределами интервала движения.

Вторая схема — алгоритм Забуски [47]. Его запишем непосредственно для уравнения (2.52) с учетом условия устойчивости для этой схемы $\Delta t = (\Delta x)^3/4$ в очень простой явной двухслойной форме

$$u_j^{n+1} = u_{j+1}^n - (u_{j+2}^{n+1} - u_{j-1}^n)(1 + \bar{s})/(3 - \bar{s}), \quad (2.61)$$

где $\bar{s} = -\frac{3}{4}(\Delta x)^2(u_{j+2}^{n+1} + u_{j-1}^n)$.

Схема (2.61) кажется неявной, но для наших граничных условий она очень просто реализуется одиночной прогонкой, если вести ее от правой границы.

Для отладки программ используйте тестовые примеры точных решений для одного солитона (2.53) и двух солитонов (2.54). Желатель-

но сопровождать расчеты наблюдением за интегральными характеристиками — суммами u и u^2 , отвечающими законам сохранения (линейному и квадратичному интегралам уравнения КдФ).

Начните с более простого алгоритма Забуски (2.61), выбрав маленький полигон с $I = 40$ и достаточно большой шаг $\Delta x = 0,2$. В качестве начального условия возьмите двухсолитонное решение на стадии слияния вида $u(x, 0) = -6 \operatorname{sech}^2 [\Delta x (J - 13)]$. Число шагов во времени до разделения солитонов оказывается порядка 100. За это время можно ясно увидеть формирование большого солитона и образование малого, а также наблюдать за фазовыми смещениями. При этом нужно иметь в виду, что рассматривается не весь процесс, а лишь его второй этап, от слияния солитонов до их разделения, так что сдвиги по координате центров волновых импульсов должны быть вдвое меньше, чем по формулам (2.59). Кроме того, можно наблюдать слабые осцилляции вблизи левой границы движения, вызванные чисто расчетными причинами (нефизическое влияние границ, которое устраняется расширением полигона — после грубой отладки).

Затем переходите к наблюдению всего процесса столкновения двух солитонов, опираясь на результаты предыдущего вводного эксперимента и увеличивая размеры испытательного полигона, а также варьируя другие параметры задачи.

Далее можно перейти к разнообразным экспериментам, выбирая в качестве начального условия различные начальные профили, отличающиеся от чисто солитонных: ямы Экарта с несолитонными параметрами, потенциалы в виде гауссиана, ступенчатые и синусоидальные профили. При этом наблюдаются как дробление волнового поля с появлением солитонных всплесков, так и эффекты типа волнового шлейфа с осцилляциями и т. п. Следует иметь в виду, что все наблюдаемые деформации несолитонных потенциалов сопровождаются сохранением уровней энергии и отражательных способностей потенциала, хотя само расположение уровней энергии в общем случае точно указать нельзя.

Наконец, можно перейти к основным опытам по нестационарному рассеянию на солитонах. В независимом варианте мы берем точное решение уравнения КдФ (двухсолитонный потенциал какого-нибудь фиксированного профиля) и наблюдаем прохождение гауссиана на обычном полигоне (как в шестом и седьмом экспериментах предыдущего параграфа). В упрощенном варианте двойной кинетики берется двухсолитонное решение, однако время рассматривается не как формальный параметр, а как истинное время нестационарного уравнения Шредингера, т. е. имеем задачу о рассеянии на переменном потенциале. Если двухсолитонное (для определенности) решение в первой постановке дает полную прозрачность, и остается только следить за деталями движения пакета над солитонами и замерять результирующий эффект опережения, то здесь ставится задача установить, как влияет движение солитонов на характер рассеяния. Имеется, так сказать, двойная нестационарность: и пакетное движение, и переменный потенциал. Другой вариант — расширенный — несолитонное начальное условие и совместное численное решение двух эволюционных

уравнений (нелинейного уравнения КдФ и линейного уравнения Шредингера).

В завершение этого параграфа для самостоятельной проработки остаются численные эксперименты по наблюдению за солитонными и несолитонными решениями нелинейного уравнения Шредингера (кубического) [35—37].

2.5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Остановимся на некоторых вопросах машинного моделирования, особенно важного при изучении квантовой теории, поскольку непосредственно увидеть микропроцессы невозможно (кроме случаев квантовой макрофизики). Абстрактный характер квантового описания настоятельно требует максимального использования иллюстраций.

С помощью машинного моделирования становятся наглядными самые трудные для восприятия нестационарные явления, относящиеся к квантовой кинетике (рассеяние, резонансные явления, пакетное движение, квантовая диффузия, реакция на переменные внешние воздействия и т. п.).

Другой важный аспект — постановка вычислительного эксперимента с целью изучения неизвестных закономерностей, неисследованных явлений.

Многие из рассмотренных в книге численных экспериментов осуществимы с помощью достаточно простых вычислительных устройств, хотя наибольшего эффекта можно достичь только при работе в диалоговом режиме с быстродействующей ЭВМ, выводя результаты на экран дисплея в виде движущихся изображений и т. д.

Наиболее доступными в настоящее время являются программируемые микрокалькуляторы. С их помощью можно достаточно быстро табулировать относительно сложные выражения, а также производить операции типа интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений или вычисления однократных интегралов. Это позволяет моделировать некоторые простые процессы типа распыления пакетов, но существенно ограничивает возможности численного эксперимента, т. е. многократного проведения больших серий вычислений с изменением большого количества параметров физической системы и используемых численных методов. Да и представление результатов возможно в чрезвычайно замедленном темпе с построением вручную графиков для отдельных стадий изучаемого процесса.

Следующий класс вычислительных устройств — портативные компьютеры, обладающие гораздо более широкими возможностями, работающие на языке (обычно это БЕЙСИК) программирования и обладающие оперативной памятью, позволяющей производить достаточно сложные расчеты. Им уже доступна реализация разностных схем для дифференциальных уравнений в частных производных, правда, еще с минимальными параметрами и с небольшой точностью. Главный же недостаток этого класса устройств — маленький дисплей, на котором обычно демонстрируется лишь одна строка знаков.

Далее идут персональные компьютеры со специальным дисплеем или использующие экран обычного телевизора. Здесь открываются гораздо более широкие возможности графических построений, движущихся изображений, появляется возможность наблюдать все этапы процесса, следить за деталями временных изменений. Кроме того, такие устройства могут подключаться к большой ЭВМ, снабжены различными печатающими устройствами, графопостроителем и т. п.

Наконец, работа на дисплее более высокого класса с большой ЭВМ, диалоговый режим, специальные графопостроители и т. п.

В настоящее время основное внимание уделяется развитию среднего звена ЭВМ — персональных компьютеров. Именно на них рассчитаны те машинные эксперименты, которые обсуждаются в книге.

Если в первой части книги вопросам численного моделирования было отведено достаточно скромное место, то вторая часть нацелена именно на машинный эксперимент, в самых широких масштабах. Необходимо еще раз подчеркнуть, что численное моделирование играет очень важную роль иллюстративную, демонстрационную, однако главной целью является исследование, эксперимент, что невозможно или очень сложно произвести аналитическими методами. Вычислительный эксперимент часто стимулирует последующие аналитические расчеты, играя важную эвристическую роль. С его помощью ведется разведка бoем при исследовании сложных, недоступных реальному экспериментированию явлений.

В книге аналитические расчеты, предполагающие машинное моделирование, доведены до такого вида, чтобы максимально приблизить читателя к непосредственному программированию. Этап перехода от физических величин и преобразований к операциям программирования предельно сокращен. Конечно, это не означает, что достаточно сесть за компьютер, и сразу можно наблюдать процесс. Требуется еще кропотливый труд по составлению программы и ее отладке. В связи с этим каждый раз даются конкретные указания тестовых примеров, однако сама отладка всегда трудоемкий процесс. При работе же с дисплеем и организации движущихся изображений возникают новые осложнения: масштабирование, кадрирование, темп смены кадров. Цветовое оформление также имеет большое значение для восприятия.

Словом, трудностей на пути организации даже простых демонстраций много, но зато сколько положительных эмоций вызывает у вас появление ожидаемых правильных результатов, какое возбуждение, подъем, а иногда и восторг вызывают ожившие картины пакетного движения, столкновения солитонов и т. п. Однако это только первые шаги, это все еще введение. Главное, конечно, начинается позднее, после достижения первых успехов в демонстрировании, когда можно переходить к постановке собственно экспериментов. Будь то эксперименты по выбору оптимальных вычислительных параметров или самые важные физические опыты по экспериментально-теоретическому исследованию совершенно непредсказуемых деталей в общих чертах известного явления, открытие (хотя бы только для себя и в достаточно узких учебных рамках) новых эффектов, закономерностей, правил.

Здесь важны жажда знаний, терпение, собранность, усидчивость. Как ярко тут проявляются черты характера исследователя. Каждый может проверить себя. Здесь не только тестируется программа, тестируется явление, но и тестируется сам исследователь.

При проведении экспериментов необходимо тщательно оформить запись программы, снабдив ее как можно более подробными комментариями и в самой программе, и в приложениях к ней. Если даже вы сами пользуетесь программой, то детали очень быстро забываются, не говоря уже о передаче программы другому пользователю. Пока вы работаете с программой, все кажется ясным, но уже через месяц невозможно установить детали обозначений, если они не зафиксированы документально.

При проведении машинных экспериментов требуется аккуратная запись результатов. Полезно все данные записывать и сохранять. Демонстрации подобраны так, чтобы можно было пользоваться типовыми программами для нескольких аналогичных демонстраций. Упражнения обычно рассчитаны на повторение уже проработанных расчетов. Унифицирован и кинетический полигон, испытательный стенд, счетный интервал для проведения большой серии разнообразных экспериментов квантовой кинетики и солитонной физики. Этим преследуется цель как можно больше упростить и облегчить подготовительные работы машинного моделирования, чтобы технические детали не отвлекали от основной задачи проведения вычислительных экспериментов и исследования физической стороны явлений.

Необходимо подчеркнуть, что в книгах по квантовой теории вопросы численного моделирования и машинных экспериментов не затрагивались, не говоря уже об учебной литературе. Такие вопросы стали актуальными и доступными для реализации лишь в самое последнее время в связи с быстрым развитием вычислительной техники и переходом на новые формы общения с машиной.

Предполагается знакомство читателя с основами программирования и практическими навыками машинного моделирования. Можно рекомендовать следующую литературу по вопросам, связанным с машинным моделированием, кроме уже упоминавшихся пособий по различным схемам: по численным методам [43, 44] и [57]; по языкам программирования [58—61]; по машинному моделированию в физике [48, 49]; по отладке программ [50—52]; по общим вопросам развития и применения ЭВМ [53—56]. Здесь же можно назвать литературу по одному из перспективных общих направлений кинетики сложных систем — по синергетике [62—67].

Переходя к третьему, заключительному разделу книги, вновь возвращаемся в лоно аналитических расчетов без применения численных методов. В связи с этим приведем перечень основных примеров машинного моделирования и вычислительного эксперимента, подробно рассмотренных в первых двух разделах.

1. Явление распыления гауссова пакета. Формула (1.86) готова к непосредственному моделированию процесса.

2. Распыление прямоугольного пакета. Формула (1.87) подготовлена к использованию квадратурных формул численного интегрирования.

3. Расплывание семи вариантов пакетов. В конце параграфа 1.6 приведены конкретные формулы для самостоятельного проведения экспериментов.

4. Расплывание двойного гауссиана. Выражение (1.96) готово для моделирования.

5. Столкновение двух гауссианов. Формула (1.108) дает возможность сразу же приступить к моделированию.

6. Столкновение гауссова пакета со стенкой. Выражение (1.113) подготовлено к моделированию.

7. Рассеяние гауссова пакета на дельта-потенциалах. Формула (1.138) позволяет перейти к непосредственному моделированию.

8. Резонансное рассеяние на прямоугольном потенциале. Выражение (1.159) позволяет также перейти к моделированию.

9. Резонансное рассеяние на солитонах подробно рассмотрено в параграфе 1.12 и моделирование предложено осуществить самостоятельно в виде упражнений.

10. Эффект распыливания гауссова пакета, движущегося на конечном интервале (кинетическом стенде — интервале движения с граничными условиями непроницаемости). Формула (2.12) готова к моделированию.

11. Движение гауссова пакета на кинетическом интервале, включая эффект столкновения со стенкой. Формула (2.17) полностью подготовлена для моделирования.

12. Рассеяние гауссова пакета на дельта-потенциале и последующие эффекты столкновения отраженного и прошедшего пакетов со стенками и друг с другом. Формула (2.23) полностью готова для проведения экспериментов.

13. Параграф 2.3 целиком посвящен машинным экспериментам на основе применения разностных схем. Подробно описаны и подготовлены двенадцать машинных экспериментов, проводимых на унифицированном кинетическом полигоне и охватывающих широкий спектр явлений и эффектов квантовой кинетики.

14. Взаимодействие двух солитонов. На основе формулы (2.54) для точного двухсолитонного решения подробно рассмотрено машинное моделирование явления столкновения двух солитонов уравнения КдФ.

15. Решение уравнения КдФ на основе разностных схем (2.60) и (2.61). Подробное описание экспериментов с солитонными и несолитонными решениями.

16. Рассеяние гауссова пакета на неподвижных и движущихся солитонах. В конце предыдущего параграфа подробно описана постановка этих и более общих вычислительных экспериментов.

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ

3.1. РЕАКЦИЯ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ. МЕТОД КУБО

Первый раздел книги был посвящен главным образом общим вопросам квантовой кинетики и явлениям, которые происходят при постоянных внешних условиях и исследуются на основе теории стационарных состояний. Второй раздел был нацелен на применение численных методов и проведение машинных экспериментов. Развитые общие методы подготовили почву для изучения переменных внешних воздействий. Кроме того, если до сих пор затрагивались достаточно простые системы типа одночастичных, то теперь будем иметь в виду чаще всего многочастичные макроскопические системы. Перейдем непосредственно к постановке основной кинетической задачи теории реакции системы на внешние воздействия.

Рассматривается система с не зависящим от времени гамильтонианом естественной эволюции H_0 , которая к моменту времени включения переменного возмущения $H_1(t)$ находилась в равновесном состоянии, описываемом статистическим оператором $\rho(t_0) \equiv \rho_0$. Как обычно, операторы в картине Шредингера записываются без специальных значков, а в этом параграфе опускаем и шляпки над операторами, чтобы не загромождать форму. Таким образом, в начальных условиях существенно, что $\{H_0, \rho_0\} = 0$ (3.1). Требуется найти среднее значение физической величины f в момент времени наблюдения t . Разного рода обобщения такой задачи будут обсуждаться далее.

Для решения поставленной задачи целесообразно воспользоваться представлением взаимодействия (см. параграф 1.1). При этом вспомогательный временной параметр, при котором все величины во всех представлениях (картинах Шредингера, Гейзенберга и Дирака) совпадают, удобно выбрать равным нулю. Во избежание недоразумений подчеркнем, что начальный момент времени t_0 определяется физическими условиями, а параметр, о котором идет речь, является формальным, произвольным. Операторы в таком представлении будем обозначать тильдой. Они связаны со шредингеровскими соотношением

$$\tilde{A}(t) = \exp(itH_0/\hbar) A \exp(-itH_0/\hbar), \quad (3.2)$$

поскольку пропагаторы естественной эволюции сводятся к экспонентам:

$$U_0(t_1, t_2) = \exp[-i(t_1 - t_2)H_0/\hbar]. \quad (3.3)$$

В частности, для статоператора в начальный момент времени в силу (3.1) имеем:

$$\tilde{\rho}(t_0) = \exp(it_0H_0/\hbar) \rho(t_0) \exp(-it_0H_0/\hbar) = \rho(t_0) = \rho_0. \quad (3.4)$$

Таким образом, самое общее кинетическое уравнение — уравнение Лиувилля — и начальное условие в выбранном представлении взаимодействия записываются в виде

$$\partial \bar{\rho}(t)/\partial t = -\{\tilde{H}_1(t), \bar{\rho}(t)\}, \quad \bar{\rho}(t_0) = \rho_0. \quad (3.5)$$

Переходя к соответствующему интегральному уравнению $\bar{\rho}(t) = \rho_0 - \int_{t_0}^t dt_1 \{\tilde{H}_1(t_1), \bar{\rho}(t_1)\}$, получаем методом итераций, в первом приближении теории возмущений выражение

$$\bar{\rho}_1(t) = \rho_0 - \int_{t_0}^t dt_1 \{\tilde{H}_1(t_1), \rho_0\}, \quad (3.6)$$

во втором приближении

$$\bar{\rho}_2(t) = \bar{\rho}_1(t) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \{\tilde{H}_1(t_1), \{\tilde{H}_1(t_2), \rho_0\}\} \quad (3.7)$$

и т. д. В общем виде ответ можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(t) = \rho_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \{ \tilde{H}_1(t_1), \\ \{ \tilde{H}_1(t_2), \dots, \{ \tilde{H}_1(t_k), \rho_0 \} \dots \} \}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Полученный результат играет роль формального точного решения кинетического уравнения (3.5). Он имеет весьма абстрактный вид и содержит избыточную информацию о всей системе в целом, тогда как фактически обычно требуется знание свойств какой-то ее части, подсистемы. В данном случае этот результат является промежуточным звеном в решении задачи. Главная цель — вычисление реакции системы в виде среднего значения некоторой важной физической характеристики системы или ее части. На основании (3.8) вычисляем искомое среднее значение

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle = \text{Sp} [\tilde{f}(t) \bar{\rho}(t)] = \text{Sp} [\tilde{f}(t) \rho_0] + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \dots \\ \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \text{Sp} [\tilde{f}(t) \{ \tilde{H}_1(t_1), \dots, \{ \tilde{H}_1(t_k), \rho_0 \} \dots \}]. \end{aligned}$$

Первое слагаемое имеет смысл среднего значения рассматриваемой величины в исходном равновесном состоянии: $\text{Sp} [\tilde{f}(t) \rho_0] = \text{Sp} [\exp \times \times (itH_0/\hbar) f \exp (-itH_0/\hbar) \rho_0] = \text{Sp} (f \rho_0) = \langle f \rangle_0$. В дальнейшем символ $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение по равновесному состоянию. Преобразование остальных членов в сумме к такого вида средним проводится на основе тождества $\text{Sp} (a \{b, c\}) = \text{Sp} (\{a, b\} c)$. Так, линейный член преобразуется следующим образом:

$$\text{Sp} (f \{H_1, \rho_0\}) = \text{Sp} (\{f, H_1\} \rho_0) = \langle \{f, H_1\} \rangle_0.$$

Аналогичной процедуре выпутывания из сетей скобок Пуассона оператора ρ_0 квадратичный член подвергается дважды:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(f\{H_1, \{H_2, \rho_0\}\}) &= \text{Sp}(\{f, H_1\}\{H_2, \rho_0\}) = \\ &= \text{Sp}(\{\{f, H_1\}, H_2\}\rho_0) = \langle \{f, H_1\}, H_2 \rangle_0, \end{aligned}$$

где для краткости обозначены $f \equiv \tilde{f}(t)$; $H_{1,2} \equiv \tilde{H}_1(t_{1,2})$, и т. д. Окончательный ответ для реакции системы можно представить в виде суммы среднего значения по исходному состоянию и добавки (реакции) за счет внешнего воздействия, записанной в форме ряда теории возмущений:

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle &= \langle f \rangle_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \times \\ &\times \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \langle \dots \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \}, \tilde{H}_1(t_2) \}, \dots, \tilde{H}_1(t_k) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Полученное выражение является основным в методе Кубо (для определенности будем говорить о методе Кубо, хотя исторически подобные результаты были получены впервые разными авторами). В линейном приближении мы имеем решение кинетического уравнения в виде (3.6) и реакцию

$$\Delta_1 \langle f \rangle = - \int_{t_0}^t dt_1 \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \} \rangle_0. \quad (3.10)$$

Эти результаты лежат в основе так называемой линейной теории реакции системы на внешние воздействия, а нелинейные вклады начинаются с членов второго порядка теории возмущений (3.7) и соответствующей квадратичной реакции

$$\Delta_2 \langle f \rangle = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle \{ \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \}, \tilde{H}_1(t_2) \} \rangle_0. \quad (3.11)$$

Расчет среднего значения можно выполнить методом канонических преобразований в представлении взаимодействия с помощью S -оператора, который является оператором движения в этом представлении. Тогда решение уравнения Лиувилля (3.5) запишется в виде

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{S}(t, t_0) \rho(t_0) \tilde{S}^{-1}(t, t_0) = \tilde{S}(t, t_0) \rho_0 \tilde{S}^{-1}(t, t_0), \quad (3.12)$$

а для среднего значения имеем компактное выражение

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle &= \text{Sp}[\tilde{f}(t) \tilde{\rho}(t)] = \text{Sp}[\tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rho_0 \tilde{S}^{-1}(t, t_0)] = \\ &= \text{Sp}[\tilde{S}^{-1}(t, t_0) \tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rho_0] = \langle \tilde{S}^{-1}(t, t_0) \tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Из него вытекает (3.9), если S -оператор записать в виде ряда теории возмущений и выполнить соответствующие умножения. Однако форму ответа (3.13) можно считать более общей, так как она не предполагает обязательного разложения в ряд. Для S -оператора, удовлетво-

ряющего эволюционному уравнению $\partial \tilde{S} / \partial t = -i \tilde{H}_1(t) \tilde{S} / \hbar$; $\tilde{S}(t_0, t_0) = 1$, можно строить другие приближения (или решать задачу точно, если это возможно), не предполагая малости $H_1(t)$ и не прибегая к методу теории возмущений даже в обобщенном смысле.

Обсудим некоторые свойства ряда Кубо (3.9). Структура ряда отвечает идее генерации реакции оператором $H_1(t)$: коммутаторы соответствуют элементарному изменению рассматриваемой динамической переменной во времени, а для конечного временного интервала образуется иерархия коммутаторов и временных интегралов. Порядок по возмущению, как нетрудно убедиться, есть и порядок по малому времени промежутку.

Выражение (3.9) допускает непосредственный переход к классическому пределу.

В задаче учтена возможность выключения внешнего воздействия до момента наблюдения t . Тогда верхний предел левого интеграла в (3.9) будет равен моменту выключения, а возникающая физическая ситуация отвечает изучению релаксации рассматриваемой системы в чистом виде.

Запаздывающий характер реакции отражен в ступенчатой структуре многократного интегрирования по времени в (3.9).

Нужно иметь в виду, что в некоторых случаях под влиянием внешнего воздействия изменяется также сама форма исследуемой величины. Например, в магнитном поле выражение для вектора плотности потока частиц изменяется, получая добавку: $\vec{j} = \vec{j}_0 - e \vec{A} \rho / mc$. Такая добавка уже сама по себе линейна по возмущению, так что в члене нулевого приближения $\langle \vec{j} \rangle_0$ (в 3.9) будет содержаться линейная по полю величина, а в остальной сумме часть с $\vec{j}_0$ построена обычным образом, а часть с $\vec{A}$ перестраивает порядок приближения: k -й член дает вклад $(k+1)$ -го порядка по возмущению.

Если одновременно действуют два механических возмущения и $H_1 = H_1^{(1)} + H_1^{(2)}$, то линейная реакция (3.10) равна сумме независимых вкладов: $\Delta_1 \langle f \rangle = \Delta_1^{(1)} \langle f \rangle + \Delta_1^{(2)} \langle f \rangle$. В членах же более высокого порядка это не так. Например, квадратичная реакция (3.11) равна $\Delta_2 \langle f \rangle = \Delta_2^{(1)} \langle f \rangle + \Delta_2^{(2)} \langle f \rangle + \Delta_2^{(1,2)} \langle f \rangle$ и содержит вклады двух типов: $\Delta^{(1)}$ и $\Delta^{(2)}$ описывают эффекты самодействия, а $\Delta^{(1,2)}$ отвечает эффекту взаимного влияния, когда на фоне, создаваемом одним возмущением, действует другое. Типичный нелинейный эффект. Возмущения различной природы нельзя рассматривать независимо вне линейного приближения. Линейные реакции описываются так называемыми обобщенными восприимчивостями (рассказ о них еще предстоит), а в нелинейных эффектах аналогичную роль играют кросс-восприимчивости.

Сам Кубо сравнивал метод прямого получения физических характеристик типа обобщенных восприимчивостей в обход построению и решению частных кинетических уравнений с методом статсуммы в статистической физике. Основным достижением его метода можно считать сведение кинетических величин к равновесным средним, для расчета

которых хорошо развиты различные технические приемы (хотя сами по себе эти расчеты в реальных сложных системах оказываются весьма сложными).

Одной из проблем метода Кубо является учет термостата и термических возмущений, не описываемых непосредственно с помощью гамильтониана возмущения. Развитый подход относится к случаю замкнутой системы, для которой эволюция описывается уравнением Лиувилля (3.5). Если система и была в контакте с термостатом до начального момента времени t_0 , то в дальнейшем учитывается лишь динамический контакт с источником возмущения (без обратной связи), а термостат явно исключается. Правда, разработаны разного рода косвенные приемы имитации термостата и термических возмущений, которых мы здесь касаться не будем. Можно также расширить систему, включив в нее термостат и описывая с помощью гамильтониана взаимодействие интересующей нас подсистемы с ее окружением. Тогда усреднения при расчете характеристик подсистемы будут содержать свертки по состояниям термостата и значительно усложнятся.

Другая проблема заключается в учете обратной связи с источником воздействий, которая в рассматриваемом методе игнорируется.

Метод допускает следующее непосредственное обобщение. Если начальным состоянием системы будет смешанное стационарное (состояние термодинамического равновесия является его частным случаем), когда $\partial \rho_0 / \partial t = 0$, то согласно уравнению Лиувилля отсюда вытекает, что $\{H_0, \rho_0\} = 0$. Таким образом, единственное условие, использованное в проведенных расчетах для равновесного начального состояния, выполнено и в этом случае (коммутативность с невозмущенным гамильтонианом). Результаты Кубо (3.9) и (3.13) остаются в силе, если теперь понимать усреднение $\langle \dots \rangle_0$ как производимое по начальному стационарному состоянию. Хотя такое обобщение внешне не требует каких-либо изменений результатов, однако практически вычисление таких средних может оказаться затруднительным, так как для равновесных распределений разработаны мощные методы квантовой теории поля [86—89].

В линейном приближении (3.10) зависимость от времени наблюдения t удобно сосредоточить в подынтегральном выражении, введя обрезающий фактор — ступенчатую функцию Хевисайда:

$$\Delta_1 \langle f \rangle = \int_{t_0}^{\infty} dt_1 \theta(t - t_1) \langle \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \rangle_0;$$

$$\theta(t) = 1, t > 0; \theta(t) = 0, t < 0. \quad (3.14)$$

Так возникает связь линейных реакций с временными функциями Грина (запаздывающими коммутаторными). Аналогичным образом ступенчатый характер интегралов по времени в любом порядке теории возмущений (3.9) выравнивается введением соответствующего произведения θ — функций в интегрируемые выражения. Таким способом устанавливается связь нелинейных реакций с многовременными запаздывающими функциями Грина коммутаторного типа. Функция Грина вида $\theta(t - t_1) \langle \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \rangle_0$ в общем случае зависит от каждого из временных аргументов, т. е. является истинно двухвременной. Однако

можно перейти к более простым двухвременным функциям, зависящим только от разности временных аргументов, с помощью следующего приема. Гамильтониан возмущения в представлении взаимодействия зависит от времени как явно, в соответствии с законом изменения внешнего воздействия, так и неявно в силу канонического преобразования (3.2). Эту двойную зависимость можно разделить, разложив шредингеровский оператор в интеграл Фурье (либо в ряд Фурье для периодического возмущения, либо представив в виде суммы с несоизмеримыми частотами для почти периодической зависимости). Обозначая такое разложение условной суммой $H_1(t) = \sum_{\Omega} \exp(-i\Omega t) H_{1\Omega}$, выражаем согласно (3.14) линейную реакцию

$$\Delta_1 \langle f \rangle = \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\Omega(t-t_1)} \theta(t-t_1) \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_{1\Omega}(t_1) \} \rangle_0$$

через функции Грина, зависящие, как будет показано далее, только от разности временных аргументов. Это позволяет рассматривать для них спектральное разложение и т. п.

Такие функции будут предметом обсуждения в следующем параграфе.

Отметим также, что изучение спонтанных флуктуаций в системе приводит к корреляционным функциям (см. параграф 1.4), выражаемым через аналогичные антикоммутаторные характеристики. Позднее будет установлена связь функций Грина с корреляционными функциями. Вычисление же неравновесных флуктуационных величин по методу Кубо приводит уже в первом порядке теории возмущений к смешанным коммутаторно-антикоммутаторным выражениям.

В заключение этого параграфа предлагаем упражнения на закрепление материала и развитие теории. Рассмотрите случай, когда возмущение действует кратковременно и описывается гамильтонианом $H_1(t) = A\delta(t)$. Получите явные формулы для временной корреляции флуктуаций методом Кубо в линейном приближении. Обобщите результаты развитой теории на случай переменной естественной эволюции системы.

3.2. ВРЕМЕННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Как отмечалось в конце предыдущего параграфа, линейная реакция системы на внешние механические воздействия связана с двухвременными функциями Грина запаздывающего типа. В свою очередь, с этими функциями Грина тесно связаны аналогичные величины опережающего и причинного типа. Введем следующие определения и обозначения. Для запаздывающих функций Грина:

$$G_{AB}^{\eta}(t_1, t_2) = \ll A(t_1) | B(t_2) \gg^{\eta} = \theta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_2)]^{\eta} \rangle, \quad (3.15)$$

где в обобщенном коммутанте $[A, B]^{\eta} \equiv AB - \eta BA$ знак коммутаторности принимает значения $\eta = 0, \pm 1$, а ступенчатая функция Хевисайда обеспечивает запаздывающий характер функций (от англ.

retard — запаздывать). Аналогичным образом вводятся опережающие функции Грина

$$G_{AB}^{an}(t_1, t_2) = \ll A(t_1) | B(t_2) \gg^{an} = -\theta(t_2 - t_1) \langle [A(t_1), B(t_2)]^n \rangle \quad (3.16)$$

(advance — опережать). Для причинных функций Грина

$$G_{AB}^{cn}(t_1, t_2) = \ll A(t_1) | B(t_2) \gg^{cn} = \langle T_\eta A(t_1) B(t_2) \rangle = \\ = \theta(t_1 - t_2) \langle A(t_1) B(t_2) \rangle + \eta \theta(t_2 - t_1) \langle B(t_2) A(t_1) \rangle \quad (3.17)$$

(cause — вызывать, причина) коммутаторный знак принимает два значения $\eta = \pm 1$. При этом выбор η зависит не от типа статистики (Ферми или Бозе), а диктуется характером решаемой задачи. Например, если функции Грина используются в линейной реакции, то только коммутаторная функция Грина непосредственно участвует в расчетах. Если же исследуются спонтанные флуктуации, то привлекаются антикоммутаторные функции Грина.

К указанным функциям Грина непосредственно примыкает вспомогательная корреляционная функция

$$F_{AB}(t_1, t_2) = \langle A(t_1) B(t_2) \rangle, \quad (3.18)$$

через которую можно выразить все функции Грина:

$$G_{AB}^{cn}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) F_{AB}(t_1, t_2) - \eta F_{BA}(t_2, t_1); \\ G_{AB}^{an}(t_1, t_2) = -\theta(t_2 - t_1) [F_{AB}(t_1, t_2) - \eta F_{BA}(t_2, t_1)]; \quad (3.19) \\ G_{AB}^{cn}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) F_{AB}(t_1, t_2) + \eta \theta(t_2 - t_1) F_{BA}(t_2, t_1).$$

Функции Грина имеют разрыв при совпадающих временных аргументах с одним и тем же скачком $G_{AB}^\eta(t+0, t) - G_{AB}^\eta(t-0, t) = \langle [A(t), B(t)]^\eta \rangle$, что приводит к одноптипным для всех функций Грина дифференциальным уравнениям

$$\partial G_{AB}^\eta(t_1, t_2) / \partial t_1 = \delta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_1)]^\eta \rangle + G_{\{H, A\}B}^\eta(t_1, t_2), \quad (3.20)$$

подтверждая общность рассматриваемых функций. Эти дифференциальные уравнения служат основой одного из направлений расчетных методов. Другого типа уравнения для функций Грина получаются путем функционального дифференцирования (см., например, [24, 84]).

Здесь и в дальнейшем во всех функциях Грина операторы будем считать не зависящими явно от времени и взятыми в представлении взаимодействия указанного в предыдущем параграфе типа, которое по отношению к системе самой по себе является гейзенберговским. Гамильтониан системы и знак усреднения по равновесному состоянию будем записывать без специальных значков, а также опустим знак тильды над операторами.

Рассматриваемые функции Грина зависят только от разности временных аргументов. Достаточно проверить это на примере корреляционной функции (3.18), воспользовавшись возможностью цикличе-

ской перестановки операторов под знаком шпура и коммутативностью гамильтониана со статистическим оператором:

$$F_{AB}(t_1, t_2) = \langle A(t_1) B(t_2) \rangle = \text{Sp} [\exp(it_1 H/\hbar) A \exp(-it_1 H/\hbar) \times \\ \times \exp(it_2 H/\hbar) B \exp(-it_2 H/\hbar) \rho] = \text{Sp} \{ \exp(it_1 H/\hbar) A \exp \times \\ \times [-i(t_1 - t_2) H/\hbar] B \rho \exp(-it_2 H/\hbar) \} = \text{Sp} \{ \exp[i(t_1 - t_2) H/\hbar] A \times \\ \times \exp[-i(t_1 - t_2) H/\hbar] B \rho \} = \langle A(t_1 - t_2) B \rangle \equiv F_{AB}(t_1 - t_2).$$

В соответствии с (3.19) все функции Грина зависят от разности временных аргументов, так что будем записывать их с одним аргументом: $G_{AB}^\eta(t) \equiv G_{AB}^\eta(t_1, t_2)$; $t \equiv t_1 - t_2$. В связи с этим удобно перейти к частотному представлению, т. е. ввести фурье-преобразование по временному аргументу. Вначале такое спектральное представление вводим для вспомогательной корреляционной функции $F_{AB}(t) =$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} F_{AB}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega/2\pi.$$

Фурье-образ этой корреляционной функции в дальнейшем будем называть функцией спектральной интенсивности (плотности) и обозначать специальным символом

$$I_{AB}(\omega) \equiv F_{AB}(\omega). \quad (3.21)$$

Функция спектральной плотности имеет непосредственный физический смысл в классическом пределе, а в квантовом случае она играет вспомогательную роль, как и функция $F(t)$. Переходя к представлению, в котором диагональны гамильтониан системы H и статистический оператор ρ , получаем для корреляционной функции выражение

$$F_{AB}(t) = \langle A(t) B \rangle = \text{Sp} [\exp(itH/\hbar) A \exp(-itH/\hbar) B \rho] = \\ = \sum_{n, m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \exp[-it(E_m - E_n)/\hbar].$$

Тогда функцию спектральной плотности можно записать в удобном для изучения ее общих свойств виде

$$I_{AB}(\omega) = 2\pi \sum_{n, m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega); \\ \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar. \quad (3.22)$$

Вычисляя комплексно сопряженное выражение $I_{AB}^*(\omega) = 2\pi \sum_{n, m} A_{nm}^* \times \\ \times B_{mn}^* \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega) = 2\pi \sum_{n, m} (B^+)_{nm} (A^+)_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega)$, приходим к свойству симметрии

$$I_{AB}^*(\omega) = I_{B^+ A^+}(\omega), \quad (3.23)$$

которое является следствием билинейной по операторам структуры корреляционной функции.

Другое свойство симметрии связано с явным видом статистического оператора для равновесной системы с каноническим (или большим каноническим) распределением: $I_{AB}(-\omega) = 2\pi \sum_{n, m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} +$

$+\omega) = 2\pi \sum_{m,n} A_{mn} B_{nm} \rho_{mm} \delta(\omega_{nm} + \omega) = 2\pi \sum_{m,n} B_{nm} A_{mn} \rho_{nn} \exp [-(E_m - E_n)/T] \delta(\omega_{mn} - \omega)$, где использовано, что в случае $\rho = Z^{-1} \exp \times (-H/T)$ диагональные элементы можно записать в виде $\rho_{mm} = \rho_{nn} \exp [-(E_m - E_n)/T]$. Таким образом, второе свойство симметрии — температурное связано с изменением знака частоты:

$$I_{AB}(-\omega) = I_{BA}(\omega) \exp(-\hbar\omega/T). \quad (3.24)$$

Рассмотрим, кроме того, операцию обобщенной инверсии времени, при которой $t \rightarrow -t$, $i \rightarrow -i$ и изменяется знак соответствующих внешних параметров типа магнитного поля. Тогда для корреляционной функции $F_{AB}(t) = \text{Sp} [\exp(itH/\hbar) A \exp(-itH/\hbar) B \rho]$ в силу инвариантности гамильтониана и зависящего от него статоператора получим соотношение $F_{AB}^*(-t) = \pm F_{AB}'(t)$, если при указанной операции величины преобразуются таким образом, что A и B не изменяют знака, либо вместе изменяют знак (тогда имеем $+$), либо изменяется знак лишь у одной из них (тогда имеем $-$). Специальный знак штриха относится к изменению знака внешних параметров. Переходя к функции спектральной интенсивности, получаем свойство симметрии онзагеровского типа

$$I_{AB}^*(\omega) = \pm I_{AB}'(\omega). \quad (3.25)$$

Совместно со свойством (3.23) оно приводит к соотношению

$$I_{AB}(\omega) = \pm I_{B^+A^+}'(\omega), \quad (3.26)$$

так что при отсутствии магнитного поля или других аналогичных внешних параметров функция спектральной интенсивности вещественна для величин однотипных или мнимая для разнотипных:

$$I_{AB}^*(\omega) = \pm I_{AB}(\omega), \quad (3.27)$$

а в общем случае для физических величин, т. е. когда $A^+ = A$ и $B^+ = B$, эта симметрия сводится к соотношению

$$I_{AB}(\omega) = \pm I_{BA}'(\omega). \quad (3.28)$$

Следующим шагом является переход к спектральному представлению для функций Грина. Учитывая фурье-разложение ступенчатой функции Хевисайда

$$\Theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i\omega t)}{\omega + i\varepsilon} d\omega,$$

где (и в дальнейшем) $\varepsilon \rightarrow +0$, и правило свертки $f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega - \omega') \psi(\omega') d\omega' / 2\pi$ для $f(t) = \varphi(t) \psi(t)$, приходим на основании (3.19) к следующим спектральным представлениям:

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega + i\varepsilon)} d\omega' \quad (3.29)$$

$$G_{AB}^{a\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega - i\varepsilon)} d\omega'. \quad (3.30)$$

Объединение выражений (3.29) и (3.30)

$$G_{AB}^{a\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega \pm i\varepsilon)} d\omega' \quad (3.31)$$

показывает, что спектральные представления запаздывающей и опережающей функций Грина являются предельными значениями интегралов типа Коши (см. в связи с этим [105], а также прил. 2 в [85]) и могут быть непосредственно продолжены аналитически в соответствующие полуплоскости комплексной частоты ω .

В качестве упражнения получите спектральное представление для причинной функции Грина.

Таким образом, в соответствии с общими свойствами интегралов типа Коши запаздывающая функция Грина имеет фурье-образ аналитичный в верхней полуплоскости комплексной частоты ω , убывает на бесконечности и может иметь особенности только в нижней полуплоскости или на вещественной оси. То же касается опережающей функции Грина в соответствующей полуплоскости, однако опережающая функция Грина вовсе не является аналитическим продолжением запаздывающей и наоборот, хотя обе они записываются в виде одного и того же интеграла типа Коши в соответствии с (3.31):

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (3.32)$$

где ω является комплексной переменной. При $\text{Im} \omega > 0$ имеем функцию, являющуюся аналитическим продолжением запаздывающей функции Грина, а при $\text{Im} \omega < 0$ — опережающей. В соответствии с формулами Сохоцкого (см. [106]) скачок предельных значений (3.31) интеграла типа Коши (3.32) равен

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) - G_{AB}^{a\eta}(\omega) = I_{AB}(\omega) - \eta I_{BA}(-\omega); \quad \text{Im} \omega = 0. \quad (3.33)$$

Таким образом, обе функции можно восстановить, зная их разность для вещественных значений частоты.

Как видим, между свойством запаздывания (полуограниченности) во времени и аналитическими свойствами в частотном представлении имеется непосредственная связь. То же касается обратной задачи, когда в частотном (энергетическом) представлении мы имеем дело с полуограниченной функцией, вследствие чего появляется аналитичность соответствующей временной характеристики. Последняя ситуация встречается в теории распада нестационарного состояния [99, 100].

Одним из преимуществ аналитических функций является возможность восстанавливать всю функцию по известным ее фрагментам (по фазе — модуль, по мнимой части — вещественную и т. д.). Это реализуется с помощью так называемых дисперсионных соотношений (см., например, [106]). При отсутствии особенностей на вещественной оси для запаздывающей функции Грина можно записать простейшие дисперсионные соотношения в форме связи вещественной и мнимой частей

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G_{AB}^{\eta}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_{AB}^{\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'; \\ \operatorname{Im} G_{AB}^{\eta}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} G_{AB}^{\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Аналогичные дисперсионные соотношения для опережающей функции Грина имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G_{AB}^{a\eta}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G_{AB}^{a\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'; \\ \operatorname{Im} G_{AB}^{a\eta}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} G_{AB}^{a\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Опираясь на формулу для интеграла типа Коши (3.32), можно вывести ряд свойств функций Грина запаздывающего и опережающего типа, связанных с отмеченными симметриями функции спектральной интенсивности.

Операция комплексного сопряжения с учетом (3.23) дает следующее соотношение в области комплексных частот: $G_{AB}^{\eta}(\omega)^* = -G_{B+A+}^{\eta}(\omega^*)$, из которого при переходе к вещественным частотам вытекает первое свойство симметрии функций Грина

$$G_{AB}^{\eta}(\omega)^* = -G_{B+A+}^{a\eta}(\omega), \quad (3.36)$$

связывающее разнотипные функции.

Второе свойство симметрии отвечает инверсии частоты и справедливо при $\eta = \pm 1$ $G_{AB}^{\eta}(-\omega) = \eta G_{BA}^{\eta}(\omega)$. Заметим, что оно не связано с симметрией функции $I(\omega)$. Отсюда для вещественных частот получаем свойство симметрии функций Грина

$$G_{AB}^{\eta}(-\omega) = \eta G_{BA}^{a\eta}(\omega). \quad (3.37)$$

Наконец, соотношение (3.26) приводит к аналогичному соотношению $G_{AB}^{\eta}(\omega) = \pm G_{B+A+}^{\eta}(\omega)^{(')}$ и соответствующему свойству симметрии для функций Грина

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \pm G_{B+A+}^{r\eta}(\omega)^{(')}. \quad (3.38)$$

Добавим, что свойство симметрии функции спектральной интенсивности (3.24) здесь участия не принимало, а проявится ниже.

В качестве упражнения покажите, что в случае вещественных функций спектральной интенсивности $I(\omega)$ вторые уравнения в дисперсионных соотношениях (3.34) и (3.35) получаются непосредственно из спектральных представлений (3.29) и (3.30).

Новые возможности появляются при переходе в область комплексных значений переменной t . И в этом случае удобно начать со вспомогательных корреляционных функций $F_{AB}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp \times$

$\times (-i\omega t) d\omega/2\pi$. Если считать временной аргумент комплексным $t = t' + it''$, то для отрицательной мнимой части t'' сходимость интеграла на верхнем пределе усиливается за счет множителя $\exp(-\omega |t''|)$. Сходимость же на нижнем пределе обеспечивается при условии $|t''| \leq \hbar/T$, поскольку в силу температурной симметрии (3.24) имеем для корреляционной функции $F_{BA}(-t)$ интеграл Фурье $F_{BA}(-t) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{BA}(\omega) \exp(i\omega t) d\omega/2\pi = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(-\hbar\omega/T - i\omega t) d\omega/2\pi$, где даже при возрастающем множителе $\exp(-\hbar\omega/T)$ на нижнем пределе предполагается сходимость.

Таким образом, в температурном случае при весьма общих предположениях о свойствах функции спектральной интенсивности (фактически требуется равномерная сходимость рассмотренных интегралов) можно считать корреляционную функцию $F_{AB}(t)$ аналитической функцией временного аргумента в полосе $-\hbar/T \leq \text{Im} t \leq 0$. Причем само аналитическое продолжение осуществляется непосредственно интегралом. Вводя новую переменную $\tau = it/\hbar$, получаем для корреляционных функций спектральные разложения вида $F_{AB}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp$

$\times (\omega) \exp(-\hbar\omega\tau) d\omega/2\pi$; $0 < \text{Re} \tau < \beta$ и $F_{BA}(-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp \times$
 $\times [-\hbar\omega(\tau + \beta)] d\omega/2\pi$; $-\beta < \text{Re} \tau < 0$, где введено обозначение для обратной температуры $\beta \equiv 1/T$. Из сравнения этих соотношений вытекает свойство симметрии корреляционных функций в области комплексной температурной переменной

$$F_{BA}(-\tau) = F_{AB}(\tau + \beta); \quad -\beta < \text{Re} \tau < 0, \quad (3.39)$$

которое является следствием температурной симметрии функции спектральной интенсивности (3.24).

Аналитические свойства корреляционных функций в области комплексного времени (или температурной переменной) используются в технике вычисления корреляционных величин с применением методов квантовой теории поля (см., например, [103]). Другое направление исследований ограничивается только отрезком вещественной оси температурной переменной τ (другими словами, рассматривается

чисто мнимое время), где вводится причинная функция Грина, аналогичная временной причинной функции Грина (3.17) и (3.19):

$$\tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) = \theta(\tau) F_{AB}(\tau) + \eta \theta(-\tau) F_{BA}(-\tau) = \langle T_{\eta} A(\tau) B \rangle. \quad (3.40)$$

Она определена на интервале $-\beta < \tau < \beta$ и носит название мацубаровской, или температурной функции Грина. В силу (3.39) при $-\beta < \tau < 0$ имеем соотношение $\tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) = \eta F_{BA}(-\tau) = \eta F_{AB}(\tau + \beta)$, которое означает, что такая функция Грина обладает свойством симметрии

$$\tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) = \eta \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau + \beta). \quad (3.41)$$

Для коммутаторных функций Грина ($\eta = +1$) оно отвечает периодичности, а для антикоммутаторных ($\eta = -1$) — антипериодичности.

Подобные функции были введены впервые для расчета равновесных характеристик (термодинамических величин) с помощью температурных аналогов техники квантовой теории поля при вычислении средних значений от хронологизированных произведений операторов (так называемая мацубаровская техника). В работах Абрикосова, Горькова и Дзялошинского (см., например, [86]) метод Мацубары получил дальнейшее развитие при переходе в соответствующее частотное представление. Мацубаровская функция Грина (3.40) раскладывается в ряд Фурье на отрезке $-\beta < \tau < \beta$:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) &= T \sum_{\omega_n} \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\omega_n) \exp(-i\omega_n \tau); \\ \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\omega_n) &= \int_{-\beta}^{\beta} \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau/2; \\ \omega_n &= n\pi T; \quad n = 0, \pm 1, \dots \end{aligned} \quad (3.42)$$

и тем самым периодически продолжается на всю ось температурной переменной τ . При этом свойство симметрии функций Грина (3.41) приводит к правилу отбора для частот:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\omega_n) &= \eta \int_{-\beta}^0 \tilde{G}(\tau + \beta) \exp(i\omega_n \tau) d\tau/2 + \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau/2 = \\ &= [1 + \eta \exp(-i\omega_n \beta)] \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau/2 = [1 + \eta(-1)^n] \times \\ &\quad \times \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau/2. \end{aligned}$$

Таким образом, в случае $\eta = +1$ отличны от нуля только фурье-компоненты с четными частотами $\omega_{2m} = 2m\pi T$, а в случае $\eta = -1$ — с нечетными $\omega_{2m+1} = (2m+1)\pi T$. Следует, однако, еще раз подчеркнуть, что в рассматриваемом кинетическом применении выбор знака коммутаторности η определяется не статистикой, которой подчиняются

частицы системы, а характером задачи: коммутаторные функции дают линейную реакцию, а антикоммутаторные позволяют рассчитать спонтанные корреляции флуктуаций. Для соответствующих отличных от нуля фурье-образов имеем:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\omega_n) &= \int_0^\beta \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \int_0^\beta F_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \\ &= \int_0^\beta \exp(i\omega_n \tau) \left[\int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') \exp(-\hbar\omega' \tau) d\omega' / 2\pi \right] d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') \times \\ &\quad \times \frac{1 - (-1)^n \exp(-\hbar\omega' \beta)}{\hbar\omega' - i\omega_n} d\omega' / 2\pi.\end{aligned}$$

Учитывая, что при этом $\eta = (-1)^n$, приходим к спектральному представлению причинных температурных функций Грина

$$\tilde{G}_{AB}^{\epsilon\eta}(\omega_n) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') [1 - \eta \exp(-\hbar\omega' \beta)]}{\omega' - i\omega_n/\hbar} d\omega', \quad (3.43)$$

которое аналогично выведенному ранее для запаздывающих и опережающих функций Грина (3.31) и имеет вид интеграла типа Коши. Правда, фурье-образы причинной функции Грина определены лишь на дискретном множестве частот ω_n , однако оно имеет предельную точку сгущения на бесконечности, что обеспечивает аналитическое продолжение в соответствующие области комплексных частот (см. [86]). Сопоставление выражений (3.43) и (3.32) дает формальное соотношение

$$\tilde{G}_{AB}^{\epsilon\eta}(\omega_n) = \frac{i}{\hbar} G_{AB}^{\eta}(i\omega_n/\hbar), \quad (3.44)$$

из которого с учетом конкретных свойств ветвей аналитического продолжения запаздывающих и опережающих функций Грина вытекают решения двух задач: по известным запаздывающим и опережающим функциям Грина получить температурную причинную функцию Грина и по известным значениям фурье-компонент причинной функции Грина восстановить запаздывающую и опережающую функции Грина.

При решении первой задачи нужно учесть свойства аналитического продолжения запаздывающих и опережающих функций Грина. Тогда приходим к следующей процедуре: причинная функция Грина для положительных частот получается из аналитического продолжения запаздывающей функции Грина в точках положительной мнимой полуоси

$$\tilde{G}_{AB}^{\epsilon\eta}(\omega_n) = \frac{i}{\hbar} G_{AB}^{\eta}(i\omega_n/\hbar); \quad \omega_n > 0,$$

а для отрицательных частот — из аналогичного аналитического продолжения для опережающей функции Грина

$$\tilde{G}_{AB}^{\epsilon\eta}(\omega_n) = \frac{i}{\hbar} G_{AB}^{\eta}(i\omega_n/\hbar); \quad \omega_n < 0.$$

С точки зрения кинетики наибольший интерес представляет вторая, обратная задача. Ее решение получается также на основе соотношения (3.44), прочитанного в обратном направлении:

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{\hbar}{i} \tilde{G}_{AB}^{\varepsilon\eta} \left(\omega_n = \frac{\hbar\omega}{i} \right). \quad (3.45)$$

Зная причинную функцию Грина для дискретных частот, продолжаем ее аналитически в правой полуплоскости до правого берега мнимой оси, что дает запаздывающую функцию Грина

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{\hbar}{i} \tilde{G}_{AB}^{\varepsilon\eta} \left(\frac{\hbar\omega}{i} + \varepsilon \right), \quad (3.46)$$

а соответствующее аналитическое продолжение с левой полуоси вещественных частот (дискретных отрицательных) в левой полуплоскости до левого берега мнимой оси дает опережающую функцию Грина

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{\hbar}{i} \tilde{G}_{AB}^{\varepsilon\eta} \left(\frac{\hbar\omega}{i} - \varepsilon \right). \quad (3.47)$$

Для наглядности нужно изобразить соответствующую плоскость комплексных частот, указать дискретные точки и области аналитического продолжения.

Для температурных причинных функций Грина была разработана техника вычислений, основанная на методах квантовой теории поля: введение аналога гейзенберговского и дираковского представлений для температурной переменной (учитывается взаимодействие частиц внутри самой системы), аналога S -оператора, выражение всех физических характеристик через полевые операторы вторичного квантования, использование аналога теоремы Вика и построение ряда обобщенной теории возмущений, применение диаграммной техники и методов выборочного суммирования в бесконечных рядах и т. д.

Специально для расчета кинетических характеристик эти методы развиты в работе [102], а также для чисто корреляционных исходных величин в [103], см. также [84—91].

Завершая обсуждение временных функций Грина, кратко суммируем основные методы их вычисления.

Решение дифференциального уравнения во временном представлении. Фактически получается система связанных между собой уравнений типа цепочек Боголюбова [79, 80]. Сюда же примыкают методы уравнений для вариационных производных. При этом используются конкретные частичные характеристики локального типа.

Прямое вычисление корреляционных функций во временном представлении (3.18) или на основе разложения для функции спектральной интенсивности в энергетическом представлении (3.22), а также использование аналитического продолжения в полосу комплексного времени.

Расчет причинных температурных функций Грина (мацубаровских) с помощью методов квантовой теории поля и переход к запаздывающе-опережающим функциям Грина на основе аналитического продолжения в частотном представлении согласно (3.46) и (3.47).

Как уже отмечалось, запаздывающие коммутаторные функции Грина имеют непосредственный физический смысл, описывая линейную реакцию системы на переменные внешние воздействия. При этом получают прямую физическую трактовку как временное, так и частотное представления функций Грина, что будет показано в следующем параграфе при более конкретном анализе обобщенных восприимчивостей.

В качестве упражнения рассмотрите вид функции спектральной интенсивности (3.22) для двухуровневой системы.

Получите функции Грина одночастичного типа для идеального газа: гамильтониан системы в представлении вторичного квантования имеет вид $H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k$, где k — полный набор квантовых чисел стационарного состояния одной частицы, а вычисляемые величины имеют билинейную структуру по операторам рождения и уничтожения вида $\langle a_k(t_1) a_l^+(t_2) \rangle$.

3.3. ОБОБЩЕННЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Пусть на систему действует возмущение в виде зондов

$$H_1(t) = -A_k F_k(t),$$

где в общем случае имеется в виду суммирование по дважды встречающимся индексам, нумерующим обобщенные силы $F_k(t)$ и обобщенные координаты системы A_k . Реакция на такого типа зондирование в линейном приближении согласно (3.10) равна

$$\langle A_l(t) \rangle = \int_{t_0}^t \langle \{ \tilde{A}_l(t), \tilde{A}_k(t_1) \} \rangle_0 F_k(t_1) dt_1,$$

где предполагаем, что в невозмущенной системе средние значения интересующих нас величин равны нулю, т. е. $\langle A_l \rangle_0 = 0$. Отсюда вытекает запись реакций в виде

$$\langle A_l(t) \rangle = \int_{t_0}^t \varphi_{lk}(t-t_1) F_k(t_1) dt_1, \quad (3.48)$$

где введены величины $\varphi_{lk}(t-t_1) = \langle \{ \tilde{A}_l(t), \tilde{A}_k(t_1) \} \rangle_0$, называемые функциями последствия и имеющие физический смысл l -й реакции системы на k -й единичный импульсный зонд. Действительно, если $F_k(t) = f\delta(t)$, то $\varphi_{lk}(t) = \langle A_l(t) \rangle / \dot{f}$. Функции последствия

$$\varphi_{lk}(t) = \langle \{ \tilde{A}_l(t), A_k \} \rangle_0 \quad (3.49)$$

вещественны и в реальных макроскопических системах убывают с ростом t , описывая процесс релаксации при импульсном зондировании системы. Другие их свойства будут обсуждены позднее.

Заметим, что обозначение обобщенных сил той же буквой, что и вспомогательных корреляционных функций в предыдущем параграфе не должны приводить к путанице, поскольку последние не будут больше фигурировать в явном виде.

Рассмотренный тип импульсных зондов является предельным случаем короткодействующего возмущения и содержит в своем спектре равномерно все частоты. Другой предельный случай отвечает одной частоте. Это — монохроматические зонды.

Предположим, что все зонды являются монохроматическими с одной и той же частотой (одноцветные) и включаются адиабатически при $t \rightarrow -\infty$, т. е. $F_k(t) = \exp(\epsilon t) \operatorname{Re} [F_k^0 \exp(-i\omega t)] = \exp(\epsilon t) |F_k^0| \cos(\omega t - \beta_k)$; $F_k^0 = |F_k^0| \exp(i\beta_k)$, где обычная предельная процедура $\epsilon \rightarrow +0$ выполняется после всех других преобразований. Тогда в соответствии с (3.48) реакция равна

$$\begin{aligned} \langle A_l(t) \rangle &= \int_{-\infty}^t \varphi_{lk}(t-t_1) \exp(\epsilon t_1) \operatorname{Re} [F_k^0 \exp(-i\omega t_1)] dt_1 = \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \exp[(-\epsilon + i\omega)\tau] \varphi_{lk}(\tau) d\tau F_k^0 \exp[(\epsilon - i\omega)t] \right\}, \end{aligned}$$

или

$$\langle A_l(t) \rangle = \operatorname{Re} \{ \chi_{lk}(\omega) F_k^0 \exp[(\epsilon - i\omega)t] \}. \quad (3.50)$$

Величины $\chi_{lk}(\omega)$ называются обобщенными восприимчивостями системы (или адмиттансами). Частота ω имеет малую мнимую добавку $i\epsilon$, которую явно выписывать у адмиттанса не будем. Восприимчивости являются комплексными величинами, их модули определяют модули соответствующих реакций, а фазы определяют запаздывание по отношению к возбуждающей обобщенной силе:

$$\begin{aligned} \langle A_l(t) \rangle &= \exp(\epsilon t) |\chi_{lk}(\omega)| |F_k^0| \cos(\omega t - \beta_k - \alpha_{lk}); \\ \chi_{lk} &= |\chi_{lk}| \exp i\alpha_{lk}. \end{aligned}$$

Обобщенные восприимчивости непосредственно связаны с функциями последействия:

$$\chi_{lk}(\omega) = \int_0^{\infty} \varphi_{lk}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau. \quad (3.51)$$

В силу линейности связи реакции с обобщенными силами при произвольной зависимости последних от времени согласно

$$F_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_k(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega/2\pi$$

имеем для соответствующего фурье-образа реакции соотношение

$$\langle A_l \rangle_{\omega} = \chi_{lk}(\omega) F_k(\omega), \quad (3.52)$$

чем определяется универсальная роль адмиттансов в линейной теории реакции.

Выражение (3.51) позволяет связать обобщенные восприимчивости непосредственно с запаздывающими функциями Грина:

$$\begin{aligned}\chi_{lk}(\omega) &= i \int_0^{\infty} \theta(\tau) \langle [\bar{A}_l(\tau), A_k] \rangle_0 \exp(i\omega\tau) d\tau/\hbar = \\ &= i \int_{-\infty}^{\infty} G_{lk}^{\eta=1}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau/\hbar,\end{aligned}$$

так что

$$\chi_{lk}(\omega) = \frac{i}{\hbar} G_{lk}^{\eta=1}(\omega). \quad (3.53)$$

Тем самым устанавливается прямой физический смысл фурье-образов запаздывающих коммутаторных функций Грина, а с другой стороны, переносятся на обобщенные восприимчивости все свойства и расчетные методы функций Грина.

Подобным же образом непосредственный физический смысл запаздывающих функций Грина во временном представлении определяется их связью с функциями последействия (3.49):

$$G_{lk}^{\eta=1}(t) = \frac{\hbar}{i} \theta(t) \varphi_{lk}(t). \quad (3.54)$$

В соответствии с (3.53) адмиттансы аналитичны в верхней полуплоскости комплексной частоты ω и обладают рядом свойств симметрии: из (3.36) и (3.37) вытекает, что

$$\chi_{kl}^*(\omega) = \chi_{kl}(-\omega). \quad (3.55)$$

Это приводит к четности реальной части адмиттанса и нечетности мнимой его части:

$$\begin{aligned}\chi_{kl}(\omega) &= \chi'_{kl}(\omega) + i\chi''_{kl}(\omega); \\ \chi'_{kl}(-\omega) &= \chi'_{kl}(\omega); \\ \chi''_{kl}(-\omega) &= -\chi''_{kl}(\omega).\end{aligned} \quad (3.56)$$

Если у адмиттансов нет особенностей на вещественной оси частот, то для них справедливы дисперсионные соотношения вида (3.34), а учет (3.56) приводит к формулам

$$\begin{aligned}\chi'_{kl}(\omega) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \chi''_{kl}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'; \\ \chi''_{kl}(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi'_{kl}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'.\end{aligned} \quad (3.57)$$

Симметрия функций Грина (3.38) переносится на адмиттансы:

$$\chi_{kl}(\omega) = \pm \chi_{lk}^{(\prime)}(\omega). \quad (3.58)$$

Проинтегрировав по частям правую часть формулы (3.51), приходим к соотношению

$$\chi_{kl}(\omega) = (i/\omega) \left[\varphi_{kl}(0) + \int_0^{\infty} \dot{\varphi}_{kl}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau \right],$$

а, повторяя эту процедуру и отделяя вещественную и мнимую части, получаем высокочастотные асимптотики для адмиттансов

$$\begin{aligned} \chi'_{kl}(\omega) &= -\dot{\varphi}_{kl}(0)/\omega^2 + \ddot{\varphi}_{kl}(0)/\omega^4 - \dots; \\ \chi''_{kl}(\omega) &= \varphi_{kl}(0)/\omega - \ddot{\varphi}_{kl}(0)/\omega^3 + \dots \end{aligned} \quad (3.59)$$

Эти формулы дают возможность непосредственно вычислить адмиттансы, поскольку стоящие в правой части аппроксимаций выражения с функциями последействия и их производными по времени при $t=0$ обычно можно получить на основе соотношений коммутации координат и импульсов.

Если обе части равенства (3.51) проинтегрировать по частоте, то с учетом свойств четности адмиттансов приходим к так называемому правилу сумм

$$\int_0^{\infty} \chi'_{kl}(\omega) d\omega = \pi \varphi_{kl}(0)/2, \quad (3.60)$$

поскольку в правой части обычно стоит некоторая аддитивная многочастичная величина — сумма по частицам системы. Если же $\varphi_{kl}(0) = 0$, то аналогичным образом из результата интегрирования по частям (по τ) можно вывести правило сумм вида

$$\int_0^{\infty} \omega \chi''_{kl}(\omega) d\omega = \pi \dot{\varphi}_{kl}(0)/2. \quad (3.61)$$

Если для некоторой величины f коммутатор $[f, e^{-\beta H}]$ записать в виде $e^{-\beta H} X(\beta)$, то $X(\beta) = e^{\beta H} f e^{-\beta H} - f$ и $X(0) = 0$, а производная $\partial X / \partial \beta = e^{\beta H} [H, f] e^{-\beta H} = -i\hbar \dot{f}(-i\hbar\beta)$. Интегрируя, получаем $X(\beta) = -i\hbar \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i\hbar\lambda)$, так что

$$[f, e^{-\beta H}] = e^{-\beta H} (-i\hbar) \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i\hbar\lambda).$$

Умножая обе части на $i/\hbar$ и деля на статсумму $\text{Sp} e^{-\beta H}$, приходим к тождеству Кубо

$$\{f, \rho\} = \rho \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i\hbar\lambda), \quad (3.62)$$

с помощью которого преобразуем функции последействия:

$$\begin{aligned}\varphi_{lk}(t) &= \text{Sp} [\{\tilde{A}_l(t), A_k\} \rho] = \text{Sp} [A_k, \rho \tilde{A}_l(t)] = \\ &= \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} [\rho \tilde{A}_k(-i\hbar\lambda) \tilde{A}_l(t)],\end{aligned}$$

или

$$\varphi_{lk}(t) = \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(t + i\hbar\lambda) \rangle_0, \quad (3.63)$$

где существование коррелятора в правой части обеспечивается тем, что аргумент $-t - i\hbar\lambda$ лежит в полосе аналитичности корреляционных функций (см. предыдущий параграф). Подставляя это выражение в (3.51), получаем формулу Кубо для обобщенных восприимчивостей

$$\chi_{lk}(\omega) = \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0. \quad (3.64)$$

Если нас интересуют токовые характеристики ($\dot{A}_l$), то соответствующие обобщенные восприимчивости — кинетические коэффициенты — выражаются через квантовый коррелятор токов $\beta^{-1} \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0$, переходящий в классическом пределе в матрицу корреляции скоростей $\langle \dot{A}_k \dot{A}_l(\tau) \rangle_0$.

Производная по времени от средней энергии системы (средняя мощность, выделяемая в системе) в случае монохроматических зондов равна

$$\begin{aligned}\frac{d\langle E \rangle}{dt} &= -\langle A_k \rangle \dot{F}_k(t) = \\ &= \frac{i\omega}{4} (\chi_{kl} F_l^0 e^{-i\omega t} + \chi_{kl}^* F_l^{0*} e^{i\omega t}) (F_k^0 e^{-i\omega t} - F_k^{0*} e^{i\omega t}).\end{aligned}$$

Усредняя эту величину по периоду действующих сил, получаем связь диссипации с восприимчивостями:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \frac{i\omega}{4} [\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega)] F_l^{0*} F_k^0. \quad (3.65)$$

Если матрицу обобщенных восприимчивостей разбить на симметричную χ_{kl}^s и антисимметричную χ_{kl}^a части, то диссипацию определяют следующие величины:

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \frac{\omega}{2} (\chi_{kl}^s + i\chi_{kl}^a) F_l^{0*} F_k^0,$$

в связи с чем χ_{kl}^s и χ_{kl}^a называют диссипативными частями адмиттансов. Когда действует одиночный зонд, то

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \frac{\omega}{2} \chi_{AA}(\omega) |F|^2,$$

так что мнимая часть диагональных элементов матрицы адмиттансов непосредственно определяет диссипируемую в системе мощность.

Входящую в выражение (3.65) комбинацию адмиттансов можно связать со скачком функций Грина:

$$\begin{aligned} \chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) &= [iG_{kl}^{\eta=1}(\omega)/\hbar]^* - iG_{lk}^{\eta=1}(\omega)/\hbar = \\ &= -i\hbar^{-1} [G_{lk}^{\eta=1}(\omega) - G_{lk}^{a\eta=1}(\omega)] = -i\hbar^{-1} [I_{lk}(\omega) - I_{kl}(-\omega)]. \end{aligned}$$

В температурном случае согласно (3.24) имеем

$$\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) = -i\hbar^{-1} I_{lk}(\omega) (1 - e^{-\hbar\omega/T}),$$

а для соответствующей матрицы корреляционных моментов, описывающей спонтанные флуктуации, фурье-образ равен $D_{lk}(\omega) = I_{lk}(\omega) \times (1 + e^{-\hbar\omega/T})/2$. Следовательно, $\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) = -2i\hbar^{-1} \text{th}(\hbar\omega/2 \times T) D_{lk}(\omega)$. Отсюда, во-первых, вытекает флуктуационно-диссипационное соотношение в силу (3.65)

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = (\omega/2\hbar) \text{th}(\omega/2T) D_{lk}(\omega) F_l^{0*} F_k^0, \quad (3.66)$$

а, во-вторых, в соответствии с (3.53) и (3.29) получаем связь обобщенных восприимчивостей с корреляциями флуктуаций

$$\chi_{lk}(\omega) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th}(\hbar\omega'/2T) D_{lk}(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} d\omega'. \quad (3.67)$$

В силу положительной определенности матрицы корреляций (покажите неотрицательность с помощью разложения функции спектральной интенсивности $I_{lk}(\omega)$ в энергетическом представлении) энергия в системе действительно диссипируется (знак средней мощности в (3.66) положительный). Формулы (3.66) и (3.67) выражают так называемую флуктуационно-диссипационную теорему, которая связывает меру спонтанных равновесных флуктуаций с мерой диссипации энергии при зондировании системы. Если система подвергается внешнему воздействию, то реакция и диссипация энергии определяются спектральным составом корреляции спонтанных флуктуаций согласно формулам (3.66) и (3.67). Спонтанные квадратичные отклонения определяют вынужденные линейные отклонения.

В качестве конкретного примера внешних воздействий рассмотрим случай, когда на систему зарядов действует однородное переменное электрическое поле. Гамильтониан возмущения можно записать в виде $H_1(t) = -P_k E_k(t)$, где обобщенными координатами являются компоненты вектора поляризации системы (дипольного момента) $P_k = \sum_a e_a x_k^a$, а обобщенными силами — компоненты напряженности электрического поля.

Для реакции в виде вектора плотности электрического тока согласно (3.52) имеем закон Ома $\langle j_l \rangle_\omega = \chi_{lP_k}(\omega) E_k(\omega)$, так что тензор электропроводности (проводимости) определяется адмиттансом вида

$\sigma_{lk}(\omega) = \chi_{l P_k}(\omega)$. Согласно формуле Кубо (3.64) $\sigma_{lk}(\omega) = \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty d\tau \times$
 $\times \exp(i\omega\tau) \langle \dot{P}_k j_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0$. Замечая, что в случае однородных системы и поля (при отсутствии пространственной дисперсии) вектор плотности тока и производная от вектора поляризации связаны друг с другом:

$$\dot{P}_k = \sum_a e_a v_k^a; \quad j_l(\mathbf{r}) = \sum_a e_a v_l^a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^a);$$

$$j_l = V^{-1} \int dV j_l(\mathbf{r}) = \dot{P}_l / V,$$

получаем формулу Кубо для тензора электропроводности

$$\sigma_{lk}(\omega) = V \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty d\tau \exp(i\omega\tau) \langle j_k j_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0. \quad (3.68)$$

Обсуждение вопросов, связанных с учетом пространственной дисперсии, а также общее зондирование электромагнитным полем (см. [107]).

На этом заканчиваем краткое рассмотрение теории реакции системы на внешние воздействия. Более подробно с этим направлением можно ознакомиться по книгам [69—80, 86—91].

В качестве упражнения исследуйте свойства симметрии матрицы корреляционных моментов $D_{kl}(t)$ во временном и частотном представлениях.

Задачи по теме метода Кубо, функций Грина и обобщенных восприимчивостей см. в книге [16, § 23, 24].

Заметим, что интересный подход к описанию периодических внешних воздействий вне теории возмущений предложен Зельдовичем [11, 36] — метод квазиэнергии.

Другим направлением квантовой теории неравновесных процессов является исследование свойств систем на основе более детального анализа разного рода частных квантовых кинетических уравнений [70, 74, 79, 97, 98].

Плодотворными оказались общие подходы на основе построения специальных форм статистического оператора: вигнеровская квантовая функция распределения [84, 108] и приближение локального равновесия [69].

В последние годы ведется планомерное изучение процессов, далеких от равновесных. Здесь проблемы квантовой кинетики смыкаются с задачами других современных нелинейных направлений в физике (нелинейной оптики, солитоники) и за ее пределами. Обобщающий подход получил название синергетики [62—67].

О возрастающей роли новых поколений ЭВМ при решении сложных проблем теоретической физики см. [109—111].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассматриваемые в книге вопросы можно разделить на следующие группы.

Первая включает общие методы, являющиеся основой, фундаментом аппарата квантовой кинетики. Сюда можно отнести канонические преобразования, представление взаимодействия, функции Грина, операторные кинетические уравнения, временные корреляции флуктуаций, переменные возмущения и др.

Вторая содержит элементарные акты, служащие основой физических представлений о первопричинах явлений и эффектов квантовой кинетики. Это — рассеяние на неоднородностях, взаимодействие квазичастиц, граничные влияния, релаксация и распад нестационарных состояний, процессы переноса частиц, массы, заряда, квантовая диффузия в виде распыливания волновых пакетов (см. также диффузию в квантовых кристаллах [114, 115]).

Третья группа объединяет вопросы численных методов, особенно актуальные в настоящее время, когда осуществляется переход на новую технологию решения задач с программированием за терминалом и развитием ориентированного на ЭВМ стиля мышления (численное моделирование, методы дискретизации, разностные схемы, вычислительный эксперимент, машинные методы исследования и пр.).

Четвертая связывает вопросы квантовой кинетики и солитонной физики (сопоставление взаимодействия волновых пакетов и солитонов, рассеяние квантовых частиц на неподвижных и движущихся солитонах и т. д.).

Пятая посвящена теории реакции системы на внешние воздействия (метод Кубо, временные и температурные функции Грина, квантовые корреляторы, обобщенные восприимчивости, кинетические коэффициенты и т. д.).

Таким образом, основная цель книги заключается в том, чтобы, во-первых, дать общее введение в методы кинетических уравнений, во-вторых, рассмотреть элементарные физические акты кинетики, в-третьих, показать новые направления и реализовать идею наглядности на основе численного моделирования, в-четвертых, установить связи с солитонной физикой, в-пятых, изложить основы линейной теории реакции.

Опыт преподавания показал, что вводные разделы позволяют более естественным образом переходить к сложным вопросам кинетики в конкретных макроскопических системах, к частным проблемам, изучаемым в спецкурсах (кинетические уравнения в теории

плазмы, теории металлов, полупроводников, сверхпроводников и т. п.).

При обучении важно, кроме того, пробудить интерес к предмету в целом. А это обычно достигается с помощью рассмотрения простых примеров с максимально достижимой наглядностью. Затем уже можно переходить к более абстрактным построениям теории кинетических явлений, базирующейся на функциях Грина, полевых методах, диаграммной технике и т. д.

В качестве общезначимого введения в конкретные системы можно рекомендовать книги Каганова [113] и Каганова и Лифшица [114], а также учебное пособие Климонтовича [116], в котором «теория неравновесных систем служит стержнем всего курса». Наконец, по всем вопросам следует, как всегда, обращаться к физическим энциклопедиям [68, 117].

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА (ФУНКЦИИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ, ПРОПАГАТОРЫ)

1. Свободное n -мерное движение:

$$U(r, t; r_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{n/2} \exp \frac{im(r - r_0)^2}{2\hbar t}.$$

2. Гармонический осциллятор:

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \exp \frac{im\omega [(x^2 + x_0^2) \cos \omega t - 2xx_0]}{2\hbar \sin \omega t}.$$

3. Трехмерное движение в постоянном однородном силовом поле:

$$U(r, t; r_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(r - r_0)^2}{2t} + \frac{(r + r_0) Ft}{2} - \frac{F^2 t^3}{24m} \right].$$

4. Одномерное полуограниченное движение ($x, x_0 < 0$):

$$U(x, t; x_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \left[\exp \frac{im(x - x_0)^2}{2\hbar t} - \exp \frac{im(x + x_0)^2}{2\hbar t} \right];$$

$$U = 0 \quad \forall x, x_0 > 0.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ЛИНЕЙНЫЕ ЭВОЛЮЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ И ОПЕРАТОРЫ ГРИНА

Решение операторного эволюционного уравнения $\partial \hat{X} / \partial t = \hat{A}(t) \hat{X}$ с начальным условием $\hat{X}(t_0) = \hat{X}_0$ можно выразить через оператор Грина (оператор эволюции, пропагатор) $\hat{J}(t, t_0)$ следующим образом: $\hat{X}(t) = \hat{J}(t, t_0) \hat{X}_0$. Пропагатор удовлетворяет тому же эволюционному уравнению с начальным условием $\hat{J}(t_0, t_0) = 1$ и обладает свойствами: $\hat{J}(t, t_0) = \hat{J}(t, t_1) \hat{J}(t_1, t_0)$; $\hat{J}^{-1}(t, t_0) = \hat{J}(t_0, t)$; $\hat{J}_A^+(t, t_0) = \hat{J}_{-A}^{-1}(t, t_0)$ (аргумент t считается вещественным). Если параметрический оператор $\hat{A}$ антиэрмитов, то пропагатор унитарен.

В качестве упражнения проверьте выполнение указанных свойств пропагатора, а также установите свойства пропагатора $\hat{J}^{(1)}(t, t_0)$ аналогичного эволюционного уравнения $\partial \hat{Y}/\partial t = \hat{Y} \hat{A}(t)$. Покажите, что $\hat{J}_A^{(1)}(t, t_0) = \hat{J}_A^{-1}(t, t_0)$.

Запишите решения уравнений $\partial \hat{Z}/\partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]$ и $\partial \hat{Z}/\partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_+$ с начальными условиями $\hat{Z}(t_0) = \hat{Z}_0$ с помощью пропагаторов $\hat{J}(t, t_0)$.

Пропагаторы позволяют представить общее решение неоднородного уравнения

$$\partial \hat{X}/\partial t = \hat{A}(t) \hat{X} + \hat{B}(t) \text{ в виде } \hat{X}(t) = \hat{J}_A(t, t_0) \hat{X}_0 + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1).$$

Найдите соответствующие решения для уравнений типа $\partial \hat{Y}/\partial t = \hat{Y} \hat{A}(t) + \hat{B}(t)$ и $\partial \hat{Z}/\partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_{\pm} + \hat{B}(t)$.

В частности, отсюда вытекает, что пропагатор для суммы параметрических операторов $\hat{J}_{A+B}(t, t_0)$ удовлетворяет интегральному уравнению $\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = \hat{J}_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_{A+B}(t_1, t_0)$. Такое неявное выражение можно назвать аддитивным представлением для рассматриваемого пропагатора. Итерации приводят к ряду по степеням величины B : $\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = \hat{J}_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_2) \hat{B}(t_2) \hat{J}_A(t_2, t_0) + \dots$

С другой стороны, нетрудно убедиться, что справедливо мультипликативное представление $\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = \hat{J}_A(t, t_0) \hat{J}_{\tilde{B}}(t, t_0)$, где $\tilde{B}(t_1) = \hat{J}_A^{-1}(t_1, t_0) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0)$.

Аналогичные соотношения можно получить и для пропагатора $\hat{J}'_{A+B}(t, t_0)$.

Если параметрический оператор не зависит явно от аргумента ($\partial \hat{A}/\partial t = 0$), то $\hat{J}_A(t, t_0) = \exp[(t - t_0) \hat{A}]$. Аналогично в случае $[\hat{A}(t_1), \hat{A}(t_2)] = 0 \forall t_1, t_2 \in [t_0, t]$ для пропагатора имеем явное выражение $\hat{J}_A(t, t_0) \exp\left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1\right]$.

Из аддитивного представления вытекает правило дифференцирования пропагаторов по параметрам, от которых зависит генератор A :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{J}_A(t, t_0) = \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} \hat{J}_A(t_1, t_0).$$

В частности, получаем способ дифференцирования операторной экспоненты

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{\hat{A}} = e^{\hat{A}} \int_0^1 dt e^{-t \hat{A}} \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} e^{t \hat{A}}.$$

Дифференциальное уравнение для пропагатора $\partial \hat{J} / \partial t = A(t) \hat{J}$ и начальное условие $\hat{J}(t_0, t_0) = 1$ эквивалентны интегральному уравнению $\hat{J}_A(t, t_0) = 1 + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{A}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0)$. Итерации дают выражение $\hat{J}_A(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}}$

$dt_n \hat{A}(t_1) \hat{A}(t_2) \dots \hat{A}(t_n)$, к которому сводится и хронологизированная экспонента $T \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right]$ при $t > t_0$. Если наряду с обычной (прямой) хронологизацией $T \equiv T^>$ воспользоваться обратной хронологизацией $T^<$, то подобным же образом можно убедиться, что $\hat{J}_A(t, t_0) = T^< \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right]$ при $t < t_0$.

Аналогично $\hat{J}_A^{(\vee)}(t, t_0) = T^< \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right]$ при $t > t_0$ и $\hat{J}_A^{(\vee)}(t, t_0) = T^> \exp \times \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right]$ при $t < t_0$.

Такая связь хронологизированных экспонент с пропагаторами позволяет перенести свойства последних на соответствующие T -экспоненты. Так, можно сразу же вычислить обратный и сопряженный операторы:

$$\begin{aligned} \left(T^> \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right] \right)^{-1} &= T^< \exp \left[- \int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right]; \\ \left(T^> \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1 \right] \right)^+ &= T^< \exp \left[\int_{t_0}^t \hat{A}^+(t_1) dt_1 \right]. \end{aligned}$$

С другой стороны, использование T -экспоненты и мультипликативного представления для пропагатора приводит к формуле для экспоненты от суммы двух операторов

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} T \exp \left(\int_0^1 dt e^{-t\hat{A}} \hat{B} e^{t\hat{A}} \right).$$

В случае коммутирующих операторов T -экспонента сводится к обычной экспоненте, так что получается простое правило коммутативной алгебры $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp \hat{A} \cdot \exp \hat{B}$.

В заключение рассмотрим в виде упражнений несколько примеров операторной симметризации экспонент, используя свойства пропагаторов. Покажите, что

$$1. e^{t\hat{A}} \hat{B} e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t [\hat{A}, \hat{B}] + t^2 [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] / 2! + \dots$$

$$2. \exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}/2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A}/2) = \exp \hat{A} \exp \hat{B} \exp([\hat{B}, \hat{A}]/2), \quad \text{если } [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

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

В упражнениях 2 и 3 целесообразно воспользоваться связью экспоненты с пропагатором $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{J}_{A+B}(1, 0)$ и мультипликативным представлением последнего, а также результатом упражнения 1.

4. Покажите, что для операторов $\hat{A}(t) = \eta(t) \hat{a}^+$ и $\hat{B}(t) = -\eta^*(t) \hat{a}$, где $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$, пропагатор

$$\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = e^{i\chi} e^{z\hat{a}^+ - z^*\hat{a}},$$

$$\text{где } z(t) = \int_{t_0}^t \eta(t_1) dt_1 \text{ и } \chi = \text{Im} \int_{t_0}^t \eta(t_1) z^*(t_1) dt_1.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

НЕКОТОРЫЕ СООТНОШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ОДНОМЕРНОГО РАССЕЯНИЯ

1. Связь амплитуд отражения и прохождения для двух фундаментальных решений. В случае стационарного одномерного уравнения Шредингера для частицы, движущейся в локализованном потенциальном поле $U(x)$, $\Psi'' + [k^2 - u(x)]\Psi = 0$, где $\hbar k = \sqrt{2mE}$ и $u(x) = 2mU(x)/\hbar^2$, для каждого значения энергии $E > 0$ рассматриваем два типа решений, отвечающих задаче рассеяния при падении частиц на рассеиватель слева

$$\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} [\exp(ikx) + B(k) \exp(-ikx)], \quad x \rightarrow -\infty;$$

$$\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} C(k) \exp(ikx), \quad x \rightarrow +\infty$$

и справа

$$\Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{-1/2} \tilde{C}(k) \exp(-ikx), \quad x \rightarrow -\infty;$$

$$\Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{-1/2} [\exp(-ikx) + \tilde{B}(k) \exp(ikx)], \quad x \rightarrow +\infty.$$

Между амплитудами рассеяния можно установить соотношения с помощью метода вронскиана $W(\Psi, \varphi) = \Psi\varphi' - \Psi'\varphi$, вычисляя его для различных вариантов пар решений и приравнявая результаты расчета в областях $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$ (соответственно $W_{\mp}$).

Первый вариант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)$ и $\Psi_k^{(-)}(x)$. Вычисления дают следующие результаты: $W_- = -ik\tilde{C}(k)/\pi$ и $W_+ = -ikC(k)/\pi$. Отсюда вытекает соотношение $\tilde{C}(k) = C(k)$, устанавливающее равенство амплитуд прохождения.

Второй вариант: пара решений $\Psi_k^{(+)}(x)$ и $\Psi_k^{(+)*}(x)$. Результаты вычислений дают $W_- = -ik(1 - |B|^2)/\pi$ и $W_+ = -ik|C|^2/\pi$, так что получаем условие для коэффициентов отражения и прохождения при падении слева $1 - |B(k)|^2 = |C(k)|^2$.

Третий вариант: пара $\Psi_k^{(-)}(x)$ и $\Psi_k^{(-)*}(x)$. В ответе имеем аналогичное предыдущему соотношение для падения справа $1 - |\tilde{B}(k)|^2 = |\tilde{C}(k)|^2$.

Четвертый вариант: пара $\Psi_k^{(+)*}(x)$ и $\Psi_k^{(-)}(x)$. Это не дает нового соотношения, а дает комплексно сопряженное по отношению к первому варианту.

Пятый вариант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)$ и $\Psi_k^{(-)*}(x)$. Произведя выкладки, приходим к соотношению для амплитуд отражения $B\tilde{C}^* = -\tilde{B}^*C$.

Шестой вариант: пара $\Psi_k^{(+)*}(x)$ и $\Psi_k^{(-)*}(x)$. Выражение сводится к комплексному сопряжению предыдущего результата.

Итак, на основе расчета вронскиана для двух решений, принадлежащих одной энергии и взятых в двух пространственных областях, где известны асимптотики задачи рассеяния, получаются следующие результаты.

Во-первых, соотношение взаимности для амплитуд отражения $\tilde{C}(k) = C(k)$, означающее независимость коэффициентов отражения и прохождения от направления рассеяния.

Во-вторых, сохранение потока (следствие уравнения непрерывности) $1 - |B \times \times (k)|^2 = |C(k)|^2$.

В-третьих, связь характеристик рассеяния слева и справа $\tilde{B}(k) = -B(k)^* \times \times C(k)/C(k)^*$, приводящая к соотношению для фаз рассеяния $\tilde{\varphi}_B(k) = \pi - \varphi_B(k) + 2\varphi_C(k)$, где $B = |B| \exp i \varphi_B$ и $C = |C| \exp i \varphi_C$.

Интересным частным случаем является рассеяние на δ -потенциале, для которого $\tilde{B}(k) = B(k)$.

О терминологии. В книге приняты следующие названия характеристик одномерного рассеяния. Амплитуды рассеяния: амплитуда отражения $B(k)$ и амплитуда прохождения (прозрачности) $C(k)$. Коэффициенты рассеяния: коэффициент отражения $R(k) = |B(k)|^2$ и коэффициент прохождения (прозрачности) $T = |C(k)|^2$.

2. Соотношения ортонормированности для фундаментальных решений. Рассмотрим два решения стационарного уравнения Шредингера Ψ_1^* и Ψ_2 , принадлежащих в общем случае разным значениям энергии, так что (потенциал считаем вещественным) $\Psi_1^{''*} + (k_1^2 - u) \Psi_1^* = 0$ и $\Psi_2'' + (k_2^2 - u) \Psi_2 = 0$. Умножая первое уравнение на Ψ_2 , а второе на Ψ_1^* и вычитая из второго первое, приходим к соотношению $dW(\Psi_1^*, \Psi_2)/dx + (k_2^2 - k_1^2) \Psi_1^* \Psi_2 = 0$. Интегрируя, получаем удобную для дальнейших вычислений формулу

$$\int_{-A}^A \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) dx = (W_+ - W_-)/(k_1^2 - k_2^2),$$

где координата A достаточно велика, чтобы были справедливы асимптотики рассеяния (обозначения для вронскиана те же, что и в первом пункте этого приложения). Из полученного соотношения вытекают условия ортонормированности рассматриваемых фундаментальных решений ($\Psi_{k_1}^{(\pm)}, \Psi_{k_2}^{(\pm)} = \delta(k_1 - k_2)$; $\Psi_{k_1}^{(+)}, \Psi_{k_2}^{(-)} = 0$). В виде упражнения убедитесь в этом, выбирая соответствующие пары решений. Переходя в окончательных ответах к пределу при $A \rightarrow +\infty$, помните, что имеете дело с обобщенными функциями. В частности, используйте предельный переход $\lim_{A \rightarrow +\infty} \sin(Ak)/k = \pi \delta(k)$.

3. Связь с другими фундаментальными решениями. В теории одномерного рассеяния был достигнут значительный прогресс в связи с развитием теории солитонов и разработкой обратной задачи рассеяния (ОЗР). При этом используются различные фундаментальные системы. Так, в соответствии с определением из книги [35], так называемые функции Йоста $f_1(x, k)$ и $f_2(x, k)$ связаны с рассматриваемыми фундаментальными решениями следующим образом: $\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} \times \times C(k) f_1(x, k)$; $\Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{-1/2} C(k) f_2(x, k)$.

В книге [36] рассматриваются два базиса: $\psi(x, k)$; $\psi^*(x, k)$ и $\varphi(x, k)$; $\varphi^*(x, k)$, связь которых с функциями Йоста устанавливается соотношениями $\psi(x, k) = f_1^*(x, k)$ и $\varphi(x, k) = f_2(x, k)$. В основу положена картина рассеяния при падении частиц справа. Вводятся соответствующие характеристики рассеяния $r(k)$ и $t(k)$, а также вспомогательные величины $a(k)$ и $b(k)$, которые связаны с рассматриваемыми в нашей книге величинами следующим образом: амплитуда рассеяния вперед (амплитуда прохождения) $t(k) = a^{-1}(k) = \tilde{C}(k)$; амплитуда рассеяния назад (амплитуда отражения) $r(k) = b(k) a^{-1}(k) = \tilde{B}(k)$. Там же обсуждаются аналитические свойства и соответствующие дисперсионные соотношения, с помощью которых по заданной амплитуде рассеяния назад можно найти и амплитуду рассеяния вперед. Подробно развивается метод обратной задачи рассеяния (ОЗР).

Добавим, что различные сведения о задаче рассеяния и ее трехмерном аналоге можно почерпнуть из книг [94, 95].

Дополнением к характеристикам непрерывного энергетического спектра служат параметры дискретного спектра: если волновые функции стационарных состояний связанных нормировать условием $\Psi_n(x) \approx \exp(\kappa_n x)$, $x \rightarrow -\infty$, то $\Psi_n(x) \approx b_n \times \exp(-\kappa_n x)$, $x \rightarrow +\infty$, а величины $|b_n|$ вместе с $\kappa_n = \sqrt{2m|E_n|/\hbar}$ и $r(k)$ образуют набор, называемый данными рассеяния [36]: $r(k)$; κ_n , $|b_n|$, $n = 1, 2, \dots, N$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

ВЫЧИСЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ИНТЕГРАЛОВ

1. Стандартный пакетный интеграл. При описании движения гауссовых пакетов встречается интеграл вида
$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-D_0(k - k_0)^2 - itE(k)/\hbar + ikx] dk,$$
 где $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ (квадратичный закон дисперсии). С помощью замены переменных $K = k - k_0$ интеграл приводится к табличному [26, с. 494] (легко преобразуемому к интегралу Пуассона). В результате получаем точный ответ: $I_1 = [\pi/D_0 \gamma \times \times(t)]^{1/2} \exp[-itE(k_0)/\hbar + ik_0 x - (x - v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)]$, где $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$; $v_0 = \hbar k_0 / m$.

2. Интеграл
$$I_2 = \int_0^{\infty} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2] dk;$$
 $D_0 k_0^2 \gg 1$, где функция $f(k)$ слабо изменяется в окрестности острого максимума гауссовой функции, вычисляется в соответствии с методом Лапласа [34] интегрированием по окрестности k_0 :
$$I_2 \approx \int_{(k_0)} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2].$$
 Раскладывая фазу $\varphi(k)$ функции $f(k)$ в ряд по степеням $k - k_0$ и пренебрегая вкладом кубических членов и изменением модуля функции $f(k)$, приходим к выражению
$$I_2 \approx f(k_0) \int_{(k_0)} \exp[-D_0(k - k_0)^2 + i(k - k_0)\varphi'(k_0) + i(k - k_0)^2 \varphi''(k_0)/2] dk.$$
 Распространяя интегрирование в том же приближении на всю ось k , сводим интеграл к рассмотренному в предыдущем пункте стандартному, так что
$$I_2 \approx f(k_0) (\pi/D_0 \gamma)^{1/2} \exp\{-[\varphi'(k_0)]^2 / 4D_0 \gamma\},$$
 где $\gamma = 1 - i\varphi''(k_0)/2D_0$.

3. Интеграл
$$I_3 = \int_0^{\infty} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2 - itE(k)/\hbar + ikx] dk$$
 вычисляется аналогично предыдущему:
$$I_3 \approx f(k_0) [\pi/D_0 \gamma(t)]^{1/2} \exp\{-itE(k_0)/\hbar + ik_0 x - [x - v_0 t + \varphi'(k_0)]^2 / 4D_0 \gamma(t)\},$$
 где $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0 - i\varphi''(k_0)/2D_0$; $v_0 = \hbar k_0 / m$. Учет изменения модуля функции $f(k)$ приводит к смещению точки максимума: $k_0 \rightarrow k_0 + i[\varphi'(k_0)]' / 2D_0 + i[\varphi''(k_0)]' / 2mD_0$, что в первом приближении вызывает сдвиг скорости $v_0 \rightarrow v_0 + \hbar[\varphi'(k_0)]' / 2mD_0 + \hbar[\varphi''(k_0)]' / 2mD_0$. Рассмотренные интегралы определяются видом гауссова распределения. Более общий подход к вычислению интегралов типа I_3 возможен для других распределений при условии $t \rightarrow \infty$ на основе метода стационарной фазы [34].

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕЧАНИЯ ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МАТЕРИАЛА КНИГИ

В связи с перестройкой учебного процесса в вузах и особым вниманием к организации самостоятельной работы студентов сделаем некоторые дополнительные замечания.

1. Материал первой части книги можно использовать в общем курсе квантовой механики (или соответствующих разделах курса общей физики) прежде всего для лекционных демонстраций. Обычно курсы квантовой теории бедны иллюстрациями (редкие примеры графиков спецфункций, таблицы собственных значений и т. п.), тогда как современные методы обучения требуют более наглядного изложения абстрактных теоретических дисциплин.

Некоторые вопросы можно рекомендовать в качестве дополнительного материала для самостоятельного изучения. Кроме того, имеющиеся в первой части упражнения и задачи могут выдаваться студентам как домашние задания и служить основой контрольных работ.

2. Книга предоставляет широкие возможности преподавателям давать специальные индивидуальные задания для самостоятельной работы, обычно практикуемые при изучении соответствующих общих курсов квантовой теории, в частности квантовой механики и квантовой статистики. Это могут быть как отдельные параграфы, так и содержащиеся в них более сложные задачи.

3. Книга может служить основой специального курса «Введение в квантовую кинетику», предваряющего спецкурсы по кинетике конкретных систем («Кинетика полупроводников», «Кинетика сверхпроводников», «Квантовые кинетические уравнения» и т. п.).

4. Отдельные вопросы, затронутые в книге, могут составить дополнительные главы спецкурса по солитонной физике (1.8, с. 47—48; 1.12, с. 69—72; 2.4, с. 90—97).

5. Особое внимание следует уделить тем вопросам из первого и второго разделов книги, которые связаны с компьютерным моделированием.

В ближайшие годы студентам станут доступны современные персональные компьютеры с богатыми графическими возможностями. Книга ориентирована прежде всего на такие вычислительные системы.

Работа с персональным компьютером решает одновременно несколько задач обучения: изучение конкретной физической дисциплины (в нашем случае — квантовой теории), выработка навыков исследовательской работы с компьютером, естественное освоение программирования и соответствующих языков общения с ЭВМ, а также попутное закрепление знаний иностранного языка (в основном английского).

Таким образом, реализуется самостоятельная, индивидуальная, активная, творческая, контролируемая преподавателем, целенаправленная, обучающая деятельность студентов. Разумеется, возможно объединение нескольких студентов-пользователей для выработки навыков коллективной работы.

6. Материал книги можно использовать для разработки лабораторных работ для практикума по вычислительным методам теоретической физики на базе различного класса электронных вычислительных машин.

7. Книга может служить пособием для курса по основам информатики и вычислительной техники — применения в конкретных областях физики (квантовая механика, квантовая кинетика, солитонная физика).

8. Материалы книги могут войти в компьютерные системы обучения соответствующих дисциплин теоретической физики.

9. Применение персональных компьютеров в научных исследованиях и учебном процессе — одна из важных областей автоматизации интеллектуальных видов деятельности. Следует заметить, что пока еще очень мало пособий, посвященных работе на персональных компьютерах, особенно в конкретной области (например, физике). Книга в какой-то мере должна заполнить этот пробел.

На очереди разработка программного обеспечения систем компьютерного обучения специальным предметам с привлечением усилий специалистов различного профиля (математиков, психологов, педагогов, физиков и др.).

10. В книге значительное место отведено различным аспектам компьютерной графики, созданию демонстраций с выводом динамических изображений на экраны дисплеев с графикой высокого разрешения (специальных графических мониторов или обычных телевизионных приемников).

При моделировании квантовых явлений современные персональные компьютеры позволяют формировать и просто управлять движущимися изображениями на экране с помощью техники так называемых спрайтов. Желательно как можно полнее использовать такие возможности (конкретный материал дают два первых раздела книги).

При разработке демонстраций нужно много внимания уделять оформлению (экранные заголовки и краткие пояснения, компоновка частей изображения, цветовое и звуковое сопровождение, документация и подробные пояснения в распечатках и приложениях к ним и т. п.).

На основе таких разработок можно затем создавать компьютерные обучающие программы по квантовой теории, а также снимать учебные и исследовательские мультфильмы.

На с. 99—100 имеется перечень примеров компьютерного моделирования, рассмотренных в первом и втором разделах книги.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— М. : Наука, 1974.— 752 с.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика.— М. : Наука, 1973.— 704 с.
3. Мессиа А. Квантовая механика.— М. : Наука, 1978.— Т. 1.— 480 с.; 1979.— Т. 2.— 584 с.
4. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика (с задачами).— М. : Наука, 1976.— 336 с.
5. Бом Д. Квантовая теория.— М. : Наука, 1965.— 727 с.
6. Шифф Л. Квантовая механика.— М. : Изд-во иностр. лит., 1959.— 473 с.
7. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики.— М. : Наука, 1979.— 480 с.
8. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики.— М. : Наука, 1983.— 664 с.
9. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. Квантовая механика.— М. : Наука, 1979.— 528 с.
10. Федорченко А. М. Основы квантовой механики.— К. : Вища шк., 1979.— 272 с.
11. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.— М.: Наука, 1971.— 544 с.
12. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике.— М. : Наука, 1981.— 648 с.
13. Флюгге З. Задачи по квантовой механике.— М. : Мир, 1974.— Т. 1.— 341 с.; Т. 2.— 315 с.
14. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике.— М. : Гостехиздат, 1957.— 275 с.
15. Сборник задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко.— М. : Высш. шк., 1984.— 319 с.
16. Ульянов В. В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике.— Х. : Вища шк., 1980.— 216 с.
17. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории.— М. : Наука, 1975.— 336 с.
18. Буриштейн А. И. Лекции по курсу «Квантовая кинетика».— Новосибирск: Изд-во Новосибирск. ун-та, 1968.— Ч. 1.— 230 с.; Ч. 2.— 264 с.
19. Дыхне А. М., Юдин Г. Л. «Встряхивание» квантовой системы и характер стимулированных им переходов // УФН.— 1978.— 125, № 3.— С. 377—407.
20. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики.— М. : Мир, 1970.— 428 с.
21. Когерентные состояния в квантовой теории.— М. : Мир, 1972.— 232 с.
22. Малкин И. А., Манько В. И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем.— М. : Наука, 1979.— 320 с.
23. Переломов А. М. Обобщенные когерентные состояния и некоторые их применения // УФН.— 1977.— 123, № 1.— С. 23—55.
24. Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц.— Швингер Ю.

- Броуновское движение квантового осциллятора.— М. : Изд-во иностр. лит., 1962.— 168 с.
25. Ульянов В. В. Интегральные методы в квантовой механике.— Х. : Вища шк., 1982.— 160 с.
 26. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений.— М. : Наука, 1971.— 1108 с.
 27. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции.— М. : Наука, 1966.— Т. 2.— 296 с.
 28. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям.— М. : Мир, 1968.— 382 с.
 29. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике.— М. : Мир, 1965.— 408 с.
 30. Попов В. Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике.— М. : Атомиздат, 1976.— 256 с.
 31. Васильев А. Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике.— Л. : Изд-во Ленингр. ун-та, 1976.— 294 с.
 32. Справочник по специальным функциям.— М. : Наука, 1979.— 832 с.
 33. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции.— М. : Наука, 1977.— 344 с.
 34. Федорюк М. В. Метод перевала.— М. : Наука, 1977.— 368 с.
 35. Лэм Дж. Введение в теорию солитонов.— М. : Мир, 1983.— 294 с.
 36. Теория солитонов. Метод обратной задачи / В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский.— М. : Наука, 1980.— 320 с.
 37. Солитоны.— М. : Мир, 1983.— 408 с.
 38. Губанков В. Н. Солитоны.— М. : Знание, 1983.— 64 с.
 39. Ахромеева Т. С., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г. Парадоксы мира нестационарных структур.— М. : Знание, 1985.— 48 с.
 40. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач.— М. : Мир, 1972.— 420 с.
 41. Самарский А. А. Теория разностных схем.— М. : Наука, 1983.— 616 с.
 42. Годунов С. К., Рябенкий В. С. Разностные схемы.— М. : Наука, 1977.— 440 с.
 43. Калиткин Н. Н. Численные методы.— М. : Наука, 1978.— 512 с.
 44. Волков Е. А. Численные методы.— М. : Наука, 1982.— 256 с.
 45. Goldberg A., Schey H. M., Schmartz J. L. Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena.— Am. J. Phys.— 1967,— 35, N 3.— P. 177—186.
 46. Березин Ю. А. Моделирование нелинейных волновых процессов.— Новосибирск : Наука, 1982.— 160 с.
 47. Zabusky N. J. Solitons and Bound States of the Time-Independent Schrödinger Equation.— Phys. Rev.— 1968.— 168, N 1.— P. 124—128.
 48. Жаблон К., Симон Ж.-К. Применение ЭВМ для численного моделирования в физике.— М. : Наука, 1983.— 236 с.
 49. Поттер Д. Вычислительные методы в физике.— М. : Мир, 1975.— 392 с.
 50. Безбородов Ю. М. Индивидуальная отладка программ.— М. : Наука, 1982.— 192 с.
 51. Майерс Г. Искусство тестирования программ.— М. : Финансы и статистика, 1982.— 176 с.
 52. Ван Тассел Д. Стиль, разработка, эффективность, отладка и испытание программ.— М. : Мир, 1981.— 320 с.
 53. Растринин Л. А. Вычислительные машины, системы, сети...— М. : Наука, 1982.— 224 с.

54. Вейценбаум Дж. Возможности вычислительных машин и человеческий разум. От суждений к вычислениям.— М. : Радио и связь, 1982.— 368 с.
55. Пекелис В. Д. Кибернетическая смесь.— М. : Знание, 1982.— 288 с.
56. ЭВМ пятого поколения: Концепции, проблемы, перспективы.— М. : Финансы и статистика, 1984.— 110 с.
57. Кунцман Ж. Численные методы — М. : Наука, 1979.— 160 с.
58. Фортран ЕС ЭВМ / З. С. Брич, Д. В. Капилевич, С. Ю. Котик, В. И. Цагельский.— М. : Статистика, 1978.— 264 с.
59. Джермейн К. Программирование на IBM/360.— М. : Мир, 1983.— 872 с.
60. Грудн Ф. Программирование на языке Фортран IV.— М. : Мир, 1976.— 184 с.
61. Уорт Т. Программирование на языке БЕЙСИК.— М. : Машиностроение, 1981.— 225 с.
62. Нелинейные волны : Самоорганизация.— М. : Наука, 1983.— 264 с.
63. Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г. Синергетика — теория самоорганизации. Идеи, методы, перспективы.— М. : Знание, 1983.— 64 с.
64. Хакен Г. Синергетика.— М. : Мир, 1980.— 406 с.
65. Кадомцев Б. Б., Рудник В. И. Волны вокруг нас.— М. : Знание, 1981.— 152 с.
66. Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах.— М. : Мир, 1979.— 280 с.
67. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах.— М. : Мир, 1979.— 512 с.
68. Физический энциклопедический словарь.— М. : Сов. энцикл., 1984.— 944 с.
69. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика.— М. : Наука, 1971.— 416 с.
70. Честер Дж. Теория необратимых процессов.— М. : Наука, 1966.— 111 с.
71. Термодинамика необратимых процессов.— М. : Изд-во иностр. лит., 1962.— 426 с.
72. Вопросы квантовой теории необратимых процессов.— М. : Изд-во иностр. лит., 1961.— 365 с.
73. Фудзита С. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику.— М. : Мир, 1969.— 207 с.
74. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика.— М. : Мир, 1978.— Т. 2.— 400 с.
75. Гуров К. П. Основания кинетической теории.— М. : Наука, 1966.— 352 с.
76. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1.— М. : Наука, 1976.— 584 с.
77. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Ч. 2.— М. : Наука, 1978.— 448 с.
78. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика.— М. : Наука, 1979.— 528 с.
79. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики.— М. : Наука, 1977.— 368 с.
80. Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.). Введение в квантовую статистическую механику.— М. : Наука, 1984.— 384 с.
81. Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика.— М. : Наука, 1977.— 552 с.
82. Исихара А. Статистическая физика.— М. : Мир, 1973.— 471 с.
83. Таулес Д. Квантовая механика систем многих частиц.— М. : Мир, 1975.— 379 с.
84. Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика.— М. : Мир, 1964.— 256 с.

85. Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц.— М. : Мир, 1967.— 516 с.
86. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике.— М. : Физматгиз, 1962.— 443 с.
87. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике.— М. : Физматгиз, 1961.— 312 с.
88. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма.— М. : Наука, 1975.— 527 с.
89. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц.— М. : Госатомиздат, 1963.— 344 с.
90. Барьяхтар В. Г., Криворучко В. Н., Яблонский Д. А. Функции Грина в теории магнетизма.— К. : Наук. думка, 1984.— 336 с.
91. Изюмов Ю. А., Кассан-оглы Ф. А., Скрябин Ю. А. Полевые методы в теории ферромагнетизма.— М. : Наука, 1974.— 224 с.
92. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов.— М. : Наука, 1971.— 332 с.
93. Зырянов П. С., Клинггер М. И. Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках.— М. : Наука, 1976.— 480 с.
94. Ситенко А. Г. Теория рассеяния.— К. : Вища. шк., 1975.— 256 с.
95. Сунакава С. Квантовая теория рассеяния.— М. : Мир, 1979.— 270 с.
96. Зельдович Я. Б. Квазиэнергия квантовой системы, подвергающейся периодическому воздействию // ЖЭТФ.— 1966.— 51, № 5.— С. 1491—1495.
97. Гуржи Р. Н. Квантовое кинетическое уравнение для электронов в металлах. // ЖЭТФ.— 1957.— 33, № 2.— С. 451—458.
98. Файн В. М. Принцип возрастания энтропии и квантовая теория релаксации // УФН.— 1963.— 79, № 4.— С. 641—690.
99. Крылов Н. С., Фок В. А. О двух основных толкованиях соотношения неопределенности для энергии и времени // ЖЭТФ.— 1947.— 17, № 2.— С. 93—107.
100. Халфин Л. А. К теории распада квазистационарного состояния // ЖЭТФ.— 1957.— 33, № 6.— С. 1371—1382.
101. Глендсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций.— М. : Мир, 1973.— 280 с.
102. Дзялошинский И. Е. Диаграммная техника для вычисления кинетических коэффициентов в статистической физике при конечных температурах // ЖЭТФ.— 1962.— 42, № 4.— С. 1126—1134.
103. Константинов О. В., Перель В. И. Графическая техника для вычисления кинетических величин // ЖЭТФ.— 1960.— 39, № 1.— С. 197—208.
104. Пригожин И. Неравновесная статистическая механика.— М. : Мир, 1964.— 314 с.
105. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного.— М. : Наука, 1973.— 736 с.
106. Боголюбов Н. Н., Медведев Б. В., Поливанов М. К. Вопросы теории дисперсионных соотношений.— М. : Физматгиз, 1958.— 203 с.
107. Константинов О. В., Перель В. И. Квантовая теория пространственной дисперсии электрической и магнитной восприимчивостей.— ЖЭТФ.— 1959.— 37, № 3.— С. 786—792.
108. Татарский В. И. Вигнеровское представление квантовой механики // УФН.— 1983.— 139, № 4.— С. 587—619.
109. Гердт В. П., Ширков Д. В. Новые возможности ЭВМ — аналитические вычисления // Природа.— 1980.— № 11.— С. 36—46.
110. Поспелов Д. А. Вычислительные машины становятся интеллектуальными // Природа.— 1985.— № 4.— С. 28—39.

111. *Критические явления.* — М. : Знание, 1983.—64 с.
112. *Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.* Электронная теория металлов.— М. : Наука, 1971.— 415 с.
113. *Каганов М. И.* Электроны, фононы, магноны.— М. : Наука, 1979.— 192 с.
114. *Каганов М. И., Лифшиц И. М.* Квазичастицы.— М. : Наука, 1976.— 80 с.
115. *Квантовые кристаллы.*— М. : Мир, 1975.— 275 с.
116. *Климонтович Ю. Л.* Статистическая физика.— М. : Наука, 1982.— 608 с.
117. *Физический энциклопедический словарь.* В 5-ти т.— М. : Сов. энцикл., 1960—1966.
118. *Пригожин И.* От существующего к возникающему.— М. : Наука, 1985.— 328 с.
119. *Филиппов А. Т.* Многоликий солитон.— М. : Наука, 1986.— 224 с.
120. *Современный компьютер.*— М. : Мир, 1986.— 212 с.
121. *Трейстер Р.* Персональный компьютер фирмы ИБМ.— М. : Мир, 1986.— 208 с.

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

A — оператор, обобщенная координата;
 a — знак опережения, ширина;
 a, a^+ — операторы уничтожения и рождения (квази)частиц;
 B — амплитуда отражения, оператор физической величины;
 b — начальная координата волнового пакета;
 C — амплитуда прохождения, нормировочный множитель;
 c — вектор состояния в энергетическом представлении; знак причинности;
 D — дисперсия;
 D_{fg} — корреляционный момент второго порядка для величин f и g ;
 E — полная энергия системы; коэффициент прогонки;
 e — электрический заряд частицы;
 F — обобщенная сила, корреляционная функция;
 f — физическая величина;
 G — функции и операторы Грина;
 g — физическая величина;
 H — гамильтониан;
 $\hbar$ — постоянная Планка, $\hbar = 2\pi\hbar$;
 I — функция спектральной интенсивности;
 J — операторы эволюции, номер узла разностной схемы;
 j — вектор плотности потока вероятности;
 K — безразмерное волновое число;
 k — волновое число;
 L — длина интервала движения, вероятность нераспада;
 m — масса частицы;
 N — число солитонов, число временных шагов разностной схемы;
 n — номер энергетического уровня;
 P — поляризация;
 p — импульс;
 Q — безразмерный аналог волнового числа;
 q — аналог волнового числа;
 R — безразмерная плотность вероятности координат; коэффициент отражения;
 r — знак запаздывания;
 S — оператор движения в представлении взаимодействия;
 T — безразмерное время, температура, оператор хронологизации;
 t — время;

U — оператор движения в картине Шредингера, потенциальная энергия;
 u — волновое поле в солитонной физике, интенсивность дельта-потенциала;
 V — безразмерный потенциал, объем;
 v — скорость;
 W — вероятность перехода;
 w — коэффициент неясности разностной схемы;
 X — безразмерная координата, решение операторного эволюционного уравнения;
 x — координата;
 Y — волновая функция;
 y — координата;
 Z — статсумма;
 z — параметр когерентных состояний;
 α — вспомогательная фаза;
 β — обратная температура;
 γ — вспомогательная комплексная величина;
 Δ — приращение;
 Δf — неопределенность физической величины f ;
 δ — дельта-функция Дирака;
 ε — энергия, положительная бесконечно малая величина;
 η — коммутаторный знак;
 Θ — функция Хевисайда;
 κ — аналог волнового числа;
 λ — длина волны;
 ρ — статистический оператор, плотность вероятности координат;
 σ — тензор электропроводности;
 τ — температурная переменная;
 Φ — вектор состояния, фаза волновой функции;
 φ — функция последствия, фаза рассеяния;
 χ — обобщенная восприимчивость;
 Ψ — волновая функция;
 ψ — вектор состояния;
 Ω — частота;
 ω — частота;
 $\langle A \rangle$ и $\bar{A}$ — среднее значение величины A ;
 $\hat{A}$ — оператор;
 $[A, B] = AB - BA$ — коммутант;
 $\{A, B\} = i[A, B]/\hbar$ — квантовые скобки Пуассона;
 ΦR — функция распространения.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Автокорреляция 25
- Адаптивное интегрирование 36
- Адиабатическое включение 117
- Адмиттанс 117, 118, 120, 121
- Алгоритм Забуски 95, 96
- Амплитуды отражения и прохождения 52, 58, 61, 63, 67, 128, 129
- Аналитические свойства функций Грина 110, 112
- Аналитическое продолжение 110, 114, 115
- Антикоммутатор 22
- Аппроксимация плотности вероятности 34, 36, 43
- Барьер Экарта 88
 - прямоугольный 88
- Безотражательный потенциал 70, 72, 91, 92, 93, 94
- Вакуум 19, 20
- Вакуумные начальные состояния 25
- Вектор состояния 6
- Вектор плотности потока 26, 104, 122
- Вектор поляризации 122
- Векторный потенциал 19
- Вероятность перехода 9, 10, 12, 13
- Взаимодействие 47, 50, 51
 - волновых пакетов 47
 - солитонов 44, 47, 93, 94
- Внешнее воздействие 25, 103, 104
- Возмущения механические 104
 - термические 105
- Волновой пакет 29, 38
- Время расплывания 23, 39
- Вынужденные колебания 11, 13, 17, 19, 20, 24, 26
- Высокочастотные асимптотики адмиттансов 119
- Вычислительный эксперимент 84, 97
- Гамильтониан взаимодействия (возмущения) 7, 11
- Гармонический осциллятор 11, 16, 21, 27, 85, 125
- Гауссов пакет (гауссиан) 39, 49, 52, 90, 93
 - двойной 40, 45, 48, 86, 100
 - — начальный 31, 64, 75, 79, 81
- Генератор движения 5, 7
- Граничные условия 84, 95
 - — искусственные 73, 79
 - — непроницаемости 74, 80, 84
 - — периодичности 74, 80, 89
- График 47, 69
- Графическое изображение 36
- Данные рассеяния 129
- Движение свободное 16, 22, 26, 33, 45, 52, 59, 72, 94, 125
- Двойная кинетика 90, 96
- Двухквантовые процессы 13
- Двухсолитонное решение 93, 96, 100
- Двухуровневая система 116
- Действие 29
- Дельта-потенциал 51, 58, 70, 77, 86, 100, 128
- Дельта-функция Дирака 28
- Демонстрационный эксперимент 35, 73, 93, 98
- Демонстрация 42, 43, 98, 99
- Динамика корреляций 21
- Дисперсионные соотношения 111, 112, 118, 129
- Дисперсия 20, 22, 25
 - волнового числа 40, 55
 - импульса 23, 33, 54
 - координаты 22, 33, 38, 44, 48, 54, 62, 71, 75, 85
- Дисплей 68, 97, 98
- Диссипация энергии 120, 121
- Естественная эволюция 6, 9, 19, 21, 101, 106
- Закон дисперсии анизотропный 28
 - — квадратичный 15, 27, 29, 38, 45, 53, 129
 - — произвольный 16, 24
 - — четверной 38, 48
- Закон Ома 121
- Закон сохранения импульса 16, 23, 32
 - — четности 31
 - — энергии 8
- Законы сохранения уравнения КДФ 93, 96
- Зонд 116, 117, 120

Излучение 13
 — индуцированное 11
 — спонтанное 12

Импульсное представление (пространство) 31, 40, 61, 89
 Интегралы по траекториям 29
 Интегралы типа Коши 110, 111
 — Френеля 27, 36
 Интегральное преобразование 26, 27, 44
 Интерференция 50, 63, 68, 79
 Испускание частиц 89

Канонические преобразования 14, 21, 41, 103, 106
 Каноническое распределение 108
 Картина Гейзенберга 5, 13, 15, 24
 — Дирака 5, 13, 19, 26, 101
 — Шредингера 4, 7, 13, 21, 24, 101
 Квазистационарные состояния 68
 Квазиуровни 63, 69, 88
 Квазиэнергия 122
 Квантовая диффузия 38, 39, 97
 Кванты 11, 20, 21, 25
 Кинетическая задача 13, 27
 Кинетические коэффициенты 4, 120
 Кинетический полигон 3, 84, 99, 100
 Кинетическое уравнение 3, 4, 5, 102, 103, 104, 122
 Когерентные состояния 13, 20, 21, 39
 Комплексный потенциал 89
 Компьютер 97, 98
 — персональный 34, 98
 Координатное представление (пространство) 9, 22, 25, 77, 81
 Короткодействующий потенциал 51
 Корреляция 25, 45
 — импульсов 25
 — координат 24
 — координаты и импульса 22, 25, 26, 33
 — разновременная 25
 — флуктуаций 26, 106, 121
 Коэффициенты отражения и прохождения 57, 69, 79, 128, 129

Линейная теория реакции 25, 103, 106, 114, 116
 Линейное приближение 106
 Ловушки двусторонние 88
 — односторонние 88
 Локализация волнового пакета 23, 30, 31, 45, 53, 76

Матрица плотности 18, 27
 Машинное моделирование 39, 42, 50, 60, 73, 97, 99

Машинный эксперимент 3, 35, 46, 68, 98, 100
 Метод вронскиана 128
 — динамики корреляций 21, 26
 — дискретизации 73, 76, 79, 80
 — итераций 102, 126
 — когерентных состояний 13, 20
 — Кубо 4, 101, 103, 105, 106, 122, 123
 — Мацубары 4, 113
 — параметрического дифференцирования 65
 — переменных возмущений 9
 — прогонки 82
 — разностных схем 80, 81
 — стационарной фазы 58
 — унитарных преобразований 5
 — уравнений движения 13
 — Фейнмана 29
 — функции распространения 26, 48, 53, 74
 — численный 99
 Методы квантовой теории поля 105, 112, 115, 124

Начальные условия 5, 16, 20, 44, 58, 75, 81, 90, 101, 125
 Нелинейное уравнение Шредингера 97
 Нелинейное эволюционное уравнение 91, 92
 Нелинейные реакции 105
 Нелинейные эффекты 104
 Неопределенность 22, 68
 — импульса 29
 — координаты 22, 30
 — нулевых колебаний 17, 25
 — энергии 39, 62
 Неравновесные процессы 101
 Нестационарная теория рассеяния 48, 51, 62, 90, 96
 Нестационарное уравнение Шредингера 39, 80, 84, 91, 96
 Нестационарные состояния 5, 8
 Нулевые колебания 11, 17, 19

Обобщенная инверсия 109
 — координата 116, 121
 — сила 116, 117, 121
 Обобщенное соотношение неопределенностей 23, 25
 Обобщенные восприимчивости 104, 116, 118, 120, 122
 Обратная задача рассеяния (ОЗР) 90, 93, 95, 129
 Одноквантовые процессы 11
 Одномодовая модель 12
 Однородное силовое поле 16, 23, 26, 39, 125

Односолитонное решение 91, 93
Операторная экспонента 7, 20, 28, 127
Операторы Грина 26, 125
— рождения 19, 21, 116
— уничтожения 19, 20, 21, 116
Отражение 51, 56, 62, 88, 90

Пакет прямоугольный 31, 35, 99
Пакеты стационарных состояний 8
Параболический потенциал 28
Переменное воздействие (возмущение) 8, 9, 101, 116
Переменный потенциал 96
Переходы 9, 10, 11
Плоскостные среды 51, 69, 87, 90
Плотность вероятности координат 30, 36, 41, 47, 59, 65, 75, 78
Поглощение 11, 12, 89
Полиномы Эрмита 27
Полный набор 9, 27
Полугораничное движение 27, 28, 48, 125
Потенциал конечнозонный 92
— локализованный 92
— прямоугольный 87
— Эккарта 70, 91
Потенциальная яма двойная 92
Правила отбора частот 113
Правила сумм 119
Предиктор-корректор 95
Представление аддитивное 126
— временное 118
— взаимодействия 5, 101, 102, 105, 107
— вторичного квантования 116
— мультипликативное 7, 126, 127
— спектральное 108, 109, 110, 112
— энергетическое 18, 58, 73, 75, 77
— частотное 108, 122
— чисел заполнения 11
Программирование 82, 84, 98, 99
Программируемые микрокалькуляторы 36, 97
Пропагаторы 4, 5, 9, 21, 28, 125, 127
Процессы переноса 26

Разностные схемы 4, 44, 73, 77
— — для нестационарного уравнения Шредингера 39, 80, 81, 84
— — уравнения КДФ 95
Разность фаз 43
Распад 38, 88, 89, 110
Расплывание волновых пакетов 22, 29, 35, 40, 46, 55, 77, 85, 99
Распределение вероятностей координат 41, 46, 50
Распределение Пуассона 20
Рассеяние 68, 74, 79, 86, 96, 100, 128
— на солитонах 69, 89
— резонансное 56, 58, 62, 65, 69, 72

Реакция системы 102, 103, 117
Резонанс 88, 89
Резонансные эффекты 87
Рекуррентные соотношения 82
Релаксация 104, 116
Ряд Кубо 104

Свободные колебания 25
Свойства симметрии 109, 111, 112, 118
Симметризация 28, 127
Симметризованное произведение 21
Синергетика 4, 99
Скалярный потенциал 19
Скобки Пуассона 14, 15, 17, 26, 103
Скорости 13, 15, 22
Солитоны 47, 69, 91, 93, 96, 100
Соотношение неопределенностей 23, 29, 33, 40, 54
— — для энергии и времени 39
Состояния равновесия 101, 102, 105, 107
— связанные 54, 70, 79, 92
— смешанные 5, 18, 24, 27
— стационарные 8, 18, 25, 53, 65, 71, 74, 84, 90, 105, 129
Спектральная интенсивность 108, 112, 121
Спонтанные флуктуации 106, 107, 121
Стабильность гауссова пакета 34
— собственных значений 8
Статистический оператор 101, 108
— принцип 9
Стационарная теория рассеяния 90, 92
Стационарное уравнение Шредингера 51, 91, 92, 128, 129
Столкновение двух пакетов 44, 46, 47, 48, 100
— солитонов 47, 93, 96, 100
— пакета со стенкой 48, 50, 60, 77, 86, 100
Стоячая волна 50
Схема двухслойная 81, 82, 95
— двухшаговая 95
— Кранка-Николсона 83
— Лакса-Вендрофа 95
— неявная 81, 82, 83
— трехточечная 82
S-оператор 6, 8, 9, 10, 15, 19

Температурная переменная 112, 113
Тензор электропроводности 121, 122
Теоремы Эренфеста 15, 22
Теория возмущений 10, 12, 18, 102, 103, 104, 105, 106, 115
Термостат 24, 105
Тестовый пример 92
Тождество Кубо 119
Туннелирование 68, 87
T-экспонента 10, 127

Узельная модель 86
Унитарные преобразования 6, 7
Уравнение баланса 12
— Кортвега-де Фриза 47, 71, 72, 90, 93, 95, 97, 100
— Лиувилля 4, 5, 102, 103, 104, 105
— непрерывности 52, 128
— Шредингера 5, 125
Устойчивость разностных схем 95

Фаза адмиттанса 117
— амплитуды отражения 56, 58, 60, 62, 72, 128
— волновой функции 25, 26, 33, 45
— солитона 91, 92
Фазовая скорость 29
Фазовые соотношения 43
Фазовый множитель 8, 33
Факторизация 28, 29, 30
Флуктуационно-диссипационная теорема 121
Формула Кубо 120, 121
Формулы Сохоцкого 110
Функция Грина 26, 39, 122, 123, 124
— — двухвременная 106, 109, 111
— — запаздывающая 106, 110, 114, 118, 121
— — коммутаторная 107
— — мацубаровская 113
— — опережающая 107, 110
— — причинная 107, 110, 115
— Йоста 129
— корреляционная 106, 108, 112, 115, 120
— Лагранжа 29

— последствия 25, 116, 117, 118, 120
— распространения 9, 26, 28, 30, 74, 125
Хевисайда 105, 106, 109

Хронологизация 126
Хронологизированное произведение 113

Численное интегрирование 95, 99
Численное моделирование 3, 69, 76, 98
Численные методы 5, 73, 91, 99
Численный эксперимент 42, 44, 50, 62, 95, 97, 125

Шлейф 96

ЭВМ 90, 97, 122, 123
Эволюционное уравнение 7, 15, 19, 22, 104, 125
Эффект граничный 73
— запаздывания 57, 59, 61
— опережения 96
— размерный 73, 76, 80
— скоростей 57, 58

Языки программирования 83, 97
Яма Эккарта 92, 94, 96

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ	
1. 1. Метод унитарных преобразований движения. Картины Шредингера, Гейзенберга, Дирака	5
1. 2. Методы теории переменных возмущений	9
1. 3. Метод уравнений движения	13
1. 4. Метод динамики флуктуаций и корреляций	21
1. 5. Метод функций распространения	26
1. 6. Эффект распыливания волновых пакетов	29
1. 7. Распыливание двойного гауссиана	39
1. 8. Столкновение двух волновых пакетов	44
1. 9. Столкновение волнового пакета со стенкой	48
1.10. Нестационарная теория рассеяния частиц короткодействующим потенциалом	51
1.11. Нестационарная теория резонансного рассеяния	62
1.12. Резонансное рассеяние на солитонах	69
2. МЕТОДЫ ДИСКРЕТИЗАЦИИ. РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ. МАШИННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	
2.1. Движение на конечном интервале	73
2.2. Метод разностных схем	80
2.3. Вычислительные эксперименты на кинетическом полигоне	84
2.4. Квантовая кинетика и солитонная физика	90
2.5. Численное моделирование	97
3. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ	
3.1. Реакция системы на внешние воздействия. Метод Кубо	101
3.2. Временные функции Грина	106
3.3. Обобщенные восприимчивости	116
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	123
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Одночастичные функции Грина нестационарного уравнения Шредингера (функции распространения, пропагаторы)	125
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. Линейные эволюционные уравнения и операторы Грина	125
ПРИЛОЖЕНИЕ 3. Некоторые соотношения стационарной теории одномерного рассеяния	128
ПРИЛОЖЕНИЕ 4. Вычисление некоторых интегралов	129
ПРИЛОЖЕНИЕ 5. Методические замечания об использовании материала книги	130
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	133
ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	138
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	139

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

Владимир Владимирович
УЛЬЯНОВ

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ КИНЕТИКИ

Редактор *Л. Ф. Кизилова*

Переплет художника
Л. А. Неровни

Художественный редактор
В. А. Рияка

Технический редактор
Г. П. Александрова

Корректор *И. В. Балакирева*

Информ. бланк № 9954

Сдано в набор 20.01.87. Подп. в печать 13.04.87. БЦ 09206. Формат 60×90/16.
Бумага типогр. № 2. Лит. гарн. Выс. печать. Печ. л. 9. Уч.-изд. л. 10.
Тираж 1500 экз. Изд. № 1457. Зак. 7-23. Цена 65 к.

Издательство при Харьковском государственном университете издательского
объединения «Вища школа». 310003, Харьков-3, ул. Университетская, 16

Книжная фабрика им. М. В. Фрунзе, Харьков, 57, Донец-Захаржевского, 6/8.

