

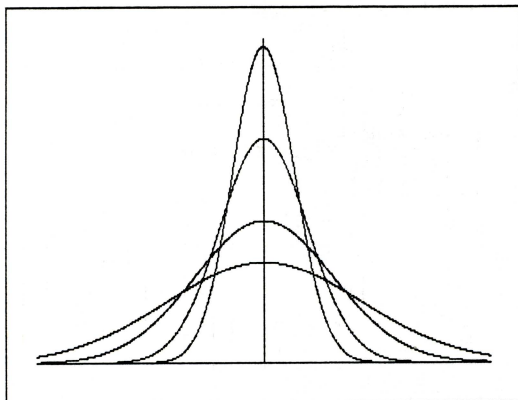
Міністерство освіти та науки України
Харківський національний університет
ім. В.Н.Каразіна

До 200-річчя Харківського університету

В. В. Ульянов

ВСТУП

ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ



Харків 2004

Міністерство освіти та науки України
Харківський національний університет
ім. В.Н.Каразіна

До 60-річчя кафедри теоретичної фізики

В.В.Ульянов

ВСТУП

ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ

Харків 2004

Ульянов В.В. Вступ до квантової кінетики. - Харків: ХНУ, 2004. - 164 с.

У навчальному посібнику розглянуто широке коло питань сучасної квантової теорії нестационарних станів та нерівноважних процесів. Викладено принципово нові елементи: чисельне моделювання; різницеві схеми; солітонні питання; обчислювальні експерименти, дуже важливі під час навчання в режимі постійного контакту з персональним комп'ютером. У кожному параграфі є методичні вказівки, вправи на закріплення матеріалу та завдання для самостійної роботи. Надаються рекомендації щодо організації комп'ютерних методів дослідження.

Для студентів фізичних спеціальностей вузів, аспірантів, викладачів та наукових робітників, які цікавляться квантовою теорією та комп'ютерним моделюванням.

Рецензенти:

доктор фіз.-мат. наук, професор О.М.Єрмолаєв,
кандидат фіз.-мат. наук, доцент Ю.М.Дюкареєв

Рекомендовано кафедрою теоретичної фізики (протокол № 4 від 15 квітня 2004 р.)

ПЕРЕДМОВА

У посібнику відображено деякі сучасні методи та напрями дослідження нестационарних станів мікросистем (чистих і змішаних) та нерівноважних явищ у макросистемах (як близьких до стану рівноваги, так і далеких), а також процесів релаксації.

До основи книги покладено оригінальні роботи автора та лекційні курси, що він читав на фізичному факультеті Харківського університету ("Квантова механіка", "Додаткові глави квантової механіки", "Квантова статистика", "Методи квантової кінетики", "Обчислювальні методи теоретичної фізики"), а також завдання, які пропонувалися студентам на практичних заняттях, для індивідуальної самостійної роботи, в курсових та дипломних роботах.

Посібник є доповненням до існуючих монографій та підручників з квантової теорії.

Книга містить три розділи. У першому розглянуто загальні методи квантової кінетики та деякі явища в чистих нестационарних станах. Для ілюстрації відібрано досить прості явища та ефекти, що не потребують громіздких розрахунків.

Другий розділ присвячено застосуванню чисельних методів. У зв'язку з бурхливим розвитком обчислювальної фізики та можливостями реалізації чисельних методів на доступних швидкодіючих персональних комп'ютерах у діалоговому режимі набувають надзвичайної актуальності питання чисельного моделювання та комп'ютерного експерименту. За останні роки проблеми нелінійних хвиль дедалі ширше торкаються різних галузей фізики. Багато питань солітонної фізики тісно пов'язані з квантовою кінетикою, деякі з них описано в книзі. У другому розділі обговорюються методи дискретизації, впроваджується інтервал руху з деякими граничними умовами (кінетичний полігон), зручний для дослідження явищ квантової кінетики та постановки демонстраційних експериментів. Кінетичні рівняння (квантові та солітонні) розв'язуються на основі різницевих схем. Докладно готуються обчислювальні експерименти дослідницького характеру.

Третій розділ продовжує тему першого і присвячений здебільшого нерівноважним процесам у макросистемах, що досліджуються за допомогою теорії реакції системи на зовнішні впливи, основним апаратом якої є квантові корелятори та функції Гріна (метод Кубо, узагальнені сприйнятливості, тощо).

Для розв'язання задач квантової кінетики традиційно залучалися методи, опрацьовані в рамках класичної кінетики. Істотний прогрес пов'язується з успіхами теорії збурень, яка розвинена на основі методів квантової теорії поля. Історично майже водночас ці методи почали

проникати й у статистику, і у кінетику (метод Мацубари та метод Кубо). Метод Кубо дозволив сформулювати в замкненому вигляді загальні правила одержання кінетичних коефіцієнтів, проте реалізувати їх на практиці досить складно. До того ж лінійна теорія не може задоволити всіх потреб кінетичних задач, особливо за умов інтенсивного розвитку нелінійних напрямків. Нова ера сильної нелінійності почалася з прогресу солітонної теорії і привела до формування широкого фронту досліджень, які об'єднали різні напрямки, народилася синергетика.

У додатках містяться: зведення декотрих функцій Гріна нестационарного рівняння Шредінгера, деякі властивості рішень операторних еволюційних рівнянь, стислі відомості зі стационарної теорії одновимірного розсіювання, а також розрахунки деяких інтегралів.

Кожний параграф наділено серією вправ. Деякі з них полягають у перевірці зроблених стверджень та виконанні випущених викладок. Інші – у здійсненні розрахунків, які є аналогічними тим, що наведені в параграфі. Вони переслідують ціль закріпити матеріал. Проте є й більш складні завдання, які розраховані на значну долю самостійності. Крім того, міститься достатньо задач для чисельного моделювання та комп'ютерних експериментів.

Відзначимо, що в книзі деякі важливі методи тільки згадано або побіжно описано. Тим же часом, більше уваги приділено різницеvim схемам, нестационарній теорії розсіювання, пакетному руху, резонансним явищам, чисельному моделюванню, зв'язку кінетичних задач з солітонною фізикою та іншим питанням, які в літературі звичайно не порушуються або розглядаються не досить повно.

Викладачів квантової теорії мають зацікавити рекомендації щодо створення демонстраційних експериментів та анімаційних фільмів з квантової кінетики. Книгу написано у вигляді єдиного курсу, а не окремих фрагментів, між параграфами є тісний зв'язок, викладання йде від простих систем, методів та явищ до більш складних.

Усі зауваження буде прийнято з вдячністю.

Книгу адресовано в першу чергу фізикам: студентам та аспірантам, викладачам та науковим робітникам, а також спеціалістам суміжних наук, які цікавляться сучасною квантовою теорією та комп'ютерними методами дослідження.

Автор висловлює глибоку подяку співробітникам кафедри теоретичної фізики ХНУ за підтримку, а М.В.Ульянову за велику допомогу під час підготовки рукопису.

Треба зауважити, що ця книга була підготовлена до друку десять років тому, але тоді не було можливостей її видати.

1. НЕСТАЦІОНАРНІ СТАНИ

1.1. Метод унітарних перетворень руху. Картини Шредінгера, Гейзенберга та Дірака

Найзагальнішим кінетичним рівнянням квантової теорії є хвильове рівняння Шредінгера для чистих станів

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

з початковою умовою $\Psi(t_0) = \Psi_0$, або відповідне рівняння Ліувілля для змішаних станів $\partial \hat{\rho} / \partial t = -\{\hat{H}, \hat{\rho}\}$; $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0$. У першому розділі буде розглянуто здебільшого чисті стани.

Головна задача квантової кінетики чистих станів системи з даним гамільтоніаном $\hat{H}$ – розв'язання рівняння (1.1). Проте, навіть у випадку простих одночастинкових квантових систем точний розв'язок цього рівняння вдасться отримати лише в особливих випадках, тому необхідно розробити наближені аналітичні та чисельні методи. Деякі чисельні методи розв'язання рівняння (1.1) розглянемо в розділі 2. Загальні ж властивості розв'язків рівняння (1.1) звичайно зручно досліджувати, переходячи до інтегральної форми та користуючись методом операторів Гріна:

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

де оператор руху $\hat{U}(t, t_0)$ задовольняє рівняння $\partial \hat{U} / \partial t = -(i / \hbar) \hat{H} \hat{U}$ з початковою умовою $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$. Загальні властивості таких операторів (пропаторів) розглянуто в дод. 2. Зокрема, оператор руху є унітарним: $\hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}^+(t, t_0)$, що формально впливає з антиермітовості генератора руху $-i\hat{H}/\hbar$ і фізично означає зберігання в часі ймовірнісного опису системи (постійності скалярного добутку).

Зауважимо, що перехід до інтегральної форми здійснюється для рівнянь Шредінгера і Ліувілля водночас, оскільки

$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{-1}(t, t_0)$, у чому неважко пересвідчитися безпосередньо (див. також дод. 2).

Розглянутий опис, де вектор стану залежить від часу, а оператори більшості фізичних величин явно від часу не залежать (винятком,

зокрема, є гамільтоніан системи, що перебуває в змінних зовнішніх умовах), зветься картиною Шредінгера, або зображенням Шредінгера.

У квантовій кінетиці часто більш зручним виявляється інше зображення, в якому залежність від часу переноситься до операторів фізичних величин, тим часом як вектор стану є постійним. Цей опис зветься картиною Гейзенберга. Фіксованим вектором стану може бути $\Psi(t_0)$ у картині Шредінгера. У цьому випадку рівняння (1.2) набуває подвійного сенсу, описуючи еволюцію в картині Шредінгера та унітарне перетворення переходу від одного зображення до іншого. Відповідно із загальною теорією унітарних (канонічних) перетворень [2], якщо вектори стану перетворюються за правилом $\Psi' = \hat{U} \Psi$, то операторні величини перетворюються відповідно: $A' = \hat{U} A \hat{U}^{-1}$.

Таким чином, перехід від картини Шредінгера до картини Гейзенберга (Γ) можна записати у вигляді співвідношень

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

Величини в зображенні Шредінгера спеціальними позначками відзначати не будемо.

У деяких випадках гамільтоніан системи доцільно поділити на дві частини: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, з яких $\hat{H}_0$ у певному розумінні є основною (незбуреною), а $\hat{H}_1$ – додатковою (збуренням, взаємодією). Тоді й повний пропагатор можна записати у вигляді добутку двох пропагаторів (див. дод. 2):

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

де $\hat{U}_0(t, t_0)$ описує еволюцію з незбуреним гамільтоніаном $\hat{H}_0$, а S -оператор обумовлюється взаємодією $\hat{H}_1$, і його зміст буде з'ясовано нижче. Тим самим, з'являється можливість проміжного опису, коли перехід від картини Шредінгера до нового зображення (картини Дірака, або зображення взаємодії) здійснюється за формулами, що аналогічні (1.3), але з заміною $\hat{U}$ на $\hat{U}_0$:

$$\Psi_D(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \Psi(t); \quad \hat{A}_D(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0). \quad (1.5)$$

Таким чином, у зображенні Дірака операторні величини набувають залежності від часу за законом природної еволюції з $\hat{H}_0$, а вектор стану – відповідно з добавкою до гамільтоніана $\hat{H}_1$, що й впливає безпосередньо із зв'язку зображення Гейзенберга та Дірака, який одержується підстановкою виразу (1.4) до формул (1.3) з урахуванням співвідношень (1.5):

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

Якщо переписати ці формули, виразивши діраківські величини через гейзенбергівські:

$$\Psi_{\text{Д}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_{\text{Г}}; \quad \hat{A}_{\text{Д}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \hat{A}_{\text{Г}}(t) \hat{S}^{-1}(t, t_0), \quad (1.7)$$

то видно, що S -оператор має зміст оператора руху в картині Дірака, оскільки завдяки $\Psi_{\text{Д}}(t_0) = \Psi_{\text{Г}}$ перше рівняння в (1.7) можна записати у вигляді

$$\Psi_{\text{Д}}(t) = \hat{S}(t, t_0) \Psi_{\text{Д}}(t_0). \quad (1.8)$$

У цій схемі при $t = t_0$ усі величини в трьох зображеннях відповідно збігаються, так що сукупність зображень визначається певним часовим аргументом t_0 , вибір якого в загальному випадку є довільним. А втім, можна ввести різні гейзенбергівські (та діраківські) зображення, які розрізняються за цим часовим параметром.

Отже, трьом зображенням (картинам Шредінгера, Гейзенберга та Дірака) відповідають три грінівські оператори $\hat{U}$, $\hat{U}_0$ та $\hat{S}$. Кожен з них є й оператором руху, й допоміжним оператором переходу від одного зображення до іншого. З огляду на особливу важливість для подальшого ще раз стисло нагадаємо розподіл ролей цих пропагаторів.

Пропагатор $\hat{U}(t_2, t_1)$ є насамперед оператором руху в картині Шредінгера (1.2) та, крім того, $\hat{U}(t, t_0)$ здійснює перехід від зображення Гейзенберга до зображення Шредінгера (зворотний перехід описується оберненим оператором).

Пропагатор $\hat{U}_0(t_2, t_1)$ також описує рух у картині Шредінгера, але для системи з гамільтоніаном $\hat{H}_0$ (природна еволюція), а $\hat{U}_0(t, t_0)$ визначає перехід від зображення Дірака до зображення Шредінгера (зворотний перехід дає обернений оператор). Нарешті, пропагатор $\hat{S}(t_2, t_1)$ є оператором руху в картині Дірака, а $\hat{S}(t, t_0)$ реалізує перехід (1.7) від зображення Гейзенберга до зображення Дірака (зворотний перехід виконує $\hat{S}^{-1}$).

Щоб закріпити матеріал, зобразіть схему трьох картин з переходами між ними в прямому та зворотному напрямках.

Підкреслимо, що всі три пропагатори є розв'язками однотипних еволюційних рівнянь з однаковими початковими умовами (одиничний оператор), але з різними генераторами руху: для U -оператора це $-i\hat{H}/\hbar$, для U_0 -оператора це $-i\hat{H}_0/\hbar$, а для S -оператора генератором є гамільтоніан взаємодії в зображенні Дірака: $-i\hat{H}_{\text{ІД}}(t)/\hbar$. Останнє впливає з виразу (1.4) та еволюційних рівнянь для $\hat{U}$ і $\hat{U}_0$, а також безпосередньо походить з мультиплікативного зображення

пропагаторів для суми параметричних операторів, яке розглянуто в дод. 2.

Одним з важливих прикладів точного розв'язання рівняння Шредінгера є випадок, коли система перебуває в постійних зовнішніх умовах. При цьому гамільтоніан не залежить від часу, тобто $\partial \hat{H} / \partial t = 0$, а пропагатор у картині Шредінгера можна записати у вигляді операторної експоненти (див. дод. 2):

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

Залежність пропагатора тільки від різниці часових аргументів відбиває однорідність часу. Якщо в початковий момент часу система перебувала в стані з визначеною енергією E_k (повний набір квантових чисел k) $\Psi(t_0) = \psi_k$, то згідно з (1.2) та (1.9) зміна вектора стану з часом буде полягати тільки в зміні фазового множника: $\Psi(t) = \psi_k \exp [-i (t - t_0) E_k / \hbar]$. Отже, енергія в кожному момент часу буде мати певне значення (початкове), а всі характеристики системи будуть постійними, оскільки такий фазовий множник не впливає на ймовірності та середні значення. У зв'язку з цим стани з визначеною енергією отримали назву стаціонарних станів. Ефект стабільності власних значень гамільтоніана є одним з проявів закону збереження енергії в квантовій механіці.

Зауважимо, що між різними станами з даною енергією у випадку виродження переходу також відсутні. На мові пропагаторів це виявляється в тім, що згідно з (1.9) пропагатор $\hat{U}$ є діагональним у зображенні k :

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

Аналогічні властивості має $\hat{U}_0$ при $\partial \hat{H}_0 / \partial t = 0$.

Відзначимо, що стаціонарні стани утворюють надзвичайно важливий клас станів квантових систем. У книгах з квантової механіки [1–10] їм приділяється значне місце. В умовах зберігання енергії, проте, будуть і більш загальні, нестаціонарні стани – пакети стаціонарних станів. Відповідно з (1.9) рух таких пакетів буде полягати в зміні з часом фазових множників окремих складових пакета: якщо $\Psi(t_0) = \sum_k c_k \psi_k$, то $\Psi(t) = \sum_k \exp [-i (t - t_0) E_k / \hbar] c_k \psi_k$.

На відміну від стаціонарних станів, вплив цих фазових множників є дуже істотним: вони приводять до залежності від часу ймовірностей та середніх значень усіх величин, крім інтегралів руху. Виникають власне кінетичні явища, процеси, змінні характеристики. Приклади таких станів буде розглянуто в наступних параграфах.

Умовно пакетні нестационарні стани можна віднести до слабкої нестационарності. У таких станах енергія не має певного значення, а закон збереження енергії виявляється в тому, що залишаються сталими середнє значення та розподіл імовірностей енергії.

Інший клас нестационарних станів виникає в умовах змінних зовнішніх впливів, коли гамільтоніан системи (або його частина) залежить від часу. У такій ситуації стаціонарних станів немає, енергія не зберігається (власні значення змінного гамільтоніана можуть виявитися корисними, але звичайно грають другорядну роль). Ці нестационарні стани також є одним з головних об'єктів дослідження в квантовій кінетиці.

Знайомство з методами дослідження нестационарних станів ми починаємо із застосування S -оператора в стандартній теорії нестационарних збурень.

1.2. Методи теорії змінних збурень

Розглянемо декілька типових постановок кінетичної задачі. Нехай у початковий момент часу t_0 система перебуває в стані, що характеризується повним набором квантових чисел n_0 : $\Psi(t_0) = \psi_{n_0}$. Знайти розподіл імовірностей цих же величин n (або іншого набору) в будь-який момент часу t . Згідно зі статистичним принципом квантової теорії така ймовірність дорівнює $W_{n_0 n} = |\langle \psi_n, \Psi(t) \rangle|^2$. Користаючись пропагатором $\hat{U}$, одержуємо завдяки $\Psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \psi_{n_0}$, що

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

Цю величину звичайно називають імовірністю переходу. Таким чином, матричні елементи пропагатора набувають простого фізичного змісту – це амплітуди відповідних імовірностей переходів.

Інша постановка задачі: у початковий момент часу задана хвильова функція системи в координатному (для визначеності) зображенні $\psi(x, t_0)$. Знайти хвильову функцію в тому ж (чи якомусь іншому) зображенні в момент часу t . Знов із $\Psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(t_0)$ випливає, що згідно з правилами дії операторів "на індекс зображення" матричні елементи пропагатора в такий спосіб визначають шукану величину:

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

Наведені приклади пояснюють, чому матричні елементи пропагаторів часто називають функцією поширення. Далі будемо використовувати для функції поширення спеціальне позначення:

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

Нарешті, ще один варіант постановки конкретної кінетичної задачі, який наближається до теми збурень.

Нехай у початковий момент часу система з постійним гамільтоніаном $\hat{H}_0$ перебуває в стаціонарному стані з енергією E_{n_0} (повний набір n_0), а потім підлягає змінному впливу, який описується додавкою до гамільтоніана $\hat{H}_1(t)$. На момент часу спостереження, коли збурення вже перестало турбувати систему, нас цікавить розподіл імовірностей величин з того ж набору інтегралів руху незбуреної системи n . Інакше кажучи, ми маємо справу з імовірністю переходу (1.11), але в більш конкретних фізичних умовах. Оскільки природна еволюція не викликає переходів серед станів з різними n , зрозуміло, що в даному випадку основну роль буде грати S -оператор. Справді, підставивши в формулу (1.11) вираз $\hat{U} = \hat{U}_0 \hat{S}$ згідно з (1.4) та користуючись тим, що $\hat{U}_0$ є діагональним у n -зображенні, а його діагональні елементи є одиничними за модулем, одержуємо формулу

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

що з'ясовує безпосередній фізичний зміст матричних елементів S -оператора та дає правило обчислення шуканих імовірностей переходів.

Щоб просунутись далі, треба зробити додаткові припущення щодо характеру збурення $\hat{H}_1$. Вважаємо, що результат його впливу на систему є малим, так що ймовірності переходів будуть малими, тобто застосовуємо метод збурень. Згідно з дод. 2 пропагатори зв'язані з T -експонентами. Зокрема при $t > t_0$

$$S(t, t_0) = \text{Texp} \left[-(i/\hbar) \int_{t_0}^t \hat{H}_{1\text{д}}(t_1) dt_1 \right]. \quad (1.15)$$

У першому наближенні $\hat{S}(t, t_0) = 1 - (i/\hbar) \int_{t_0}^t \hat{H}_{1\text{д}}(t_1) dt_1$, так що

$$\langle n | S(t, t_0) | n_0 \rangle = \delta_{nn_0} - (i/\hbar) \int_{t_0}^t \langle n | \hat{H}_{1\text{д}}(t_1) | n_0 \rangle dt_1. \quad \text{Якщо нас цікавить}$$

саме перехід, тобто $n \neq n_0$ (оскільки під n розуміється, загалом)

кажучи, декілька величин, достатньо розбіжності початкового та кінцевого значень хоча б для однієї з них), то враховуючи, що

$$\hat{H}_{1D}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t, t_0) \hat{H}_1(t) \hat{U}_0(t, t_0), \text{ а пропагатор}$$

$\hat{U}_0(t, t_0) = \exp[-i(t - t_0)\hat{H}_0/\hbar]$ є діагональним у n -зображенні, приходимо до остаточного виразу для шуканої ймовірності переходу в першому наближенні теорії збурень:

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

де частоти переходу $\omega_{nn_0} = (E_n - E_{n_0})/\hbar$.

Одержаний результат є надто загальним. Різні окремі випадки та численні приклади вживання докладно розглядаються в книгах з квантової механіки (див., наприклад, [1–3]): адіабатичні, раптові, періодичні в часі збурення, переходи в неперервному спектрі енергій, тощо. Тут же ми обмежимося кількома простими зауваженнями.

Ймовірності переходів є квадратичними за збуренням і визначаються відповідним перетворенням Фур'є. Для великих енергетичних інтервалів $E_n - E_{n_0}$ вони малі, а тому переходи здебільшого відбуваються між станами з близькими енергіями. Якщо ймовірність переходу дорівнює нулю (матричний елемент збурення перетворюється на нуль), то кажуть, що перехід є забороненим у даному наближенні. У такому випадку в S -операторі можна врахувати члени більш високого порядку за степенями збурення. У випадку виродження енергії можна обчислити ймовірності переходів між станами з тою ж самою енергією. В такий спосіб виводиться формула для перерізу в борнівському наближенні стандартної теорії розсіяння [1–3], коли в ролі збурення розглядається потенціальна енергія.

Для початкового та кінцевого повних наборів, що збігаються, ймовірність "непереходу" обчислюється за формулою

$$W_{n_0 n_0} = 1 - \sum_{n \neq n_0} W_{n_0 n}.$$

Як конкретний приклад розглянемо задачу про вимушені коливання гармонічного осцилятора, ґрунтуючись на результатах елементарної теорії в зображенні чисел заповнення (див., наприклад, [2]).

Нехай на гармонічний осцилятор з гамільтоніаном

$\hat{H}_0 = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2 = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2)$ (оператори народження $\hat{a}^+$ та знищення $\hat{a}$), який перебуває в стані з n_0 квантами (фононами, фотонами, тощо), тобто має енергію $E_{n_0} = (n_0 + 1/2)\hbar\omega$, діє змінне

однорідне силове поле $f(t)$. Гамільтоніан збурення при цьому дорівнює $\hat{H}_1(t) = -f(t)x = -f(t)\Delta x_0(\hat{a}^+ + \hat{a})$, де $\Delta x_0 = \sqrt{\hbar / 2m\omega}$ – невизначеність координати в стані нульових коливань. Необхідно знайти ймовірності переходів та приріст середньої енергії осцилятора в першому наближенні теорії збурень. Насамперед з'ясуємо, які саме переходи можливі в цьому наближенні. Матричні елементи збурення $\langle n | H_1(t) | n_0 \rangle = -f(t)\Delta x_0 \langle n | \hat{a}^+ + \hat{a} | n_0 \rangle$ відмінні від нуля лише в двох випадках: коли $n = n_0 + 1$ (внесок від $\hat{a}^+$) та коли $n = n_0 - 1$ (внесок від $\hat{a}$). Таким чином, відбуваються тільки одноквантові процеси. У першому випадку в системі з'являється ще один квант – цей процес можна назвати випромінюванням, тоді як у другому випадку число квантів зменшується на одиницю – це процес поглинання.

Для випромінювання $\langle n_0 + 1 | \hat{a}^+ | n_0 \rangle = \sqrt{n_0 + 1}$ та $\omega_{n_0+1, n_0} = \omega$, так що ймовірність згідно з (1.16) дорівнює

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

Для поглинання $\langle n_0 - 1 | \hat{a} | n_0 \rangle = \sqrt{n_0}$ та $\omega_{n_0-1, n_0} = -\omega$, так що

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

Порівняння виразів (1.17) та (1.18) виявляє, що випромінювання є ймовірнішим процесом. До того ж ймовірність випромінювання природним способом розбивається на дві частини. Перша пропорційна кількості квантів у наявності n_0 . Вона відповідає так званому індукованому випромінюванню, при якому чим більше існує квантів, тим ймовірніша поява нових, що взагалі є характерним для бозонів. Друга частина існує й у випадку відсутності квантів у початковому стані. Вона відповідає спонтанному випромінюванню. Процес поглинання ж, що описується формулою (1.18), здійснюється з ймовірністю, яка пропорційна кількості квантів у наявності (через відсутність квантів нема що й поглинати).

Для повного розв'язання поставленої задачі необхідно обчислити середнє значення енергії осцилятора, яке виникло через дію сили, що збурює. Відповідно загальному правилу обчислення середніх значень на основі відомих ймовірностей власних значень

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

Шуканий приріст середньої енергії має типовий вигляд рівняння балансу:

$$\begin{aligned} \Delta \langle E \rangle &\equiv \langle E \rangle - E_{n_0} \approx (E_{n_0+1} - E_{n_0}) W_{n_0 n_0+1} - (E_{n_0} - E_{n_0-1}) W_{n_0 n_0-1} = \\ &= \hbar \omega (W_{n_0 n_0+1} - W_{n_0 n_0-1}). \end{aligned}$$

З огляду на (1.17) та (1.18) маємо остаточну формулу

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

Цікаво, що цей результат є точним, дарма що одержаний за допомогою наближених формул теорії збурень. Як не раз трапляється, під час аналітичних та чисельних розрахунків похибки компенсуються, спричиняючи несподівано гарні наближення. У даному випадку під час обчислення середньої енергії не враховувалися, по-перше, багатоквантові переходи, а по-друге, ймовірності одноквантових переходів обчислювалися в першому наближенні.

Не менш цікаво, що результат для середньої енергії збігається з класичним (що видно з того, що відповідь не містить сталої Планка). Аналогічна ситуація виникає ще в одній задачі: диференційний переріз розсіяння в кулонівському полі, що розрахований за теорією збурень (у борнівському наближенні), не відрізняється від одержаного строгим квантовим обчисленням та збігається з класичною формулою Резерфорда (у разі розсіяння тотожних частинок одна на одній врахування обмінних ефектів приводить до формули Мотта [1]).

Далі, істотно, що приріст середньої енергії > 0 , тобто система з гармонічними коливаннями є поглиначем, відсмоктувачем енергії (підсилення, віддачу енергії можуть давати системи з ангармонічними коливаннями). Отак на простій одномодовій моделі демонструються важливі фізичні наслідки. Результат для приросту енергії (як і ймовірності переходів) залежить від тривалості дії сили та від її величини. Так, якщо час дії сили t значно більший, ніж період класичних коливань осцилятора, тобто якщо $\omega t \gg 1$, вплив осцилюючого множника $\exp(i\omega t)$ буде таким великим, що інтеграл в (1.19) зробиться дуже малим, хоча величина сили може бути значною (адіабатичний випадок). У другій границі $\omega t \ll 1$ експоненціальний множник можна замінити одиницею, так що інтеграл зведеться до повного імпульсу сили й не залежить від частоти осцилятора. Істотними є й величина сили, і характер включення її. У зв'язку з цим

розрізняють сильні та слабкі, адіабатичні й різко змінні впливи (ударні, імпульсні, раптові, тощо [1, 18, 19]).

Розглянута задача з вимушених коливань гармонічного осцилятора припускає точний розв'язок. Уперше вона була розв'язана Шредінгером у період створювання хвильової механіки, а в сучасній квантовій теорії стала основою методу когерентних станів [20–23]. До питання точного розв'язку ми ще повернемося.

Підкреслимо ще раз, що цей приклад кінетичної задачі є повчальним у багатьох відношеннях. Так, продемонстровано, яким чином імовірності переходів дають уявлення (якісно та кількісно) про процеси, що відбуваються в системі, а також безпосередньо використовуються, "працюють" під час розрахунку середньої енергії. Фактично результати стосуються окремого головного коливання (моди) системи з великою кількістю ступенів свободи, зокрема електромагнітного поля. Задача по суті є фрагментом теорії випромінювання. У послідовній теорії випромінювання необхідно квантовим способом описувати й електромагнітне поле, й атомну систему. У спрощеному, напівкласичному підході розглядають випромінюючу систему квантовим способом, а поле класично. У даній же задачі розглянуто інший підхід, коли поле квантоване, а система, що його збуджує, описується класично (моделювання процесу випромінювання, так би мовити, з польового кінця). Додамо, що точні формули для ймовірностей переходів під час вимушених коливань гармонічного осцилятора одержано Швінгером (див., наприклад, [24]).

Наприкінці для закріплення матеріалу цього параграфа пропонуємо вправу.

Отримайте формулу для ймовірностей переходу в другому наближенні та знайдіть імовірності двоквантових процесів для вимушених коливань гармонічного осцилятора.

1.3. Метод рівнянь руху

Під час переходу до рівнянь руху в картинах Гейзенберга та Дірака користуємось загальним визначенням операторів похідних за часом $\hat{dA}/dt$ (швидкостей). Для всіх зображень вони запроваджуються відношенням

$$\langle dA/dt \rangle = d\langle A \rangle/dt. \quad (1.20)$$

Оскільки в картині Шредінгера середнє значення $\langle A \rangle = (\Psi(t), \hat{A} \Psi(t))$ залежить від часу насамперед через вектор стану $\Psi(t)$, а також у

загальному випадку й через $\hat{A}$, диференціювання з урахуванням (1.1) дає згідно з (1.20) вираз для швидкості

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

Оскільки оператори фізичних величин найчастіше явно від часу не залежать, розрахунок швидкостей зводиться до обчислення дужок Пуассона $\{ \hat{H}, \hat{A} \}$.

У картині Гейзенберга середнє значення $\langle A \rangle = (\Psi_{\Gamma}, \hat{A}_{\Gamma}(t) \Psi_{\Gamma})$ залежить від часу тільки через оператор $\hat{A}_{\Gamma}(t)$, так що на підставі (1.20)

$$(\widehat{dA}/dt)_{\Gamma} = \partial \hat{A}_{\Gamma} / \partial t. \quad (1.22)$$

З іншого боку, безпосередній перехід від шредінгерівської похідної (1.21) згідно з канонічним перетворенням (1.3) дає правило розрахунку швидкостей

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

Для стислості часові аргументи випускаємо.

Нарешті, в картині Дірака залежність від часу середніх значень знов визначається й оператором, і вектором стану: $\langle A \rangle = (\Psi_{\text{Д}}(t), \hat{A}_{\text{Д}}(t) \Psi_{\text{Д}}(t))$, а оскільки згідно з (1.7) $\hbar \partial \Psi_{\text{Д}} / \partial t = -i \hat{H}_{\text{Д}}(t) \Psi_{\text{Д}}$, одержуємо

$$(\widehat{dA}/dt)_{\text{Д}} = \partial \hat{A}_{\text{Д}} / \partial t + \{ \hat{H}_{\text{Д}}, \hat{A}_{\text{Д}} \}. \quad (1.24)$$

Перехід же від шредінгерівської формули (1.21) відповідно канонічному перетворенню (1.5) дає таке правило обчислення швидкостей на підставі шредінгерівських величин, які вважаються вихідними:

$$\begin{aligned} (\widehat{dA}/dt)_{\text{Д}} &= \hat{U}_0^{-1} (\widehat{dA}/dt) \hat{U}_0 = \hat{U}_0^{-1} (\partial \hat{A} / \partial t) \hat{U}_0 + \hat{U}_0^{-1} \{ \hat{H}, \hat{A} \} \hat{U}_0 = \\ &= \hat{U}_0^{-1} (\partial \hat{A} / \partial t) \hat{U}_0 + \{ \hat{H}_{\text{Д}}, \hat{A}_{\text{Д}} \}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Оскільки $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, з (1.24), (1.25) одержуємо співвідношення

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

Нагадаємо, що шредінгерівські величини спеціальних позначок не мають.

Найчастіше в картині Шредінгера оператори фізичних величин та допоміжні оператори типу народження та знищення явно від часу не залежать, тобто в одержаних формулах $\partial \hat{A} / \partial t = 0$. Для цих величин

рівняння руху набувають ось такого вигляду. У зображенні Гейзенберга з формул (1.22), (1.23) впливає диференціальне рівняння

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

яке й є основою методу рівнянь руху в цій картині. Подібно до того в зображенні Дірака співвідношення (1.26) дає рівняння руху

$$\partial \hat{A}_\Delta / \partial t = \{ \hat{H}, \hat{A} \}_\Delta. \quad (1.28)$$

В обох випадках практична користь полягає в тому, що спочатку обчислюються дужки Пуассона $\{ \hat{H}, \hat{A} \}$ або $\{ \hat{H}_0, \hat{A} \}$ для шредінгерівських величин, а потім в одержаних виразах переходять до відповідного зображення, що й дає праву частину операторних еволюційних рівнянь (1.27), (1.28). Початковою умовою при цьому є збіг усіх величин у трьох зображеннях: для рівняння (1.27) це означає, що $\hat{A}_\Gamma(t_0) = \hat{A}$, а для рівняння (1.28) $\hat{A}_\Delta(t_0) = \hat{A}$. Таким чином, після інтегрування рівнянь руху відповідь для гейзенбергівських операторів буде вираженою через шредінгерівські величини, а обчислення середніх значень зведемо до усереднення за початковим станом, оскільки $\Psi_\Gamma = \Psi(t_0)$. Для картини Дірака необхідно, проте, обчислити ще й вектор стану $\Psi_\Delta(t)$ (або побудувати S -оператор).

Зазначимо також, що в тих випадках, коли оператори рівняння руху (1.27), (1.28) виявляються лінійними, можна використати загальні властивості їх розв'язків, які розглянуто в дод. 2.

Перш ніж переходити до конкретних застосувань рівнянь руху, виконайте таку вправу.

Виведіть усі формули для швидкостей, розглядаючи змішані стани, для яких середні значення обчислюються за правилом $\langle A \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A})$.

Ілюстрації до методу рівнянь руху почнемо з випадку одновимірної частинки з квадратичним законом дисперсії в потенціальному полі. Гамільтоніан системи $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{U}(x, t)$. На дослідження беремо канонічно спряжені змінні: координату x та імпульс p . Обчислюємо дужки Пуассона $\{ \hat{H}, \hat{x} \} = \hat{p}/m$;
 $\{ \hat{H}, \hat{p} \} = -\partial \hat{U} / \partial x$. Отже, гейзенбергівські рівняння мають вигляд

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

(крапкою позначено частинні похідні за часом). Звідси, зокрема, впливають з огляду на (1.22), (1.20) так звані теореми Еренфеста для середніх значень:

$$d\langle x \rangle / dt = \langle p \rangle / m; \quad d\langle p \rangle / dt = -\langle \partial U / \partial x \rangle. \quad (1.30)$$

Якщо рух вільний, тобто $U = 0$, то друге рівняння в (1.29) дає закон зберігання імпульсу $\hat{p}_\Gamma = \text{const}$, після чого інтегруємо перше рівняння та, користуючись початковими умовами, одержуємо остаточну відповідь

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

Це й є повний розв'язок задачі, тому що всі характеристики руху можна виразити через x та p . Звідси, зокрема, виходить, що результат для середніх значень координати та імпульсу за будь-яких початкових умов збігається з класичним (чого, певна річ, не можна сказати про всі характеристики вільного руху).

Аналогічно розв'язуються рівняння й у випадку однорідного постійного силового поля F :

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

Пропонуємо вправу: проінтегруйте гейзенбергівські рівняння для однорідного змінного силового поля й для вільного руху з довільним законом дисперсії. Узагальніть усі результати на випадок тривимірного руху.

Ще одним прикладом системи, для якої рівняння руху легко інтегруються, є гармонічний осцилятор, коли $\hat{U} = m \omega^2 \hat{x}^2 / 2$, а рівняння (1.29) зводяться до системи

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

Інтегруючи, одержуємо з урахуванням початкових умов відповідь у вигляді

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

Одним з наслідків є важливий висновок про те, що у гармонічного осцилятора середні значення координати (й імпульсу) змінюються з часом за гармонічним законом з частотою класичних коливань ω за будь-яких початкових умов:

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle_0 \cos \omega (t - t_0) + (\langle p \rangle_0 / m \omega) \sin \omega (t - t_0) = A \cos (\omega t + a). \quad (1.34)$$

Позначкою $\langle \dots \rangle_0$ визначено усереднення за початковим станом. Винятком (або тривіальним окремим випадком) є стаціонарні стани, коли усі ці середні дорівнюють нулю.

Вправа: проінтегруйте гейзенбергівські рівняння руху у випадку параболічного потенціалу відштовхування $\hat{U} = m \kappa^2 \hat{x}^2 / 2$ ($\kappa > 0$). Дослідіть зміну за часом середнього значення координати $\langle x \rangle$ для різних початкових умов.

Проведемо тепер розрахунок для гармонічного осцилятора ще раз, користуючись зображенням вторинного квантування, тобто виражаючи всі величини через оператори народження та знищення. Ця задача має самостійне значення в загальному методі вторинного квантування для системи бозе-частинок. Гамільтоніан осцилятора має вигляд $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$, так що з урахуванням бозевських переставних співвідношень $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ потрібні дужки Пуассона легко обчислюються:

$$\{\hat{H}, \hat{a}^+\} = i\omega\hat{a}^+[\hat{a}, \hat{a}^+] = i\omega\hat{a}^+; \quad \{\hat{H}, \hat{a}\} = i\omega[\hat{a}^+, \hat{a}]\hat{a} = -i\omega\hat{a},$$

приводячи до гейзенбергівських рівнянь руху $\dot{\hat{a}}_+^+ = i\omega\hat{a}_+^+$; $\dot{\hat{a}}_- = -i\omega\hat{a}_-$.

Зрозуміло, що в поданій задачі рівняння для операторів народження та знищення розділяються, так що досить розглянути тільки одне з них. У більш складних випадках зустрічаються системи зв'язаних між собою рівнянь для операторів народження $\hat{a}_k^+$ та знищення $\hat{a}_k$ частинок у певних станах k .

Диференціальні рівняння легко інтегруються:

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

Звідси, зокрема, можна одержати результати (1.33), бо

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

де невизначеності нульових коливань осцилятора $\Delta x_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$; $\Delta p_0 = \sqrt{\hbar m\omega/2}$.

Ще раз підкреслимо, що формули (1.35) та (1.33) повністю розв'язують квантову задачу про вільні коливання гармонічного осцилятора, тому що будь-які характеристики руху виражаються через оператори $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ або $\hat{x}$, $\hat{p}$.

Покажемо, в який спосіб методом гейзенбергівських рівнянь руху точно розв'язується задача про вимушені коливання гармонічного осцилятора. Тепер гамільтоніан осцилятора виконує роль незбуреного гамільтоніана $\hat{H}_0 = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$, а збурення, що вже зустрічалося в попереднім параграфі, має вигляд

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

Етап обчислення дужок Пуассона:

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

(цього разу обмежуємось рівнянням для оператора знищення). Оскільки другий доданок у правій частині гейзенбергівського рівняння руху $\dot{\hat{a}}_- = -i\omega\hat{a}_- + i\Delta x_0 f(t)/\hbar$ є с-числом, інтегрування не створює клопоту (див. також дод. 2):

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

Остаточну відповідь, приєднуючи спряжений оператор, запишемо у вигляді

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

де комплексна величина

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

Ці формули й надають точного розв'язку задачі, що було поставлено, хоча, зрозуміло, підрахунок різних конкретних фізичних характеристик потребує додаткових зусиль. Як простий приклад застосування гейзенбергівських операторів, що було знайдено, обчислимо середнє значення енергії осцилятора:

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

Перший доданок має значення середньої енергії в початковому стані. Якщо цей стан був чистим стаціонарним, то середні значення

$$\langle \hat{a}^+ \rangle_0 = \langle \hat{a} \rangle_0 = 0, \quad (1.40)$$

тому що діагональні елементи операторів народження та знищення дорівнюють нулю в зображенні чисел заповнення. У такому разі приріст середньої енергії $\Delta \langle E \rangle = \hbar\omega |z|^2$. Враховуючи (1.39), переконуємося, що цей вираз збігається з тим, що було одержано раніше (1.19) на підставі теорії збурень. При цьому результат є слушним також для початкового змішаного стану, коли матриця густини діагональна в енергетичному зображенні, так що всіляке середнє значення $\langle A \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) = \sum_n \rho_{nn} A_{nn}$ є лінійною комбінацією середніх за чистими стаціонарними станами. У цьому випадку знов здійснюється умова (1.40).

Таким чином, виявляється, що формула для приросту енергії (1.19) не тільки є точною, але й має більш широке коло застосування (для будь-яких змішаних стаціонарних станів, включаючи стан термодинамічної рівноваги). Як часто трапляється, результат має насправді більш широке коло застосування, ніж передбачається при його одержанні.

Вправа: обчисліть середні значення координати та імпульсу збудженого осцилятора. Запишіть також гейзенбергівські рівняння

руху для заряду в електромагнітному полі з векторним потенціалом $\mathbf{A}$ та скалярним потенціалом ϕ . Вказівка: гамільтоніан

$$\hat{H} = [\hat{\mathbf{P}} - (e/c) \hat{\mathbf{A}}]^2/2m + e\phi, \text{ де } \{\hat{P}_k, \hat{x}_l\} = \delta_{kl}; \quad k, l = 1, 2, 3.$$

Наприкінці цього параграфа розглянемо, як розв'язується та ж сама задача про вимушені коливання осцилятора в зображенні взаємодії. Відразу зауважимо, що діраківські рівняння руху (1.28) збігаються з гейзенберґівськими (1.27) для вільних коливань (взагалі, для будь-яких систем діраківські величини є гейзенберґівськими для природної еволюції). Тим самим, перша частина задачі – знаходження операторів народження та знищення в картині Дірака – вже розв'язана при гейзенберґівському підході, тобто відповідь пишемо за формулами (1.35):

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

Друга частина задачі – побудова S -оператора, який задовольняє еволюційне рівняння $\partial \hat{S} / \partial t = -i \hat{H}_{1D}(t) \hat{S} / \hbar$, де згідно з (1.37)

$\hat{H}_{1D}(t) = -\Delta x_0 f(t) (\hat{a}_D^+ + \hat{a}_D)$, а діраківські оператори народження та знищення беремо з (1.41). Інтегрування такого рівняння розглянуто у вправі 4 дод. 2. Функція η , що фігурує там, дорівнює в даному випадку

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

інша величина χ є дійсною та дорівнює

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

а остаточну відповідь записано в такій компактній формі:

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

де величину z визначено в (1.39).

Як уже відзначалося під час загального обміркування методу рівнянь руху в картині Дірака, формули (1.41), (1.42) дають повний розв'язок задачі, що було поставлено.

Як приклад застосування результатів розглянемо важливий випадок початкових умов, коли осцилятор перебуває в стані нульових коливань ψ_0 (вакуум квантів). Тоді в картині Дірака стан осцилятора в будь-який момент часу буде визначатися вектором $\Psi_D(t) = \hat{S}(t, t_0) \psi_0$. Факторизуючи S -оператор (1.42) згідно з тотожністю з вправи 2 в дод. 2

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

одержуємо внаслідок послідовної дії операторних експонент, права з яких не змінює вакуумного вектора:

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

де враховано, що $(\hat{a}^+)^n \psi_0 = \sqrt{n!} \psi_n$.

Таким чином, у зображенні взаємодії вектор стану при вакуумній початковій умові з точністю до фазового множника дорівнює вектору так званих когерентних станів:

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

У даному випадку зручно перейти до позначень Дірака для векторів станів.

Метод когерентних станів широко використовується в різних розділах квантової теорії. Докладний виклад його основ та застосувань у квантовій оптиці подано в книзі [20], застосування та узагальнення викладено в [21, 22], теоретико-груповому підходу до побудови узагальнених когерентних станів та їх застосуванням присвячено огляд Переломова [23]. Задачі з теми когерентних станів містяться в книзі [16, п. 6]. Але тут ми обмежимося стислими зауваженнями щодо когерентних станів.

У задачі про вимушені коливання осцилятора комплексна величина z залежить від сили, що змушує, згідно з (1.39). У загальному випадку когерентні стани (1.44) розглядаються на всій площині комплексної z . Вони утворюють повну систему векторів (навіть надповну, але неортогональну). Вектор $|z\rangle$ є власним вектором оператора знищення: $\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle$ (у чому корисно перекоонатися безпосередньо). У z -станах добуток невизначеностей координати та імпульсу, які дорівнюють вакуумним $\Delta x = \Delta x_0$; $\Delta p = \Delta p_0$, набуває найменшого принципово можливого значення $\hbar/2$. Переконайтесь у цьому, водночас обчисливши також середні значення координати та імпульсу в станах (1.44).

Із запису когерентних станів у вигляді суперпозиції стаціонарних станів (1.44) видно, що ймовірності числа квантів розподілені за Пуассоном:

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

При цьому середнє значення числа квантів дорівнює дисперсії, так що $\langle n \rangle \equiv \bar{n} = |z|^2$, а $\Delta n = \sqrt{\Delta n} = |z|$. Переконайтесь у цьому також

безпосереднім обчисленням. Тим самим, ступінь класичності когерентних станів ($\bar{n} \gg \Delta n \gg 1$) визначається віддаленістю його зображуючої точки від початку координат у площині z , тобто умовою $|z| \gg 1$.

Повертаючись до вимушених коливань осцилятора зі стану вакууму, визначимо, що в картині Дірака еволюції відповідає траєкторія на площині z згідно з (1.39), що виходить з початку координат – єдиної точки, якій відповідає певне число квантів (нульове). Якщо сила, що змушує, перестає діяти, то зображуюча точка не рухається (часова залежність залишається тільки у операторних величин). У картині Шредінгера вектор стану одержуємо згідно з канонічним перетворенням (1.5):

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

Оскільки для осцилятора $\hat{H}_0 = \hbar \omega (\hat{n} + 1/2)$ і пропагатор природної еволюції

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

внаслідок безпосередньої дії на власні вектори оператора кількості частинок в (1.44) одержуємо

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

Отже, в зображенні Шредінгера вектор стану вимушених коливань осцилятора також належить до когерентних станів (з точністю до фазового множника). При цьому осциляторний параметр когерентних станів $z \exp[-i \omega (t - t_0)]$ відрізняється тільки фазою від відповідної діраківської величини. Інакше кажучи, в комплексній z -площині точку, яка зображує шредінгерівську еволюцію, зсунуто за фазою відносно діраківської за стрілкою годинника в кожний момент часу, а після вимикання змушуючої сили вона рухається по колу з постійною кутовою швидкістю (вільні коливання).

Завершуючи тему вимушених коливань, відзначимо, що для гармонічного осцилятора точний розв'язок можливий також у випадку змінної частоти $\omega(t)$. Теорія докладно викладена в [11].

Вправа: виведіть формули для діраківських операторів (1.41) за правилом (1.5) з пропагатором (1.45) методом комутаторного ряду (вправа 1 з дод. 2).

Те ж саме методом прямої дії операторів $\hat{a}^+$ і $\hat{a}$ як операторів народження та знищення кількості квантів.

1.4. Метод динаміки флюктуацій та кореляцій

Дослідження динаміки кореляційних характеристик почнемо з простих одночастинкових систем. Будемо розглядати центральні кореляційні моменти другого порядку для величин A та B поки що в той самий момент часу t : $D_{AB}(t) = (A - \bar{A})(B - \bar{B})$. У квантовому випадку при цьому необхідно брати симетрований добуток відповідних операторів величин, які досліджуються, тобто антикомутатор

$$D_{AB}(t) = 1/2 \left\langle \left[\hat{A} - \bar{A}, \hat{B} - \bar{B} \right]_+ \right\rangle = 1/2 \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right]_+ \right\rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle.$$

Якщо $A = B$, кореляційна міра зводиться до дисперсії, тобто квадратичної міри флюктуацій, а невизначеність $\Delta A = \sqrt{D_{AA}}$.

Можна зазначити два напрямки досліджень: інтегрування диференціальних рівнянь руху для дисперсій і кореляцій та побудування кореляційних величин на підставі розв'язку операторних еволюційних рівнянь. Ілюстрацією першого напрямку може бути ланцюжок диференціальних рівнянь для кореляцій під час одновимірного руху частинки з квадратичним законом дисперсії в потенціальному полі.

Внаслідок білінійності кореляційних величин похідні за часом виражаються через відповідні кореляції з швидкостями $\dot{D}_{AB} = D_{AB} + D_{AB}$. З огляду на теорему Еренфеста похідна за часом від дисперсії координати зв'язана з кореляцією координати та імпульсу: $\dot{D}_{xx} = (2/m)D_{xp}$. Аналогічно

$$\dot{D}_{xp} = D_{pp}/m + D_{xF}; \quad \dot{D}_{pp} = 2D_{pF}, \text{ тощо.}$$

Розв'язання такого нескінченного ланцюжка можливе, якщо зробити певні додаткові припущення, які або дають замкнену систему рівнянь, або дозволяють розчепити, обірвати в наближений спосіб цей ланцюжок.

Розглянемо декілька простих прикладів точного розв'язку. Перший відноситься до вільного руху, коли ланцюжок обривається. Замкнена система диференціальних рівнянь $\dot{D}_{xx} = (2/m)D_{xp}$; $\dot{D}_{xp} = D_{pp}/m$; $\dot{D}_{pp} = 0$ легко інтегрується:

$$D_{xx} = D_{xx}^0 + 2tD_{xp}^0/m + t^2D_{pp}^0/m^2; \\ D_{xp} = D_{xp}^0 + tD_{pp}^0/m; \quad D_{pp} = D_{pp}^0. \quad (1.46)$$

Надалі вважаємо $t_0 = 0$ і позначаємо нульовим індексом початкові значення.

Особливий інтерес викликає відповідь для дисперсії координати. Вона показує, що за будь-яких початкових умов спостерігається ефект розпливання пакета в координатному просторі: при $t \rightarrow \infty$ невизначеність координати лінійно зростає з часом $\Delta x \sim t \Delta p^0 / m$. Проте у випадку початкової від'ємної кореляції координати та імпульсу дисперсія змінюється немонотонно: спочатку вона зменшується, досягаючи мінімального значення, $D_{xx}^{\min} = D_{xx}^0 - D_{xp}^0 / D_{pp}^0$ при $t_{\min} = -m D_{xp}^0 / D_{pp}^0$. Певна річ, $D_{xx}^{\min} > 0$ з огляду на нерівність $D_{xx} D_{pp} \geq D_{xp}^2 + \hbar^2 / 4$, що впливає з узагальненого співвідношення невизначеностей (див. [25, п. 13]). Якщо $D_{xp}^0 = 0$, то час розпливання пакета Δt , тобто час, за який другий член у дисперсії координат (1.46) стає порядку початкової дисперсії, $\Delta t \sim m \Delta x^0 / \Delta p^0$, а з урахуванням співвідношення невизначеностей одержуємо оцінку

$$\Delta t \sim m D_{xx}^0 / \hbar. \quad (1.47)$$

Результат означає нестійкість початкової координатної локалізації: чим вузькіший за координатою початковий пакет, тим швидше він розширюється. Щодо кореляції координати та імпульсу, то вона згідно з (1.46) зростає лінійно з часом. Навіть при $D_{xp}^0 = 0$ виникає додатна кореляція між x та p , тому що великим p відповідають великі x (частинка з великим імпульсом встигає просунутися далі).

Нарешті, дисперсія імпульсу є сталою величиною, що відповідає закону збереження імпульсу в наших умовах. Другим прикладом може стати рух в однорідному змінному силовому полі. Цікаво, що результати (1.46) залишаються слухними. Покажіть це.

Третій приклад – гармонічний осцилятор, для якого $\hat{F} = -m\omega^2 \hat{x}$. Ланцюжок рівнянь для кореляцій у цьому випадку також замикається: $\dot{D}_{xx} = 2D_{xp} / m$; $\dot{D}_{xp} = D_{pp} / m - m\omega^2 D_{xx}$; $\dot{D}_{pp} = -2m\omega^2 D_{xp}$. З першого та третього рівнянь випливає інтеграл $D_{xx} + D_{pp} / m^2 \omega^2 = \text{const}$, а виключення D_{xp} з першого та другого дає рівняння $\ddot{D}_{xx} + 4\omega^2 D_{xx} = 2\omega^2 (D_{xx}^0 + D_{pp}^0 / m^2 \omega^2)$.

Звідси одержуємо для основних кореляційних характеристик вільних коливань гармонічного осцилятора такі вирази:

$$\begin{aligned}
D_{xx} &= D_{xx}^0 \cos^2 \omega t + D_{xp}^0 / m\omega \sin 2\omega t + D_{pp}^0 / m^2 \omega^2 \sin^2 \omega t; \\
D_{xp} &= D_{xp}^0 \cos 2\omega t + (D_{pp}^0 - m^2 \omega^2 D_{xx}^0) / 2m\omega \sin 2\omega t; \\
D_{pp} &= D_{pp}^0 \cos^2 \omega t - m\omega D_{xp}^0 \sin 2\omega t + m^2 \omega^2 D_{xx}^0 \sin^2 \omega t.
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Ніякого розпливання немає. Більше того, якщо середнє значення лінійних характеристик (1.34) змінюється з частотою ω , то всі кореляційні міри змінюються за гармонічним законом з подвійною частотою. Зауважимо також, що в стаціонарних станах дисперсії повинні бути сталими, а $D_{xp} = 0$. Рівняння (1.48) дають такий результат, оскільки для осцилятора в цих станах $D_{pp} = m^2 \omega^2 D_{xx}$.

Вправа: розгляньте приклад квадратичного потенціалу відштовхування з $\hat{F} = m\hat{x}^2 \hat{x}$. Покажіть, що в усіх розглянутих досі випадках диференціальні рівняння для кореляцій мають інтеграл $D_{xx} D_{pp} - D_{xp}^2 = \text{const}$. Узагальніть результати для руху частинки в однорідному силовому полі на тривимірний випадок. Одержіть закон зміни за часом дисперсії координати у випадку вільного руху частинки з довільним законом дисперсії.

Другий напрямок досліджень кореляційних характеристик проілюструємо на прикладі вимушених коливань гармонічного осцилятора. Попередньо зауважимо, що хоч усі три картини опису станів у часі еквівалентні, проте при розгляді різночасових характеристик, зокрема, кореляційних моментів для двох величин, що взяті в різні моменти часу, $D_{AB}(t_1, t_2) = [A(t_1) - \overline{A(t_1)}][B(t_2) - \overline{B(t_2)}]$, перевагу слід віддати гейзенбергівському зображенню. Адже в картині Шредінгера стан системи визначається вектором у певний момент часу і немає рецепта обчислення різночасових величин. У картині ж Гейзенберга вектор стану залишається незмінним, а часова залежність міститься в операторах, що дозволяє побудувати кореляційні характеристики згідно з правилом:

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

де усереднення провадиться за допомогою фіксованого гейзенбергівського вектора стану, яким є початковий шредінгерівський вектор.

Для вимушених коливань гармонічного осцилятора гейзенбергівські оператори будемо на підставі одержаного раніше результату (1.38): $\hat{x}_\Gamma(t) = \Delta x_0 [\hat{a}_\Gamma^+(t) + \hat{a}_\Gamma(t)] = \Delta x_0 (\hat{a}^+ e^{i\omega t} + \hat{a} e^{-i\omega t} + z^* e^{i\omega t} + z e^{-i\omega t})$;

$$(1.50)$$

$$\hat{p}_\Gamma(t) = i\Delta p_0[\hat{a}_\Gamma^+(t) - \hat{a}_\Gamma(t)] = i\Delta p_0(\hat{a}^+ e^{i\omega t} - \hat{a} e^{-i\omega t} + z^* e^{i\omega t} - z e^{-i\omega t}).$$

$$3 \text{ вигляду операторів, що відлічені від середніх значень,}$$

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

$$\hat{P}(t) \equiv \hat{p}_\Gamma(t) - \langle \hat{p}_\Gamma(t) \rangle_0 = i\Delta p_0[(\hat{a}^+ - \langle \hat{a}^+ \rangle_0) e^{i\omega t} - (\hat{a} - \langle \hat{a} \rangle_0) e^{-i\omega t}]$$

робимо важливий висновок, що на кореляційні характеристики, які розглядаються, сила, що змушує, не робить ніякого впливу, тобто вони змінюються з часом у такий же спосіб, як і під час вільних коливань осцилятора.

Будемо вважати, що в початковий момент часу стан осцилятора був змішаним стаціонарним (досить загальне припущення, яке включає, зокрема, чисті стаціонарні стани та стан термодинамічної рівноваги – осцилятор у термостаті). Тоді для кореляції координат після нескладних обчислень одержуємо

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

де $\langle n \rangle_0$ означає середню кількість квантів у початковому стані. Аналогічний вираз знаходимо й для кореляції імпульсів:

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

У такий же спосіб приходимо до формули для кореляції координат та імпульсів:

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

У цій формулі можна, звичайно, врахувати, що $\Delta x_0 \Delta p_0 = \hbar / 2$, але запис у вигляді добутку вакуумних невизначеностей зближує її з іншими формулами.

Вправа: виведіть формули (1.52), (1.53) безпосередньо з (1.51).

Одержані результати для різночасових кореляцій доповнюють формули (1.48), які були одержані раніше. При часових аргументах, що збігаються, автокореляції (1.51), (1.52) переходять у відповідні дисперсії для стаціонарних станів, причому з указанням явного їх вигляду. Усі величини змінюються за гармонічним законом з частотою ω . За певних $t_1 - t_2$ кореляції перетворюються на нуль. Залежність тільки різниці часових аргументів відбиває однорідність часу для вільних коливань осцилятора.

До знайдених величин додамо ще одну близьку характеристику, так звану функцію післядії, про важливу роль якої в теорії лінійної реакції на зовнішні впливи ще буде розповідь у відповідному розділі посібника: $\varphi_{xp}(t_1, t_2) = \langle \{\hat{x}_\Gamma(t_1), \hat{p}_\Gamma(t_2)\} \rangle_0$. Обчислення за допомогою формул (1.50) дає $\varphi_{xp}(t_1, t_2) = -\cos\omega(t_1 - t_2)$. (1.54)

Величини (1.51)–(1.54) задовольняють нерівність, що випливає з узагальненого співвідношення невизначеностей для різночасових величин з урахуванням кореляції [25, р. 13]:

$D_{xx}(t_1, t_1)D_{pp}(t_2, t_2) \geq D_{xp}^2(t_1, t_2) + \hbar^2\varphi_{xp}^2(t_1, t_2)/4$. Дійсно, $D_{xx}(t_1, t_1)D_{pp}(t_2, t_2) - D_{xp}^2(t_1, t_2) = (\hbar^2/4)(2\langle n \rangle_0 + 1)\cos^2\omega(t_1 - t_2)$, а $(\hbar^2/4)\varphi_{xp}^2(t_1, t_2) = (\hbar^2/4)\cos^2\omega(t_1 - t_2)$. Рівність же досягається у випадку вакуумного початкового стану з $\langle n \rangle_0 = 0$.

На закінчення переглянемо питання про зв'язок фази Φ одночастинкової хвильової функції $\Psi = A \exp(i\Phi)$ координатного шредінгєрівського зображення з кореляцією та середнім значенням імпульсу частинки. Насамперед нагадаємо, що саме фаза визначає вектор густини потоку ймовірності [1] – одну з основних характеристик процесів переносу: $\mathbf{j} = (\hbar/m)A^2\nabla\Phi$, (1.55)

а з нею й середні густини потоків кількості частинок, маси та заряду. Далі, середнє значення градієнта фази дає середнє значення імпульсу частинки: $\langle \mathbf{p} \rangle = \hbar\langle \nabla\Phi \rangle$. (1.56)

Нарешті, наприклад в одному вимірі, кореляція флюктуацій координати та імпульсу виражається формулою

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

Так, якщо фаза хвильової функції $\Phi = \alpha x + \beta x^2$, то з огляду на (1.56) і (1.57) $\bar{p} = \hbar(\alpha + 2\beta\bar{x})$; $D_{xp} = 2\hbar\beta D_{xx}$. (1.58)

Переконайтесь прямим розрахунком у слушності цих співвідношень.

Завершуючи параграф про метод динаміки кореляцій, пропонуємо виконати вправи. Одержіть аналогічні (1.46) результати для різночасових одночастинкових величин за допомогою шредінгєрівських операторів вільного руху та в однорідному силовому полі. Обчисліть такі операторні величини для вимушених коливань гармонічного осцилятора: $[\hat{a}_\Gamma(t_1), \hat{a}_\Gamma^\dagger(t_2)]$; $\{\hat{x}_\Gamma(t_1), \hat{x}_\Gamma(t_2)\}$; $\{\hat{p}_\Gamma(t_1), \hat{p}_\Gamma(t_2)\}$, де хвилясті дужки, нагадаємо, означають квантові дужки Пуассона.

1.5. Метод функцій поширення

Функцією поширення будемо називати, як це вже було зазначено в 1.1, матричні елементи оператора еволюції (пропатора, оператора Гріна) в картині Шредінгера:

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

Цю величину часто також називають пропатором і функцією Гріна. Фізичний зміст функції поширення (ФП) полягає в тому, що хвильова функція в будь-який момент часу зв'язана з початковою хвильовою функцією інтегральним перетворенням, ядром якого є ФП:

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

Для визначеності пишемо знаки координат та інтегрування, тому що звичайно координатне зображення найбільш наочно для опису властивостей руху, хоча, певна річ, маються на увазі будь-які повні набори квантових чисел, а інтегрування може замінитися підсумовуванням.

Таким чином, знання функції поширення дозволяє розв'язати кінетичну задачу. Відповідне інтегральне перетворення можна записати й для матриці густини змішаних станів. На першому етапі ставиться задача обчислення ФП для конкретних випадків руху. Можна вказати декілька способів.

По-перше, за сталих зовнішніх умов, тобто при $\partial \hat{H} / \partial t = 0$, пропатор згідно з (1.9) дорівнює

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

Якщо розв'язана задача про власні значення E_k та власні хвильові функції $\psi_k(x)$ гамільтоніана в x -зображенні, то

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

де k – повний набір квантових чисел, які класифікують стаціонарні стани. Наприклад, для вільного одновимірного руху частинки з квадратичним законом дисперсії $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m$ ($k \equiv p$ і $p = \pm \sqrt{2mE}$) при $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx / \hbar)$ інтегрування в (1.61) за імпульсом

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

зводиться до інтегралів Френеля [26]. Відповідь запишемо, поклавши тут і надалі, якщо не застережене протилежне, $t_0 = 0$:

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

Для вільного руху на півосі $x < 0$ маємо: $\psi_k(x) = (2/\pi)^{1/2} \sin kx$, $x \leq 0$; $\psi_k(x) = 0$, $x \geq 0$; $\hbar k = \sqrt{2mE} > 0$. Обчислення в (1.61) зводяться до попереднього випадку, якщо використати формулу $2 \sin kx \sin kx_0 = \cos k(x - x_0) - \cos k(x + x_0)$. У результаті функція поширення напівобмеженого руху буде дорівнювати

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

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

Подібно до того на підставі знання характеристик стаціонарних станів можна одержати функцію поширення гармонічного осцилятора, якщо вжити відповідну формулу для твірних функцій поліномів Ерміта з книги [27, с. 194].

Вправа: покажіть, що ФП гармонічного осцилятора дорівнює

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

Як і повинно бути, при $\omega = 0$ цей вираз переходить в (1.62).

Другий спосіб обчислення функцій поширення з пропагатором вигляду (1.60) полягає в симетризації операторних експонент. Сутність цього засобу розберемо на прикладі руху частинки в однорідному постійному силовому полі. При цьому гамільтоніан $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m - F\hat{x}$ природним способом розбивається на основну частину для вільного руху, ФП якого вже вважаємо відомою, та додаток у вигляді потенціалу $-F\hat{x}$. Простіше за все скористатися симетризацією з вправи 2 в дод. 2, згідно з якою пропагатор розбивається на операторні множники таким чином:

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

Така симетризація значно спрощує обчислення матричних елементів у координатному зображенні, де є діагональними обкладинки вільного пропагатора $\hat{U}_0$, а тому одержуємо з урахуванням (1.62) функцію

поширення

$$U(x, t; x_0, 0) =$$

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

Окремим випадком цього способу можна вважати точну факторизацію пропагатора, коли гамільтоніан дорівнює сумі переставних операторів. Наприклад, для тривимірного вільного руху частинки з квадратичним анізотропним законом дисперсії у випадку декартових координат вздовж головних осей тензора обернених ефективних мас гамільтоніан $\hat{H} = \hat{p}_1^2 / 2m_1 + \hat{p}_2^2 / 2m_2 + \hat{p}_3^2 / 2m_3$, тому функція поширення зведеться до добутку відповідних множників у вигляді (1.62).

Існують також спеціальні заходи. Наприклад, у випадку напівобмеженого руху функцію поширення (1.63) можна було б одразу побудувати за допомогою (1.62) методом дзеркального відбиття. Функцію поширення в параболічному потенціалі відштовхування з $\hat{F} = m\omega^2 \hat{x}$ можна записати на основі заміни $\omega \rightarrow i\omega$ у виразі для ФП гармонічного осцилятора (1.64).

Зауважимо, що з огляду на початкові умови для пропагатора $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ функції поширення при $t \rightarrow 0$ прямують до дельта-функції, а тому, наприклад, з (1.62) випливає таке зображення для дельта-функції:

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

Ще одним важливим напрямком серед способів відшукування функцій поширення є метод Фейнмана інтегралів за траєкторіями [28–31], коли також вживається факторизація пропагаторів, проте на основі розбиття часового інтервалу на невеличкі проміжки часу згідно з властивістю, відзначеною в дод. 2:

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

Потім використовується вигляд ФП за малих Δt у випадку потенціалу V :

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

Граничний перехід при $\Delta t \rightarrow 0$ дає континуальний (функціональний) інтеграл, або інтеграл за віртуальними траєкторіями, що виражає ФП

через класичну функцію Лагранжа. Не вдаючись у деталі, зауважимо, що в сучасній квантовій теорії метод Фейнмана набув широкого узагальнення та різноманітного вжитку.

Нарешті, додамо, що часто обчислення функції поширення за формулою (1.61) виявляється громіздким або сума (інтеграл) не обчислюється. У таких випадках звичайно використовується конкретний вигляд початкової хвильової функції в k -зображенні: з (1.59) та (1.61) походить, що

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

Далі робиться спроба обчислити суму точно, наближено аналітично або ж чисельно.

На закінчення пропонуємо вправи. Обчисліть ФП для вільного руху частинки з квадратичним ізотропним законом дисперсії в n вимірах. Знайдіть ФП для частинки в постійному однорідному силовому полі в тривимірному випадку. Покажіть, що ФП (1.62), (1.64), (1.65) мають вигляд $U(x, t; x_0, t_0) = C(t - t_0) \exp \frac{i}{\hbar} S_{\text{к.л.}}(x, t; x_0, t_0)$, де $S_{\text{к.л.}}$ – класична дія, яка виражена через початкові та кінцеві значення координати та часу.

1.6. Ефект розпливання хвильових пакетів

Хоча питання про розпливання хвильових пакетів уже порушувалось у параграфі 1.4, цьому цікавому явищу квантової кінетики слід приділити особливу увагу. Ефект розпливання є довільним, не зв'язаним з будь-яким зовнішнім впливом на систему. Причиною його виникнення є невизначеність імпульсу та нелінійність закону дисперсії. В локалізованому за координатою пакеті з огляду на співвідношення невизначеностей присутні хвилі з різними імпульсами, а отже, через нелінійну залежність енергії від імпульсу, і з різними фазовими швидкостями. Бистрі хвилі з великою фазовою швидкістю випереджають повільні, а тому в координатному просторі відбувається безперервна перебудова хвильового пакета.

Як вже відзначалося в 1.4, ознакою розпливання є зростання невизначеності координати при великих t . Це – загальний, так би мовити, інтегральний результат. Дослідимо деякі локальні властивості цього явища. Спочатку розглянемо одновимірні пакети довільної початкової форми $\Psi(x, 0)$. З формул (1.59), (1.62) випливає, що в будь-який момент часу хвильовий пакет визначається виразом

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

Якщо початковий пакет був зосереджений в області $|x_0| \lesssim a$, то для $|x| \lesssim a$ при $t > ma^2/\hbar$ підінтегральну експоненту в першому наближенні можна замінити одиницею, що дає грубу оцінку поведінки густини ймовірності координат в області початкової локалізації

$$\rho(x, t) \approx \frac{m}{2\pi\hbar t} \left| \int \Psi(x_0, 0) dx_0 \right|^2, \quad |x| \lesssim a.$$

Правило $\rho \sim t^{-1}$ при великих t випливає з умови нормування $\int \rho(x, t) dx = 1$, якщо врахувати, що $\Delta x \sim t$, а $\int \rho(x, t) dx \sim \rho(0, t) \Delta x$.

Таким чином, виявлено такі попередні закономірності кінцевої стадії процесу розпливання. Густина ймовірності координат у першому наближенні не залежить від x і спадає за законом

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

де $\tau = ma^2 / 2\pi\hbar$ порядку часу розпливання пакета, а величину a введено визначенням $\int \Psi(x, 0) dx = a \Psi(0, 0) \neq 0$. Часова асимптотика і факт згладжування пакета в області початкової локалізації носять універсальний характер, тобто не залежать від форми початкового пакета.

Результати безпосередньо узагальнюються на багатовимірний випадок. Функція поширення для n вимірювань факторизується (п. 1 з дод. 1), так що $\rho(x, t) \approx (\tau/t)^n \rho(0, 0)$. Таке швидке розпливання багатовимірних пакетів пояснюється необхідністю дотримання нормування, оскільки для всіх напрямків невизначеності координат зростають лінійно з часом, а $\int \rho(r, t) dV \sim \rho(0, t) (\Delta x)^n$.

Точнішу оцінку для густини ймовірності координат одержуємо згідно з (1.68) з виразу

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

в якому початкова функція $\Psi(x, 0)$ вважається дійсною. Розкладаючи тригонометричні функції в ряди та зберігаючи відповідні члени, маємо $\rho(x, t) =$

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

де тильдою позначено особливе усереднення за правилом $\tilde{x} = \int x \Psi(x, 0) dx / \int \Psi(x, 0) dx$. У випадку парної початкової хвильової функції лінійний за координатою член в (1.71) зникає, як і має бути з огляду на закон зберігання парності. Незалежний від x поправковий член уточнює значення ρ на початку координат, а останній член дає слабку квадратичну залежність від координати.

Як конкретний приклад розглянемо гауссів та прямокутний початкові пакети. Для початкової хвильової функції у вигляді гауссіана

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

характерні величини дорівнюють $a = (4\pi D_0)^{1/2}$; $\tau = 2mD_0 / \hbar$; $\rho(0, 0) = (2\pi D_0)^{-1/2}$. Після обчислення потрібних середніх значень $\tilde{x}^2 = 2D_0$; $\tilde{x}^4 = 12D_0^2$ формула (1.71) набуває вигляду

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

Для початкового прямокутного пакета

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

аналогічні величини обчислюються ще простіше: $\tau = ma^2 / 2\pi\hbar$;

$\rho(0, 0) = a^{-1}$; $\tilde{x}^2 = a^2 / 12$; $\tilde{x}^4 = a^4 / 80$, так що в результаті одержуємо таку конкретизацію виразу (1.71):

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

Знайдені апроксимації придатні лише для області початкової локалізації за координатами (центр розподілу). Для периферії ж (крил розподілу) можна також одержати відповідне наближення, записуючи густину ймовірності координат згідно з (1.68) у вигляді

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

Зміст виразу під знаком модуля простий – це імпульсне зображення для функції $\Psi(x, 0) \exp(imx^2 / 2\hbar t)$, взяте при значенні імпульсу

$p = mx / t$. При $t > ma^2 / \hbar$ експоненціальний множник замінюємо одиницею та знаходимо наближену формулу, яка зв'язує густину ймовірності координат з густиною ймовірностей імпульсів,

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

яка придатна для всіх x . Помножуючи обидві частини рівності на dx та вводячи $dv = dp/m = dx / t$, бачимо, що фізичний сенс одержаного результату міститься в тому, що ймовірність виявити частинку з координатами в малому інтервалі dx поблизу точки x дорівнює ймовірності мати відповідні швидкості в інтервалі dv поблизу v .

Таким чином, крила розподілу за координатами (великі x) визначаються далекими Фур'є-компонентами.

Для гауссового початкового пакета (1.72) імпульсний розподіл не змінюється з часом (закон збереження імпульсу) і має вигляд $\rho(p) = (2D_0 / \pi \hbar^2)^{1/2} \exp(-2D_0 p^2 / \hbar^2)$, так що згідно з (1.77)

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

що узгоджується з наближенням (1.73), якщо врахувати, що відкинуто члени порядку t^{-3} , що не залежать від координати x . При великих значеннях x (крила розподілу) маємо гауссову форму: далекі імпульсні компоненти функції без особливостей є експоненційно малими.

Для прямокутного пакета (1.74) розподіл за імпульсами $\rho(p) = (a / 2\pi\hbar) [\sin(ap / 2\hbar) / (ap / 2\hbar)]^2$ приводить до апроксимації для розподілу за координатами

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

Цей вираз також переходить при малих x в (1.76) зі вказаною вище точністю. Таким чином, тут крила розподілу мають осциляції з амплітудою, що спадає: функція з особливістю у вигляді стрибків при $x = \pm a / 2$ має далекі Фур'є-компоненти, що спадають за степеневим законом (у середньому $\bar{\rho} \sim x^{-2}$).

Загальна формула (1.68) показує, що перехід від початкового моменту часу до кінцевого визначається інтегральним перетворенням (1.68), так що можливі особливості початкового пакета згладжуються. Проте на початковій стадії пакет з особливостями може перетерплювати дуже істотні деформації.

Для малих t та початкових хвильових функцій без особливостей можна вжити формальний засіб розкладу за степенями t , що впливає з явного запису вільного пропагатора $\hat{U}(t, 0) = \exp(-it\hat{H} / \hbar)$ у

координатному зображенні, де $\hat{H} = -(\hbar^2 / 2m) \partial^2 / \partial x^2$, так що $\Psi(x, t) = \exp[i(\hbar t / 2m) \partial^2 / \partial x^2] \Psi(x, 0)$.

Звідсіля з початкового пакета у вигляді гауссіана (1.72) після не дуже складних обчислень, які радимо проробити як вправу, маємо

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

Конкретними прикладами початкових форм хвильових пакетів вибираємо гауссовий та прямокутний. Це викликано тим, що, по-перше, для цих двох випадків можна одержати точні розв'язки для вільного руху. По-друге, ці приклади відповідають крайнім випадкам гладкої функції та функції з особливостями у вигляді стрибків. По-третє, наближені формули, що розглядалися вище, легко обчислюються для цих пакетів. Крім того, їх форма наочна, а аналітичні вирази відрізняються особливою простотою. Нарешті, вони мають досить простий фізичний зміст і можуть бути безпосередньо приготовлені, тобто створені експериментально (у більшій мірі це стосується гауссіана).

Обговорення точних розв'язків почнемо з випадку початкового гауссового пакета (1.72), який визначається єдиним параметром – дисперсією координати D_0 . З огляду на дійсність початкової хвильової функції маємо згідно з (1.55)–(1.57) безструмовий стан $j_0 = 0$ з нульовим середнім імпульсом $\langle p \rangle_0 = 0$ та нульовою кореляцією $D_{xp}^0 = 0$. Дисперсія імпульсу при цьому $D_{pp}^0 = \hbar^2 / 4D_0$, (1.81) що безпосередньо впливає зі співвідношення невизначеностей, яке мінімізує гауссіан (1.72).

Для одержання вигляду хвильової функції в будь-який момент часу необхідно обчислити інтеграл (1.68) для початкового гауссіана (1.72). Він береться елементарно. Розрахунок пропонуємо виконати у вигляді вправи. Результат можна записати в такій формі:

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

де введено допоміжну комплексну величину $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$.

Таким чином, дійсна початкова хвильова функція перетворюється на комплексну, причому з'являється залежна від координати фаза (опріч неістотного в даній задачі фазового множника, що залежить тільки від часу)

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

де величина $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$ має зміст дисперсії координати згідно з (1.46) та (1.81).

Внаслідок цього з'являються згідно з (1.55) струми $j(x, t) = (\hbar / m) \rho \Phi' = \hbar^2 t x \rho / 4m^2 D_0 D(t)$, тобто розпливання пакета супроводжується розтіканням імовірності від центра пакета.

З огляду на збереження імпульсу $\langle p \rangle = \langle p \rangle_0 = 0$, так що немає загального зміщення центра пакета (ефект розпливання розглядаємо в чистому вигляді).

Згідно з (1.58) зростає лінійно з часом додатна кореляція координати та імпульсу з урахуванням (1.81) за правилом

$$D_{xp}(t) = t D_{pp}^0 / m = \hbar^2 t / 4m D_0.$$

Переходячи до густини ймовірності координат

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

робимо важливий висновок про те, що гауссовому початковому пакету вдається зберігати свій вигляд – гауссіан залишається гауссіаном, хоча параметр гауссового розподілу – дисперсія координати – монотонно зростає з часом. Стабільність гауссової форми є наслідком квадратичності гауссового розподілу в експоненті та квадратичності закона дисперсії (у пропагаторній експоненті). Таким чином, гауссовий розподіл є інваріантним за формою не тільки при інтегральному перетворенні переходу в імпульсний простір, а й при інтегральному перетворенні руху з квадратичним законом дисперсії. Це ясніше видно з формули (1.67) для вільного руху. Стабільність, як буде показано далі, гауссові пакети виявляють не тільки при вільному русі, але часто й за умов розсіювання.

Точний вираз для дисперсії координати

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

який вже згадувався, дозволяє дати більш строгу трактовку введеного раніше часу розпливання пакета $\tau = 2mD_0 / \hbar$. Бачимо, що це є час збільшення вдвічі дисперсії координати.

За допомогою масштабу часу розпливання τ та невизначеності координати $\Delta x^0 = \sqrt{D_0}$ в початковий момент часу точну формулу (1.84) доцільно записати в безрозмірному вигляді, що дуже важливо для чисельних оцінок та графічного зображення при роботі з комп'ютером:

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

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

Порівняння виразів (1.84) та (1.86) з наближеними формулами для великих часів (1.73) та (1.78), а також для малих (1.80) дозволяє оцінити точність цих апроксимацій. Виведіть указані вирази з точної формули й оцініть часи, за яких відносна похибка для ρ та відповідних x не перевищує 10 % та 1 %.

Зіставте графіки $\rho(x)$, що побудовані за точною формулою та за допомогою зазначених наближень, для різних моментів часу t .

Тут вперше в нашому викладі матеріалу з'являється необхідність застосування сучасних обчислювальних пристроїв. Запропоновані вправи можна, звичайно, виконати за допомогою простого калькулятора, побудувавши графіки по точках на міліметровому папері. Але краще почати навіть на такому простому прикладі працювати з персональним комп'ютером, який забезпечує побудування графічних зображень на екрані дисплея. Починайте з неперервного змінювання профіля пакета (1.86), організувавши зміну зображень через певний час, імітуючи рух, спостерігаючи розпливання в реальному масштабі часу. Є можливість яскраво продемонструвати ефект розпливання хвильових пакетів, що повинно мати велике пізнавальне значення, а також давати естетичне задоволення. Чудова картина оживленого ефекту повинна назавжди запам'ятатися. До речі, можна багато разів приблизно малювати гауссіан, але так і не пізнати його справжнього профілю (рис. 1).

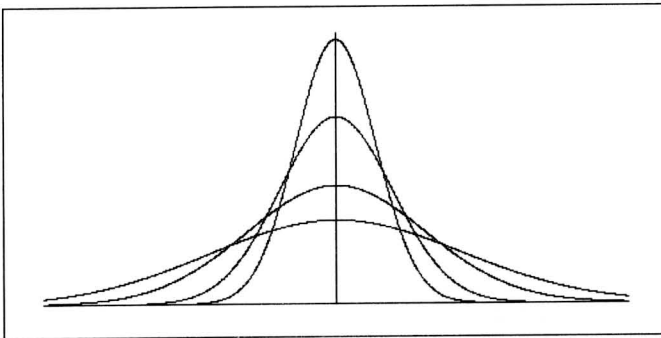


Рис. 1. Розпливання гауссіана

Які ж перші враження? Спостереження показує, що розпливання відбувається монотонно, нема чітко означених стадій ефекту. Це видно з формул, це видно на екрані. Така особливість гауссіана. Але ж характерні моменти часу є. Зафіксуйте профіль, який відповідає

моменту часу $T = 1$. Накладіть на нього початковий пакет. Порівняйте. Зробіть те ж саме для моменту часу $T = \sqrt{3}$, коли ширина пакета збільшується вдвічі. Зверніть також увагу на кривизну розподілу в центрі пакета при досить великих T . Видно, як поступово пакет сплющується в області початкової локалізації (накладайте поточні зображення на фіксований початковий профіль).

Перший демонстраційний експеримент повинен виробити навички побудови зображень, що рухаються. Кінетику бажано вивчати не тільки за допомогою формул та уяви, але й безпосередньо спостерігаючи за розвитком процесів, ставлячи комп'ютерний експеримент, збільшуючи те, що звичайно приховане в мікросвіті до макроскопічних розмірів та часових інтервалів.

Другим прикладом з точним розв'язком задачі про розпливання розглядаємо початковий хвильовий пакет прямокутної форми (1.74). При розрахунку густини ймовірностей координат згідно з (1.70) вводимо нову змінну інтегрування $y = (m / 2\hbar t)^{1/2}(x - x_0)$, що дає

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

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

де безрозмірні величини визначені співвідношеннями $R = ar$; $X = x / a$; $T = t / \tau = 2\pi\hbar t / ma^2$.

Вправа: запишіть відповідь безпосередньо через інтеграли Френеля $C(x)$ і $S(x)$, користуючись визначенням з [26]. Зокрема, у центрі пакета

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

Говорячи про точний розв'язок, ми маємо на увазі можливість виразити відповідь через елементарні або добре досліджені спеціальні функції. Застосування відповідних властивостей інтегралів Френеля дає, зокрема, оцінку точності апроксимацій (1.75) та (1.79). Проте для детального спостереження за всіма етапами перетворень пакета в даному випадку доцільно спиратись на вираз (1.87), маючи на увазі чисельні методи. Можна, звичайно, звернутись до таблиць інтегралів Френеля, але це практично незручно, хоча окремі табличні значення допоможуть оцінити вірність і точність чисельних методів.

Оскільки для наших цілей немає необхідності обчислювати густину координат з дуже великою точністю, досить використати просту квадратурну формулу (наприклад, Сімпсона). У програмі облік обох інтегралів у (1.87) ведеться паралельно. Проте слід пам'ятати, що при

малих T (початковий етап розпливання) центр інтервалу інтегрування $\bar{y} = (y_1 + y_2) / 2 = (\pi / T)^{1/2} X$ уже при $|X| \sim 1$ потрапляє в область частих осциляцій функцій, які інтегруються, а інтервал інтегрування $y_2 - y_1 = (\pi / T)^{1/2}$ також достатньо великий. Уважно слідкуйте за вибором кроку інтегрування згідно з T та X (адаптивне інтегрування), контролюючи точність зіставленням результатів при зменшенні кроку вдвічі та перевіряючи вірність розрахунків за табличними значеннями інтегралів Френеля [32]. Зазначимо, що інтеграли Френеля в літературі визначаються по-різному. Для наочності радимо зобразити графіки функцій $\cos y^2$ та $\sin y^2$ і для кожного T та X позначити, де саме розташовано інтервал інтегрування.

Указані розрахунки можна виконувати за допомогою програмованих мікрокалькуляторів. Цього досить для побудови графіків для типових значень часу T (наприклад, 0,1; 0,2; 0,35; 0,75; 1,5; 3,0). Проте доцільніше, звичайно, скористатися швидкодіючим комп'ютером, що дозволяє перерахувати інтеграли відразу для великої кількості точок X для даного T і швидко вивести на екран графічне зображення. На початковому етапі розпливання профіль пакета має багато осциляцій у просторі, тому розрахункові точки повинні вибиратися досить близько одна до одної. З огляду на симетрію пакета достатньо провадити розрахунок тільки для додатних X .

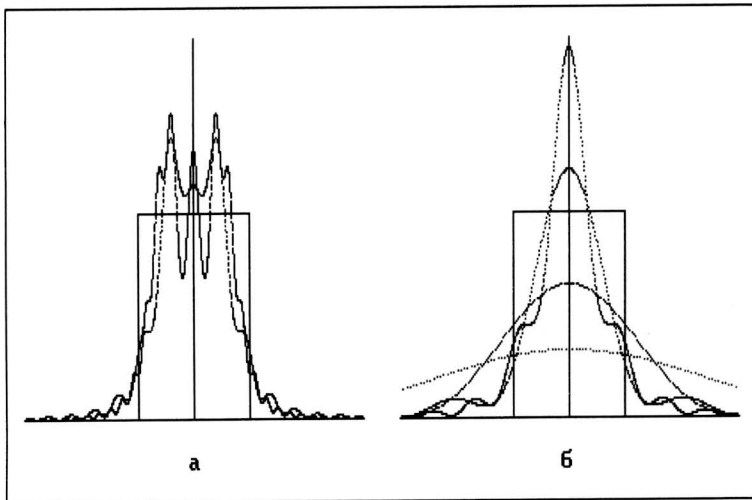


Рис. 2. Розпливання прямокутного пакета:
а - початкова стадія; б - кінцева стадія

Що ж повинно з'явитися в результаті? Аналіз комп'ютерного експерименту покаже, що пакет, по-перше, не зберігає своєї форми. Це впливає, зрозуміло, вже з наближеної формули (1.79) для кінцевої стадії розпливання. По-друге, даний пакет відзначається надзвичайною мінливістю форми. По-третє, можна визначити декілька типових стадій процесу розпливання. На першому етапі з'являються осциляції, амплітуда яких з часом зростає. Після певного критичного моменту часу $T \approx 0,35$ настає етап монотонного спадання ρ в центрі пакета, хоча загальний профіль ще має осцилюючий вигляд. При $T \gtrsim 1$ пакет набуває гладкої дзвонообразної форми, а решта осциляцій зміщується в далеку периферійну область, де ρ вже дуже мале. Таким чином, на першій стадії відбувається перебудова профілю пакета, спостерігаються осциляції, а саме розпливання починається пізніше (рис. 2).

Особливості деформації пакета передаються поведінкою густини ймовірності координат у центрі, де згідно з (1.88) $R(0, T)$ пропорційне сумі квадратів інтегралів Френеля. У зв'язку з цим можна дати наочну трактовку явищам, які тут виникають, користуючись так званою спіраллю Корню [33], для точок якої квадрат відстані до початку координат є пропорційним $C^2 + S^2 = R(0, T) / 2$, а відповідний аргумент є пропорційним аргументу інтегралів Френеля в (1.88). Початковому значенню $T = 0$ відповідає гранична точка, на яку накручується спіраль. Зі збільшенням T спіраль розкручується, що відповідає осциляціям, амплітуда яких збільшується. Потім при певному значенні параметра, що відповідає $T \approx 0,35$, точка на спіралі максимально віддаляється від початку координат, що відповідає максимуму амплітуди осциляцій $R(0, T) \approx 1,8$. Є також точка мінімального значення $R_{\min}$ у докритичний період розпливання. Подальшому збільшенню T відповідає монотонна зміна – зменшення $R(0, T)$.

Вправа: переконайтесь у сказаному й знайдіть момент часу з $R_{\min}$ в осциляційній стадії розпливання пакета.

Розгляньте також розпливання таких хвильових пакетів, що задані в початковий момент часу в координатному просторі:

- а) $\Psi(x, 0) = A \exp(-\alpha |x|)$ (Лапласа);
- б) $\Psi(x, 0) = A / (1 + \alpha x^2)$ (Коші–Лоренца);
- в) $\Psi(x, 0) = A / \operatorname{ch}^2 \alpha x$ (Еккарта);

г) $\Psi(x, 0) = A \exp(-\alpha x^4)$ (четвірний гауссіан);

д) $\Psi(x, 0) = A(1 - \alpha |x|)$, $\alpha |x| < 1$;

$\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > 1$ (трикутний);

е) $\Psi(x, 0) = A \cos \alpha x$, $\alpha |x| < \pi/2$;

$\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > \pi/2$ (напівперіод синусоїди).

При виведенні формул (1.69), (1.71) було припущено, що $\int \Psi(x, 0) dx \neq 0$. Отримайте відповідні оцінки у випадку $\int \Psi(x, 0) dx = 0$. Розгляньте конкретні приклади таких початкових профілів, зокрема період синусоїди $\Psi(x, 0) = A \sin \alpha x$, $\alpha |x| < \pi$; $\Psi(x, 0) = 0$, $\alpha |x| > \pi$.

Початковий хвильовий пакет можна задавати й в імпульсному зображенні. Тоді, згідно з (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 $t \rightarrow \infty$ можна провести обчислення методом стаціонарної фази [34]. У результаті для густини ймовірностей координат одержуємо співвідношення

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

(p_0 – корінь рівняння $E'(p_0) = x/t$), яке узагальнює (1.77) на випадок довільного закону дисперсії. Обчислення зробіть самостійно. Покажіть, що квадратична залежність дисперсії координат від часу слухна й у загальному випадку при великих t . Визначте роль кореляції швидкостей в явищі квантової дифузії (розпливання) пакета.

Форма запису (1.89) наочнo показує, чому саме гауссовий початковий пакет залишається гауссовим у випадку квадратичного закону дисперсії і якого результату слід чекати при інших законах дисперсії частинки $E(p)$ та початкових хвильових функціях $\Psi(p, 0)$.

Дослідіть вплив закону дисперсії на характер розпливання пакетів на прикладі четвірного закону $E(p) = \beta p^4$ при різних конкретних формах початкових пакетів в імпульсному просторі. Розгляньте випадок, коли в області імпульсів, де зосереджений початковий пакет $\Psi(p, 0)$, закон дисперсії виявляється лінійним.

Явище розпливання хвильових пакетів зв'язане із загальною проблемою розпаду нестационарного стану. Пропонуємо вправу на оцінку ймовірності нерозпаду. Частинка спочатку локалізована у

тривимірній області простору. За яким законом змінюється ймовірність виявити її в тій самій області при великих t ?

Знайдіть час розпливання пакета для електрона, спочатку локалізованого в області порядку 10^{-8} см. Зіставте з часом розпливання для частинки з масою 10^{-10} г, локалізованої в області розміром 10^{-4} см.

Покажіть, що для явища розпливання слушне співвідношення невизначеностей для енергії та часу у вигляді $\Delta E \tau \sim \hbar$, де ΔE – невизначеність енергії, а τ – час розпливання. Обчисліть невизначеність енергії для гауссіана (1.72), у якого $\tau = 2mD_0 / \hbar$, і знайдіть точне значення добутку цих величин для розпливання гауссового пакета.

Можна зазначити три напрямки детального дослідження розпливання хвильових пакетів. По-перше, на основі точного розв'язку в явній аналітичній формі (як у випадку гауссіана з елементарними функціями або у випадку прямокутного пакета, коли точний розв'язок виражається через спеціальні функції). По-друге, за допомогою функції поширення з обчисленням інтегралів у координатному або імпульсному просторах. По-третє, самий загальний підхід безпосереднього інтегрування нестационарного рівняння Шредінгера із застосуванням різницевих схем та комп'ютерного моделювання.

Повчально порівняти закономірності звичайної дифузії та квантової дифузії (розпливання пакетів). Неважко встановити аналогію та помітити відмінності (уявний коефіцієнт дифузії, роль співвідношення невизначеностей, часова залежність дисперсії координат, зв'язок спостережуваних величин з квадратом модуля хвильової функції, застосування функцій Гріна та інтегральної форми запису розв'язку, тощо).

Цікавим є питання про оборотність (стискання пакета, генерація кореляції та її роль в оберненні часу, наприклад гауссіана, тощо).

Роль явища розпливання в історії розвитку квантової теорії (спроба зв'язати хвильову функцію зі структурою частинок).

Про створення пакетів. Гауссів – основний стан гармонічного осцилятора та когерентний стан, що виходить внаслідок вимушених коливань з вакууму. Прямокутний – суперпозиція високоезбуджених станів у нескінченно глибокій потенціальній ямі.

Цим стислим переліком деяких питань, пов'язаних з явищем розпливання, завершуємо знайомство з квантовою дифузією.

1.7. Розпливання подвійного гауссіана

Досліджені особливості процесу розпливання пакета без загального зміщення його центра зберігаються й у випадку, коли середній імпульс частинки є відмінним від нуля, а також при русі в постійному однорідному силовому полі. Багато рис розпливання властиві й складнішим зовнішнім впливам, наприклад під час розсіяння. Основні закономірності явища розпливання можна вважати відомими, що дає підставу перейти до більш складних задач. Однією з них є розпливання двопараметричного пакета у вигляді суперпозиції двох гауссіанів, центри яких знаходяться в точках $\pm b$:

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

Нормуючий коефіцієнт, як неважко переконатися, визначається співвідношенням $A^{-2} = 2(2\pi D_0)^{1/2} [1 + \exp(-b^2 / 2D_0)]$.

Як і раніше, розглядаємо поки що дійсну в початковий момент часу хвильову функцію без загального зміщення центра пакета, тобто без переміщення пакета в цілому. Пакет має симетричну форму та містить два параметри (b, D_0). При обзорові фактично залишається одна величина – відношення b^2 / D_0 , від значення якого залежать типові початкові профілі пакета. Покажіть, що при досить віддалених центрах ($b > \sqrt{2D_0}$) пакет має характерну двогорбу, двоглаву форму, при $b < \sqrt{2D_0}$ гауссіани зливаються в єдиний одnogорбий профіль, а проміжному випадку $b = \sqrt{2D_0}$ відповідає також одnogорбий критичний профіль зі сплющеною вершиною. Обчислюючи дисперсію координати, одержуємо формулу

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

з якої видно, що параметр D_0 має зміст початкової дисперсії лише в граничному випадку $b = 0$. При малих відстанях між центрами гауссіанів $b \ll \sqrt{D_0}$ дисперсія наближено дорівнює $D_0 + b^2 / 2$, а в іншому граничному випадку віддалених центрів $b \gg \sqrt{D_0}$ вона складається з основного внеску b^2 , що відповідає двом однаковим вузьким відокремленим розподілам, та додатку D_0 від розширення кожного з них: $D_x(0) \approx b^2 + D_0$.

Переходячи до імпульсного зображення для початкової хвильової функції (1.91), вводимо формулу для густини ймовірності (зручніше скористатися зображенням хвильового числа $k = p / \hbar$)

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

яка внаслідок закону збереження імпульсу не змінюється з часом. Неважкий розрахунок дає дисперсію хвильового числа

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

яка при всіх відношеннях b^2 / D_0 мало відрізняється від дисперсії для окремого гауссіана $(4D_0)^{-1}$.

Вправа: переконайтесь, що у відповідності до співвідношення невизначеностей $4D_x(0)D_k \geq 1$. Знаючи дисперсію x у початковий момент часу та дисперсію k і враховуючи, що з огляду на дійсність початкової хвильової функції (1.91) $D_{xk}^0 = 0$, знаходимо згідно з (1.46) дисперсію координат у будь-який момент часу

$D_x(t) = D_x(0) + \hbar^2 t^2 D_k / m^2$. Таким чином, не досліджуючи ще деталей розпливання, можна встановити, що зростаючий з часом член у дисперсії слабо залежить від b і визначається здебільшого величиною D_0 . Оскільки, однак, перший член дуже чутливий до відношення цих параметрів, доходимо такого результату щодо часу розпливання: при $b \ll \sqrt{D_0}$ він практично не відрізняється від такого ж для окремого гауссіана $\tau = 2mD_0 / \hbar$, який визначається за збільшенням дисперсії вдвічі, а при $b \gg \sqrt{D_0}$ він зводиться до виразу $\tau = 2mb\sqrt{D_0} / \hbar$.

Перейдемо тепер до більш детального дослідження змінювання пакета з часом. Внаслідок лінійності канонічного перетворення руху кожний з гауссіанів у сумі (1.91) змінюється за вже відомим законом (1.82) для окремого гауссіана (зсув $\pm b$ центра гауссіана не впливає на вигляд перетворення). Цей захід дозволяє одразу написати відповідь для хвильової функції в будь-який момент часу t :

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

де $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$, а також для розподілу ймовірностей координат:

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

де введено безрозмірні величини $R = \sqrt{D_0} \rho$; $C = 2A^2 \sqrt{D_0}$; $X = x / \sqrt{D_0}$; $B = b / \sqrt{D_0}$; $T = \hbar t / 2mD_0$.

Класифікацію різних початкових профілів пакета можна уточнити, розглядаючи характер зміни густини ймовірності координат при $X = 0$, яка пропорційна величині

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

Досліджуючи поведінку цієї функції, доходимо висновку, що у випадку $B \leq 1$ відбувається монотонне зменшення $R(0, T)$, а у випадку $B > 1$ змінювання $R(0, T)$ виявляється немонотонним. Так, при малих T у першому наближенні $Y(T) = 1 + (B^2 - 1)T^2 / 2$, $B \neq 1$; $Y(T) = 1 - T^4 / 4$, $B = 1$. Якщо $B > 1$, то густина ймовірності в центрі пакета досягає максимуму: $R_{\max}(0, T) / R(0, 0) = B^{-1} \exp[(B^2 - 1) / 2] > 1$ при

$T_{\max} = \sqrt{B^2 - 1}$, і тільки потім надходить власне стадія розпливання – монотонне зменшення $R(0, T)$. Це явище пояснюється тим, що на першому етапі збільшення ширини кожного з досить віддалених гауссіанів у пакеті (1.93) веде до тимчасового зростання густини ймовірності координат між ними.

Таким чином, у пакетів з $B = b / \sqrt{D_0} > 1$ чітко простежується стадія перебудови, коли їх частини зливаються в єдине ціле. Тільки після цього починається розпливання. Хоча дисперсія координат при цьому монотонно збільшується, проте на першій стадії додток до початкової дисперсії ще малий.

Якщо пакет при $B > 1$ має одnogорбий вигляд, то це ще не означає, що кінетично він не підлягає перебудові. На першому етапі може виявитися його прихована подвійна структура. Аналітично пакет у всіх випадках складається з двох гауссіанів, але, як було показано, геометрично він може мати й одnogорбий вигляд. Кінематичний же ефект монотонного розпливання залежить від співвідношення параметрів b і D_0 . Ця ситуація веде до великої різноманітності профілів пакетів у процесі їх розпливання, особливо при початковій двогорбій формі.

Далі особливу увагу буде приділено саме випадку $B > \sqrt{2}$, коли поведінка густини ймовірності координат у центрі пакета має явний двогорбий вигляд. Початкову стадію в цьому випадку можна розбити на такі етапи. На першому етапі починається заростання западини між

горбами. При $T_1 = \sqrt{(B^2 - 2)/(B^2 + 2)}$ спостерігається сплющення западини (четвірний мінімум). На другому етапі на місці западини з'являється третій горб. При $T_2 \approx \sqrt{B^2 / 2,8 - 1}$ ($B^2 \gg 1$) він вирівнюється за висотою з двома іншими. На третьому етапі середній горб збільшується далі. При $T_3 = \sqrt{B^2 - 1}$ він досягає максимальної висоти. Після цього надходить вже друга, кінцева стадія монотонного зменшування середнього горбу з поступовим розмиттям бічних горбів, які сповзають вздовж його схилу – стадія власне розпливання пакета, що прийняв стандартний одnogорбий профіль із залишками початкових горбів-сателітів.

Переходячи до питань комп'ютерного моделювання, зазначимо, що формула для густини ймовірності координат (1.96) повністю готова для складання програм чисельного експерименту з демонстрацією основних властивостей розпливання подвійного гауссіана. Оскільки вона є точною та виражається через прості функції, є можливість і будувати графіки за допомогою простого обчислювального пристрою, і показувати картини, що рухаються на екрані дисплея, що дуже бажано. Мова йде про серію демонстрацій при різних значеннях параметра B . Для кожного фіксованого B спостерігаємо деталі основних стадій процесу.

У зв'язку з цим повторюємо, яким значенням цього параметра відповідають найбільш цікаві картини розпливання. У випадку $B < 1$ початковий пакет має одnogорбий профіль, а розпливання відбувається монотонно. У випадку $B = 1$ початковий профіль також одnogорбий, а розпливання йде із зменшенням висоти горба спочатку в трохи уповільненому темпі. У випадку $1 < B < \sqrt{2}$, як і раніше, є тільки один горб, але його висота на початковому етапі збільшується. У випадку $B = \sqrt{2}$ усе ще є один горб, але зі сплющеною вершиною (четверним максимумом), яка потім перетворюється на звичайну (з квадратичним максимумом) у процесі тимчасового збільшення висоти горба. Нарешті, у випадку $B > \sqrt{2}$ процес розпливання супроводжується найбільш цікавими явищами у зв'язку з перебудовою пакета, який має на початку спостереження двогорбий профіль. Зокрема, на рис. 3 показані характерні профілі пакета для процесу розпливання при $B = \sqrt{2\pi}$ (а – початковий момент часу $T_0 = 0$, б – момент сплющення западини $T_1 = 0,719$, в – момент формування трьох горбів однакової

висоти $T_2 = 1,06$ та Γ – момент максимальної висоти центрального горба $T_3 = 2,30$).

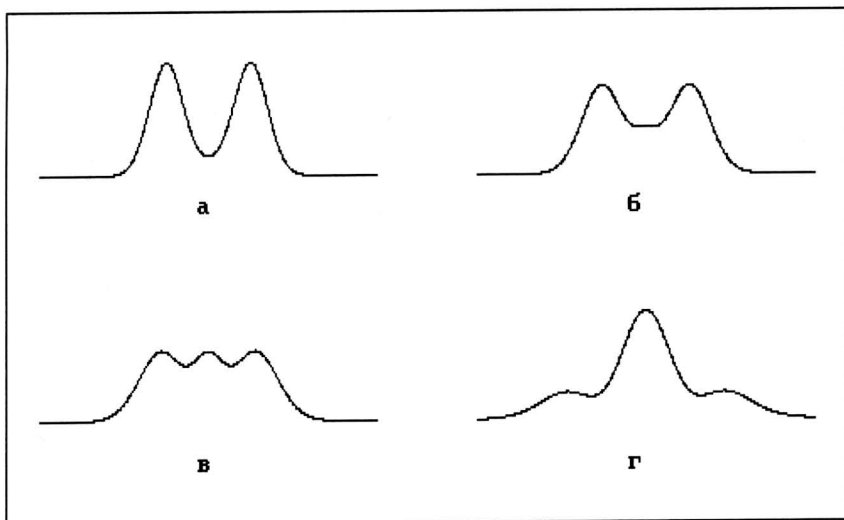


Рис. 3. Розпливання подвійного гауссіана

У процесі демонстрації зображень на екрані (а також при нанесенні графіків у ручний спосіб або за допомогою графобудівельника) нормуюча стала C у формулі (1.96) обирається з міркувань зручності. Можна переконатися у збереженні умови нормування, обчислюючи відповідний інтеграл (наприклад, за формулою трапецій) для різних моментів часу, а також чисельно перевірити одержаний аналітично вираз для сталої C .

Одержіть на основі імпульсного зображення (1.93) згідно з загальною формулою (1.77) апроксимацію для густини ймовірності координат при великих t та оцініть точність наближення чисельним порівнянням з результатами точної формули (1.96).

Розпливання подвійного гауссіана супроводжується певною взаємодією його частин. При цьому велике значення мають фазові співвідношення.

Дослідіть процес розпливання пакета, що складається в початковий момент часу з різниці двох гауссіанів. Цей приклад повинен наочно показати роль різниці фаз (гауссіани в протифазі).

На закінчення цього параграфа зробимо одне загальне зауваження щодо всіх застосувань чисельних методів у книзі.

Точний розв'язок, що одержуємо у вигляді простої явної аналітичної формули, грає важливу роль в чисельних експериментах: він є тестовим прикладом для тих випадків, коли те ж саме явище вивчається за інших умов за допомогою квадратурних формул. Здійснюється як груба, якісна перевірка, так і тонка, кількісна, встановлюється кількість вірних знаків у відповіді, тощо.

У свою чергу, перевірені квадратурні формули разом із можливими явними аналітичними виразами становлять тестові приклади для опису на основі методу різницевих схем.

1.8. Зіткнення двох хвильових пакетів

Розглянута в попередньому параграфі тема подвійного хвильового пакета має цікаве продовження у вигляді задачі про зустріч двох пакетів, що рухаються, тобто про їх зіткнення. Відміна від попереднього випадку буде полягати, по-перше, в припущенні початкової відокремленості пакетів, а по-друге, – і це буде технічно основним новим елементом, – в урахуванні поширення хвильових утворень, переміщення пакетів як цілих. Ефект же розпливання відходить на другий план. Звичайно можна вибрати параметри задачі таким чином, щоб за час зіткнення пакети розпливалися слабо. Зрозуміло, мова фактично йде про один пакет, який є розбитим спочатку на дві локалізовані частини. Задача має ще один важливий аспект: її можна зіставити з задачею про взаємодію солітонів, яка буде викладена в другій частині книги. Як конкретний приклад будуть досліджуватись гауссові пакети, для яких розв'язок записується в простій явній аналітичній формі.

Насамперед дослідимо поширення окремого гауссіана у вільному русі. На відміну від розглянутого раніше випадку, тепер початковий пакет буде мати середню швидкість (імпульс, хвильове число). Такий вибір початкових умов буде зустрічатися також і в задачах нестационарної теорії розсіяння.

Нехай у початковий момент часу хвильова функція в координатному просторі має такий вигляд:

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

де параметри мають простий фізичний зміст: b – положення центра пакета, тобто $\langle x \rangle_0 = b$; D_0 – дисперсія координат; k_0 – середнє значення хвильового числа згідно з (1.56). Якщо перейти до зображення хвильового числа, де

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

то відповідно з (1.89) у будь-який момент часу координатна хвильова функція визначається інтегральним перетворенням

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

Враховуючи, що ми обмежуємось поки що звичайним квадратичним законом дисперсії $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$, обчислюємо стандартний інтеграл і приходимо до такого результату:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = \\ = (2\pi D_0)^{1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0/\hbar + ik_0(x-b) - (x-b-v_0t)^2 / 4D_0\gamma(t)]', \end{aligned} \quad (1.100)$$

де $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$, а також введено стисле позначення $E_0 = E(k_0)$. Величина v_0 має зміст середньої швидкості. Згідно із загальним законом вільного руху $\langle x \rangle = b + v_0 t$, тобто центр пакета рухається рівномірно, за класичним законом. Якщо не виписувати неістотний для подальшого внесок за рахунок множника $\gamma^{-1/2}(t)$ в (1.100), то фаза хвильової функції

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

де $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$ (1.102) є дисперсія координати згідно із загальними закономірностями (1.46) при $D_{xk}^0 = 0$. Як бачимо, введення величини k_0 веде до істотного перетворення фази порівняно з (1.83), що відіб'ється на взаємодії гауссіанів, але не впливає на дисперсію координати і хвильового числа та на їх кореляцію, яка згідно з (1.57) дорівнює

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

Амплітуда хвильової функції визначає густину ймовірності координат

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

Тепер можна перейти до задачі про зіткнення двох гауссіанів, кожен з яких має вигляд (1.100) з відповідними значеннями параметрів. Для простоти вважаємо, що дисперсії у них однакові, абсолютні величини швидкостей також рівні, а центри розташовані симетрично відносно початку координат, чого завжди можна досягти його вибором. Отже, початкова хвильова функція дорівнює сумі

гауссіанів:

$$\Psi(x, 0) =$$

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

Перший член описує пакет, що локалізований поблизу точки $-b$ (вважаємо, що $b > 0$) і рухається праворуч, а другий є локалізованим поблизу точки b і рухається ліворуч. Нормуюча стала A , як неважко бачити, визначається виразом

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

Знову використовуємо спосіб почленного перетворення кожного з гауссіанів в (1.105), що вже був застосований у попередньому параграфі. Згідно з (1.100) це дає для хвильової функції у будь-який момент часу формулу

$$\Psi(x, t) = A \gamma^{-1/2}(t) \exp(-itE_0 / \hbar) \{ \exp [ik_0(x+b) - (x+b-v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)] + \exp [-ik_0(x-b) - (x-b+v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)] \}, \quad (1.107)$$

де $v_0 = \hbar k_0 / m > 0$. Звідси випливає вираз для розподілу ймовірностей координат

$$R(X, T) =$$

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

що підготовлений до чисельного моделювання введенням безрозмірних величин $R = \sqrt{D_0} \rho$; $C = 2A^2 \sqrt{D_0}$; $X = x / \sqrt{D_0}$; $B = b / \sqrt{D_0}$; $K = k_0 \sqrt{D_0}$; $T = \hbar t / 2mD_0$ і узагальнює одержаний раніше результат (1.96) на випадок гауссіанів, що рухаються один до одного ($K \neq 0$).

Для спостереження за зіткненням гауссіанів насамперед треба вибрати придатні вхідні параметри. Щоб початкові пакети були роз'єднані, необхідно взяти $B \gg 1$, а щоб їх розпливання було малим, треба вибирати значення $K > B$. У кінці спостереження за процесом зіткнень, коли пакети поміняються місцями, кожен з них пройде відстань $2B$ зі швидкістю $2K$, так що час процесу дорівнює B/K , а час розпливання $T = 1$. Наприклад, обравши $B = 10$, $K = 50$, маємо час процесу $T = 0,2$. При цьому зменшення висоти пакетів, яка є пропорційною $(1+T^2)^{-1/2}$, за рахунок розпливання складе лише 2 %.

На старті відстань між такими пакетами $2B = 20$, а півширина кожного приблизно дорівнює 2 (в указаному вище масштабі).

Як завжди, комп'ютерний експеримент здійснюється побудовою картин, які змінюють одна одну. Стартове положення гауссіанів можна вибрати й за межами інтервалу, який виводиться на екран. Тоді будуть краще помітні деталі самого зіткнення, а пакети будуть поступово входити в кадр з різних боків. На першій стадії йде зближення первісно відокремлених гауссіанів. Кожен з них рухається рівномірно, а дуже слабким ефектом розпливання можна знехтувати (він практично не буде помітним на екрані).

Потім надходить друга стадія, коли пакети починають перекриватися. Спочатку вступають у контакт їх хвости, а потім і основні частини. Взаємодія відбувається дуже інтенсивно. Пакети набувають сильно порізаної форми, з'являється багато осциляцій. Процес злиття досягає апогею при $T = B / 2K$, коли центр кожного з пакетів досягнув би середини відстані між їх початковими положеннями при незалежному поширенні. В цей момент згідно з (1.108) розподіл імовірностей координат

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

Загальний профіль відповідає модульованому гауссіану. Утворюються стоячі хвилі, довжина яких дорівнює π / K . Значення густини ймовірності координат у максимумі (центрального сплеску) у чотири рази перевищує найбільше її значення для окремого гауссіана. Зіставте ці аналітичні результати з тими, що спостерігаються на екрані (або на відповідному графіку).

Подальші картини руху повторюють у зворотному порядку те, що відбувалося до злиття пакетів. Гауссіани знов розділяються, набираючи початкової форми, та розходяться. Ніяких слідів не залишається від такої бурхливої взаємодії. Це дуже ясно видно з формули (1.107), яка наочно показує незалежність віддалених пакетів як на початку процесу зіткнення, так і наприкінці. Кожний з внесків у цих граничних випадках ніяк не зв'язаний з іншим (практично немає перекривання, хоча теоретично експоненціально мале накладання хвостів, звичайно, є завжди). Формула ж (1.108) зручна для опису стадії зближення пакетів та їх безпосередньої взаємодії, злиття, інтерференції.

Є можливими різні варіанти розглянутої задачі про зіткнення двох хвильових пакетів. Вправа: дослідіть взаємодію двох гауссіанів з різними параметрами. Зокрема, вивчіть випадок, коли початкові гауссіани перебувають у протифазі: у формулі (1.105) стоїть не сума, а різниця. Розгляньте зіткнення гауссіанів, які наздоганяють один одного, подібно до солітонів рівняння Кортевега–де Фріза [35].

Спробуємо зіставити зіткнення гауссіанів з аналогічним явищем для солітонів рівняння Кортевега–де Фріза. Як уже відзначалося, після зіткнення гауссіанів ніяких слідів взаємодії не залишається, тимчасом як солітони зберігають пам'ять про зіткнення в формі так званого зсуву фаз. Внаслідок зіткнення швидкий солітон рухається з випередженням, а повільний із запізненням у порівнянні з вільним рухом солітонів без взаємодії.

Далі, у гауссіанів найбільш цікавою (а втім, як і у солітонів) є стадія безпосереднього контакту пакетів, злиття, коли утворюється стояча хвиля та виникають інтерференційні явища. Солітони ж зливаються плавно, без осциляцій. Додамо, що солітони при злитті мають різні профілі в залежності від відношення їх основних параметрів – швидкостей (одногогорбий хвильовий імпульс із звичайною або сплющеною вершиною, а також двогорбі форми [35]).

У випадку солітонів мова йде про матеріальне хвильове поле, тимчасом як гауссіани відповідають полю ймовірностей. У зв'язку з цим солітони можна розглядати з більшою підставою як окремі фізичні об'єкти, тимчасом як гауссіани фактично утворюють єдине ціле – хвильову функцію однієї частинки (описуючи суто квантовий ефект локалізації однієї частинки відразу в двох віддалених одна від одної областях). Відмінності в картині злиття зв'язані із комплексністю хвильової функції в квантовому випадку, що приводить до інтерференційних явищ, та дійсністю поля у випадку солітонів рівняння КдФ. Ще одна деталь: гауссіани можуть бути однаковими, а солітони ні. Гауссіани можуть рухатися в різні боки, назустріч один одному, навздогін, а два солітони – тільки в один бік (ще раз підкреслимо, що порівняння йде з найбільш простим виглядом солітонів рівняння КдФ [35–39]). Крім того, швидкість пересування солітонів визначається їх розмірами, а для гауссіанів такого зв'язку немає. Нарешті, солітони точно зберігають форму, тимчасом як гауссіани розпливаються, а втім, залишаються гауссіанами.

На закінчення, як звичайно, декілька вправ.

Дослідіть процес зіткнення пакетів у випадку четвірного закону дисперсії $E(k) = \beta k^4$.

Розгляньте зіткнення двох хвильових пакетів якоїсь іншої форми (приклади зібрані в параграфі 1.6).

У розглянутій задачі про зіткнення двох гауссіанів ми мали справу з випадком явного звуження загального, єдиного пакета на першій стадії процесу при зближенні гауссіанів. Обчисліть відповідні дисперсії та кореляцію координати й швидкості. Покажіть, що вони змінюються з часом за звичайними для вільного руху правилами (1.46). Остаточним результатом є, зрозуміло, ефект розширення при розходженні частин – гауссіанів – на останній стадії процесу.

Завершуючи цей параграф, зробимо ще одне загальне зауваження щодо ролі точних розв'язків, особливо виражених простими явними аналітичними формулами. Такі розв'язки дозволяють зосередити увагу на фізичній суті явища, а не на математичних питаннях, зв'язаних з уточненням області застосування апроксимацій, тощо.

1.9. Зіткнення хвильового пакета зі стінкою

Переходячи до питань нестационарної теорії розсіяння, розглянемо спочатку випадок, який займає проміжне положення між вільним рухом пакетів і розсіянням на локалізованому потенціальному полі.

Якщо досі при дослідженні поширення пакетів ніяких обмежень не припускалося, то тепер поставимо задачу про рух частинки в напівобмеженому просторі (для визначеності $x < 0$).

Вважаємо, що в початковий момент часу хвильова функція частинки має вигляд гауссіана

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

розташованого поблизу точки $-b$, яка віддалена від межі руху, тобто здійснюється нерівність $b^2 \gg D_0$ (у теорії з'являється великий параметр).

Засновуючись на методі функції поширення, скористаємося відповідним виразом, що отримано раніше та наведено в п. 4 дод. 1. Тоді для будь-якого моменту часу хвильова функція визначається інтегральною формулою

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

$$\Psi(x, t) = 0, \quad x > 0. \quad (1.111)$$

Відмінність від розглянутих раніше аналогічних співвідношень для необмеженого руху полягає, по-перше, в появі різниці пропагаторних експонент, а по-друге, інтеграл береться тільки за півоссю $x < 0$. Тут корисним буде спосіб, який часто буде застосовуватися в теорії розсіяння. Додамо та віднімемо інтеграл за додатковою півоссю $x > 0$. Тоді одержаний інтеграл за всією оссю обчислюється точно (при $x > 0$ фігурує той же самий вираз для $\Psi(x, 0)$ що й при $x < 0$), а додаток розглянемо окремо. Відкидаючи несуттєвий множник перед інтегралом в (1.111), оцінюємо абсолютну величину додаткового інтеграла:

$$\left| \int_0^{\infty} \left[e^{\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar t}} - e^{\frac{im(x+x_0)^2}{2\hbar t}} \right] \Psi(x_0, 0) dx_0 \right| \leq$$

$$\leq 2 \int_0^{\infty} |\Psi(x_0, 0)| dx_0 = 2A \int_0^{\infty} \exp[-(x_0 + b)^2 / 4D_0] dx_0 \sim \exp(-b^2 / 4D_0).$$

У результаті для $x < 0$ маємо

$$\Psi(x, t) = A \gamma^{-1/2}(t) \{ \exp[ik_0(x+b) - (x+b-v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)] - \exp[-ik_0(x-b) - (x-b+v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)] + O[\exp(-b^2 / 4D_0)] \}, \quad (1.112)$$

де, як і раніше в аналогічних формулах, $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$ і $v_0 = \hbar k_0 / m > 0$.

Фактичну точність апроксимації можна проілюструвати, якщо повернутись до вихідного моменту часу $t = 0$. З формули (1.112) випливає, що для $x < 0$

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

Порівняння з вихідним виразом (1.110) показує, що додаток в області $x \approx -b$ виявляється порядку $\exp(-b^2 / D_0)$, тобто значно менше, ніж припускалося при оцінці.

Щодо нормуючої сталої A в (1.110), то вона також незначно відрізняється від відповідної величини для відокремленого гауссіана: $A = (2\pi D_0)^{-1/4} \{ 1 + O[\exp(-b^2 / 2D_0)] \}.$

Вправа: знайдіть явний вигляд поправки в першому наближенні.

Результат (1.112) має простий фізичний сенс. Перший член описує ту частину пакета, яка рухається вправо, тобто падаючі хвилі. На початковій стадії руху другий член є експоненціально малим для всіх $x < 0$. На кінцевій стадії (після взаємодії зі стінкою) навпаки: головним є другий член, що описує частину пакета, яка рухається вліво, тобто відбиті хвилі, а центр першого внеску йде за межі області руху, так що його величина стає експоненціально малою. На стадії безпосереднього контакту зі стінкою, коли $t \approx b / v_0$, обидва члени в (1.112) дають внесок одного порядку, виникає інтерференція між падаючими та відбитими хвилями, формується стояча хвиля.

У виразі (1.112) неважко побачити аналогію із зіткненням двох гауссіанів, що перебувають у протифазі (див. попередній параграф), проте один з них майже весь час перебуває в області $x > 0$, будучи як би уявним перевернутим зображенням іншого гауссіана. У момент зіткнення зі стінкою вони обмінюються ролями. Різниця фізичних ситуацій знаходить вираз у нормуючих коефіцієнтах A : порівняйте з наведеним у формулі (1.106).

Для розподілу ймовірностей координат, який найбільш наочно показує суть процесу, одержуємо

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

де безрозмірні величини впроваджуються так же, як і при виведенні формули (1.108), та дозволяють одразу ж перейти до комп'ютерного моделювання. На момент максимального зближення зі стінкою $T = B / 2K$ ймовірності координат розподілені за законом, подібним до (1.109): $R = 2C(1+T^2)^{-1/2} \exp[-X^2 / 2(1+T^2)] \sin^2 KX$, що дає можливість уявити собі деякі деталі взаємодії, проте найбільш повну картину забезпечує, звичайно, тільки чисельний експеримент.

Тут є дві можливості. Перша полягає в тому, що на підставі наближеної аналітичної формули (1.113) складається програма, що розрахована на виведення зображень на екран дисплея. Формула настільки проста, що навіть повільно працюючий обчислювальний пристрій забезпечить швидку зміну картин – рухоме зображення пакета, який буде потрапляти в кадр зліва, тоді як стінка розташовується поблизу правої межі кадра.

Можна побачити у всіх подробицях, як поступово при підході пакета до стінки виникають спотворення правої хвостової частини. Потім відбитих хвиль стає все більше, й інтерференція охоплює вже основну частину пакета. Поступово осциляції опадають, знов вимальовується вихідна гауссова форма. Вщент розбитий об стінку, гауссіан виходить цілісний, бо з ним нічого й не трапилось. Тільки змінився напрямок руху та злегка розповнів він і став трохи нижче ростом за рахунок ефекту розпливання.

Варіюйте початкові параметри. У вашому розпорядженні – відстань до стінки на старті та швидкість (B та K). Намагайтеся з'ясувати, чому виникають ті чи інші картини

руху за різних початкових умов. Слідкуйте, щоб розрахункових точок було досить багато (не менше десяти на інтервалі хвилі π / K). Для першого перегляду треба обрати повільну зміну кадрів, щоб краще помітити всі деталі взаємодії зі стінкою, а потім бажано прокрутити процес ще раз прискорено, щоб охопити явище в цілому. Видовище справляє сильне враження навіть при грубій передачі окремих "кадрів" на графіках. Що вже й казати про зображення, що рухаються.

Друга можливість міститься в чисельному розв'язанні задачі на підставі розрахунку інтеграла в формулі для $R(X, T)$, що впливає з (1.111). Перетворіть цей вираз до введених вище безрозмірних змінних. Застосовуючи квадратурну формулу (досить формули трапецій), складіть програму розрахунків з метою демонстрації зображень, що рухаються, а також для перевірки точності наближеної аналітичної формули (1.113).

Процес зіткнення гауссіана зі стінкою дає уяву про більш складну взаємодію частинок, яка описується в задачах розсіювання на локалізованих потенціальних полях, в умовах сильного відбиття.

Вправа. Розгляньте зіткнення зі стінкою пакетів іншої форми на підставі чисельного розрахунку за формулою (1.111).

1.10. Нестационарна теорія розсіювання частинок короткодійним потенціалом

Кінетику процесів розсіювання почнемо досліджувати з одновимірної задачі в потенціальному полі, яке модульоване дельта-потенціалом (випадок граничної короткодії). Фізичний сенс задачі міститься в описі проходження частинок крізь плоскошарувате середовище з тонким прошарком.

Теорія нестационарного розсіювання на перших порах буде ґрунтуватися на результатах стандартної стаціонарної теорії, яку будемо вважати відомою.

Тут і в подальшому для означеності будемо вважати, що падаючі хвилі рухаються зліва на розсіюючу область (в позитивному напрямку осі x). Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінґера, який відповідає такій постановці задачі, з локалізованим біля початку координат потенціалом можна записати асимптотично у вигляді

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

Далеко від розсіювача ліворуч є падаючі та відбиті хвилі, а праворуч – проходячі. Амплітуда відбитої хвилі $B(k)$ визначає коефіцієнт відбиття $R(k) = |B(k)|^2$, а амплітуда $C(k)$ проходячої – коефіцієнт проходження $T(k) = |C(k)|^2$. У випадку дійсного потенціального поля рівняння неперервності веде до рівняння $R + T = 1$.

Результати стаціонарної теорії розсіювання в дельта-полі з потенціалом

$$U(x) = u\delta(x)\tag{1.115}$$

добре відомі. Про них можна прочитати в багатьох посібниках з квантової механіки, проте радимо одержати всі відповіді самостійно. Це дозволить відсвіжити в пам'яті технічні дані стаціонарної теорії розсіювання та зрозуміти особливості нестационарного підходу, який розгортається. Зокрема, амплітуди відбиття та проходження в δ -полі (1.115) дорівнюють

$$B(k) = \varkappa / (ik - \varkappa); \quad C(k) = ik / (ik - \varkappa)\tag{1.116}$$

де $\varkappa = mu / \hbar^2$. Вигляд цих формул не залежить від знака $\varkappa$, проте, якщо у випадку потенціалу відштовхування ($u > 0$) є тільки неперервний енергетичний спектр з полюсами амплітуд (1.116) при $k = -i\varkappa$, то потенціал притягання веде ще й до зв'язаного стану з енергією та хвильовою функцією

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

(полюс амплітуд при $k = i|\varkappa|$).

У загальному випадку при $E > 0$ рівні енергії двократно вироджені, так що функції $\Psi_k^{(+)}$ (разом із можливими Ψ_0) не утворюють повної системи. До них слід додати лінійно незалежні розв'язки, що відповідають падінню хвиль справа на розсіювач (див. дод. 3):

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

Можна показати, що амплітуди $\tilde{B}$ і $\tilde{C}$ зв'язані з B і C в (1.114) співвідношеннями (див. дод. 3)

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

Звідсіля, зокрема, випливає незалежність коефіцієнтів відбиття та проходження від напрямку падаючих хвиль. У випадку δ -потенціалу (1.115) явний вигляд амплітуд (1.116) веде до того, що й $\tilde{B} = B$.

Цих відомостей поки досить для переходу до зазначеної задачі.

Як звичайно, нестационарні стани неперервного спектра енергії описуємо на підставі початкових хвильових пакетів у формі гауссіана. По-перше, гауссіан зберігає власну форму при вільному русі, так що можна в чистому вигляді простежити за впливом, що справляє розсіювач, а не за спонтанними деформаціями пакета. По-друге, простота аналітичного вигляду гауссіана сприяє розрахунку інтегралів при квадратичному законі дисперсії частинок.

Нехай початкова хвильова функція

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

зосереджена біля точки $-b$, віддаленої від області дії розсіювача настільки, що

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

(перший великий параметр теорії).

Згідно із загальним результатом методу функцій поширення (1.67), що спирається на відомі розв'язки для стаціонарних станів, одержуємо хвильову функцію в будь-який момент часу у вигляді

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

де величини c відповідають початковому хвильовому вектору $\Psi(0)$ в енергетичному зображенні, тобто в базисі неперервного спектра енергії, асимптотики хвильових функцій якого визначаються формулами (1.114) та (1.118), а також можливого дискретного:

$$c_k^{(\pm)} = (\Psi_k^{(\pm)}, \Psi(0)) = \int_{-\infty}^\infty \Psi_k^{(\pm)}(x_0)^* \Psi(x_0, 0) dx_0;$$

$$c_n = (\Psi_n, \Psi(0)) = \int_{-\infty}^\infty \Psi_n^*(x_0) \Psi(x_0, 0) dx_0. \quad (1.123)$$

У полях відштовхування (потенціал $U > 0$), а також у спеціальних випадках потенціалів різного знака (див., наприклад, [25]) зв'язаних станів немає, а тому відсутні й суми у виразі (1.122).

Обчислення величин $c_k^{(\pm)}$ можна провести в загальному вигляді для початкової хвильової функції (1.120) у припущенні (1.121). До того ж останню вимогу треба уточнити: локалізація початкового пакета повинна потрапляти в область асимптотик (1.114) та (1.118). Тоді можна використати спосіб наближеного обчислення інтегралів у (1.123), подібний розглянутому в попередньому параграфі. Проілюструємо це на прикладі розрахунку $c_k^{(-)}$.

Вважаючи потенціал локалізованим, розташуємо початок координат на лівій межі області його дії, а тому ліві асимптотики в (1.114) та (1.118) фактично будуть слухними для всіх $x < 0$. У такому випадку інтеграл для $c_k^{(-)}$ в (1.123) розбивається на дві частини:

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

Додаємо та віднімаємо відповідний додатковий інтеграл:

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

Перший інтеграл обчислюється точно (фур'є-перетворення гауссіана). Враховуючи, що за $x > 0$ початкова хвильова функція (1.120) експоненціально мала, оцінюємо другий інтеграл та доходимо остаточної відповіді

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

Аналогічним способом діємо у випадку $c_k^{(+)}$, де відповідь має вигляд

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

Залишається питання про відповідні внески зв'язаних станів. Тут можна поки зробити таким чином. По-перше, обмежитися, як вже зазначалося, потенціалами, у яких відсутні зв'язані стани. Тоді таких внесків нема зовсім. По-друге, враховуючи, що хвильові функції можливих зв'язаних станів за межами області дії потенціалу

експоненціально спадають: $\Psi_n(x) \sim \exp(-\alpha_n |x|)$, $\hbar \alpha_n = \sqrt{2m|E_n|}$ можна дати грубу оцінку c_n з (1.123) $c_n \sim \exp(-\alpha_n b)$ та вважати, що b таке велике, що цим внеском можна знехтувати (додаткове уточнення умови (1.121)). Звичайно, можна обчислити c_n більш точно, що пропонуємо зробити у вигляді вправи.

Хоча подальший розвиток теорії є можливим і на підставі одержаних досить точних виразів (1.124) та (1.125), проте з фізичних міркувань слід вважати, що початкова середня швидкість є досить великою, тому

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

(другий великий параметр теорії). Фізичний сенс цієї вимоги міститься ось в чому. По-перше, для початкового гауссіана дисперсія імпульсів зв'язана безпосередньо з дисперсією координат точним співвідношенням $D_{pp}(0) = \hbar^2 / 4D_0$. У загальному випадку при довільній формі початкового пакета з огляду на співвідношення невизначенностей $D_{pp}(0) \gtrsim \hbar^2 / 4D_0$. Умова (1.126) означає, що можна говорити практично про певне значення енергії (або хвильового числа k), як буде ясно з подальшого. Інакше кажучи, середні значення цих величин несуть основну інформацію про їх реалізацію. У протилежному разі, за великого статистичного розкиду, середні значення в слабкій мірі характеризують рух, указуючи лише найзагальніші тенденції. Щоб уникнути непорозумінь, нагадаємо, що в розглянутих умовах імпульс не зберігається (швидкість пропорційна імпульсу), а інтегралом руху є повна енергія E (або хвильове число $k = \sqrt{2mE} / \hbar$). Значення ж $\hbar k_0$ має зміст середнього імпульсу в початковий момент часу, проте за умови (1.126) розподіл хвильових чисел (та енергії) буде визначатися тільки $c_k^{(+)}$ з (1.127), тобто практично буде гауссовим з дисперсією $(4D_0)^{-1}$, а тому й хвильове число має вузький розподіл біля значення k_0 , і енергія також має вузький розподіл поблизу значення $E(k_0)$.

По-друге, розпливання пакета буде слабким на протязі всього часу розсіяння $t = 2b / v_0$ за умови $T^2 = (\hbar t / 2mD_0)^2 = (b / D_0 k_0)^2 \ll 1$, що з урахуванням (1.121) дає вимогу (1.126).

Таким чином, за вказаних умов (1.121) та (1.126) початкова хвильова функція в зображенні стаціонарних станів (1.124) та (1.125)

має з точністю до експоненціально малих членів (нагадуємо, що $k > 0$) практично гауссову форму

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

Отже, координатна хвильова функція в будь-який момент часу в такому наближенні має вигляд

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

Подальші кроки вимагають знання явного вигляду розв'язку стаціонарної задачі розсіяння $\Psi_k^{(+)}(x)$. Зокрема, в області асимптотичних розкладів (1.114), а отже, фактично за межами області дії потенціалу, тобто в загальному випадку для початкової та кінцевої стадій процесу розсіяння, одержуємо згідно з (1.114) та (1.128) за $x < 0$ (далеко від потенціалу)

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

Для внеску падаючих хвиль інтегрування з тою ж точністю можна брати в межах від $-\infty$ до $+\infty$, а тому інтеграл зводиться до стандартного вигляду, який вже неодноразово зустрічався (див. також дод. 4). Обчислення внеску відбитих хвиль виявляється трохи складнішим та ґрунтується на результатах дод. 4. Відповідь записується в такий спосіб:

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

де $\varphi_B(k)$ – фаза амплітуди відбиття: $B = |B| \exp i\varphi_B$, а також введено позначення $\varphi_B' = d\varphi_B(k_0) / dk$; $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$;
 $\gamma_B(t) = \gamma(t) - i\varphi_B''(k_0) / 2D_0$; $E_0 = E(k_0)$.

Перший член описує вільний рух гауссова пакета – падаючі хвилі. Другий член має аналогічний вигляд і описує також гауссів пакет, що рухається назустріч, – відбиті хвилі. Фактично, другий пакет є частиною першого на кінцевій стадії процесу розсіяння та тільки аналітичний запис зводить їх в єдину формулу. Справді, на початковій стадії другий член є експоненціально малим у розглянутій області

руху, а тому їм можна знехтувати в межах прийнятої точності, а на кінцевій стадії з тієї ж причини треба відкидати перший член. Більш докладне обговорення результатів поки що відкладемо й звернемось до хвиль, що пройшли. За $x > 0$ (далеко від області дії поля) на кінцевій стадії розсіювання з (1.128) та (1.114) маємо

$$\Psi(x, t) =$$

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

Наближений розрахунок інтеграла згідно з дод. 4 дає формулу

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

де $\varphi_C(k)$ – фаза амплітуди проходження: $C = |C| \exp i\varphi_C$, а $\varphi'_C = d\varphi_C(k_0) / dk$ та $\gamma_C(t) = \gamma(t) - i\varphi''_C(k_0) / 2D_0$. Цей гауссів пакет також є частиною падаючих хвиль, але на кінцевій стадії розсіювання. Він описує хвилі, які пройшли.

Одразу ж підкреслимо, що при обчисленні інтегралів припускалося, що модулі амплітуд відбиття та проходження дуже слабо залежать від k поблизу k_0 в інтервалі порядку $D_0^{-1/2}$ (основному інтервалі інтегрування за k), а фази змінюються плавно. Урахування ж зміни модулів амплітуд дає зсув середньої точки (див. дод. 4), що веде до відмінності швидкостей руху відбитих пакетів та тих, що пройшли, від швидкості падаючого.

Вправа: покажіть, що цей звичайно слабкий ефект дає для відбитих і падаючих хвиль швидкості відповідно

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

В особливих випадках (резонансне розсіювання) фази можуть сильно змінюватись в основному інтегральному інтервалі. Тоді треба вести розрахунок більш коректно. Резонансне розсіювання розглянемо пізніше.

Перейдемо до обговорення результатів. Насамперед зіставимо висновки нестационарної теорії з результатами стаціонарної. Остання дає тільки інтегральні характеристики розсіювання, запроваджуючи залежність від енергії, яка має певне значення (або хвильового числа) коефіцієнтів відбиття $R(k) = |B(k)|^2$ та проходження $T(k) = |C(k)|^2$. Фази ж комплексних амплітуд відбиття $B(k)$ та проходження $C(k)$ не

фігурують зовсім. Завбачення нестационарної теорії значно багатші на фізичні ефекти.

По-перше, інтегральну, глобальну картину розсіяння стаціонарної теорії уточнює локальний координатний опис у вигляді пакетного руху.

По-друге, якщо зінтегрувати за відповідними областями координат квадрати модулів хвильових пакетів в (1.130) та (1.132), то на початку процесу одержимо одиничне нормування для падаючого пакета. На кінцевій стадії відповідні інтеграли для відбитих хвиль дадуть $|B(k_0)|^2$, а для тих, що пройшли, $|C(k_0)|^2$, а тому коефіцієнт відбиття (проходження) набуває трактовки ймовірності локалізації частинки на кінцевій стадії процесу ліворуч (праворуч) від розсіювача. Умова ж нормування забезпечується стаціонарним співвідношенням $R + T = 1$.

По-третє, падаючі, відбиті та ті, що пройшли, хвилі мають стійку гауссову форму.

По-четверте, розпливання пакетів відбувається за законами вільного руху, виявленими в 1.6, з невеликими поправками у відбитих пакетів та тих, що пройшли, зв'язаними з другими похідними від фаз. Отак, дисперсії координат у кожному з пакетів дорівнюють

$$D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0 \quad (\text{падаючі хвилі});$$

$$D_B(t) = D_0 + (\hbar t / m - \phi_B'')^2 / 4D_0 \quad (\text{відбиті хвилі});$$

$$D_C(t) = D_0 + (\hbar t / m - \phi_C'')^2 / 4D_0 \quad (\text{хвилі, що пройшли}).$$

По-п'яте, якщо стаціонарна теорія не дає розвитку процесу в часі, оскільки енергія має певне значення, то за нестационарного опису процес розгортається в часі, спостерігаються окремі стадії, включаючи безпосередній контакт з розсіювачем.

По-шосте, рух пакетів характеризується швидкостями їх центрів і поза областю дії потенціалу відбувається рівномірно. Навіть можна завбачити тонкий ефект різниці швидкостей згідно з (1.133).

По-сьоме, перші похідні від фаз визначають зсуви за часом (загання або випередження пакетів у порівнянні з їх відповідним вільним рухом). Положення центра хвиль, що пройшли, в (1.132) визначається рівнянням $x_C = -b + v_0 t - \phi_C'$, а тому зсуви за координатою та за часом дорівнюють

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

Аналогічно для відбитих хвиль в (1.130) $x_B = b - v_0 t + \phi'_B$, а зсуви за координатою та за часом дорівнюють

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

Знаки залежать від конкретного вигляду потенціального поля (чи то загання, затримка, чи то випередження, пришвидшення).

По-восьме, саме пакетний рух відповідає переходу до класичного опису.

По-дев'яте, теорія описує і найбільш яскраву стадію розсіяння – безпосередній контакт пакета з розсіювачем. Для цього необхідно знати явний вигляд хвильової функції стаціонарних станів в області дії потенціалу згідно з (1.128).

По-десяте, при резонансному розсіянні, крім відбитих хвиль і тих, що пройшли, які через особливості фаз мають у такому разі більш складну форму, ніж поодинокі гауссіани, можуть тимчасово з'являтися й захоплені хвилі, які застрягли в області дії потенціалу.

Ще раз підкреслимо, що одержані результати – загальна формула (1.128) та асимптотики для кінцевої стадії розсіяння (1.130) і (1.132) – відносяться до будь-яких локалізованих потенціальних полів (асимптотики одержано поза резонансом). Є, проте, особливий випадок, коли формули (1.130) та (1.132) слушні для всіх значень координат і всіх моментів часу. Це випадок граничного локалізованого δ -потенціалу.

Початкові умови задачі були сформульовані в координатному просторі – задавався початковий пакет у вигляді (1.120). Можна формулювати початкові умови інакше – задавати початкову хвильову функцію одразу в енергетичному зображенні. До того ж вважати, що задана саме величини $c_k^{(+)}$ (інші ж проекції $c_k^{(-)}$ і c_n точно дорівнюють нулю). Тоді побудування теорії починається з дослідження загального розв'язку згідно з (1.122)

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

Звідси можна одержати асимптотики при $t \rightarrow \infty$ на підставі стаціонарних результатів (1.114) за допомогою методу стаціонарної фази [34] при дуже загальних припущеннях щодо $c_k^{(+)}$ або задавши її конкретний вигляд.

Права: одержить зазначені часові асимптотики для початкового пакета $c_k^{(+)}$ досить загального вигляду, який зосереджений поблизу якогось значення k_0 .

Звернемось тепер до конкретних потенціальних полів. Потенціалом, для якого може бути найбільш повний розв'язок, як уже відзначалося, є δ -потенціал (1.115). При цьому точні стаціонарні хвильові функції мають вигляд (1.114) не тільки асимптотично при $x \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow +\infty$), але й для всіх $x < 0$ ($x > 0$). Амплітуди відбиття і проходження визначаються виразом (1.116). Модулі амплітуд змінюються слабо (оцініть все ж таки ефект різниці швидкостей згідно з (1.133)), а фази

$$\varphi_B = \arctg(k/\varkappa) - \pi; \quad \varphi_C = -\arctg(\varkappa/k) \quad (1.137)$$

з однаковими похідними $\varphi'_B = \varphi'_C = \varkappa/(\varkappa^2 + k_0^2)$ дають слабкий зсувний ефект координат: $|\Delta x_{B,C}| / \sqrt{D_0} \leq (2k_0 \sqrt{D_0})^{-1} < 1$ з огляду на умови (1.126). Таким чином, у полі відштовхування ($\varkappa > 0$) виникає невелика затримка пакетів з $\Delta x_C < 0$ і $\Delta x_B > 0$, а в полі притягання ($\varkappa < 0$) вони рухаються з випередженням: $\Delta x_C > 0$ і $\Delta x_B < 0$. Фізичний сенс цього результату можна пояснити з класичних позицій: у полі відштовхування частинка рухається повільніше, ніж при вільному русі, тому що в області дії потенціалу її швидкість (кінетична енергія) зменшується, тим часом як над ямою частинка проходить швидко, оскільки її кінетична енергія стає великою. Це лише навідні міркування, оскільки в даному випадку взагалі розглядається суто квантова гранично локалізована модель δ -потенціалу.

Оцінюючи внесок других похідних від фаз у дисперсію координат, доходимо висновку, що той цілком незначний для всіх розглянутих енергій з (1.126): $\varphi''_B = \varphi''_C = -2k_0 \varkappa / (k_0^2 + \varkappa^2)^2$; $|\varphi''_{B,C}| / 2D_0 = k_0 \varkappa / (k_0^2 + \varkappa^2)^2 D_0 \leq (4k_0^2 D_0)^{-1} \ll 1$, а тому ним будемо нехтувати, як і додатками до швидкостей в (1.133), що мають той же порядок малості.

Таким чином, при розсіянні гауссіана на δ -потенціалі хвильові функції згідно з (1.130) та (1.132) у зазначеному наближенні дорівнюють

$$\Psi(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0 / \hbar + ik_0 b] f(x, t), \quad \text{де при } x < 0 \\ f(x, t) = \exp[ik_0 x - (x + b - v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)] + [\varkappa / (ik_0 - \varkappa)] \exp\{-ik_0 x - \\ - [x - b + v_0 t - \varkappa / (\varkappa^2 + k_0^2)]^2 / 4D_0 \gamma(t)\},$$

а при $x > 0$

$$f(x, t) = [ik_0 / (ik_0 - \varkappa)] \exp\{ik_0 x -$$

$-[x+b-v_0t+\varpi/(\varpi^2+k_0^2)]^2/4D_0\gamma(t)\}$. Звідси для густини ймовірності координат одержуємо формулу

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

Якщо $X < 0$, то $F(X,T) = F_1^2 + F_2^2 - 2F_1F_2 \cos F_3$, де

$$\begin{aligned} F_1 &= \exp\left[-\frac{(X+B-2KT)^2}{4(1+T^2)}\right]; \\ F_2 &= \frac{Q}{\sqrt{Q^2+K^2}} \exp\left\{-\frac{[X-B+2KT-Q/(Q^2+K^2)]^2}{4(1+T^2)}\right\}; \\ F_3 &= 2KX - \arctg(K/Q) + \\ &+ \frac{T[B-2KT+Q/2(Q^2+K^2)][X-Q/2(Q^2+K^2)]}{1+T^2}. \end{aligned}$$

Якщо $X > 0$, то

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

Тут введені безрозмірні величини, більшість з яких уже зустрічалась у подібних розрахунках: $R = \sqrt{D_0}\rho$; $X = x/\sqrt{D_0}$; $B = b/\sqrt{D_0}$; $K = k_0\sqrt{D_0}$; $Q = \varpi\sqrt{D_0}$; $T = \hbar t/2mD_0$.

При $|Q| \rightarrow \infty$ формула переходить в одержаний раніше вираз (1.113), який описує процес зіткнення гауссіана зі стінкою. Зауважимо, що цей граничний перехід дає однаковий результат незалежно від знака Q , так що роль непроникної стінки виконують як дуже інтенсивний δ -потенціал відштовхування, так і потенціал притягнення.

Формула (1.138) готова до чисельного моделювання процесу розсіяння гауссіана на δ -потенціалі. Явний аналітичний запис, хоч і трохи громіздкий ніж ті, що зустрічалися раніше, дозволяє швидко відтворювати зображення на екрані дисплея. Розчленування формули (1.138) на фрагменти (F , F_1 , F_2 , F_3) полегшує програмування. Вибираючи початкові значення вхідних параметрів B , K , Q , треба пам'ятати, що явний аналітичний вираз вдалося отримати завдяки двом припущенням. Перша умова (1.21) зводиться до нерівності $B^2 \gg 1$. Вона означає, що спочатку відстань до потенціалу значно перевищує ширину пакета. Зміст другого припущення (1.126) полягає в тому, що параметр K також повинен бути великим: $K^2 \gg 1$. Це означає, що

можна говорити про майже певне значення хвильового числа (енергії), що характеризується середнім значенням K . Ще одну умову треба накласти, якщо ви хочете, щоб за час процесу розсіювання, аж до повернення відбитого пакета до місця старту, $T = B / K$ розпливання пакета було малим. Для цього повинна виконуватися нерівність $T^2 \ll 1$, тобто величина K повинна трохи перевищувати величину B : $K > B$, щоб $K^2 \gg B^2$ (вибір надто великих K означає великі енергії).

Нарешті, параметр Q характеризує інтенсивність потенціалу. Якщо величини B , K уже обрані, то орієнтиром при виборі Q може бути вираз для коефіцієнта прозорості потенціалу $K^2 / (Q^2 + K^2)$, а тому при $Q = K$ падаючий пакет перетворюється на два однакові гауссіани, що рухаються в різних напрямках. Збільшуючи Q , зменшуємо прозорість, тощо.

Тут є доречними всі ті зауваження щодо комп'ютерного моделювання, які було висловлено наприкінці параграфа 1.9. Треба тільки врахувати, що спостереження бажано вести водночас за відбитим пакетом та пакетом, що пройшов, а тому початок координат необхідно розташувати поблизу центра, дещо змістивши його вправо (мова йде про екран дисплея), оскільки саме перед розсіювачем розгравуються найцікавіші події при безпосередньому контакті з досить інтенсивним потенціалом.

При спостереганні за процесом розсіювання ще раз зверніть увагу на роль фаз амплітуд відбиття та проходження φ_B і φ_C , включаючи їх похідні.

Постарайтеся помітити ефект загаяння та випередження, про які йшлося при виведенні формул (1.134) і (1.135).

Оцініть середню швидкість усього хвильового пакета в процесі розсіювання (нагадуємо, що імпульс не зберігається при русі частинки в потенціальному полі), а також простежте за процесом розсіювання в імпульсному просторі.

Другим прикладом потенціального поля, для якого можна одержати не дуже складні аналітичні вирази характеристик розсіювання в нестационарній теорії, є прямокутний потенціал

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

Для нього хвильові функції стаціонарних станів (1.114) будуть точними відповідно в областях $x < 0$ та $x > a$. При цьому амплітуди відбиття $B(k)$ та проходження $C(k)$ дорівнюють: якщо $E > U_0$ (зокрема, для потенціальної ями, коли $U_0 < 0$),

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

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

де $\hbar k = \sqrt{2mE}$; $\hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)}$; якщо $E < U_0$ (результати одержуються з попередніх заміною $iq \rightarrow \varkappa$, де $\hbar \varkappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}$,

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

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

У області дії потенціалу, тобто для $0 < x < a$, хвильові функції стаціонарних станів, що нас цікавлять, у випадку $E > U_0$ мають вигляд

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

а у випадку $E < U_0$

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

Цих відомостей про стаціонарні характеристики досить для побудови нестационарної теорії. Далі є декілька шляхів розв'язання задачі. Можна використовувати загальні формули (1.130) та (1.132), доповнюючи їх аналогічним обчисленням для області дії поля на підставі (1.128), (1.142) та (1.143). При цьому у випадку $E < U_0$ (тунелювання крізь бар'єр) фази амплітуд відбиття та проходження, як видно з формул (1.141), плавно змінюються з енергією, але у випадку $E > U_0$ ці фази змінюються досить швидко, що відповідає резонансному розсіяню.

Можна, зрозуміло, побудувати початковий пакет таким чином, щоб дисперсія енергії була малою навіть у порівнянні з характерними енергетичними інтервалами зміни фаз, але такий пакет буде надто широким у координатному просторі. До того ж явні точні формули для перших похідних від фаз досить громіздкі. У зв'язку з цим, залишивши для читача реалізацію цього напрямку теорії, розглянемо

інші шляхи розв'язання. Один напрямок – аналітичні розрахунки для енергій в околі резонансу, а інший, більш загальний напрямок – чисельні експерименти на підставі формули (1.128), які зводяться до розрахунку однократного інтеграла.

1.11. Нестационарна теорія резонансного розсіювання

Продовжуючи тему попереднього параграфа, розглянемо спочатку розв'язання задачі нестационарного розсіювання потенціалом прямокутної форми у випадку резонансу. Припустимо, що середня енергія (або середнє хвильове число k_0) дорівнює резонансному значенню $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$, при якому в стаціонарній теорії відбиття відсутнє, тобто

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

Як видно з формули (1.140), це відбувається за умови $q_n a = \pi n$, або

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

де $n = 1, 2, \dots$ у випадку потенціального бар'єра ($U_0 > 0$), а у випадку ями ($U_0 < 0$) n повинні приймати такі значення, щоб резонансний рівень енергії потрапив у область $E_n > 0$. З (1.145) видно, що E_n відповідають рівням енергії частинки, замкненої в області $0 < x < a$ (прямокутна потенціальна яма нескінченної глибини) з відліком енергії від U_0 . Явище повної прозорості пояснюється гасінням хвиль, відбитих від різних меж у точках $x = 0$ та $x = a$. Це є вимога, щоб на інтервалі укладалося ціле число півхвиль: $a / (\lambda_n / 2) = n$; $\lambda_n = 2\pi / q_n$.

Переходячи до нестационарного опису, насамперед зазначимо, що повної прозорості бути не повинно через невизначеність енергії. Це попереднє якісне завбачення вимагає підкріплення кількісним розрахунком кінетики пакетного руху в умовах резонансу.

Базуємось на загальному виразі (1.128) з початковою умовою для хвильової функції у k -зображенні (енергетичному) вигляду

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

яке в координатній картині означає, як з'ясовано в попередньому параграфі, що початковий хвильовий пакет має гауссову форму з центром у точці $-b$, дисперсією координати D_0 і стартує вдалині від розсіювача з середньою швидкістю $v_0 = \hbar k_0 / m$ при малій дисперсії енергії. Остання умова вимагає уточнення. Будемо вважати, що дисперсія енергії ΔE менше відстані між сусідніми резонансними

квазірівнями, тобто $\Delta E \ll E_{n+1} - E_n$. Через те що згідно з (1.145) $E_{n+1} - E_n = (2n+1)\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ та $\Delta E = 2\Delta k E / k$, а $\Delta k = 1 / 2\sqrt{D_0}$, доходимо умови

$$a^2 / D_0 \ll (2n+1)\pi^2 / k_0 \sqrt{D_0}. \quad (1.147)$$

У цьому випадку можна застосувати такий засіб. При обчисленні інтегралів у (1.128) із стаціонарними хвильовими функціями $\Psi_k^{(+)}(x)$, що мають за межами області дії потенціалу вигляд (1.114), розкладемо амплітуди відбиття та проходження (1.140) в ряд за степенями відхилень від середнього значення k_0 , яке збігається з одним з резонансних значень k_n . Ураховуючи умову (1.144) та обчислюючи похідну амплітуди відбиття в резонансній точці, одержуємо в першому наближенні, що $B(k) = B'_n(k - k_0)$, де

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

Аналогічний розрахунок для амплітуди проходження вимагає залишення квадратичних членів розкладу. Крім того, вилучимо множник $\exp(-ika)$: $C = \tilde{C}(k) \exp(-ika)$. Тоді

$\tilde{C}(k) = \tilde{C}(k_n) + \tilde{C}'(k_n)(k - k_0) + \tilde{C}''(k_n)(k - k_0)^2 / 2$, де лінійний член легко обчислюється безпосередньо за формулою (1.140), а квадратичний простіше знайти з точного співвідношення для амплітуд розсіяння $|C(k)|^2 + |B(k)|^2 = 1$ з урахуванням (1.148). У результаті

$$\begin{aligned} \tilde{C}(k) &= (-1)^n [1 + i\alpha(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2], \text{ де} \\ \alpha &= a(k_n^2 + q_n^2) / 2q_n^2; \quad \beta = -a^2(k_n^4 + q_n^4) / 4q_n^4. \end{aligned} \quad (1.149)$$

Спочатку розглянемо поведінку хвиль перед розсіювачем ($x < 0$). Згідно з (1.128), (1.114) та (1.148) хвильова функція в будь-який момент часу визначається інтегралом

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

Перший член обчислюється приблизно стандартним способом і приводить до падаючих хвиль

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

де, як і раніше, $E_0 = E(k_0)$; $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$.

Другий член обчислюється аналогічно із застосуванням параметричного диференціювання інтеграла та описує відбиті хвилі

$$\Psi_{\text{від}}(x, t) = (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma^{-1/2}(t) \exp[-itE_0 / \hbar -$$

$$-ik_0(x-b)]B_n i \partial / \partial x \exp[-(x-b+v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)]. \quad (1.152)$$

Переходячи до густини ймовірності координат, запишемо результати для такої стадії розсіяння, коли вже інтерференцією між падаючими та відбитими хвилями можна знехтувати (а втім, для падаючого пакета це не "вже", а "ще"). Падаючі хвилі мають форму звичайного поодинокого гауссіана

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

де $D(t) = D_0 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 D_0$, а самий цікавий результат одержуємо для відбитих хвиль:

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

де B'_n визначено в (1.148).

Тепер можна зробити деякі висновки щодо відбитих хвиль.

По-перше, ясно, що відбиті хвилі є, так що повної прозорості, як і передбачалося, насправді немає.

По-друге, відбитий пакет в умовах резонансу має більш складний вигляд, ніж звичайний поодинокий гауссіан.

По-третє, пакет має двогорбу симетричну стійку форму (з поправкою на розпливання, звичайно).

По-четверте, центр пакета знаходиться в западині між горбами і рухається (як і весь пакет у цілому) з постійною швидкістю $-v_0$. Густина ймовірності координат у центрі пакета дорівнює нулю.

По-п'яте, пакет (хвильова функція) є граничним випадком різниці двох гауссіанів, які відповідають відбиттю від меж потенціалу з ефективною відстанню порядку a .

По-шосте, відстань між максимумами горбів

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

По-сьоме, інтегральний внесок, тобто частка відбитих жвиль, або коефіцієнт відбивання, складає

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

що з урахуванням малості a згідно з (1.147) повинно бути відносно малою величиною. У граничному випадку при $D_0 \rightarrow \infty$ переходимо до стаціонарної відповіді повної прозорості.

Треба мати на увазі, звичайно, що деякі деталі можуть бути уточнені. Так, відбитий пакет фактично має дещо несиметричну двогорбову форму, а густина ймовірності координат не перетворюється на нуль у центрі пакета, хоч і є малою величиною. Центр пакета

фактично рухається з деякою затримкою в порівнянні з законом (1.154).

Далі, за середнє значення енергії нами був обраний резонансний рівень енергії стаціонарної теорії, але фактично мінімум відбиття (не рівний, звичайно, нулю) є дещо зсунутим.

Всі ці деталі виявляються при більш точному розрахунку. Якщо досі обчислення виконувалися з експоненційно малими похибками, то в цьому параграфі поки що апроксимації мали степеневого характеру, так що не завжди слід сподіватися на велику точність від формул (1.155) та (1.156), хоча основні висновки залишаються вірними, а оцінку точності дадуть чисельні розрахунки.

У такий же спосіб досліджується поведінка хвиль і за розсіювачем, тобто при $x > a$. Вираз для хвиль, що пройшли, буде, однаке, дещо більш громіздким, тому що в розкладі (1.149) треба врахувати всі три члени. Виконайте ретельно всі розрахунки тим же методом параметричного диференціювання, що й під час аналізу відбитих хвиль, а потім одержить формулу й для густини ймовірності координат. Не забудьте включити в інтеграл множник, що відрізняє C від $\tilde{C}$. Зробіть відповідні висновки щодо структури пакета, що пройшов, у тій же послідовності, що й для відбитого пакета.

Продовжуючи дослідження нестационарного резонансного розсіяння, перейдемо до розглядання хвиль, що потрапляють у середину області дії потенціалу. Знову звертаючись до загальної формули (1.128) з урахуванням (1.146) і (1.142), одержуємо вираз

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

У першому наближенні вважаємо, що два останні множники в функції, що інтегрується, можна замінити їх резонансними значеннями, зокрема, урахувавши, що $\tilde{C}(k_n) = (-1)^n$ і $q_n a = \pi n$. Тоді інтеграл, що залишився, обчислюється стандартним способом, а

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

Таким чином, часова залежність відокремлюється від координатної. Густина ймовірностей координат

$$\rho_{\text{зак}}(x, t) = [1 + (k_n^2 / q_n^2 - 1) \sin^2 q_n x] [2\pi D(t)]^{-1/2} \exp[-(b - v_0 t)^2 / 2D(t)]$$

близька до тієї, що одержуємо для стаціонарних станів при русі на інтервалі $0 < x < a$. З наближенням пакета до області дії потенціалу

відштовхування зі слабкою проникністю (у цьому випадку $k_n^2 \gg q_n^2$) утворюється досить значна хвиля, яка описує частинки, що були захоплені, позастріяли. Найбільшої величини вона досягає при $t = b / v_0$:

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

Зокрема, для непарних резонансів ($q_n a = \pi, 3\pi, \dots$) у середній точці $x = a / 2$ густина ймовірності координат

$\rho_{\text{з ax}}^{\text{max}}(x, t) = (k_n^2 / q_n^2)[2\pi D(t)]^{-1/2}$ у декілька разів може перевищувати максимальне значення навіть для падаючої хвилі – гострий сплеск на тлі плавної частини пакета, що пройшла, і частини перед розсіювачем, яка охоплена осциляціями, де інтерферують падаючі та відбиті хвилі.

Поступово хвиля, що захоплена, опадає, розсотується, загасає, релаксує за експоненціальним законом, підживлюючи хвилі, що відбиті та пройшли, які відходять від розсіювача.

Інтегральний ефект описується формулою

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

Перетворіть усі знайдені вирази для трьох областей ($x < 0$, $0 < x < a$ та $x > a$) до безрозмірного вигляду, не забуваючи врахувати й інтерферуючий член при $x < 0$ у густині ймовірності координат. Складіть програму чисельного моделювання процесу резонансного розсіювання гауссіана на прямокутному потенціалі. Дослідіть у комп'ютерному експерименті випадки різних значень параметрів потенціалу, приділіть особливу увагу порівнянню особливостей розсіювання на бар'єрі й на ямі. Зіставте результати для резонансів різного порядку n .

Тепер перейдемо до більш точного розглядання задачі нестационарного розсіювання на прямокутному потенціалі. Знов звернемось до загальної формули (1.128) та початкової умови (1.146). Тоді найближчою метою буде обчислення хвильової функції, яка визначається інтегралом

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

Тут точний розв'язок задачі розсіювання в стаціонарній теорії $\Psi_k^{(+)}(x)$ описується формулами (1.114), (1.142) та (1.143), де амплітуди

відбиття та проходження задаються виразами (1.140) та (1.141). Оскільки далі мається на увазі комп'ютерне моделювання, введемо одразу ж безрозмірні змінні та перепишемо всі співвідношення в зручному для програмування вигляді. Густина ймовірності координат розбивається на дві частини, що відповідають реальній та уявній частинам хвильової функції:

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

де інтеграли є однотипними й будуть обчислюватись паралельно

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

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

Фаза $P = (K - K_0)[B - T(K + K_0)]$, а функція $F(X)$ має різний вигляд у різних областях координат:

якщо $X < 0$, то $F(X) = \exp(iKX) + G(K) \exp(-iKX)$;

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

якщо $0 < X < A$, то $F(X) = C(K)Z(X)$.

Тут для амплітуди відбиття $B(k)$ введено позначення $G(K)$ (позначення B вже використали для стартової координати пакета), а модифікована амплітуда проходження $\tilde{C}(k)$ позначена $C(K)$. У випадку $K^2 > V$ (потенціальна яма або надбар'єрні енергії) амплітуди розсіяння мають вигляд

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

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

а допоміжна функція

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

У випадку $K^2 < V$ (підбар'єрні енергії) амплітуди розсіяння визначаються формулами

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

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

а допоміжна функція

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

При цьому для всіх енергій $Q = \sqrt{|K^2 - V|}$.

Фізичний зміст безрозмірних величин такий: $R = \rho\sqrt{D_0}$ – густина ймовірності координат (вихідна величина); $K = k\sqrt{D_0}$ – хвильове число (змінна інтегрування); $K_0 = k_0\sqrt{D_0}$ – середнє хвильове число (вихідна величина); $Q = q\sqrt{D_0}$, $q\sqrt{D_0}$ – допоміжне хвильове число; $V = 2mU_0D_0 / \hbar^2$ – висота потенціального бар'єра або глибина ями (вихідна величина); $X = x / \sqrt{D_0}$ – координата; $A = a / \sqrt{D_0}$ – ширина бар'єра або ями (вихідна величина); $B = b / \sqrt{D_0}$ – відстань від стартової точки до лівої межі потенціалу (вихідна величина); $T = \hbar t / 2mD_0$ – час.

Таким чином, основні перетворення є зв'язаними з комплексними величинами. Якщо мова програмування, якою ви користуєтесь, не передбачає операцій з комплексними змінними, то необхідно спочатку перетворити вирази в інтегралах I_1 та I_2 . Під час практичного обчислення інтегралів досить за верхню границю інтегрування обрати величину $2K_0$.

Вхідні величини вибираються так, щоб виконувались такі умови. Пакет віддалено від розсіювача й чітко локалізовано на старті ліворуч від нього: $B^2 \gg 1$. Практично можна говорити про певне значення енергії (хвильового числа), а помилки аналітичних обчислень, зокрема при вказаному вище обрізанні верхньої границі інтегрування, будуть експоненційно малі: $K_0^2 \gg 1$. Час процесу від старту до повернення на те ж місце відбитого пакета $T = 2B / 2K = B / K$ повинний бути досить малим: $T^2 \ll 1$, чим забезпечується слабке розпливання пакетів.

Додаткові умови зв'язані з конкретними спостереженнями. Наприклад, вимога $VA^2 \gg 1$ забезпечує слабку проникність бар'єра в області тунелювання та достатню гострість надбар'єрних резонансів прозорості.

У даному випадку для чисельних експериментів треба мати комп'ютер середньої швидкодії (який працює приблизно на два порядки швидше, ніж при виконанні експериментів з простими демонстраціями рухомих зображень на підставі явних аналітичних формул). На екрані дисплея можна спочатку показати всю картину в цілому, відзначивши загальний ефект відбиття та проходження при

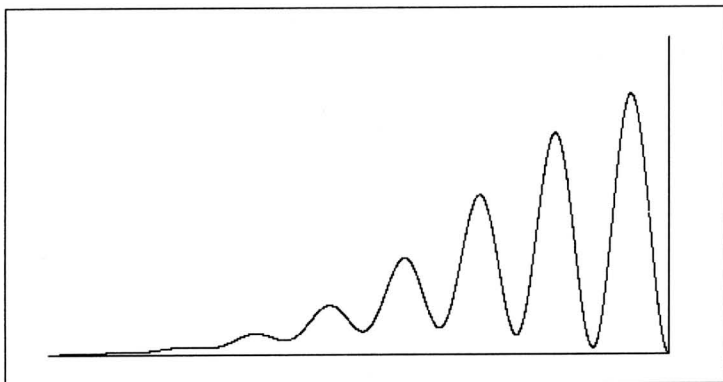


Рис. 4. Інтерференція падаючих та відбитих хвиль перед розсіювачем

різних значеннях параметрів пакета та потенціалу. Потім бажано змінити масштаб координат, залишаючи в кадрі тільки область безпосередньо перед лівою межею потенціалу, щоб у деталях розглянути осциляції падаючих та відбитих хвиль. У випадку резонансного розсіювання (рис. 4) крім того, можна залишити в кадрі тільки область дії потенціалу ($0 < X < A$) і спостерігати за поступовим наростанням пакета, а потім і за розпадом квазістаціонарного стану, що тимчасово виникає (явище захоплення й розпаду квазістаціонарного стану).

На етапі налагодження програми як тестовий приклад можна взяти більш грубі результати для розсіювання, які одержано раніше, включаючи резонансну ситуацію. У свою чергу, налагоджена програма обчислення дозволить оцінити точність цих розрахунків.

Для орієнтування доцільно відкласти на шкалі хвильових чисел (і водночас на осі енергій) характерні опорні точки та інтервали: значення висоти бар'єра $\sqrt{V}$ (або глибини ями $\sqrt{-V}$), декілька резонансів $K_n = \sqrt{\pi^2 n^2 / A^2 + V}$, середнє значення для пакета K_0 і повну ширину пакета в K -просторі $\delta K = 4\Delta K = 2$ (вона може бути визначена за спаданням у e^2 разів квадрата модуля густини ймовірності в K -просторі), де невизначеність для гауссового пакета, що розглядається, $\Delta K = 1/2$. Таким чином можна ясніше уявити собі, яку роль грають резонансні явища, як укладається пакет у K -просторі відносно стаціонарної кривої резонансу, які слід добирати параметри пакета та потенціалу. Треба також зобразити графік залежності від K

стаціонарного коефіцієнта прозорості $|C(K)|^2$ для даного потенціалу, щоб мати уявлення про ширину резонансів при різних значеннях K . Однією з кількісних цілей даного комп'ютерного експерименту є побудування графіка для нестаціонарного коефіцієнта прозорості в залежності від середнього хвильового числа K_0 . Порівняйте його з відповідною стаціонарною кривою. Для цього на кінцевій стадії розсіяння треба в процесі розрахунку координатних точок для R робити обчислення координатних інтегралів $\int_{-\infty}^0 R(X,T)dX$ і $\int_A^\infty R(X,T)dX$. Бажано ці обчислення виконувати й під час усього процесу розсіяння, додавши також інтеграл за областю дії потенціалу

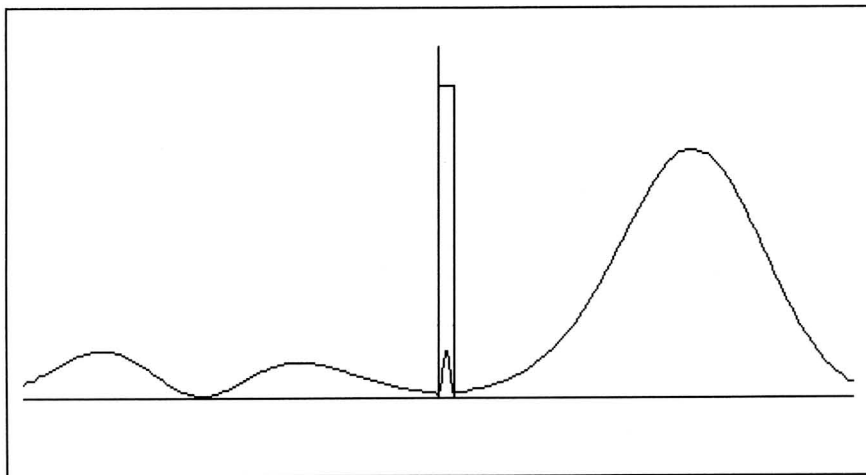


Рис. 5. Утворення двогорбкої відбитої хвилі у випадку резонансного розсіяння

$\int_0^4 R(X,T)dX$. Це дасть можливість характеризувати процес не тільки на підставі диференціальної величини $R(X,T)$, але й на основі інтегральних величин, а також дозволить контролювати правильність розрахунків за виконанням умови нормування. Як завжди, оцінюйте точність усіх обчислень, зменшуючи вдвоє шаг інтегрування по K (DK).

Як приклад вибору параметрів для спостереження резонансного розсіювання на бар'єрі (рис. 5) можна запропонувати такий варіант:

$B = 6,25$; $K_0 = 40$; $V = 1600 - 16\pi^2$; $A = 0,25$; $DK = 0,2$; $K_{\min} = 35$; $K_{\max} = 45$.

Для розвитку теми чисельного моделювання процесу нестаціонарного розсіювання дослідіть випадки початкових пакетів відмінної від гауссової форми, вводячи відповідні функції в інтегралах I_1 та I_2 формули (1.159), що замінюють гауссові та є зосередженими поблизу точки K_0 у K -просторі, не забуваючи при цьому змінити нормуючий коефіцієнт.

1.12. Резонансне розсіювання на солітонах

Попередній параграф було присвячено тим випадкам нестаціонарного резонансного розсіювання, коли стаціонарна теорія завбачує повну прозорість при окремих значеннях енергії (квазірівнях). Зокрема, така ситуація виникає в плоскошаруватих середовищах з прошарками, які мають різкі межі та описуються кусково-постійними потенціалами або їх граничними моделями у вигляді δ -потенціалів. Розгляньте нестаціонарне резонансне розсіювання у випадку двох δ -потенціалів (два бар'єри, дві ями, яма та бар'єр), коли є можливим точний розв'язок задачі для стаціонарних станів.

У стаціонарній теорії точно розв'язується й задача про безвідбиткові потенціальні поля, для яких відбиття відсутнє при всіх значеннях енергії. Одним з прикладів такого типу потенціальних полів є добре досліджена потенціальна яма Еккарта [1]. При деяких значеннях параметрів цього потенціалу, фізичний зміст яких полягає в появі чергового зв'язаного стану, настає повна прозорість для всіх енергій неперервного спектра. Безвідбиткові потенціали є щонайтісніше зв'язаними з солітонними розв'язками рівняння Кортевега–де Фріза [35–39, 128, 129].

У нестаціонарній теорії розсіювання безвідбитковим потенціалам також повинне відповідати повне проходження хвиль (при фіксованому профілі потенціалу).

Що ж буде темою дослідження у випадку нестаціонарного безвідбиткового розсіювання на солітонах? По-перше, крім інтегрального ефекту проходження є закон переміщення пакета в даному потенціальному полі (локальні ефекти). По-друге, результатом проходження області притягання (солітона) буде явище загаяння в порівнянні з випадком повністю вільного руху. При цьому цікаво

зіставити квантову затримку з відповідною класичною. Цікаво, що задача допускає загальний розв'язок, незалежно від числа солітонів та їх форми. У цьому відношенні приклад ями Еккарта є лише найпростішим випадком, з якого й природно починати розгляд питання. Нарешті, сама постановка проблеми зв'язку квантової кінетики з солітонікою веде до нових аспектів різноманітних взаємовідносин нелінійних хвильових явищ з квантовими. До цих питань доведеться ще повернутися в другому розділі книги.

Отже, звернемось до потенціалу притягання Еккарта

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

Точний розв'язок стаціонарної задачі розсіяння при довільних параметрах приводить до хвильової функції, що нас цікавить, яка виражається через гіпергеометричну функцію таким чином [1]:

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

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

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

є критичною умовою появи чергового зв'язаного стану (є N зв'язаних станів). Цей випадок, як відомо [35], відповідає N солітонам рівняння Кортевега–де Фріза (КдФ). При цьому $s = N$, тобто параметр s стає цілим числом, так що гіпергеометрична функція зводиться до полінома Якобі [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 асимптотиці $\Psi_k^{(+)}(x)$ при $x \rightarrow -\infty$ зникають відбиті хвилі:

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

де амплітуда проходження дорівнює

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

Звідси впливає властивість адитивності фази проходження

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

Виконайте всі вказані математичні викладки, спираючись на властивості гіпергеометричної функції [26].

Випишемо також явний вигляд точних розв'язків у випадку $N = 1$ (один солітон):

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

і у випадку $N = 2$ (два солітони):

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

Оскільки фаза проходження (1.166) є плавною функцією енергії, можна скористатися загальною апроксимацією для хвиль, що пройшли (1.132), якщо початковий пакет має гауссову форму з центром у точці $-b$, середньою швидкістю $v_0 = \hbar k_0 / m$ та дисперсією координат D_0 :

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & (2\pi D_0)^{-1/4} \gamma_C^{-1/2}(t) C(k_0) \exp[-itE_0 / \hbar + \\ & + ik_0(x + b) - (x + b - v_0 t + \phi'_C)^2 / 4D_0 \gamma_C(t)], \end{aligned} \quad (1.169)$$

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

У даному випадку перші похідні від фаз (1.166) дорівнюють

$$\phi'_C(k) = -2a [(1 + k^2 a^2)^{-1} + 2^{-1} (1 + k^2 a^2 / 4)^{-1} + \dots + N^{-1} (1 + k^2 a^2 / N^2)^{-1}] \quad (1.170)$$

Звідси для координатного зсуву хвиль, що пройшли (1.134), маємо ефект випередження $\Delta x_C = -\phi'_C(k_0) > 0$, тобто пакет опиняється далі від потенціальної ями після взаємодії з нею, ніж при вільному русі. З класичної точки зору це природно, тому що частинка в області ями розганяється. Розрахунок відповідного класичного випередження для потенціалу (1.160) дає $\Delta x_{\text{к.л}} = a \ln(1 + U_0 / E_0)$. Для безвідбиткового випадку $\Delta x_{\text{к.л}} = a \ln [1 + N(N + 1) / k^2 a^2]$. Зіставивши з результатом (1.170), переконаємось, що при великих енергіях вони дають однакову відповідь. Виконайте всі вказані розрахунки.

Другі похідні від фаз (1.166) входять у додаток до дисперсії координат у відповідності з (1.169). Оцініть їх вплив.

Переходячи до комп'ютерного моделювання, запрограмуйте розрахунок густини ймовірності координат на підставі точного виразу для фази проходження (1.166), зіставивши з наближенням розкладу фаз (1.169). За допомогою точних формул для випадків одного солітона (1.167) та двох солітонів (1.168) моделюйте весь процес руху пакета, детально простеживши за зміною його форми під час

безпосереднього контакту з солітонами, тобто при русі в області дії потенціалу.

Особливе зацікавлення викликає можливість перенесення результатів на випадок довільного безвідбиткового потенціалу (N солітонів). Для одного солітона безвідбиткові потенціали завжди мають вигляд ями Еккарта, але вже у випадку двох солітонів потенціали виявляються набагато різноманітнішими за формою (подвійні ями різних профілів) і лише при певних значеннях параметрів зводяться до ями Еккарта. Однак амплітуда проходження, як показано в [36], у випадку солітонів завжди може бути записаною у

вигляді $C(k) = (-1)^N \prod_{n=1}^N (1 - ik/\alpha_n) / (1 + ik/\alpha_n)$, де α_n – додатні величини (інтеграли руху рівняння КдФ), що відповідають рівням енергії безвідбиткового потенціалу: $E_n = -\hbar^2 \alpha_n^2 / 2m$. В окремому випадку безвідбиткового потенціалу Еккарта $\alpha_n = n/a$, так що одержуємо формули (1.165). Це означає, що зберігають силу з відповідними уточненнями основні результати для ями Еккарта.

Завершуючи стисле обговорення кінетики резонансного розсіювання гауссіана на солітонах, повторимо її головні особливості. Відміна від інших резонансних явищ, які розглядалися, у тому, що звичайний резонанс відповідає певному класу потенціалів з різними формами, але лише для окремих енергій (квазірівнів), тоді як у безвідбитковому випадку енергії будь-які, а профіль тільки певного типу. Безвідбиткові потенціали відповідають суто солітонним розв'язкам рівняння КдФ, так що можна говорити про розсіювання квантових частинок на солітонах. Стаціонарна безвідбитковість зберігається й у нестаціонарному випадку, але солітони не є "невидимками". Має місце ефект випередження – пам'ять про взаємодію гауссіана з солітонами. Коефіцієнт проходження дорівнює одиниці, але фази залежать від енергії та мають універсальний адитивний вигляд для будь-яких прозорих потенціалів.

2. МЕТОДИ ДИСКРЕТИЗАЦІЇ. РІЗНИЦЕВІ СХЕМИ. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

2.1. Рух на скінченному інтервалі

Другий розділ книги буде присвячено здебільшого питанням застосування чисельних методів у квантовій кінетиці. З деякими простими прикладами дослідження процесів на підставі комп'ютерного моделювання, обчислюваного експерименту ми вже знайомились у першій частині книги. Задачі, що там зустрілися, проте, зводилися чи то до обчислення більш або менш громіздких виразів у вигляді явних аналітичних формул, чи то, щонайбільше, до розрахунку нескладних однократних інтегралів. Зрозуміло, цілі, які при цьому переслідувались, не були обчислювальними, а головною задачею з фізичної точки зору була організація демонстраційних експериментів з показом кінетичних явищ, що ожили, зображень, що рухаються, тощо. У більш складних кінетичних проблемах розв'язок не зводиться до квадратур або, тим більше, до явних аналітичних виразів. Тоді на допомогу приходять потужні засоби розв'язання кінетичних диференціальних рівнянь з частинними похідними – чисельні методи, що базуються на різницевих схемах і реалізуються на швидкодіючих персональних комп'ютерах у режимі діалогу з виведенням результатів на екран дисплея, тощо.

Загальна ідея методів, які розглядаються у другому розділі книги, – це ідея дискретизації. Як і звичайно, почнемо з більш простих питань. Приклади нестационарних станів, що зустрічалися в першому розділі при вивченні різних кінетичних ефектів, були зв'язані здебільшого з суцільним енергетичним спектром, а рух розглядався у всьому координатному просторі. Першим кроком на шляху дискретизації буде введення штучних межових умов, тобто перехід до руху на певному скінченному інтервалі координат, що приводить до дискретизації енергетичного спектра, до заміни інтегралів в енергетичному зображенні на суми, тощо. Є важливим, що фізичні ситуації, які при цьому виникають, мають самостійне значення, оскільки ми переходимо до руху в реальних обмежених границях. Таким чином,

введення штучних межових умов є не тільки зручним засобом, але і водночас переходом до певного класу рухів, іноді більш реального, ніж ідеалізований необмежений випадок. Крім того, такий метод дає змогу продемонструвати нові ефекти: межові, розмірні, тощо. З розрахункової точки зору він дозволяє більш природним способом обчислювати фізичні характеристики. Адже під час обчислення інтегралів на підставі квадратурних формул однаково треба переходити до підсумовування. При цьому треба обрати відповідний алгоритм, зуміти оцінити похибки методу і таке інше, тоді як при обчисленні сум залишається лише питання про оцінку членів, що відкидаються. Є ще одна неабияка обставина: в одновимірному неперервному спектрі інфінітного в обох напрямках руху, що відповідає постановці задач розсіяння, значення енергії двократно вироджені, а тому виникає проблема вибору відповідного базису. Рівні ж енергії дискретного спектра не мають виродження в одновимірному випадку. Базис однозначно задається розв'язком відповідної стаціонарної задачі.

Є суттєвим, що розв'язки задачі про рух на інтервалі є тестовими прикладами під час налагодження програм реалізації різницевих схем, оскільки в обох випадках будуть фігурувати однакові межові умови. Частіше це будуть умови непроникності, хоча іноді зручно розглядати періодичні межові умови, які також мають певний фізичний смисл.

Таким чином, вступну частину другого розділу книги присвяtimo питанням дискретизації енергетичного спектра, які підготовляють перехід до більш широкої дискретизації координат і часу в сіткових методах, коли кінетичне рівняння розв'язується на підставі різницевих схем. Підкреслимо ще раз, що ці вступні задачі грають цілком самостійну роль у кінетиці.

Отже, почнемо з розгляду руху частинок на скінченному інтервалі $0 < x < L$ з межовими умовами непроникності

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

Якщо ніяких інших зовнішніх впливів немає, то дискретний базис утворюють добре відомі хвильові функції стаціонарних станів частинки у нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі:

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

Функція поширення має вигляд суми

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

Хвильова функція нестационарних станів у будь-який момент часу згідно з методом функцій поширення (див. параграф 1.5) визначається виразом

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

де c_n задаються початковими умовами – це є початковий вектор стану $\Psi(0)$ в енергетичному зображенні:

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

Нехай початкова хвильова функція, як неодноразово було раніше (причина такого вибору вже обговорювалась), має вигляд гауссіана

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

де область визначення, певна річ, обмежується інтервалом руху, який вважаємо досить широким, так що положення центра пакета b віддалене від меж настільки, що

$$b^2 \gg D_0. \quad (2.7)$$

Звернемо увагу на те, що в задачах з необмеженим рухом пакет звичайно стартував зліва від початку координат (у точці $-b$). Величина k_0 характеризує середню початкову швидкість пакета $v_0 = \hbar k_0 / m$, а D_0 є початковою дисперсією координат (усі величини, включаючи нормуючий множник, визначено з точністю до експоненційно малих членів типу $\exp(-b^2/2D_0)$).

Переходячи до енергетичного зображення, одержуємо в тому ж наближенні для початкового пакета вираз

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

Другим членом у дужках можна знехтувати у наближенні малої дисперсії енергії

$$k_0^2 D_0 \gg 1, \quad (2.9)$$

проте у деяких задачах його треба зберігати, наприклад у випадку пакета, що перебуває у спокої, з $k_0 = 0$ і

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

з якого почнемо конкретні приклади. Тоді в будь-який момент часу хвильова функція

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

приводить до такого ланцюжку формул для густини ймовірності координат у безрозмірних змінних:

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

де для безрозмірної ширини інтервалу $L / \sqrt{D_0}$ зберігаємо позначення L , а інші величини вводяться за правилами $R = \rho \sqrt{D_0}$; $X = x / \sqrt{D_0}$; $B = b / \sqrt{D_0}$; $T = \hbar t / 2mD_0$; $K_n = k_n \sqrt{D_0} = \pi n \sqrt{D_0} / L$, які вже зустрічалися.

Таким чином, усе підготовлено для чисельного моделювання процесу, що, як зрозуміло з постановки задач, полягає в розпливанні гауссового пакета. Обчислення сум I_1 та I_2 виконується паралельно; вони мають нескладну структуру, а тому для обчислень досить комп'ютера середньої швидкодії. Легко оцінити помилку, яка є припустимою при відкиданні членів, коли суми замінюються скінченними. У границі при $L \rightarrow \infty$ вони переходять в інтеграли та описують розпливання вільного гауссіана.

У даному випадку не стільки важливо заново досліджувати ефект розпливання, скільки опанувати самий метод дискретизації, а головне, підготувати тестовий приклад для роботи з різницевиими схемами.

Організуйте демонстрацію зображень, які будуть рухатись на екрані дисплея, оцініть точність моделювання розпливання у вільному русі методом дискретизації.

Зазначимо, що час розрахунку сум можна скоротити, якщо розташувати центр пакета в середині інтервалу, так що у сумах внески з парними n перетворюються на нуль.

Інший аспект – самостійна роль задач. Якщо початковий пакет задавати не в координатному, а в енергетичному зображенні, то можна вважати, що формула (2.10) задає початкові умови точно. Треба тільки уточнити нормування:

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

де нормуючий множник визначається відповідною сумою:

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

і в граничному випадку великих інтервалів переходить у вираз з формули (2.10). У іншому граничному випадку малих інтервалів (у порівнянні з L) істотним є тільки перший член у сумі, так що $A^{-1} \approx \sin(K_1 B) \exp(-K_1^2)$, а при локалізації пакета в центрі інтервалу $A \approx \exp(\pi^2 D_0 / L^2)$.

З урахуванням цієї зміни нормуючого множника розрахунки проводяться за формулами (2.12), які тепер описують загальнішу ситуацію. Фізичний зміст надається руху саме на скінченному інтервалі. Повчально простежити, змінюючи довжину інтервалу, тобто ставлячи чисельні експерименти при різних значеннях L , як від розпливання пакета, що має практично точну гауссову форму, переходимо до стійкого стаціонарного стану (основного) при синусоїдній формі пакета у випадку малих L (у всіх сумах залишається тільки перший член). Від квазінеперервного спектра, який моделює явища при необмеженому русі, поступово можна перейти до одного тільки стану дискретного спектра. Від розпаду до стабільності, від гауссової форми до синусоїдної. Від вільного руху, через поступове підсилення межових впливів, до істотно обмеженого (до квантового розмірного ефекту).

Другий приклад стосується моделювання переміщення пакета як цілого. Якщо в першому випадку покладали $k_0 = 0$, то тепер вважаємо, що величина k_0 є настільки великою, що виконується умова малої дисперсії енергії (2.9). Тоді в енергетичному зображенні початковому пакету (2.6) відповідає

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

а хвильова функція в будь-який момент часу в координатному просторі буде визначатися сумою типу

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

Тоді аналогічно (2.12) маємо для густини ймовірності координат співвідношення

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

де до введених раніше безрозмірних величин додається $K_0 = k_0 \sqrt{D_0}$. Щоб запобігти непорозумінню, нагадаємо, що k_0 стосується початкових умов, а номер стаціонарних станів n не приймає нульового значення.

Усе підготовлено до чисельного моделювання руху. Програмуйте, зіставляйте з точними виразами для вільного поширення гауссового пакета, оцінюючи точність дискретної апроксимації і готуючи тест для реалізації різницьових схем.

І знов переглядаємо трактування результатів, користуючись формальними обмеженнями для ілюстрації фізичних межових впливів: підбираючи відповідним чином початкові параметри, можна моделювати зіткнення пакета зі стінкою, роль якої грає права межа руху (найкраще в режимі слабкого розпливання пакета). Не зупиняючись на повторенні усіх порад під час аналогічного обчислювального експерименту, перейдемо до третього прикладу.

Нехай у центрі інтервалу перебуває δ -потенціал

$$U(x) = u \delta(x - L/2). \quad (2.18)$$

Для визначеності поки що будемо вважати, що $u > 0$. Дискретний базис (2.2) змінюється. Щоправда, стани з парними n залишаються такими ж (з'ясуйте, чим це викликано), а для інших розв'язуємо задачу на власні значення гамільтоніана частинки у випадку δ -бар'єра та межових умов непроникності (2.1). Це дає такі результати:

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x), \quad 0 < x < L/2;$$

$$\psi_n(x) = A \sin[k_n(L - x)], \quad L/2 < x < L, \text{ де рівні енергії знаходяться з рівняння}$$

$$k_n L = \pi(n + 1) - 2 \arctg(k_n / \varkappa), \quad n = 1, 3, \dots, \quad (2.19)$$

$\varkappa = m u / \hbar^2$, а нормуючий коефіцієнт визначається співвідношенням

$$A_n^{-2} = L/2 + \varkappa / (\varkappa^2 + k_n^2). \quad (2.20)$$

Для початкової хвильової функції типу (2.6) у наближенні широкого інтервалу (2.7) і великих енергій (2.9) у випадку початкового розташування пакета зліва від δ -потенціалу одержуємо в енергетичному зображенні

$$c_n = i(\pi D_0 / 2)^{1/4} A_n \exp[-i k_n b - D_0(k_n - k_0)^2]. \quad (2.21)$$

Для непарних n множник A_n задається формулою (2.20), а для парних згідно з (2.2) він дорівнює $A_n = \sqrt{2/L}$. Звідси для координатної хвильової функції в області $0 < x < L/2$ впливає вираз

$$\Psi(x, t) = i(\pi D_0 / 2)^{1/4} \sum_{n=1}^{\infty} A_n \exp[-itE_n / \hbar - ik_n b - D_0(k_n - k_0)^2] \sin(k_n x), \quad (2.22)$$

а в області $L/2 < x < L$ треба для непарних n замінити $\sin(k_n x)$ на $\sin[k_n(L - x)]$.

Остаточну відповідь записуємо для густини ймовірності координат у стандартному безрозмірному вигляді

$$\begin{aligned} R(X, T) &= (\pi/2)^{1/2} (I_1^2 + I_2^2); \\ I_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} \cos(P) F(K_n, X); \\ I_2 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sin(P) F(K_n, X); \\ P &= (K_n - K_0)[B + T(K_n + K_0)]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Для парних n $F(K_n, X) = 2L^{-1} \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin(K_n X)$, а для непарних n в області $0 < X < L/2$

$$F(K_n, X) = A_n^2 \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin(K_n X),$$

а в області $L/2 < X < L$

$$F(K_n, X) = A_n^2 \exp[-(K_n - K_0)^2] \sin[K_n(L - X)],$$

до того ж нормуючий коефіцієнт дорівнює

$A_n^2 = [L/2 + Q/(Q^2 + K_n^2)]^{-1}$, а рівняння для власних значень енергії у випадку непарних n записується у вигляді

$$K_n L = \pi(n+1) - 2 \arctg(K_n / Q). \quad (2.24)$$

До введених раніше змінних додається тільки одна – інтенсивність δ -потенціалу $Q = \mp \sqrt{D_0}$.

Таким чином, усі співвідношення підготовлено для проведення чисельного моделювання. У відсутності поля результати зводяться до одержаних у другому прикладі (трохи перебудована фаза P). Обчислювальна особливість наведеного прикладу полягає в тому, що при розрахунку сум непарні внески вимагають попереднього знаходження коренів рівняння (2.24), що можна досить швидко виконати за допомогою методу ітерацій, проте загальний розрахунковий час дещо збільшується.

Фізичний смисл – моделювання процесу розсіяння гауссова пакета на δ -бар'єрі. Стислий сценарій картини, що повинна демонструватися на екрані дисплею. Гауссіан стартує в лівій половині інтервалу руху (можна вибрати $B = L/4$) у напрямку потенціалу. По мірі наближення до середини інтервалу, при зіткненні хвосту гауссіана з розсіювачем,

виникають відбиті хвилі, які інтерферують з падаючими, з'являються характерні сплески хвиль та повільне наростання хвилі, що пройшла. Потім пакет виходить з зони зіткнення з потенціалом у вигляді двох гауссіанів, що рухаються в різних напрямках, пакет розбивається на дві незалежні частини – хвилі, що відбиті, та хвилі що пройшли (які, проте, належать, до єдиної хвильової функції частинки). Далі можна простежити за рухом цих хвиль до їх зіткнення з межами руху. Потім можна спостерігати "напад" одразу двох пакетів на розсіювач або, усунувши потенціал, зіткнення двох пакетів.

Отже, наведений приклад ілюструє одразу декілька кінетичних явищ: розпливання (у даному випадку це другорядний ефект); поширення окремого пакета (вільне переміщення до зіткнення з потенціалом); розсіяння – поява хвиль, що відбиті та пройшли, інтерференція падаючих та відбитих хвиль, перетворення початкового пакета на два пакети; зіткнення двох пакетів.

Останнє явище моделюємо так: коли пакети після розсіяння віддалені від середини інтервалу руху і зайняті "штурмом" меж, потенціал знімаємо зі сцени, вважаючи $Q = 0$.

Звернемо увагу ще на один важливий аспект. У задачах із застосуванням різницевих схем цей приклад буде тестовим для вузельної апроксимації короткодіючого потенціалу.

При моделюванні невпинно обчислюйте коефіцієнти відбивання та проходження, інтегруючи $R(X, T)$ за областями ліворуч і праворуч від середини інтервалу руху, а також контролюйте виконання умови нормування. Установіть фазові затримки пакетів і зіставте їх з одержаними за допомогою апроксимації розкладу фаз (1.34) та (1.35).

Завершуючи стислий огляд застосувань методу дискретизації введенням штучних межових умов, пропонуємо низку задач, які продовжують цю тему.

По-перше, узагальніть всі одержані для δ -бар'єра результати на випадок δ -ями, не забуваючи про існування зв'язаного стану. Дослідіть також особливий випадок впливу поля на розпливання пакета, коли центр його збігається з місцем локалізації потенціалу і $k_0 = 0$ (гауссіан "сидить" на δ -ямі).

По-друге, дослідіть тим же методом розсіяння на прямокутних потенціалах, розв'язавши спочатку відповідну задачу про стаціонарні стани на інтервалі.

По-третє, дослідіть резонансне розсіяння гауссіана на двох δ -потенціалах одного або різних знаків – випадок двобічного

потенціального уловлювача.

По-четверте, спочатку розв'яжіть задачу про стаціонарні стани для руху на інтервалі у випадку, коли δ -потенціал знаходиться не в середині інтервалу, а поблизу правої (для визначеності) межі. При цьому виникає нова резонансна ситуація, що відповідає однобічному уловлювачу. Розгляньте задачу про відбивання і захоплення гауссіана таким уловлювачем, а також про розпад стану, попередньо локалізованого в однобічному уловлювачі.

По-п'яте, дослідіть вільний рух гауссіана при періодичних межових умовах.

2.2. Метод різницевих схем

Найзагальнішими методами розв'язання кінетичних рівнянь є чисельні, між якими самим універсальним можна вважати метод різницевих схем.

Стисло накреслимо схему дослідження кінетичних задач на підставі цього методу. Спочатку буде розглядатися одновимірний рух частинки з квадратичним законом дисперсії в потенціальному полі. Матеріал попереднього параграфа вже підготував ґрунт для розуміння загального способу дискретизації. Першим кроком є перехід від нестационарного рівняння Шредінґера – диференціального рівняння у частинних похідних – до деякої системи різницевих рівнянь на підставі введення координатно-часової сітки. Інтервал руху $[0, L]$ розбивається на малі відрізки довжиною Δx , а часовий проміжок $[0, t]$ – на малі відтинки часу Δt . При цьому частинні похідні замінюються скінченними різницями.

Щодо межових умов, то вибираємо умови непроникності, тобто будемо вважати, що хвильова функція перетворюється на нуль на кінцях інтервалу руху (можливим є, звичайно, й інший варіант межових умов). Це не тільки дає певні переваги при реалізації методу різницевих схем, а й дозволяє надати межовим умовам безпосереднього фізичного сенсу при дослідженні межових впливів та розмірних ефектів.

Так вибирається сцена, на якій мають відбуватися події, – кінетичний полігон, лічильний інтервал.

Наступне питання – опис зовнішніх впливів, крім межових умов. Зовнішні впливи будуть моделюватися потенціальними полями, які

звичайно локалізуються на певній ділянці координатного інтервалу та мають довільну форму, сталими і змінними, дійсними і комплексними.

Нарешті, необхідно задати початкові умови. Найчастіше, з огляду на вже з'ясовані обставини, початкова хвильова функція буде вибиратися у вигляді гауссова пакета (гауссіана).

Не ставлячи перед собою задачу викладання основ методу різницьових схем (на цю тему є багато гарних книг математичного плану за теорією та застосуваннями [40-44]), перейдемо до безпосереднього застосування методу різницьових схем для розв'язання хвильового рівняння Шредінгера

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \hat{H} \Psi / \hbar \quad (2.25)$$

з початковою умовою $\Psi(0)$ при $t = 0$.

Загальна ідея інтегрування цього рівняння першого порядку за часом полягає в переході від певного моменту часу t до $t + \Delta t$, коли у відповідності з (2.25)

$$\Psi(t + \Delta t) = \Psi(t) - i \Delta t \hat{H} \Psi(t) / \hbar + O[(\Delta t)^2], \quad (2.26)$$

і далі така процедура повторюється, починаючи з $t = 0$. Ітерації припиняються на деякому проміжному значенні часу, якщо ми стежимо за всіма стадіями процесу, або одразу доводяться до кінцевого моменту часу, якщо нас цікавить тільки остаточний результат.

Виявляється, що на практиці доцільніше записати співвідношення (2.26) у тому ж наближенні в дещо іншому вигляді, вводячи певну величину w (загально кажучи, комплексну), яка називається коефіцієнтом неявності схеми:

$$\Psi(t + \Delta t) + w i \Delta t \hat{H} \Psi(t + \Delta t) / \hbar = \Psi(t) - (1 - w) i \Delta t \hat{H} \Psi(t) / \hbar + O[(\Delta t)^2] \quad (2.27)$$

Якщо рівняння (2.25) дозволяє одразу знайти $\Psi(t + \Delta t)$ за відомою $\Psi(t)$ (явний вираз), то з рівняння (2.27) безпосередньо знайти $\Psi(t + \Delta t)$ неможливо (неявний вираз). Це найясніше видно при переході від загальних операторних виразів з гамільтоніаном $\hat{H}$ до конкретного зображення, координатного за звичаєм.

Введемо нумерацію моментів часу (шарів)

$$t_n = n \Delta t; \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (2.28)$$

та перепишемо рівняння (2.27) у вигляді двошаруватої схеми з верхніми часовими індексами

$$\Psi^{n+1} + w i \Delta t \hat{H} \Psi^{n+1} / \hbar = \Psi^n - (1 - w) i \Delta t \hat{H} \Psi^n / \hbar. \quad (2.29)$$

У координатному зображенні гамільтоніан системи, яку ми розглядаємо, $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m + \hat{U}(x, t)$ зводиться до диференціального оператора

$$\hat{H} = -(\hbar^2 / 2m) \partial^2 / \partial x^2 + U(x, t). \quad (2.30)$$

Другу похідну замінюємо скінченнорізницевою апроксимацією

$$\partial^2 \Psi(x) / \partial x^2 = [\Psi(x + \Delta x) - 2\Psi(x) + \Psi(x - \Delta x)] / (\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^2]. \quad (2.31)$$

Користуючись нижніми індексами для нумерації координатних вузлів рівномірної сітки $x_j = j \Delta x$; $j = 0, 1, \dots, I$, (2.32)

записуємо рівняння (2.29) у вигляді

$$\begin{aligned} & \Psi_j^{n+1} + i w (\Delta t / \hbar) [-(\hbar^2 / 2m) (\Psi_{j+1}^{n+1} - 2\Psi_j^{n+1} + \Psi_{j-1}^{n+1}) / (\Delta x)^2 + U_j^{n+1} \Psi_j^{n+1}] = \\ & = \Psi_j^n + i (1 - w) (\Delta t / \hbar) [-(\hbar^2 / 2m) (\Psi_{j+1}^n - 2\Psi_j^n + \Psi_{j-1}^n) / (\Delta x)^2 + U_j^n \Psi_j^n]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Таким чином, приходимо до двохшаруватої трьохточкової неявної різницевої схеми, в якій невідомі величини Ψ_j^{n+1} задовольняють систему лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею. Ця система ефективно розв'язується методом так званого проганяння. Якщо додержуватись позначень Ріхтмайера та Мортон [40] для системи рівнянь

$$-A_j \Psi_{j+1}^{n+1} + B_j \Psi_j^{n+1} - C_j \Psi_{j-1}^{n+1} = D_j, \quad (2.34)$$

то коефіцієнти згідно з (2.33) дорівнюють $A_j = i w \hbar \Delta t / 2m (\Delta x)^2$ (не залежить від j);

$B_j = 1 + 2i w \hbar \Delta t / 2m (\Delta x)^2 + i w \Delta t U_j / \hbar$; $C_j = i w \hbar \Delta t / 2m (\Delta x)^2$ (збігається з A_j). Для правої частини рівнянь (2.34) маємо формули

$$\begin{aligned} D_j = & \Psi_j^n [1 - 2i(1 - w) \hbar \Delta t / 2m (\Delta x)^2 - i(1 - w) \Delta t U_j / \hbar + \\ & + i(1 - w) \hbar \Delta t (\Psi_{j+1}^n + \Psi_{j-1}^n) / 2m (\Delta x)^2]. \end{aligned}$$

Усі ці величини записуються компактніше через безрозмірні характеристики: часовий крок $G = \hbar \Delta t / 2m (\Delta x)^2$ і потенціал

$$V_j = 2m L^2 U_j / \hbar^2 = 2m (\Delta x)^2 I^2 U_j / \hbar^2, \quad (2.35)$$

де враховано, що $L = I \Delta x$. Коефіцієнти приймають вигляд

$$A_j = C_j = i w G; \quad B_j = 1 + 2 i w G + i w G V_j / I^2;$$

$$D_j = \Psi_j^n [1 - 2i(1-w)G - i(1-w)G V_j / I^2] + i(1-w)G (\Psi_{j+1}^n + \Psi_{j-1}^n). \quad (2.36)$$

Метод проганання у випадку граничних умов $\Psi_0^{n+1} = \Psi_I^{n+1} = 0$ полягає в послідовному обчислюванні допоміжних коефіцієнтів на підставі рекурентних співвідношень

$$E_j = A_j / (B_j - C_j E_{j-1}); F_j = (D_j + C_j F_{j-1}) / (B_j - C_j E_{j-1}), \quad (2.37)$$

коли індекс j збільшується від 1 до $I - 1$ (пряме проганання), а потім – у розрахунку невідомих значень хвильової функції за правилом зворотного проганання

$$\Psi_j^{n+1} = E_j \Psi_{j+1}^{n+1} + F_j, \quad (2.38)$$

коли індекс j зменшується від $I - 1$ до 1.

На цьому закінчується підготовчий етап. Далі треба переходити до програмування. Зробимо ще тільки один крок, вводючи позначення, близькіші до стандартних мов програмування, а також стисло окресливши схему розрахунків. Після завдання усіх параметрів, включаючи w , G та I , а також межових значень відповідних величин, визначаємо допоміжні коефіцієнти $A = iwG$; $A_1 = i(1-w)G$; $A_2 = 1 - 2i(1-w)G$; $A_3 = i(1-w)G / I^2$; $B_2 = 1 + 2iwG$; $B_3 = iwG / I^2$. Потім для J від 1 до $I - 1$ задаємо потенціал $V(J)$ і початкову хвильову функцію $Y(J)$ (вводиться позначення $Y \equiv \Psi$), а також водночас обчислюємо коефіцієнти $B(J) = B_2 + B_3 V(J)$. Далі для кожного переходу до нового часового шару йде пряме проганання зі змінюванням J від 1 до $I - 1$:

$$D(J) = Y(J)[A_2 - A_3 V(J)] + A_1[Y(J-1) + Y(J+1)];$$

$$B_1 = B(J) - A E(J-1); E(J) = A / B_1;$$

$$F(J) = [D(J) + A F(J-1)] / B_1,$$

та зворотне проганання зі зміною J від $I - 1$ до 1: $Y(J) = E(J)Y(J+1) + F(J)$.

Після потрібної кількості ітерацій приходимо до останнього етапу – виведення результатів на друк або на екран дисплея у вигляді графічного зображення квадрату модуля хвильової функції на тлі сценічних деталей (потенціал, межі). Ще раз підкреслимо, що опис розрахунків наведено дуже схематично, щоб не обмежувати читача жорсткими рамками готової програми і вибором мови програмування. Важливо дати можливість самостійно розробити програму, оскільки для розуміння суті розрахунків це значно корисніше, ніж розбиратися

у чужій. Крім того, програму довелося б супроводжувати такими докладними коментаріями, що її розпечатка зайняла б надто багато місця. Алгоритм же описано досить докладно, а за математичними деталями обґрунтування належить звернутися до вказаної літератури.

У програму обов'язково потрібно ввести обчислення нормувального інтеграла, порівнюючи його значення наприкінці спостереження з початковим (досить обчислити просто суму квадратів модулів хвильової функції на лічильному інтервалі).

Основні операції при переході з одного часового шару на інший зосереджені у співвідношеннях прогання (2.37) і (2.38). Для досягнення високої точності треба інтервал руху роздрібнювати на досить велике число кроків ($I \gtrsim 1000$), те ж саме стосується й часового проміжка. Аналіз показує (див., наприклад, [4], с. 296), що випадок симетричної неявної схеми типу Кранка–Ніколсона з $w = 1/2$ відповідає абсолютній стійкості (при будь-яких співвідношеннях між малими величинами кроків Δx і Δt) та забезпечує високу точність.

Щодо апіорних оцінок точності типу $O[(\Delta x)^2]$, то вони дають лише найзагальніші уявлення про відносну точність тих або інших різницевих схем. Практично, як уже відмічалось, треба користатися на етапі налагодження програми зіставленням з тестовими прикладами як для контролю загальної правильності розрахунку, так і для детальної оцінки точності. Треба порівнювати результати, що виконані при подвоєнні числа кроків, а також вести рахунок з подвійною точністю. І ще: бажано починати налагодження з невеликих значень параметрів лічильного інтервалу (брати невеликі $I \sim 100$ та ін.), що дозволить помітити небезпечні тенденції переповнень, занулень, тощо.

Слід підкреслити, що існує багато варіантів різницевих схем для нестационарного рівняння Шредінгера (явні, багатошарові, тощо).

Крім того, реалізація прогання може бути різною (див., наприклад, [41, с. 35, 597]), включаючи простіший варіант прогання лише в одному напрямку. Усе залежить від типу схеми та межових умов.

Треба мати на увазі, що в літературі найчастіше обмірковуються різницеві схеми для рівняння теплопровідності (див., наприклад, варіанти схем у [40, с. 192]), а аналогічне рівняння Шредінгера користується значно меншою увагою і часто дається з помилками.

2.3. Обчислювальні експерименти на кінетичному полігоні

Підготувавши програму розрахунків, можна перейти до конкретних комп'ютерних експериментів на кінетичному полігоні – інтервалі руху, що досліджувався в попередньому параграфі. Почнемо з простих прикладів, які дозволяють налагодити програму, вибрати оптимальні для даного комп'ютера параметри, тощо.

Перший експеримент присвячено стаціонарним станам. Для інтервалу, що розглядається, з межовими умовами непроникності стаціонарні стани частинки описуються хвильовими функціями (2.2). За початкову умову вибираємо хвильову функцію основного стану, що в зручних для програмування позначеннях і без нормуючого множника дає

$$Y_0(J) = \sin(\pi J / I), \quad (2.39)$$

і спостерігаємо за її змінюванням з плином часу. При цьому повинен залежати від часу тільки фазовий множник, оскільки для стаціонарних станів $\Psi(x, t) = \exp(-itE / \hbar)\Psi(x, 0)$, що в безрозмірних величинах (2.35) з урахуванням (2.28) приводить до точного тестового розв'язку $Y(J) = \exp(-i\pi^2 N G / I^2) \sin(\pi J / I)$. Отже, з'являється можливість, по-перше, слідкувати за зміною фази. Тестовий приклад дозволяє оцінити точність обчислень і вибрати оптимальні параметри. Простежте, як впливає на точність збільшення кількості координатних кроків (від $I=1000$ можна перейти до $I=2000$, тощо) і зміна коефіцієнта неявності w . Переконайтесь, що при $w < 0,5$ настає різка нестійкість, і подивіться, що буде при $w > 0,5$, зіставивши зі значенням $w = 0,5$, яке рекомендується. Далі експериментально дослідіть вплив уявної частини w на точність розрахунків. Потім варіюйте часовий крок G і час спостереження N (кількість кроків за часом). Нарешті, розгляньте збуджені стаціонарні стани (2.2) як початкові умови, і установіть, як впливає на точність розрахунків ступінь енергетичного збудження і збільшення числа вузлів хвильової функції.

Експеримент можна розширити, вибираючи інші приклади стаціонарних станів, які розв'язуються точно. Так, розглядаючи гармонічний осцилятор, вводимо у гру відповідний потенціал, правда, обмежений вибраним інтервалом руху, так що необхідно враховувати вплив цього обмеження.

Другий експеримент – розпливання хвильових пакетів. За початкову хвильову функцію вибираємо гауссовий пакет з дисперсією координат

D_0 (у нових безрозмірних позначеннях їй буде відповідати мала величина $D = D_0 / L^2 \ll 1$), який розташований на середині інтервалу, подалі від небажаних у даному випадку межових впливів:

$$Y(J) = \exp [-(J - I/2)^2 / 4DI^2]. \quad (2.40)$$

Тестові приклади заготовлено при дослідженні вільного розпливання (1.86) і розпливання на інтервалі (2.12). У даному чисельному експерименті можна приділити головну увагу оптимальному вибору часового кроку G , досліджуючи процес розпливання аж до збільшення дисперсії координат вдвоє, що буде вимагати DI^2 / G ітерацій за часом. Це впливає з закону розпливання (у безрозмірних позначеннях, які прийнято у попередньому параграфі)

$$D(N) = D [1 + (NG / DI^2)^2]. \quad (2.41)$$

Наприклад, якщо $I = 1000$, $D = 0,0025$ і $G = 2$, то час розпливання відповідає $N = 1250$.

Для тестування важливо, що при розпливанні змінюється не тільки модуль хвильової функції, а й фаза. Налагодивши програму на прикладі гауссіана, можна перейти до спостережень за іншими пакетами. Конкретні типи хвильових функцій наведено у параграфі 1.6 (див. також подвійний гауссіан у 1.7).

Третій експеримент є розвитком попереднього та враховує рух центра пакета, який визначається новим 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 що маємо можливість спостерігати за переміщенням пакета по порожній поки що сцені інтервалу руху, порівнюючи з відповідними тестовими прикладами. Стартуючи в середині лічильного інтервалу, пакет дійде до межі руху за час $N = I^2 / 4K_0G$. Щоб при цьому він слабо розпливався, потрібно згідно з (2.41) накласти на новий параметр обмеження

$$4K_0D > 1. \quad (2.43)$$

Є також обмеження і з боку великих значень хвильового числа у зв'язку з дискретністю координатного простору. Мінімальній довжині хвилі відповідає максимальне хвильове число, так що для прояву хвильових, фазових властивостей необхідним є виконання нерівності

$$K_0 / I < \pi. \quad (2.44)$$

Даний експеримент також переслідує допоміжну мету налагодити

програму і підібрати оптимальні параметри, хоча, звичайно, має й самостійне значення, демонструючи ефект вільного переміщення пакета із збереженням його форми, а також ефект зіткнення зі стінкою.

Знов у ролі узагальнень пропонується розглянути початкові пакети найрізноманітнішої форми як у вільному переміщенні, так і при зіткненні з непроникною межею.

Четвертий експеримент – зіткнення двох однакових гауссіанів, які рухаються назустріч один одному симетрично відносно середини інтервалу:

$$Y_0(J) = \exp[iK_0(J - I/4)/I - (J - I/4)^2/4DI^2] + \exp[-iK_0(J - 3I/4)/I - (J - 3I/4)^2/4DI^2]. \quad (2.45)$$

Відповідний тестовий приклад див. у параграфі 1.8. Можна також розглянути випадок різниці двох гауссіанів. За експериментальні варіанти можна вибрати інші різниці фаз пакетів, що стартують, а також різні дисперсії та швидкості переміщення. Одним словом, даний експеримент є різноманітним щодо можливостей маневрування. Постеживши за зіткненням і переконавшись у тому, що гауссіани після зіткнення залишаються незмінними ("виходять сухими з води"), продовжуємо спостереження за зіткненням гауссіанів з межами, коли вони також зберігають свій профіль ("як об стінку горох"). Потім можна знов стежити за "співударенням" гауссіанів, тощо.

Змінивши знак перед K_0 у (2.45), одержуємо па-де-де: вихід партнерів-гауссіанів (антре), сольні варіації при зіткненнях зі стінками (адажіо) і взаємодія-співудар (кода).

Вибираючи інші стартові форми хвильових функцій, приходимо до нових варіантів експерименту. Подробиці ж кінетики обмірковувались у параграфі 1.8.

П'ятий експеримент містить зовсім новий елемент – вузлову модель короткодійного потенціалу. Нехай гауссіан стартує ліворуч від середини інтервалу руху з центром пакета у вузлі J_0 :

$$Y_0(J) = \exp[iK_0(J - J_0)/I - (J - J_0)^2/4DI^2]. \quad (2.46)$$

На сцені з'являється нова дійова особа – представник зовнішніх впливів – короткодійний потенціал, що моделюється одновузловим:

$$V(J) = 0, J \neq I/2; V(J) = V_0, J = I/2. \quad (2.47)$$

Величина V_0 може бути як додатною, так і від'ємною. Моделюється розсіяння на δ -потенціалі. Постановка задачі відповідає звичайній ситуації розсіяння. Відповідні результати для розсіяння гауссіана на δ -потенціалах див. у параграфах 1.10 і 2.1. Мета експерименту –

встановити, чи у змозі вузлова модель передати усі тонкощі розсіювання на δ -потенціалі, а якщо так, то які співвідношення існують між їх параметрами (величиною u для потенціалу $U(x) = u\delta(x)$ і V_0 у (2.47)). Якщо одного вузла мало, можна додати ще. Різновиди експерименту – різні початкові профілі хвильових функцій.

Шостий експеримент – розсіювання гауссова пакета на прямокутному потенціалі. Пакет задається формулою (2.46), а потенціал визначається виразом

$$V(J) = 0, \quad J < J_1 \text{ та } J > J_2; \quad V(J) = V_0, \quad J_1 \leq J \leq J_2. \quad (2.48)$$

Знов тестовими прикладами можуть бути на етапі налагодження програми результати параграфів 1.10 та 1.11, проте після налагодження маємо протилежну ситуацію: розрахунки на підставі різницевих схем будуть тестовими прикладами для оцінки точності апроксимацій з указаних параграфів (фазова, квадратурна, резонансна).

Як у свій час було з'ясовано, задача має багато варіантів, ілюструє різноманітні кінетичні явища. Вперше результати чисельного моделювання розсіювання гауссових пакетів на прямокутних потенціалах було опубліковано в роботі [45], що супроводжується серією малюнків-кадрів із зображенням характерних стадій процесу. У ті часи це справляло дуже сильне враження. Тепер такі розрахунки та демонстрації доступні усе ширшим колам вивчаючих квантову теорію завдяки появі великої кількості швидкодіючих комп'ютерів, але й нині вони захоплюють уяву. Правда, саме моделювання фактично є можливим і без застосування різницевих схем за допомогою досить простих апроксимацій, розглянутих у параграфах 1.10 та 1.11.

Змінюючи величину потенціалу та його ширину, можна спостерігати за переходом від сильної прозорості до слабкої, досліджувати резонансні ефекти, включаючи формування двогорбих відбитих пакетів і явище захоплення частини пакета областю дії потенціалу, тунелювання і над'ямне відбивання, тощо. Зрозуміло, необхідним є ретельний вибір основних параметрів різницевої схеми, фізичних характеристик потенціалу і початкової хвильової функції. У роботі [45] можна знайти більш докладне обміркування цих питань. Один з варіантів такого вибору в перерахунку на наші позначення є таким: параметри різницевої схеми: $I = 1000$; $w = 0,5$; $G = 2$; параметри початкового пакета: $J_0 = 250$; $D = 1,25 \cdot 10^{-3}$; $K_0 = 50\pi$; параметри потенціалу: $V_0 = 2K_0^2$; $J_2 - J_1 = 64$. (2.49)

Задача про розсіяння гауссових пакетів на прямокутних потенціалах має не тільки важливе методичне значення, демонструючи різноманітні кінетичні ефекти і можливості методу різницевих схем. Вона, як уже визначалося, має безпосередній практичний фізичний сенс у випадку плоскошаруватих середовищ, а отже, і застосовне значення.

Як завжди, початковий пакет може бути обраним у різних спосіб.

Сьодмий експеримент – моделювання розсіяння на різних поодиноких локалізованих потенціалах, серед яких можна указати потенціальний бар'єр Еккарта

$$V(J) = V_0 \operatorname{ch}^{-2}[(J - I/2)/AI], \quad (2.50)$$

потенціал гауссової форми

$$V(J) = V_0 \exp[-(J - I/2)^2 / A^2 I^2], \quad (2.51)$$

а також інші аналогічні потенціали плавної форми, параметри яких повинні задовольняти певним умовам. Зокрема, їх ширина повинна бути малою в порівнянні з шириною інтервалу руху і в той же час містити досить багато координатних кроків, щоб схема була у змозі передати профіль потенціалу. Наприклад, для наведених вище моделей можна вибрати $AI = 25$.

Восьмий експеримент – розпад і резонанс у двобічних потенціальних уловлювачах. Моделюється процес резонансного розсіяння з тимчасовим захопленням частини пакета уловлювачем, подібний до розглянутого для прямокутних бар'єрів в 1.11, і процес розпаду квазістаціонарного стану, який спочатку був стаціонарним для частинки, запертої в уловлювачі. Експериментальна крива передає залежність прозорості уловлювача від середньої енергії пакета, що розсіюється, а в постановці задачі на розпад – залежність від часу ймовірності виявлення частинки усередині уловлювача (імовірність нерозпаду). Потенціал уловлювачів можна побудувати з двох слабкопроникних прямокутних бар'єрів, що знаходяться на такій відстані один від одного, щоб підбар'єрні квазірівні були досить чітко виділеними на шкалі енергій. У вигляді ще простішого "будівельного матеріалу" можна запропонувати вузлові моделі (два вузлових потенціала одного чи різних знаків). Розгляньте також потенціали-уловлювачі у формі двогорбих гауссіанів, аналогічних за профілем пакетам у параграфі 1.7.

Одне слово, у даному експерименті ми зустрічаємося і з новою фізичною ситуацією (розпад), і з новими потенціальними формами – двобічними уловлювачами.

Дев'ятий експеримент є аналогічним попередньому, але відноситься до напівфінитного, напівобмеженого руху (розпад і резонанс в однобічних уловлювачах). Потенціал однобічного уловлювача формується зі слабкопроникного прямокутного бар'єра, розташованого досить близько від правої (для визначеності) межі інтервалу руху, щоб досягнути гарного розрізнення підбар'єрних квазірівнів на енергетичній шкалі. Можна також використати вузлову модель потенціалу відштовхування. Постановка задачі розсіяння (відбивання) така. Гауссів пакет рухається до уловлювача. Поза резонансом виникає сильне відбивання від бар'єра, так що в уловлювач проникає лише невелика частка пакета, а в умовах резонансу значна частина пакета вільно просмоктується усередину уловлювача і на деякий час захоплюється ним.

Постановка задачі розпаду: початковий пакет відповідає стаціонарному стану частинки, запертої в уловлювачі, тобто бар'єр непрозорий, має нескінченну висоту, а потім раптово висота бар'єра стає скінченною. Початковий стан тепер уже не є стаціонарним, пакет розпливається, "витікаючи" з уловлювача.

Розгляньте резонансне відбивання і розпад поблизу різних квазірівнів. Замірте час розпаду і ширину резонансу.

Десятий експеримент – моделювання поглинання і випромінювання частинок за допомогою комплексних потенціалів. В умовах шостого або сьомого експериментів дослідіть випадок, коли потенціальна енергія описується комплексною функцією (різницева схема це припускає). Змінюючи знак уявної частини потенціалу, експериментально встановіть характер ефекту. Вимірюючи коефіцієнти відбивання R і проходження T , знайдіть зміну нормування хвильової функції і за нею коефіцієнти поглинання $1 - R - T$ (або випромінювання $R + T - 1$).

Дослідіть вплив уявної частини потенціалу на всі кінетичні ефекти при розсіянні. Розгляньте випадок, коли дійсна частина потенціалу дорівнює нулю.

Одинадцятий експеримент відноситься до явищ сильної нестационарності, коли зовнішні впливи виявляються змінними. Потенціал явно залежить від часу. Це накладає певні обмеження на різницеву схему. Зокрема, зміна потенціалу повинна бути досить плавною, щоб дискретні кроки в часі були спроможні це уловлювати. Наприклад, може змінюватися висота бар'єра і його ширина, потенціал може зміщатись як ціле, вібрувати, змінювати форму; поле може включатись і виключатись, поступово і раптово, тощо.

Дванадцятий експеримент – розсіяння на солітонах. Це питання заслуговує спеціальної уваги і буде розглянуто в наступному параграфі разом з іншими аспектами зв'язку квантової кінетики з солітонікою. Деякі задачі з аналітичним розв'язком уже було порушено в параграфі 1.12.

Додамо декілька загальних зауважень. Бажано в процесі моделювання мати картину в імпульсному просторі, що реалізується розрахунком фур'є-образу хвильової функції, а також супроводжувати експерименти обчисленням середніх значень кінетичної і потенціальної енергій і стежити за збереженням повної енергії (у випадках змінних полів – за її зміною). Іноді повчально перейти до межових умов періодичності, змінивши відповідним чином проганання в різницевій схемі. Крім локалізованих потенціалів, можна розглянути і потенціали типу сходинок, моделюючи відбивання на межі двох середовищ, включаючи резонансне, якщо у середовищі з великим значенням потенціалу є додатковий прошарок потенціалу притягнення. У першому експерименті можна моделювати нестационарні стани, взявши суперпозицію кількох стаціонарних станів. Слід пам'ятати, що розглянуті одновимірні задачі є фрагментами тривимірних рухів у плоскошаруватих середовищах (результат розділення змінних). Розрахунки на підставі різницевої схем переносяться й на істотно тривимірні випадки, проте обчислення займають надто багато часу навіть на швидкодіючих ЕОМ. У експериментах не порушувались задачі з нелокальними потенціалами, а також з моделюванням випадкових впливів. Зазначимо, що в операторно-різницевої схем кроки за часом можуть сполучатись з точним координатним розв'язком.

2.4. Квантова кінетика і солітонна фізика

Відзначаючи зв'язки нерелятивістської квантової теорії з солітонною фізикою, можна насамперед указати на нелінійне рівняння Шредінгера. З одного боку, воно є безпосереднім узагальненням одного з основних рівнянь елементарної квантової кінетики, визначаючи одновимірний рух квазічастинки, що має властивість самодії, потенціальна енергія якої цілком визначається її станом (хвильовою функцією). З іншого боку, це рівняння описує хвильові явища в різних нелінійних середовищах [35-37], за рідким винятком безпосередньо не зв'язаних з квантовою фізикою. Таким чином, це рівняння є одним з мостів, що з'єднують тематику квантової

кінетики з солітонікою. Другий міст – солітонні розв'язки рівняння Кортевега–де Фріза (КдФ) і метод оберненої задачі розсіяння (ОЗР). Нелінійне еволюційне рівняння КдФ, що не має формально прямого відношення до квантової теорії, може розв'язуватись за допомогою квантовомеханічних методів (ОЗР). Хоча останні не є кінетичними, а зв'язані зі стаціонарною теорією розсіяння, проте, по-перше, ми маємо зв'язок кінетики взагалі (КдФ) з квантовою теорією (ОЗР), а по-друге, стаціонарна теорія розсіяння є певною апроксимацією нестаціонарної теорії. Надалі, можна розглядати розв'язки рівняння КдФ у ролі сталих потенціалів у нестаціонарній теорії розсіяння (зокрема, так виникає задача про розсіяння гауссіана на солітонах). Нарешті, можлива постановка задачі подвійної кінетики, коли час рівняння КдФ стає реальним часом і для квантової задачі, а розв'язок рівняння КдФ є змінним потенціалом у нестаціонарній теорії розсіяння. Зокрема, виникає задача розсіяння на солітонах, що рухаються. Ступінь складності задачі подвійної кінетики залежить від початкових умов для рівняння КдФ: якщо вони відповідають суто солітонному розв'язку, то тим самим половина задачі вже розв'язана, тому що залежність потенціалу від часу буде визначатися досить простими точними формулами солітонних розв'язків рівняння КдФ, хоча й досить складними для аналітичного розв'язання кінетичної задачі нестаціонарного розсіяння; якщо ж початкові умови не є солітонними, то необхідно, розв'язавши рівняння КдФ і "вставивши" відповідь у рівняння Шредінгера (нестационарне), водночас розв'язувати останнє. Найефективнішим способом розв'язування в обох випадках є чисельні методи. Зрозуміло, можливим є і випадок самоузгодженого розв'язку, коли поведінка квантової частинки визначає властивості нелінійного еволюційного рівняння (зі змінними коефіцієнтами). Інших питань типу квантування нелінійних еволюційних рівнянь та інстантонного напрямку торкатися не будемо.

Переходячи до конкретних задач, спочатку звернемось до солітонних розв'язків рівняння КдФ. У теорії солітонів прийнята стандартна форма цього рівняння у вигляді

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (2.52)$$

де нижні індекси означають відповідні похідні, а u є дійсним. Серед розв'язків, що спадають на нескінченності, є суто солітонні, що визначаються загальною точною формулою для N солітонів [37], яку ми не будемо виписувати, а наведемо результати для одного та двох солітонів. Односолітонний розв'язок має вигляд

$$u(x, t) = -2\alpha^2 \operatorname{sech}^2[\alpha(x - 4\alpha^2 t + \delta)]. \quad (2.53)$$

Амплітуда та ширина хвильового сплеску характерної форми (солітона) задаються параметром α . Він же визначає сталу швидкість руху солітона, а другий параметр δ (фаза) показує початкове положення солітона. Цей розв'язок рівняння КдФ відповідає потенціалу Еккарта (1.160) з безвідбитковим співвідношенням параметрів (1.162) у відповідних безрозмірних змінних.

Двосолітонний розв'язок рівняння КдФ (2.52) можна компактно записати [35] у вигляді

$$u(x, t) = -2(\alpha_2^2 - \alpha_1^2)(\alpha_2^2 \operatorname{cosech}^2 \gamma_2 + \alpha_1^2 \operatorname{sech}^2 \gamma_1)(\alpha_2 \operatorname{cth} \gamma_2 - \alpha_1 \operatorname{th} \gamma_1)^{-2}, \quad (2.54)$$

де $\gamma_l = \alpha_l x - 4\alpha_l^3 t + \delta_l$; $l = 1, 2$; $\alpha_2 > \alpha_1$. Якщо $\alpha_2 = 2\alpha_1$ і $\delta_1 = \delta_2 = 0$, то два солітони також будуть при $t = 0$ зливатися в єдиний хвильовий імпульс, що відповідає потенціалу Еккарта з безвідбитковими параметрами:

$$u(x, 0) = -6\alpha_1^2 \operatorname{sech}^2(\alpha_1 x). \quad (2.55)$$

Зауважимо також, що в окремому випадку $\alpha_2 = 2$; $\alpha_1 = 1$; $\delta_1 = \delta_2 = 0$ загальний вираз (2.54) переходить у формулу, яка часто цитується:

$$u(x, t) = -12[3 + \operatorname{ch}(4x - 64t) + 4\operatorname{ch}(2x - 8t)][\operatorname{ch}(3x - 36t) + 3\operatorname{ch}(x - 28t)]^{-2}. \quad (2.56)$$

Суто солітонним розв'язкам рівняння КдФ (2.52), тобто тим, що спадають при $|x| \rightarrow \infty$ і подрібнюються при $|t| \rightarrow \infty$ на окремі солітони типу (2.53), відповідають безвідбиткові потенціали стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\Psi'' + [-\alpha^2 - u(x)]\Psi = 0. \quad (2.57)$$

І навпаки: усі безвідбиткові потенціали рівняння (2.57) утворюють однопараметричний за t клас функцій, що задовольняють нелінійному еволюційному рівнянню відносно параметра t у вигляді (2.52). Ще раз слід підкреслити, що параметр t є часовим аргументом тільки для рівняння КдФ, а відносно стаціонарного рівняння Шредінгера він грає роль формального параметра, а тому безвідбитковість стосується фіксованих, сталих потенціалів у стаціонарній теорії розсіяння.

Безвідбиткові потенціали завжди мають від'ємний знак

$$u(x, t) < 0 \quad \forall x, t, \quad (2.58)$$

хоча профілі їх досить різноманітні та істотно перебудовуються в залежності від t . Отак, двосолітонний потенціал при $t \rightarrow \mp \infty$ розбивається на два солітони:

$$u(x, t) \approx -2\alpha_1^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_1 \mp \Delta) - 2\alpha_2^2 \operatorname{sech}^2(\gamma_2 \pm \Delta);$$

$$2\Delta = \ln[(\alpha_2 + \alpha_1) / (\alpha_2 - \alpha_1)].$$

Швидкий солітон (2) наздоганяє повільний (1), після зіткнення знов утворюються швидкий і повільний солітони з тими ж параметрами, але зі зсувом фаз, який зберігає пам'ять про взаємодію солітонів. У цьому відношенні зіткнення солітонів відрізняється від аналогічного зіткнення гауссіанів, яке розглянуто в параграфі 1.8.

Таким чином, двосолітонні безвідбиткові потенціали можуть мати форму відокремлених різних ям-солітонів, які спроможні з'єднуватись у складову яму. Солітони не можуть бути однаковими. У квантовій механіці це відповідає відсутності виродження рівнів енергії зв'язаних станів в одновимірному випадку. Злиття солітонів при $t = 0$ у випадку $\delta_1 = \delta_2 = 0$ (такий вибір фаз завжди можливий при відповідному відліку координат і часу) дає симетричну потенціальну яму, тобто $u(-x, 0) = u(x, 0)$, а параметри солітонів α_1 та α_2 визначають рівні енергії $E_1 = -\alpha_1^2$ та $E_2 = -\alpha_2^2$, які є інтегралами рівняння КдФ (2.52). При цьому потенціал має вигляд поодинокій ями при умові $\alpha_2 > \sqrt{3}\alpha_1$ (зокрема, при $\alpha_2 = 2\alpha_1$ зводиться до ями Еккарта), при $\alpha_2 < \sqrt{3}\alpha_1$ утворюється подвійна потенціальна яма, а при $\alpha_2 = \sqrt{3}\alpha_1$ виникає яма зі сплосченим дном (четверним мінімумом). У цьому неважко переконатися, досліджуючи вираз (2.54).

Довільно вибираючи пару рівнів енергії зв'язаних станів з α_1 та α_2 , завжди можна побудувати за правилом (2.54) цілу сім'ю потенціалів з даними значеннями енергії та відповідними хвильовими функціями стаціонарних станів, які також мають досить простий явний вигляд (тут ми їх не наводимо). Аналогічно одержуються точні розв'язки РШ й з довільним числом рівнів енергії, де ефективний потенціал, однак, має більш складний вигляд (див. [35]-[37]). Відмітна особливість цих розв'язків полягає в тому, що вони зв'язані з однопараметричною сім'єю потенціальних полів (параметром є час відповідного еволюційного рівняння КдФ) при фіксованих рівнях енергії. Це означає, що скарбничка тестових прикладів з простими точними розв'язками в квантовій механіці істотно збагачується випадками локалізованих потенціалів різної форми з рівнями енергії, що довільно задаються, і простими явними формулами для хвильових функцій.

Крім локалізованих потенціалів з точними розв'язками, існують так звані скінченнозонні потенціали, що мають більш цікаві властивості і специфічні точні розв'язки [36,37], які ми не будемо порушувати.

Додамо також, що до появи методу ОЗР в теорії солітонів простих точних розв'язків стаціонарного рівняння Шредінгера з явними виразами для рівнів енергії та хвильових функцій було відомо дуже мало. Це – гармонічний осцилятор, нескінченна прямокутна потенціальна яма, кулонівський потенціал, дельта-яма, потенціали Пешля–Теллера, Еккарта, Морза, Кратцера [1,12-16].

Новий прорив у питанні точних розв'язків рівняння Шредінгера був зв'язаний з розвитком теорії спінових систем та розробкою методу ефективних потенціалів для таких систем [127], що дозволило відкрити нові класи точних розв'язків рівняння Шредінгера з простими явними формулами для рівнів енергії та хвильових функцій стаціонарних станів, які суттєво змінюються в залежності від декількох параметрів.

На відміну від точних розв'язків солітонного походження, ці потенціали є більш різноманітними по формі, вони є нелокальними, та рівні енергії в них суттєво змінюються в залежності від декількох параметрів.

Усі ці нові види точних розв'язків рівняння Шредінгера, – та ще й з простими явними аналітичними виразами для рівнів енергії та хвильових функцій стаціонарних станів, – взагалі утворюють непорушний "золотий" фонд квантової теорії.

Завершуючи стислий огляд потрібних для подальшого відомостей про одно- і двосолітонні розв'язки рівняння КдФ, пропонуємо провести вступний ознакомлюючий експеримент, зв'язаний з рухом солітонів. Щодо односолітонного розв'язку, то явний аналітичний вираз (2.53) виглядає настільки просто, що дає повне уявлення про всі властивості окремого солітона: амплітуда дорівнює $2\alpha^2$, швидкість переміщення праворуч (завжди праворуч) дорівнює $4\alpha^2$, площа дорівнює 4α (переконайтеся в цьому), повна ширина складає приблизно $4/\alpha$. Профіль характерний. Корисно відтворити його у крупному масштабі, зіставивши з гауссіаном. До речі, коли мова йде про солітони, а не про відповідні безвідбиткові потенціальні ями, то краще вважати $u(x, t) > 0$. Фізично сплески хвильового поля звичайно додатні і тільки заради зручності запису співвідношень ОЗР змінено знак у рівнянні КдФ (2.52) і введено множник 6.

Проте вже двосолітонний розв'язок, що задається також досить простою формулою (2.54), у загальному випадку вимагає розшифровки. Це можна зробити, організувавши демонстраційний експеримент за допомогою нескладного обчислювального пристрою.

Як уже зазначалося, вибором відліку координати та часу перетворюємо фази δ_1 і δ_2 на нуль. Експеримент складається з двох частин. Перша демонстрація показує зіткнення, взаємодію двох солітонів. Для опрацювання масштабів починаємо з $t = 0$, тобто спостерігаємо за розвитком подій після злиття солітонів. Заглянувши в майбутнє, маємо повне уявлення й про минуле, оскільки задача є симетричною відносно перетворення $t \rightarrow -t$; $x \rightarrow -x$ (при вказаному виборі відліку t і x). Це дозволяє вибрати такий момент часу початку досліду $t < 0$, коли солітони досить відсунуті один від одного.

Отже, на старті два ізольованих солітони: ліворуч швидкий з параметром α_2 , а праворуч від нього знаходиться повільний з α_1 . Починаються перегони, проте, питання, наздожене чи ні, у глядача не виникає. Зацікавлення викликає інше – стадія безпосереднього контакту солітонів. Що ж трапиться при їх безпосередньому зіткненні? Проте, усе складається надто буденно. Ніяких особливих струсів, сплесків, як це було при зустрічі гауссіанів, немає. Солітони поступово зливаються в одне хвильове утворення, а потім процес іде в зворотному напрямку. При цьому з огляду на закони збереження рівняння КдФ (2.52) зберігаються загальна площа і швидкість "центра мас" солітонів. Змінюючи співвідношення між швидкостями солітонів, переконаємось, що є різні режими взаємодії, і приходимо до двох інтерпретацій такого змісту.

Перша – обгін через стадію повного злиття – підходить до випадків істотно різних солітонів (один – великий і швидкий, а другий – маленький і повільний). Солітони – мешканці одновимірного простору – не можуть обганяти один одного інакше, ніж через стадію об'єднання, злиття. При цьому великий солітон поглинає, поїдає малого, утворюється єдиний (спільний) хвильовий імпульс, а потім знов вимальовується контур великого солітона попереду і малого солітона, що відстав. Результатом взаємодії є певне випередження для великого солітона в порівнянні з вільним рухом і затримка для малого: на всьому інтервалі руху

$$\begin{aligned}\Delta x_2 &= 2\alpha_2^{-1}\Delta = \alpha_2^{-1}\ln[(\alpha_2 + \alpha_1)/(\alpha_2 - \alpha_1)]; \\ \Delta x_1 &= -2\alpha_1^{-1}\Delta = -\alpha_1^{-1}\ln[(\alpha_2 + \alpha_1)/(\alpha_2 - \alpha_1)].\end{aligned}\quad (2.59)$$

Друга трактовка – естафетна передача параметрів через стадію частинного об'єднання солітонів. Вона є адекватною у випадку близьких за параметрами солітонів. Солітони обмінюються швидкостями. Естафетний механізм допомагає краще зрозуміти збільшення ефекту зміщення (2.59) для майже однакових солітонів, у

яких на стадії часткового злиття утворюється двогорбий профіль хвильового поля.

Зрозуміло, картина двох солітонів на стадії об'єднання є великою умовністю. Індивідуалізувати солітони на цій стадії можна лише з метою кращого розуміння того, що діється.

Ефект випередження і затримки можна наочно показати, закривши ширмою ділянку, на якій відбувається з'єднання солітонів, і зіставивши рух взаємодіючих солітонів на остаточній стадії з рухом суто вільним (нижче на екрані).

Другу демонстрацію націлено на докладніше знайомство з можливими профілями хвильового поля в час найбільш повного об'єднання солітонів. При цьому повчальніше перевернути малюнок "догори ногами", тобто повернутися до від'ємних значень і говорити про безвідбиткові потенціальні ями. На екрані доцільно також відзначати положення рівнів енергії (як прийнято на графіках потенціальної енергії, проводяться горизонтальні лінії, що відповідають даній повній енергії).

Спочатку розглядаємо великі значення $\varepsilon_2 / \varepsilon_1$. Потенціал має вигляд загостреної глибокої ями, рівні розділено великим проміжком. Для солітонів маємо одnogорбий верблюдачий профіль – "дромедар". Зменшуючи відношення $\varepsilon_2 / \varepsilon_1$, одержуємо при $\varepsilon_2 / \varepsilon_1 = 2$ характерний профіль ями Еккарта (для солітона – "еккартон"), а далі, при $\varepsilon_2 / \varepsilon_1 = \sqrt{3}$ приходимо до випадку ями зі сплосченим дном (для солітона одержуємо характерний капелюшний профіль – "наполеон"). Після цього йдуть уже подвійні ями з досить малою енергетичною щільною (для солітонів – двогорбі верблюдачі профілі – типу "бактріан") і все чіткіше вираженими роздільними ямами (тунельне розщеплення рівнів енергії у симетричній подвійній потенціальній ямі).

На цьому вступний експеримент, що дозволяє уявити собі характер парної взаємодії солітонів, а також познайомитись з деякими профілями безвідбиткових двосолітонних потенціальних ям, закінчується.

Другий експеримент також є до певного ступеню допоміжним. Він підготовляє ґрунт для основного дослідження і знайомить із загальними розв'язками рівняння КдФ. Мова буде йти про чисельне інтегрування рівняння КдФ при довільних початкових умовах, коли розв'язок не зводиться в загальному випадку до суто солітонного, а тому точних аналітичних формул одержати не вдається (для всіх стадій руху

хвильового поля). У принципі задача розв'язується на підставі ОЗР, проте у випадку непрозорих потенціалів фактичний розв'язок інтегрального рівняння ОЗР не вдається одержати в явному вигляді. Історично саме чисельні експерименти Крускала та Забускі дали поштовх сучасній теорії солітонів і сприяли розвитку методу ОЗР.

Отже, розглядаємо розв'язок рівняння КдФ за допомогою різницевих схем. Існують різні підходи до побудови різницевих схем для такого типу рівнянь. З ними можна ознайомитись, зокрема, у книзі [46]. У даному випадку нашою метою є моделювання, а не побудова самих схем, а тому наведемо два приклади готових досить простих різницевих схем.

Перша схема – двокрокова явна схема Лакса–Вендорфа [46, с. 39] типу предиктор–коректор, що записана для рівняння КдФ у формі $u_t + uu_x + u_{xxx} = 0$. Відповідь для рівняння (2.52) виходить діленням результатів інтегрування на -6 . У стандартних позначеннях схема має такий вигляд:

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = (1/2)(u_{j+1}^n + u_j^n) - (\tau/4h)[(u_{j+1}^n)^2 - (u_j^n)^2 + (2/h^2)(u_{j+2}^n - 3u_{j+1}^n + 3u_j^n - u_{j-1}^n)];$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - (\tau/2h)[(u_{j+1/2}^{n+1/2})^2 - (u_{j-1/2}^{n+1/2})^2 + (2/h^2)(u_{j+3/2}^{n+1/2} - 3u_{j+1/2}^{n+1/2} + 3u_{j-1/2}^{n+1/2} - u_{j-3/2}^{n+1/2})], \quad (2.60)$$

де $h \equiv \Delta x$; $\tau \equiv \Delta t$. Нерівність $\Delta t \leq (\Delta x)^3 / 4$ забезпечує стійкість цієї схеми.

Зручно зберегти стандартні для нашого дослідного полігону граничні умови перетворення на нуль шуканого розв'язку поза межами інтервала руху.

Друга схема – алгоритм Забускі [47]. Його запишемо безпосередньо для рівняння (2.52) з урахуванням умови сталості для цієї схеми $\Delta t = (\Delta x)^3 / 4$ у зовсім простій явній двошаруватій формі

$$u_j^{n+1} = u_{j+1}^n - (u_{j+2}^{n+1} - u_{j-1}^n)(1 + \bar{s}) / (3 - \bar{s}), \quad (2.61)$$

де $\bar{s} = -(3/4)(\Delta x)^2(u_{j+2}^{n+1} + u_{j-1}^n)$.

Схема (2.61) виявляється неявною, але для наших граничних умов вона дуже просто реалізується поодинокую прогонкою, якщо вести її від правої межі.

Для налагодження програм використовуйте тестові приклади точних розв'язків для одного солітона (2.53) і двох солітонів (2.54). Бажано

супроводжувати розрахунки спостереженням за інтегральними характеристиками – сумами u і u^2 , що відповідають законам збереження (лінійному та квадратичному інтегралам рівняння КдФ).

Почніть з більш простого алгоритму Забускі (2.61), вибравши маленький полігон з $I = 40$ і досить великий крок $\Delta x = 0,2$. За початкову умову візьміть двосолітонний розв'язок на стадії злиття у вигляді $u(x, 0) = -6 \operatorname{sech}^2[\Delta x (J - 13)]$. Кількість кроків у часі до розділення солітонів виявляється порядку 100. За цей час можна ясно побачити формування великого солітона й утворення малого, а також спостерігати за фазовими зміщеннями. При цьому треба мати на увазі, що розглядається не весь процес, а тільки його другий етап, від злиття солітонів до їх розділення, а тому зсуви за координатою центрів хвильових імпульсів повинні бути вдвічі менші, ніж за формулами (2.59). Крім того, можна спостерігати слабкі осциляції поблизу лівої межі руху, що викликані суто розрахунковими причинами (нефізичний вплив меж, який усувається розширенням полігона – після грубого налагодження).

Потім перейдіть до спостереження всього процесу зіткнення двох солітонів, спираючись на результати попереднього вступного експерименту та збільшуючи розміри випробувального полігона, а також варіюючи інші параметри задачі.

Далі можна перейти до різних експериментів, вибираючи за початкову умову різні початкові профілі, що відрізняються від суто солітонних: ями Еккарта з несолітонними параметрами, потенціали у вигляді гауссіана, східчасті та синусоїдні профілі. При цьому спостерігаються як дроблення хвильового поля з появою солітонних сплесків, так і ефекти типу хвильового шлейфа з осциляціями, тощо. Слід мати на увазі, що всі спостережувані деформації несолітонних потенціалів супроводжуються зберіганням рівнів енергії та відбиткових можливостей потенціалу, хоча саме розташування рівнів енергії у загальному випадку точно вказати не можна.

Нарешті, можна перейти до основних дослідів з нестационарного розсіяння на солітонах. У незалежному варіанті ми беремо точний розв'язок рівняння КдФ (двосолітонний потенціал якого-небудь фіксованого профілю) і спостерігаємо проходження гауссіана на звичайному полігоні (як у шостому та сьомому експериментах попереднього параграфа). У спрощеному варіанті подвійної кінетики береться двосолітонний розв'язок, проте час розглядається не як формальний параметр, а як справжній час нестационарного рівняння

Шредінгера, тобто маємо задачу про розсіяння на змінному потенціалі. Якщо двосолітонний (для певності) розв'язок у першій постановці дає повну прозорість, і залишається тільки стежити за деталями руху пакета над солітонами та заміряти результуючий ефект випередження, то тут ставиться задача виявити, як впливає рух солітонів на характер розсіяння. Є, так би мовити, подвійна нестационарність: і пакетний рух, і змінний потенціал. Інший варіант – розширений – несолітонна початкова умова та сумісний чисельний розв'язок двох еволюційних рівнянь (нелінійного рівняння КдФ та лінійного рівняння Шредінгера).

На завершення цього параграфа для самостійної проробки залишаються чисельні експерименти щодо спостереження за солітонними та несолітонними розв'язками нелінійного рівняння Шредінгера (кубічного) [35-37].

2.5. Чисельне моделювання

Зупинимось на деяких питаннях комп'ютерного моделювання, що є дуже важливим при вивченні квантової теорії, оскільки безпосередньо побачити мікропроцеси неможливо (крім випадків квантової макрофізики). Абстрактний характер квантового опису настійно вимагає максимального використання ілюстрацій.

За допомогою комп'ютерного моделювання стають наочними найважчі для сприймання нестационарні явища, що відносяться до квантової кінетики (розсіяння, резонансні явища, пакетний рух, квантова дифузія, реакція на зовнішні впливи, тощо).

Інший важливий аспект – постановка обчислювального експерименту з метою дослідження невідомих закономірностей, недосліджених явищ.

Багато з розглянутих у книзі чисельних експериментів можна здійснити за допомогою досить простих обчислювальних пристроїв, хоча найбільшого ефекту можна досягнути тільки при роботі у діалоговому режимі з швидкодіючим персональним комп'ютером, виводячи результати на екран дисплея у вигляді зображень, що рухаються, тощо.

Найбільш доступними раніше були програмовані мікрокалькулятори. За їх допомогою можна досить швидко табулювати відносно складні вирази, а також робити операції типу інтегрування звичайних диференціальних рівнянь або обчислення однократних інтегралів. Це дозволяє моделювати деякі прості процеси типу розпливання пакетів, але істотно обмежує можливості чисельного експерименту, тобто

багаторазового проведення великих серій обчислень зі зміною великої кількості параметрів фізичної системи і використовуваних чисельних методів. Та й представлення результатів є можливим лише у надзвичайно сповільненому темпі з побудовою ручним способом графіків для окремих стадій досліджуваного процесу.

Наступний клас обчислювальних пристроїв – портативні комп'ютери, які володіють значно ширшими можливостями, працюють на мові програмування і володіють оперативною пам'яттю, що дозволяє проводити досить складні розрахунки. Їм уже є доступною реалізація різницевих схем для диференціальних рівнянь у частинних похідних, щоправда, ще з мінімальними параметрами та з невеликою точністю. Головний же недолік цього класу пристроїв – маленький дисплей, на якому звичайно демонструється лише один рядок знаків.

Далі йдуть персональні комп'ютери зі спеціальним дисплеєм або ті, що використовують екран звичайного телевізора. Тут відкриваються значно ширші можливості графічних побудов, зображень, що рухаються, з'являється можливість спостерігати усі етапи процесу, стежити за деталями змін у часі.

На цей час основна увага приділяється розвитку середньої ланки ЕОМ – персональних комп'ютерів. Саме на них розраховані ті комп'ютерні експерименти, які обмірковуються у книзі.

Якщо у першій частині книги питанням чисельного моделювання було приділено досить скромне місце, то друга частина націлена саме на комп'ютерний експеримент, у найширших масштабах. Необхідно ще раз підкреслити, що чисельне моделювання грає дуже важливу роль ілюстративну, демонстраційну, проте головною метою є дослідження, експеримент, що неможливо або дуже важко зробити аналітичними методами. Обчислювальний експеримент часто стимулює подальші аналітичні розрахунки, граючи важливу евристичну роль. За його допомогою ведеться розвідка боєм при дослідженні важких, недосяжних реальному експерименту явищ.

У книзі аналітичні розрахунки, що передбачають комп'ютерне моделювання, доведені до такого вигляду, щоб максимально наблизити читача до безпосереднього програмування. Етап переходу від фізичних величин і перетворень до операцій програмування є гранично обмеженим. Звичайно, це не означає, що досить сісти за комп'ютер, і одразу можна спостерігати процес.

Вимагається ще кропіткий труд щодо складання програми та її налагодження. У зв'язку з цим кожного разу даються конкретні вказівки тестових прикладів, проте саме налагодження завжди

трудомісткий процес. При роботі ж з дисплеєм і організації зображень, що рухаються, виникають нові ускладнення: масштабування, кадрівання, темп зміни кадрів. Кольорове оформлення також має велике значення для сприймання.

Одне слово, труднощів на шляху організації навіть простих демонстрацій багато, а зате скільки позитивних емоцій викликає у вас поява очікуваних вірних результатів, яке збудження, підйом, а іноді й захоплення викликають картини пакетного руху, зіткнення солітонів, що ожили. Проте це тільки перші кроки, це все ще вступ. Головне, звичайно, починається пізніше, після досягнення перших успіхів у демонструванні, коли можна переходити до постановки власне експериментів. Нехай це будуть експерименти з вибором оптимальних обчислювальних параметрів або важливіші фізичні досліди з експериментально-теоретичного дослідження цілком непередбачених деталей у загальних рисах відомого явища, відкриття (хоч би тільки для себе і в досить вузьких учбових рамках) нових ефектів, закономірностей, правил. Тут важливі жага знань, терпіння, зібраність, посидючість. Як яскраво тут виявляються риси характеру дослідника. Кожний може перевірити себе. Тут не тільки тестується явище, а й тестується сам дослідник.

При проведенні експериментів необхідно ретельно оформити запис програми, наділивши її якомога докладнішими коментарями і в самій програмі, і в додатках до неї. Якщо навіть ви самі користуєтесь програмою, то деталі дуже швидко забуваються, не кажучи вже про передачу програми іншому користувачеві. Поки ви працюєте з програмою, усе здається ясным, але вже через місяць неможливо виявити деталі позначень, якщо вони не зафіксовані документально.

При проведенні комп'ютерних експериментів вимагається акуратний запис результатів. Корисно всі дані записувати і зберігати. Демонстрації підібрано так, щоб можна було користуватися типовими програмами для кількох аналогічних демонстрацій. Вправи звичайно розраховані на повторення вже опрацьованих розрахунків. Уніфіковано й кінетичний полігон, випробувальний стенд, лічильний інтервал для проведення великої серії різноманітних експериментів квантової кінетики та солітонної фізики. Цим переслідується мета якомога більше спростити та полегшити підготовчі роботи комп'ютерного моделювання, щоб технічні деталі не відвертали уваги від основної задачі проведення обчислювальних експериментів і дослідження фізичних явищ.

Необхідно підкреслити, що в книгах з квантової теорії питання комп'ютерного моделювання та обчислювальних експериментів досі не порушувалися, не кажучи вже про навчальну літературу. Такі питання стали актуальними й доступними для реалізації лише самим останнім часом у зв'язку з швидким розвитком обчислювальної техніки та переходом до нових форм спілкування з комп'ютером.

Передбачається знайомство читача з основами програмування і практичними навиками комп'ютерного моделювання. Можна рекомендувати таку літературу з питань, зв'язаних з комп'ютерним моделюванням, крім уже згаданих посібників з різницевих схем: з чисельних методів [43,44]; з мов програмування [53-61]; з комп'ютерного моделювання у фізиці [48,49,109,110,135]; з налагодження програм [50-52]; із загальних питань застосування персональних комп'ютерів [120-126, 138-139]. Тут же можна назвати літературу з одного з перспективних загальних напрямків кінетики складних систем – з синергетики [62-67, 136-137].

Оскільки в третьому, заключному розділі книги ми знов повернемося у лоно аналітичних розрахунків без застосування чисельних методів, наведемо перелік основних прикладів комп'ютерного моделювання й обчислювального експерименту, докладно розглянутих у перших двох розділах.

1. Явище розпливання гауссова пакета. Формула (1.86) є готовою до безпосереднього моделювання процесу.

2. Розпливання прямокутного пакета. Формула (1.87) підготовлена до використання квадратурних формул чисельного інтегрування.

3. Розпливання семи варіантів пакетів. Наприкінці параграфа 1.6 наведено конкретні формули для самостійного проведення експериментів.

4. Розпливання подвійного гауссіана. Вираз (1.96) готовий для моделювання.

5. Зіткнення двох гауссіанів. Формула (1.108) дає можливість одразу ж розпочати моделювання.

6. Зіткнення гауссова пакета зі стінкою. Вираз (1.113) підготовлено до моделювання.

7. Розсіяння гауссова пакета на дельта-потенціалах. Формула (1.138) дозволяє перейти до безпосереднього моделювання.

8. Резонансне розсіяння на прямокутному потенціалі. Вираз (1.159) дозволяє також перейти до моделювання.

9. Резонансне розсіяння на солітонах докладно розглянуто в параграфі 1.12 і моделювання запропоновано здійснити самостійно у вигляді вправ.

10. Ефект розпливання гауссова пакета, що рухається на скінченному інтервалі (кінетичному стенді – інтервалі руху з межовими умовами непроникності). Формула (2.12) є готовою до моделювання.

11. Рух гауссова пакета на кінетичному інтервалі, включаючи ефект зіткнення зі стінкою. Моделюємо за формулою (2.17).

12. Розсіяння гауссова пакета на дельта-потенціалі і подальші ефекти зіткнення пакета, що відбитий, та пакета, що пройшов, зі стінками й один з одним. Формула (2.23) є цілком готовою до проведення експериментів.

13. Параграф 2.3 цілком присвячено комп'ютерним експериментам на підставі застосування різницевих схем. Докладно описано та підготовлено дванадцять обчислювальних експериментів, що проводяться на уніфікованому кінетичному полігоні й охоплюють широкий спектр явищ і ефектів квантової кінетики.

14. Взаємодія двох солітонів. На підставі формули (2.54) для точного розв'язку докладно розглянуто комп'ютерне моделювання явища зіткнення двох солітонів рівняння КдФ.

15. Розв'язок рівняння КдФ на підставі різницевих схем (2.60) та (2.61). Докладний опис експериментів з солітонними та несолітонними розв'язками.

16. Розсіяння гауссова пакета на нерухомих солітонах. Наприкінці попереднього параграфа докладно описано постановку цих і загальніших обчислювальних експериментів.

2.6. Комп'ютерне моделювання фізичних процесів

Проблема методів моделювання процесів за допомогою персонального комп'ютера виходить за межі квантової кінетики. Вона торкається як фізики взагалі, так і інших дисциплін.

Під час розробки демонстрацій якого-небудь процесу часто маємо багато спільного зі створенням анімаційного фільму (мультфільму). Кількість кадрів (звично від ста до тисячі) залежить як від структури зображення та застосованого методу, так і від обсягу оперативної пам'яті комп'ютера. Частота зміни кадрів визначається швидкістю виконання програми та характером процесу. Практично в усіх

випадках вона може програмно регулюватися (звичайно вона становить порядку 10 кадрів у секунду).

Однак деякі методи застосовано на інших засадах. Наприклад, моделювання процесу зростання фрактальних кластерів [133-134], де тільки нарощуються точки (пікселі), та спрайтове моделювання не потребують покадрової побудови.

При обговоренні питань комп'ютерного моделювання ми маємо на увазі звичайне оснащення навчального процесу в рядовому вузі. Існуюча спеціальна технологія з використанням особливих комп'ютерних систем є недосяжною простому користувачеві.

Під час моделювання процесів у формі динамічних зображень є необхідними спеціальні методи фіксації та зберігання зображень, а головною проблемою стає швидке їх відтворення. При цьому виникають різні ситуації: суттєво змінюється все екранне поле або тільки його фрагмент; щось рухається на фіксованому тлі; малюється лише деякий контур, що деформується; дія розгортається тільки в деякому вікні екрана, спостерігається лише зростання об'єкта, тощо. У кожному конкретному випадку є необхідним окремий тонкий економний розв'язок, хоча є можливим використання й більш грубих універсальних способів, що не залежать ані від специфіки зображень, ані від графічних режимів монітора.

Іноді для уявлення про загальні риси процесу досить переглянути окремі кадри-зображення, тобто мати справу зі статичними картинками. В цьому випадку можна зберігати велику кількість графічних повноекранних кадрів, користуючись лише методом їх ефективної архівації (економного пакування).

Однак для динамічної візуалізації потрібна розробка спеціальних методів.

Стисло перелічимо деякі конкретні методи створення, компактного зберігання та швидкого відтворення зображень з вказівкою ілюстративних прикладів з області квантової кінетики, солітонної фізики, фізики фрактальних явищ, а також класичної механіки.

При цьому ми навмисно проминаємо технічні деталі конкретної програмної реалізації кожного методу, а також його можливі різновиди та варіанти, окреслюючи тільки головний принцип.

1. Метод спрайтів. У деяких випадках доцільно скористатися технікою так званих спрайтів, які є апаратно реалізованими у персональних комп'ютерах типу Commodore. Спрайти існують незалежно від текстового й графічного режимів. Вони здійснюють поступний рух невеликих змінних зображень. Одночасно на екрані

пересуваються лише декілька спрайтів, але вони існують необмежено в часі та їх характеристики можуть змінюватись під час руху (зображення, кольори, розміри, швидкість, напрямки).

Вони широко використовуються в комп'ютерних програмах та моделюванні фізичних процесів.

Хоча IBM-сумісні персональні комп'ютери не мають спрайтового режиму, на них також можна створювати аналогічні об'єкти (див. метод 3).

2. Метод смуги. Найпростіший варіант – запис цілого екрана. Якщо дія відбувається лише на деякій частині екрана, то достатньо мати справу лише з відповідною смугою (кінетичним полігоном).

Це швидкий та універсальний метод, але не дуже економний, оскільки доводиться зберігати зайву інформацію, бо зображення звичайно займає лише частину площі навіть у випадку смуги.

Можливий варіант з адаптивністю – зміна ширини та положення смуги на екрані в залежності від переміщення зображення. Наприклад, процес розпливання хвильового пакета супроводжується зменшенням ширини смуги.

Головна проблема – швидке відтворення кадрів. Довгострокове зберігання кадрів забезпечується за допомогою пакування (архівзації). Однак вилучення файлів з архіву займає багато часу, так що реально треба мати кадри в розпакованому вигляді в оперативній пам'яті комп'ютера, щоб швидко переносити зображення на область відеопам'яті. Найпростіший спосіб – використання віртуального диска (псевдодиска).

Типова схема підготовки анімаційного фільму: кожний кадр створюється на екрані в графічному режимі дисплея та зберігається у вигляді запакованого файлу даних, перед показом робиться досить великий віртуальний диск, до якого заносяться файли-кадри в розпакованому вигляді, а під час демонстрації кадри майже миттєво завантажуються з віртуального диска на відповідну область відеопам'яті.

3. Метод прямокутника. Цей метод є аналогом попереднього, але фіксується область екрана прямокутної форми. Він має більше можливостей для адаптивності (слідкує за зміною розмірів та форми рухомої частини зображення). Технічно потребує використання дещо інших засобів (наприклад, в мові Turbo Pascal реалізується за допомогою процедур GetImage та PutImage, а в мові Quick Basic – операторів Get та Put, за допомогою яких відбувається обмін даними поміж відеопам'яттю та масивом в оперативній пам'яті). Цей метод

також може частково імітувати згадувані вище спрайти та в такому спрощеному вигляді найчастіше наводиться у посібниках по мовам програмування як спосіб здійснення мультиплікації.

4. Метод перебудови. Принцип цього методу можна зрозуміти на такому прикладі. Формується початкове зображення у вигляді деякої фігури (наприклад, солітонного профілю). Коли фігура переміщується чи деформується, то на екрані це здійснюється за допомогою додавання нових точок (пікселів) та вилучення старих. Запам'ятовуються лише відповідні байти координат цих точок. Дуже економний метод.

5. Метод ординат. Якщо зображення має вигляд деякого графіка (хвильові пакети, солітони), то досить запам'ятовувати байти ординат, що зберігаються в масивах-кадрах.

Для одержання ефекту руху бажано мати графічний режим хоча б з двома сторінками відеопам'яті. Поки ми бачимо деяку картинку на одній сторінці, нове зображення будується на іншій, яка є невидимою та активною. По закінченні побудови чергового кадру сторінки обмінюються ролями.

6. Метод частинок. Перш за все виділимо особливі випадки з класичної механіки, коли можна безпосередньо на екрані створювати окремі кадри. Це – повільні рухи нескладних об'єктів типу маятникових систем або переміщення окремих частинок чи їх скупчень у різноманітних фізичних полях. При цьому об'єкт швидко формується на екрані, маючи просту геометричну структуру: точка (піксел), маленька кулька (круг), відрізок прямої, тощо. Наприклад, моделювання механічних годинників різноманітної будови, коливання подвійного маятника, броунівські частинки, рух заряду у електричному або магнітному полі та рух тіла в полі тяжіння, обертання тривимірних тіл, побудованих з простих елементів-відрізків. Сюди ж можна віднести моделювання процесів зростання фрактальних кластерів [133-134] (наприклад, обмеженої дифузії агрегації), а також так звану гру "Життя" Джона Конвея [136], що імітує події у популяції живих організмів.

7. Метод кодування. Економний запис зображень за допомогою спеціальних алгоритмів стиснення. Простіший варіант – побайтове сканування, коли записуються два байти, один з яких містить кількість однакових байтів, а другий – величину самого байту. Якщо зображення займає лише невелику частину екрана, то метод стає дуже економним та швидким.

8. Метод мозаїки. Зберігаються невеличкі фрагменти (секції) та їх групи в тих місцях екрана, де знаходяться рухомі об'єкти. Економний метод, але він потребує спеціальних програм для швидкого відтворення таких складних мозаїчних зображень.

9. Метод прокручування. Рух зображення на всьому екрані як цілого по вертикалі або по горизонталі (так зване прокручування). Вживається іноді для створення динамічних ефектів, коли переміщується не сам об'єкт, а тло. Сюди можна також віднести спеціальні засоби рухомого тексту: рекламно-інформаційне переміщення тексту по вертикалі та горизонтальний біжучий рядок.

На відміну від анімаційних фільмів комп'ютерне моделювання процесів доповнюється можливістю керування під час демонстрації швидкістю, кольором, звуком, тлом, тощо. Звукове супроводження створює додаткові барви імітації динамічних ситуацій.

Яскраве уявлення про комп'ютерні досягнення дають кращі зразки ігрових систем, де в повному обсязі реалізується ідея моделювання руху (складні тривимірні об'єкти, швидкі зміни оточення, великі швидкості переміщень, поєднання кольорових та звукових ефектів, можливість втручання в процеси – керування подіями). Однак навчальні та дослідницькі цілі потребують концентрації уваги на суті процесу, очищення від зайвого супроводження.

На жаль, поки що є дуже мало літератури про комп'ютерне моделювання фізичних процесів [109-110, 135-137, 139], не говорячи вже про опис конкретних методів їх втілення на персональному комп'ютері.

Примітка: Треба мати на увазі, що книга була написана десять років тому. За цей час дещо змінилися умови праці з персональними комп'ютерами, з'явилися візуальне програмування та потужні математичні пакети для прикладних розробок, але автор залишив все так, як було написано тоді.

3. НЕРІВНОВАЖНІ ПРОЦЕСИ

3.1. Реакція системи на зовнішні впливи. Метод Кубо

Перший розділ книги було присвячено здебільшого загальним питанням квантової кінетики та явищам, які відбуваються за сталих зовнішніх умов і досліджуються на основі теорії стаціонарних станів. Другий розділ було націлено на застосування чисельних методів та проведення комп'ютерних експериментів. Розвинуті загальні методи підготували ґрунт для дослідження змінних зовнішніх впливів. Крім того, якщо досі порушувались досить прості системи типу одночастинкових, то тепер будемо мати на увазі найчастіше багаточастинкові макроскопічні системи. Перейдемо безпосередньо до постановки основної кінетичної задачі теорії реакції системи на зовнішні впливи.

Розглядається система з незалежним від часу гамільтоніаном природної еволюції H_0 , яка на момент часу включення змінного збурення $H_1(t)$ знаходилась у рівноважному стані, що описується статистичним оператором $\rho(t_0) \equiv \rho_0$. За звичаєм оператори в картині Шредінгера записуються без спеціальних позначок, а в цьому розділі випускаємо і шапки над операторами, щоб не захарашувати формули. Таким чином, у початкових умовах істотно, що

$$\{H_0, \rho_0\} = 0. \quad (3.1)$$

Треба знайти середнє значення фізичної величини f у момент часу спостереження t . Різного роду узагальнення такої задачі будуть обмірковуватись далі.

Для розв'язання поставленої задачі доцільно скористуватись зображенням взаємодії (див. параграф 1.1). При цьому допоміжний часовий параметр, при якому усі величини в усіх зображеннях (картинах Шредінгера, Гейзенберга та Дірака) збігаються, зручно вибрати тотожним нулю. Уникаючи непорозумінь, підкреслимо, що початковий момент часу t_0 визначається фізичними умовами, а параметр, про який іде мова, є формальним, довільним. Оператори в такому зображенні будемо позначати тільдою. Вони зв'язані з шредінгерівськими співвідношенням

$$\tilde{A}(t) = \exp(itH_0 / \hbar) A \exp(-itH_0 / \hbar), \quad (3.2)$$

оскільки пропагатори природної еволюції зводяться до експонент:

$$U_0(t_1, t_2) = \exp[-i(t_1 - t_2)H_0 / \hbar]. \quad (3.3)$$

Зокрема, для статоператора в початковий момент часу з огляду на (3.1) маємо:

$$\tilde{\rho}(t_0) = \exp(it_0 H_0 / \hbar) \rho(t_0) \exp(-it_0 H_0 / \hbar) = \rho(t_0) = \rho_0. \quad (3.4)$$

Таким чином, найзагальніше кінетичне рівняння – рівняння Ліувілля – і початкова умова в обраному зображенні взаємодії записуються у вигляді

$$\partial \tilde{\rho} / \partial t = - \{ \tilde{H}_1(t), \tilde{\rho}(t) \}, \quad \tilde{\rho}(t_0) = \rho_0. \quad (3.5)$$

Переходячи до відповідного інтегрального рівняння

$\tilde{\rho}(t) = \rho_0 - \int_{t_0}^t dt_1 \{ \tilde{H}_1(t_1), \tilde{\rho}(t_1) \}$, одержуємо методом ітерацій у першому наближенні теорії збурень вираз

$$\tilde{\rho}_1(t) = \rho_0 - \int_{t_0}^t dt_1 \{ \tilde{H}_1(t_1), \rho_0 \}, \quad (3.6)$$

у другому наближенні

$$\tilde{\rho}_2(t) = \tilde{\rho}_1(t) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \{ \tilde{H}_1(t_1), \{ \tilde{H}_1(t_2), \rho_0 \} \} \quad (3.7)$$

і так далі. У загальному вигляді відповідь можна записати так:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) = & \rho_0 + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \{ \tilde{H}_1(t_1), \{ \tilde{H}_1(t_2), \dots, \{ \tilde{H}_1(t_k), \rho_0 \} \dots \} \}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Одержаний результат грає роль формального точного розв'язку кінетичного рівняння (3.5). Він має надто абстрактний вигляд і містить надмірну інформацію про систему взагалі, тим часом як фактично звичайно треба знати властивості якоїсь її частини, підсистеми. У даному випадку цей результат є проміжною ланкою в розв'язанні задачі. Головна мета – обчислення реакції системи у вигляді середнього значення певної важливої фізичної характеристики системи або її частини. На засаді (3.8) обчислюємо шукане середнє значення $\langle f(t) \rangle = \text{Sp} [\tilde{f}(t) \tilde{\rho}(t)] = \text{Sp} [\tilde{f}(t) \rho_0] +$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \operatorname{Sp} [\tilde{f}(t) \{ \tilde{H}_1(t_1), \dots, \{ \tilde{H}_1(t_k), \rho_0 \} \dots \}]. \quad \text{Перший}$$

доданок має зміст середнього значення розглянутої величини у вихідному рівноважному стані:

$$\operatorname{Sp} [\tilde{f}(t) \rho_0] = \operatorname{Sp} [\exp(itH_0 / \hbar) f \exp(-itH_0 / \hbar) \rho_0] = \operatorname{Sp} (f \rho_0) = \langle f \rangle_0.$$

Надалі символом $\langle \dots \rangle_0$ позначаємо усереднення за рівноважним станом. Перетворення інших членів у сумі до середніх такого вигляду здійснюється на підставі тотожності $\operatorname{Sp}(a\{b, c\}) = \operatorname{Sp}(\{a, b\}c)$. Так, лінійний член перетворюється таким чином:

$$\operatorname{Sp}(f \{H_1, \rho_0\}) = \operatorname{Sp}(\{f, H_1\} \rho_0) = \langle \{f, H_1\} \rangle_0. \quad \text{Аналогічній процедурі}$$

виплутування з тенет дужок Пуассона оператора ρ_0 квадратичний член підлягає двічі:

$$\operatorname{Sp}(f \{H_1, \{H_2, \rho_0\}\}) = \operatorname{Sp}(\{f, H_1\} \{H_2, \rho_0\}) = \operatorname{Sp}(\{\{f, H_1\}, H_2\} \rho_0) = \langle \{\{f, H_1\}, H_2\} \rangle_0,$$

де для стислості позначено $f \equiv \tilde{f}(t)$; $H_{1,2} \equiv \tilde{H}_1(t_{1,2})$, тощо. Остаточну відповідь можна зобразити у вигляді суми середнього значення за вихідним станом і додатку (реакції) за рахунок зовнішнього впливу, що записаний у формі ряду теорії збурень:

$$\langle f(t) \rangle = \langle f \rangle_0 +$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \langle \{ \dots \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \}, \tilde{H}_1(t_2) \}, \dots, \tilde{H}_1(t_k) \} \rangle_0. \quad (3.9)$$

Одержаний вираз є основним у методі Кубо (для певності будемо говорити про метод Кубо, хоч історично подібні результати були одержані вперше різними авторами). У лінійному наближенні ми маємо розв'язок кінетичного рівняння у вигляді (3.6) і реакцію

$$\Delta_1 \langle f \rangle = - \int_{t_0}^t dt_1 \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \} \rangle_0. \quad (3.10)$$

Ці результати лежать в основі так званої лінійної теорії реакції системи на зовнішні впливи, а нелінійні внески починаються з членів другого порядку теорії збурень (3.7) і відповідної квадратичної реакції

$$\Delta_2 \langle f \rangle = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle \{ \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \}, \tilde{H}_1(t_2) \} \rangle_0. \quad (3.11)$$

Розрахунок середнього значення можна виконати методом канонічних перетворень у зображенні взаємодії за допомогою S -оператора, який є оператором руху у цьому зображенні. Тоді розв'язок рівняння Ліувілля (3.5) запишеться у вигляді

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{S}(t, t_0) \rho(t_0) \tilde{S}^{-1}(t, t_0) = \tilde{S}(t, t_0) \rho_0 \tilde{S}^{-1}(t, t_0), \quad (3.12)$$

а для середнього значення маємо компактний вираз

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle &= \text{Sp} [\tilde{f}(t) \tilde{\rho}(t)] = \text{Sp} [\tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rho_0 \tilde{S}^{-1}(t, t_0)] = \\ &= \text{Sp} [\tilde{S}^{-1}(t, t_0) \tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rho_0] = \langle \tilde{S}^{-1}(t, t_0) \tilde{f}(t) \tilde{S}(t, t_0) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

З нього випливає (3.9), якщо S -оператор записати у вигляді ряду теорії збурень і виконувати відповідні множення. Проте форму відповіді (3.13) можна вважати загальнішою, тому що вона не передбачає обов'язкового розкладання в ряд. Для S -оператора, що задовольняє еволюційному рівнянню $\partial \tilde{S} / \partial t = -i \tilde{H}_1(t) \tilde{S} / \hbar$; $\tilde{S}(t_0, t_0) = 1$, можна будувати інші наближення (або розв'язувати точно, якщо це можливо), не припускаючи мализни $H_1(t)$ і не звертаючись до методу теорії збурень навіть у узагальненому сенсі.

Обміркуємо деякі властивості ряду Кубо (3.9). Структура ряду відповідає ідеї генерації реакції оператором $H_1(t)$: комутатори відповідають елементарній зміні динамічної величини, що розглядається, у часі, а для скінченного часового інтервалу утворюється ієрархія комутаторів та часових інтегралів. Порядок за збуренням, як неважко переконатися, є й порядком за малим часовим проміжком.

Вираз (3.9) припускає безпосередній перехід до класичної границі.

У задачі враховано можливість вимикання зовнішнього впливу до моменту спостереження t . Тоді верхня границя лівого інтеграла в (3.9) буде дорівнювати моменту вимикання, а фізична ситуація, що виникає, відповідає дослідженню релаксації системи, що розглядається, у чистому вигляді.

Заганий характер реакції відбито у ступінчастій структурі багаторазового інтегрування за часом у (3.9).

Треба мати на увазі, що в деяких випадках під зовнішнім впливом змінюється також сама форма величини, що досліджується. Наприклад, у магнітному полі вираз для вектора густини потоку частинок змінюється, одержуючи додаток: $\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 - e \mathbf{A} \rho / mc$. Такий додаток уже сам собою є лінійним за збуренням, а тому в члені

нульового наближення $\langle \mathbf{j} \rangle_0$ у (3.9) буде міститися лінійна за полем величина, а у решті суми частина з $\mathbf{j}_0$ побудована у звичайний спосіб, а частина з $\mathbf{A}$ перебудовує порядок наближення: k -й член дає внесок $(k+1)$ -го порядку за збуренням.

Якщо водночас діють два механічних збурення і $H_1 = H_1^{(1)} + H_1^{(2)}$, то лінійна реакція (3.10) дорівнює сумі незалежних внесків: $\Delta_1 \langle f \rangle = \Delta_1^{(1)} \langle f \rangle + \Delta_1^{(2)} \langle f \rangle$. А у членах вищого порядку це не так. Наприклад, квадратична реакція (3.11) дорівнює $\Delta_2 \langle f \rangle = \Delta_2^{(1)} \langle f \rangle + \Delta_2^{(2)} \langle f \rangle + \Delta_2^{(1,2)} \langle f \rangle$ і містить внески двох типів: $\Delta^{(1)}$ і $\Delta^{(2)}$ описують ефекти самодії, а $\Delta^{(1,2)}$ відповідає ефекту взаємного впливу, коли на тлі, що утворюється одним збуренням, діє інше. Типовий нелінійний ефект. Збурення різної природи неможна розглядати незалежно поза лінійним наближенням. Лінійні реакції описуються так званими узагальненими сприйнятливостями (розповідь про них ще буде попереду), а у нелінійних ефектах аналогічну роль грають крос-сприйнятливості.

Сам Кубо порівнював метод прямого одержання фізичних характеристик типу узагальнених сприйнятливостей в обхід побудові і розв'язанню частинних кінетичних рівнянь з методом статсуми у статистичній фізиці. Основним досягненням цього методу можна вважати зведення кінетичних величин до рівноважних середніх, для розрахунку яких добре розвинуто різні технічні заходи (хоча ці розрахунки в реальних системах виявляються надто складними).

Однією з проблем методу Кубо є урахування термостату і термодинамічних збурень, які не описуються безпосередньо за допомогою гамільтоніана збурення. Розвинутий підхід відноситься до випадку замкненої системи, для якої еволюція описується рівнянням Ліувілля (3.5). Якщо система і перебувала у контакті з термостатом до початкового моменту часу t_0 , то у подальшому ураховується лише динамічний контакт із джерелом збурення (без зворотного зв'язку), а термостат явно виключається. Щоправда, розроблено різного роду побічні заходи імітації термостату й термічних збурень, яких ми тут торкатися не будемо. Можна також розширити систему, включивши у неї термостат та описуючи за допомогою гамільтоніана взаємодію підсистеми, що нас цікавить, з її оточенням. Тоді усереднення при розрахунку характеристик підсистеми будуть містити згортки за станами термостату та значно ускладняться.

Інша проблема полягає в урахуванні зворотного зв'язку з джерелом впливу, який ігнорується у методі, що розгортається.

Метод припускає й інше безпосереднє узагальнення. Якщо початковим станом системи буде змішаний стаціонарний (стан термодинамічної рівноваги є його окремим випадком), коли $\partial \rho_0 / \partial t = 0$, то згідно з рівнянням Ліувілля звідси випливає, що $\{H_0, \rho_0\} = 0$. Таким чином, єдину умову, яку було використано у проведених розрахунках для рівноважного початкового стану, виконано і в цьому разі (комутативність з незбуреним гамільтоніаном). Результат Кубо (3.9) і (3.13) залишається слухним, якщо тепер розуміти усереднення $\langle \dots \rangle_0$ як те, що виконується за початковим стаціонарним станом. Хоч таке узагальнення зовні не потребує якихось змін результатів, однак практично обчислення таких середніх може виявитись більш важким, тому що для рівноважних розподілів розроблено потужні методи квантової теорії поля [86-89].

У лінійному наближенні (3.10) залежність від часу спостереження зручно зосередити у підінтегральному виразі, якщо ввести фактор, що обрізує, – ступінчасту функцію Хевісайда:

$$\Delta_1 \langle f \rangle = \int_{t_0}^{\infty} dt_1 \theta(t - t_1) \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \} \rangle_0; \\ \theta(t) = 1, t > 0; \theta(t) = 0, t < 0. \quad (3.14)$$

Так виникає зв'язок лінійних реакцій з часовими функціями Гріна (загаяними комутаторними). У аналогічний спосіб ступінчастий характер інтегралів за часом у будь-якому порядку теорії збурень (3.9) вирівнюється введенням відповідного добутку θ -функцій у вирази, що інтегруються. У такий спосіб установлюється зв'язок нелінійних реакцій з багаточасовими загаяними функціями Гріна комутаторного типу. Функція Гріна у вигляді $\theta(t - t_1) \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_1(t_1) \} \rangle_0$ в загальному випадку залежить від кожного з часових аргументів, тобто є справді двочасовою. Проте можна перейти до простіших двочасових функцій, які залежать тільки від різниці часових аргументів, за допомогою такого заходу. Гамільтоніан збурення у зображенні взаємодії залежить від часу як явно, у відповідності з законом зміни зовнішнього впливу, так і неявно з огляду на канонічні перетворення (3.2). Цю подвійну залежність можна розділити, якщо розкласти шредінгерівський оператор у інтеграл Фур'є (або в ряд Фур'є для періодичного збурення, або у вигляді суми з несумірними частотами для майже періодичної

залежності). Позначивши такий розклад умовною сумою $H_1(t) = \sum_{\Omega} \exp(-i\Omega t) H_{1\Omega}$, виражаємо згідно з (3.14) лінійну реакцію

$$\Delta_1 \langle f \rangle = \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\Omega(t-t_1)} \theta(t-t_1) \langle \{ \tilde{f}(t), \tilde{H}_{1\Omega}(t_1) \} \rangle_0$$

через функції Гріна, які залежать, як буде показано далі, тільки від різниці часових аргументів. Це дозволяє розглядати для них спектральний розклад, тощо.

Такі функції будуть предметом обміркування в наступному параграфі.

Відзначимо також, що дослідження спонтанних флюктуацій у системі приводить до кореляційних функцій (див. параграф 1.4), які виражаються через аналогічні антикомутаторні характеристики. Пізніше буде виявлено зв'язок функцій Гріна з кореляційними функціями. Обчислення ж нерівноважних флюктуаційних величин за методом Кубо приводить до змішаних комутаторно-антикомутаторних виразів.

На закінчення цього параграфа пропонуємо вправи на закріплення матеріалу і розвиток теорії. Розгляньте випадок, коли збурення діє короткочасно і описується гамільтоніаном $H_1(t) = A \delta(t)$. Одержіть явні формули для часової кореляції флюктуацій методом Кубо в лінійному наближенні. Узагальніть результати розвинутої теорії на випадок змінної природної еволюції системи.

3.2. Часові функції Гріна

Як відзначалося в кінці попереднього параграфа, лінійна реакція системи на зовнішні механічні впливи зв'язана з двочасовими функціями Гріна загаяного типу. У свою чергу, з цими функціями Гріна тісно зв'язані аналогічні величини випереджуючого та причинного типу. Введемо такі визначення та позначення. Для загаяних функцій Гріна:

$$G_{AB}^{r\eta}(t_1, t_2) = \left\langle \left\langle A(t_1) \middle| B(t_2) \right\rangle \right\rangle^{r\eta} = \theta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_2)]^{\eta} \rangle, \quad (3.15)$$

де в узагальненому комутанті $[A, B]^{\eta} \equiv AB - \eta BA$ знак комутаторності приймає значення $\eta = 0, \pm 1$, а ступінчаста функція Хевісайда забезпечує загаяний характер функцій (від англ. *retard* – запізнюватись). У аналогічний спосіб вводяться випереджуючі функції Гріна

$$G_{AB}^{r\eta}(t_1, t_2) = \langle \langle A(t_1) | B(t_2) \rangle \rangle^{r\eta} = \theta(t_2 - t_1) \langle [A(t_1), B(t_2)]^\eta \rangle \quad (3.16)$$

(advance – випереджувати). Для причинних функцій Гріна

$$G_{AB}^{c\eta}(t_1, t_2) = \langle \langle A(t_1) | B(t_2) \rangle \rangle^{c\eta} = \langle T_\eta A(t_1) B(t_2) \rangle =$$

$$= \theta(t_1 - t_2) \langle A(t_1) B(t_2) \rangle + \eta \theta(t_2 - t_1) \langle B(t_2) A(t_1) \rangle \quad (3.17)$$

(cause – спричиняти, причина) комутаторний знак приймає два значення $\eta = \pm 1$. При цьому вибір η залежить не від типу статистики (Фермі чи Бозе), а диктується характером задачі, що розв'язується. Наприклад, якщо функції Гріна використовуються в лінійній реакції, то тільки комутаторна функція Гріна безпосередньо бере участь у розрахунках. Якщо ж досліджуються спонтанні флюктуації, то залучаються антикомутаторні функції Гріна.

До вказаних функцій Гріна безпосередньо примикає допоміжна кореляційна функція

$$F_{AB}(t_1, t_2) = \langle A(t_1) B(t_2) \rangle, \quad (3.18)$$

через яку можна виразити всі функції Гріна:

$$G_{AB}^{r\eta}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) [F_{AB}(t_1, t_2) - \eta F_{BA}(t_2, t_1)] ; \dots \quad (3.19)$$

Функції Гріна мають розрив при збіжних часових аргументах з однаковим стрибком $G_{AB}^\eta(t+0, t) - G_{AB}^\eta(t-0, t) = \langle [A(t), B(t)]^\eta \rangle$, що приводить до однотипних для всіх функцій Гріна диференціальних рівнянь

$$\partial G_{AB}^\eta(t_1, t_2) / \partial t_1 = \delta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_1)]^\eta \rangle + G_{\{H, A\}B}^\eta(t_1, t_2), \quad (3.20)$$

підтверджуючи спільність функцій, що розглядаються. Ці диференціальні рівняння є основою одного з напрямків розрахункових методів. Іншого типу рівняння для функцій Гріна одержуються шляхом функціонального диференціювання (див., наприклад, [24,84]).

Тут і в подальшому в усіх функціях Гріна оператори будемо вважати незалежними явно від часу і взятими у зображенні взаємодії вказаного в попередньому параграфі типу, яке відносно самої системи є гейзенбергівським. Гамільтоніан системи та знак усереднення за рівноважним станом будемо записувати без спеціальних позначок, а також пропустимо знак тільди над операторами.

Розглянуті функції Гріна залежать тільки від різниці часових аргументів. Досить перевірити це на прикладі кореляційної функції (3.18), скориставшись можливістю циклічного переставлення

операторів під знаком шпура та комутативністю гамільтоніана зі статистичним оператором:

$$F_{AB}(t_1, t_2) = \text{Sp}[e^{it_1 H/\hbar} A e^{-it_1 H/\hbar} e^{it_2 H/\hbar} B e^{-it_2 H/\hbar} \rho] = \\ = \text{Sp}[e^{i(t_1 - t_2) H/\hbar} A e^{-i(t_1 - t_2) H/\hbar} B \rho] = \langle A(t_1 - t_2) B \rangle \equiv F_{AB}(t_1 - t_2).$$

У відповідності з (3.19) усі функції Гріна залежать від різниці часових аргументів, а тому будемо записувати їх з одним аргументом: $G_{AB}^n(t) \equiv G_{AB}^n(t_1, t_2)$; $t \equiv t_1 - t_2$. У зв'язку з цим зручно перейти до

частотного зображення, тобто ввести фур'є-перетворення за часовим аргументом. Спочатку таке спектральне зображення вводимо для допоміжної кореляційної функції $F_{AB}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{AB}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega / 2\pi$.

Фур'є-образ цієї кореляційної функції у подальшому будемо називати функцією спектральної інтенсивності (густини) і позначати спеціальним символом

$$I_{AB}(\omega) \equiv F_{AB}(\omega). \quad (3.21)$$

Функція спектральної густини має безпосередній фізичний сенс у класичній границі, а у квантовому випадку вона грає допоміжну роль, як і функція $F(t)$. Переходячи до зображення, в якому діагональні гамільтоніан системи H та статистичний оператор ρ , одержуємо для кореляційної функції вираз

$$F_{AB}(t) = \langle A(t) B \rangle = \text{Sp}[e^{itH/\hbar} A e^{-itH/\hbar} B \rho] = \\ = \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \exp[-it(E_m - E_n)/\hbar].$$

Тоді функцію спектральної густини можна записати у зручному для дослідження її загальних властивостей вигляді

$$I_{AB}(\omega) = 2\pi \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega); \\ \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar. \quad (3.22)$$

Обчислюючи комплексно спряжений вираз

$$I_{AB}^*(\omega) = \\ = 2\pi \sum_{n,m} A_{nm}^* B_{mn}^* \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega) = 2\pi \sum_{n,m} (B^+)_{nm} (A^+)_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} - \omega),$$

приходимо до властивості симетрії

$$I_{AB}^*(\omega) = I_{B^+ A^+}(\omega), \quad (3.23)$$

яка є висновком білінійної за операторами структури кореляційної функції.

Інша властивість симетрії зв'язана з явним виглядом статистичного оператора для рівноважної системи з канонічним (або великим канонічним) розподілом:

$$\begin{aligned} I_{AB}(-\omega) &= 2\pi \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \rho_{nn} \delta(\omega_{mn} + \omega) = \\ &= 2\pi \sum_{m,n} A_{mn} B_{nm} \rho_{mm} \delta(\omega_{nm} + \omega) = \\ &= 2\pi \sum_{m,n} B_{nm} A_{mn} \rho_{nn} e^{-(E_m - E_n)/T} \delta(\omega_{mn} - \omega), \end{aligned}$$

де використано, що у випадку $\rho = Z^{-1} \exp(-H/T)$ діагональні елементи можна записати у вигляді $\rho_{mm} = \rho_{nn} \exp[-(E_m - E_n)/T]$. Таким чином, друга властивість симетрії – температурна зв'язана із зміною знаку частоти:

$$I_{AB}(-\omega) = I_{BA}(\omega) \exp(-\hbar\omega/T). \quad (3.24)$$

Розглянемо, крім того, операцію узагальненої інверсії часу, при якій $t \rightarrow -t$, $i \rightarrow -i$ та змінюється знак відповідних зовнішніх параметрів типу магнітного поля. Тоді для кореляційної функції $F_{AB}(t) = \text{Sp}[\exp(itH/\hbar) A \exp(-itH/\hbar) B \rho]$ з огляду на інваріантність гамільтоніана і статоператора, що залежить від нього, одержимо співвідношення $F_{AB}^*(-t) = \pm F_{AB}^{(\dagger)}(t)$, якщо при вказаній операції величини перетворюються таким чином, що A та B не змінюють знаку, або разом змінюють знак (тоді маємо +), або змінюється знак тільки у однієї з них (тоді маємо -). Спеціальна позначка штрих відноситься до зміни знаку зовнішніх параметрів. Переходячи до функції спектральної інтенсивності, одержуємо властивість симетрії онзагерівського типу

$$I_{AB}^*(\omega) = \pm I_{AB}^{(\dagger)}(\omega). \quad (3.25)$$

Разом із властивістю (3.23) воно приводить до співвідношення

$$I_{AB}(\omega) = \pm I_{B^+ A^+}^{(\dagger)}(\omega), \quad (3.26)$$

так що на відсутність магнітного поля або інших аналогічних зовнішніх параметрів функція спектральної інтенсивності дійсна для величин однотипних або уявна для різнотипних:

$$I_{AB}^*(\omega) = \pm I_{AB}(\omega), \quad (3.27)$$

а у загальному випадку для фізичних величин, тобто коли $A^+ = A$ та $B^+ = B$, ця симетрія зводиться до співвідношення

$$I_{AB}(\omega) = \pm I_{BA}^{(\dagger)}(\omega). \quad (3.28)$$

Наступним кроком є перехід до спектрального зображення для функцій Гріна. Ураховуючи фур'є-розклад ступінчастої функції Хевісайда $\theta(t) = (i / 2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i\omega t)}{\omega + i\varepsilon} d\omega$, де (i в подальшому) $\varepsilon \rightarrow +0$,

і правило згортки $f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega - \omega') \psi(\omega') d\omega' / 2\pi$ для

$f(t) = \varphi(t) \psi(t)$, приходимо на підставі (3.19) до таких спектральних зображень:

$$G_{AB}^{r\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega + i\varepsilon)} d\omega' \quad (3.29)$$

і

$$G_{AB}^{a\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega - i\varepsilon)} d\omega'. \quad (3.30)$$

Об'єднання виразів (3.29) і (3.30)

$$G_{AB}^{r,a\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - (\omega \pm i\varepsilon)} d\omega' \quad (3.31)$$

показує, що спектральні зображення загаяної та випереджуючої функцій Гріна є граничними значеннями інтегралів типу Коші (див. у зв'язку з цим [105], а також дод. 2 у [85]) і можуть бути безпосередньо продовжені у відповідні півплощини комплексної частоти ω .

У вигляді вправи одержите спектральне зображення для причинної функції Гріна.

Таким чином, у відповідності із загальними властивостями інтегралів типу Коші загаяна функція Гріна має фур'є-образ аналітичний у верхній півплощині комплексної частоти ω , спадає на нескінченності і може мати особливості тільки у нижній півплощині або на дійсній осі. Те ж саме стосується випереджуючої функції Гріна у відповідній півплощині, проте випереджуюча функція Гріна зовсім не є аналітичним продовженням загаяної і навпаки, хоча обидві вони записуються у вигляді однакового інтеграла типу Коші у відповідності з (3.31):

$$G_{AB}^{\eta}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') - \eta I_{BA}(-\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (3.32)$$

де ω є комплексною змінною. При $\text{Im } \omega > 0$ маємо функцію, яка є аналітичним продовженням загаяної функції Гріна, а при $\text{Im } \omega < 0$ – випереджуючої. У відповідності з формулами Сохоцького (див. [106]) стрибок граничних значень (3.31) інтегралу типу Коші (3.32) дорівнює

$$G_{AB}^{r\eta}(\omega) - G_{AB}^{a\eta}(\omega) = I_{AB}(\omega) - \eta I_{BA}(-\omega); \text{Im } \omega = 0. \quad (3.33)$$

Таким чином, обидві функції можна відновити, знаючи їх різницю для дійсних значень частоти.

Як бачимо, між властивістю запізнювання (напівобмеженості) у часі та аналітичними властивостями у частотному зображенні є безпосередній зв'язок. Те ж стосується зворотної задачі, коли у частотному (енергетичному) зображенні ми маємо справу з напівобмеженою функцією, внаслідок чого з'являється аналітичність відповідної часової характеристики. Остання ситуація зустрічається у теорії розпаду нестационарного стану [99, 100].

Однією з переваг аналітичних функцій є можливість відновлювати всю функцію за відомими її фрагментами (за фазою – модуль, за уявною частиною – дійсну, тощо). Це реалізується за допомогою так званих дисперсійних співвідношень (див., наприклад, [106]). На відсутність особливостей на дійсній осі для загаяної функції Гріна можна записати простіші дисперсійні співвідношення у формі зв'язку дійсної та уявної частин

$$\begin{aligned} \text{Re } G_{AB}^{r\eta}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{AB}^{r\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'; \\ \text{Im } G_{AB}^{r\eta}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Re } G_{AB}^{r\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Аналогічні дисперсійні співвідношення для випереджуючої функції Гріна мають вигляд

$$\begin{aligned} \text{Re } G_{AB}^{a\eta}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{AB}^{a\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'; \\ \text{Im } G_{AB}^{a\eta}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Re } G_{AB}^{a\eta}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Спираючись на формулу для інтеграла типу Коші (3.32), можна вивести ряд властивостей функцій Гріна загаяного та випереджуючого типу, що зв'язані з відзначеними симетріями функції спектральної інтенсивності.

Операція комплексного спряження з урахуванням (3.23) дає таке співвідношення в області комплексних частот: $G_{AB}^{\eta}(\omega)^* = -G_{B^+A^+}^{\eta}(\omega^*)$, з якого при переході до дійсних частот випливає перша властивість симетрії функцій Гріна

$$G_{AB}^{r\eta}(\omega)^* = -G_{B^+A^+}^{a\eta}(\omega^*), \quad (3.36)$$

що зв'язує різнотипні функції.

Друга властивість симетрії відповідає інверсії частоти і слухна при $\eta = \pm 1$: $G_{AB}^{\eta}(-\omega) = \eta G_{BA}^{\eta}(\omega)$. Зазначимо, що вона не зв'язана з симетрією функції $I(\omega)$. Звідси для дійсних частот одержуємо властивість симетрії функцій Гріна

$$G_{AB}^{r\eta}(-\omega) = \eta G_{BA}^{a\eta}(\omega). \quad (3.37)$$

Нарешті, формула (3.26) приводить до аналогічного співвідношення $G_{AB}^{\eta}(\omega) = \pm G_{B^+A^+}^{\eta}(\omega)^{(\cdot)}$ та відповідної властивості симетрії для функцій Гріна

$$G_{AB}^{r\eta}(\omega) = \pm G_{B^+A^+}^{r\eta}(\omega)^{(\cdot)}. \quad (3.38)$$

Додамо, що властивість симетрії функції спектральної інтенсивності (3.24) тут участі не брала, а виявиться нижче.

У вигляді вправи покажіть, що у випадку дійсних функцій спектральної інтенсивності $I(\omega)$ другі рівняння у дисперсійних співвідношеннях (3.34) та (3.35) одержуються безпосередньо з спектральних зображень (3.29) та (3.30).

Нові можливості з'являються при переході в область комплексних значень змінної t . І в цьому випадку зручно почати з допоміжних кореляційних функцій

$$F_{AB}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega / 2\pi.$$

Якщо вважати часовий аргумент комплексним $t = t' + it''$, то для від'ємної уявної частини t'' збіжність інтеграла на верхній границі підсилюється за рахунок множника $\exp(-\omega t'')$. Збіжність же на нижній границі забезпечується при умові $|t''| \leq \hbar / T$, оскільки з огляду на температурну симетрію (3.24) маємо для кореляційної функції

$$F_{BA}(-t) \text{ інтеграл Фур'є } F_{BA}(-t) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{BA}(\omega) \exp(i\omega t) d\omega / 2\pi =$$

$= \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(-\hbar\omega / T - i\omega t) d\omega / 2\pi$, де навіть при зростаючому множнику $\exp(-\hbar\omega / T)$ на нижній границі передбачається збіжність.

Таким чином, у температурному випадку при надто загальних припущеннях про властивості функції спектральної інтенсивності (фактично вимагається рівномірна збіжність розглянутих інтегралів) можна вважати кореляційну функцію $F_{AB}(t)$ аналітичною функцією часового аргументу в смузі $-\hbar/T \leq \text{Im } t \leq 0$. До того ж саме аналітичне продовження здійснюється безпосередньо інтегралом. Вводячи нову змінну $\tau = it / \hbar$, одержуємо для кореляційних функцій спектральні розклади типу

$$F_{AB}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp(-\hbar\omega\tau) d\omega / 2\pi; \quad 0 < \text{Re } \tau < \beta \quad \text{та}$$

$$F_{BA}(-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega) \exp[-\hbar\omega(\tau + \beta)] d\omega / 2\pi; \quad -\beta < \text{Re } \tau < 0,$$

де введено позначення для зворотної температури $\beta \equiv 1/T$. З порівняння цих відношень випливає властивість симетрії кореляційних функцій в області комплексної температурної змінної

$$F_{BA}(-\tau) = F_{AB}(\tau + \beta); \quad -\beta < \text{Re } \tau < 0, \quad (3.39)$$

яка є наслідком температурної симетрії функції спектральної інтенсивності (3.24).

Аналітичні властивості кореляційних функцій в області комплексного часу (або температурної змінної) використовуються в техніці обчислення кореляційних величин із застосуванням методів квантової теорії поля (див., наприклад, [103]). Інший напрямок досліджень обмежується тільки відрізком дійсної осі температурної змінної τ (інакше кажучи, розглядається суто уявний час), де вводиться причинна функція Гріна, що аналогічна часовій причинній функції Гріна (3.17) та (3.19):

$$\tilde{G}_{AB}^{\text{en}}(\tau) = \theta(\tau)F_{AB}(\tau) + \eta\theta(-\tau)F_{BA}(-\tau) = \langle T_{\eta} A(\tau) B \rangle. \quad (3.40)$$

Вона визначена на інтервалі $-\beta < \tau < \beta$ і має назву мацубарівської, або температурної функції Гріна. З огляду на (3.39) при $-\beta < \tau < 0$ маємо співвідношення $\tilde{G}_{AB}^{\text{en}}(\tau) = \eta F_{BA}(-\tau) = \eta F_{AB}(\tau + \beta)$, яке означає, що така функція Гріна має властивість симетрії

$$\tilde{G}_{AB}^{\text{en}}(\tau) = \eta \tilde{G}_{AB}^{\text{en}}(\tau + \beta). \quad (3.41)$$

Для комутаторних функцій Гріна ($\eta = +1$) воно відповідає періодичності, а для антикомутаторних ($\eta = -1$) – антиперіодичності.

Подібні функції були введені вперше для розрахунку рівноважних характеристик (термодинамічних величин) за допомогою температурних аналогів техніки квантової теорії поля при обчисленні середніх значень від хронологізованих добуток операторів (так звана

мацубарівська техніка). У роботах Абрикосова, Горькова і Дзялошинського (див., наприклад, [86]) метод Мацубари одержав подальший розвиток при переході у відповідне частотне зображення. Мацубарівська функція Гріна (3.40) розкладається в ряд Фур'є на відрізки $-\beta < \tau < \beta$:

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) &= T \sum_{\omega_n} \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\omega_n) \exp(-i\omega_n \tau); \\ \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\omega_n) &= \int_{-\beta}^{\beta} \tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau / 2; \quad \omega_n = n\pi T; \quad n = 0, \pm 1, \dots\end{aligned}\quad (3.42)$$

і тим самим періодично продовжується на всю вісь температурної змінної τ . При цьому властивість симетрії функцій Гріна (3.41) приводить до правила добору для частот:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\omega_n) &= \eta \int_{-\beta}^0 \tilde{G}(\tau + \beta) \exp(i\omega_n \tau) d\tau / 2 + \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau / 2 = [1 + \eta \exp(-i\omega_n \beta)] \times \\ &\times \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau / 2 = [1 + \eta(-1)^n] \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau / 2.\end{aligned}$$

Таким чином, у випадку $\eta = +1$ відмінні від нуля тільки фур'є-компоненти з парними частотами $\omega_{2m} = 2m\pi T$, а у випадку $\eta = -1$ — з непарними $\omega_{2m+1} = (2m+1)\pi T$. Слід, однак, ще раз підкреслити, що у розглянутому кінетичному застосуванні вибір позначки комутативності η визначається не статистикою, якій підпорядковуються частинки системи, а характером задачі: комутаторні функції дають лінійну реакцію, а антикомутаторні дозволяють розрахувати спонтанні кореляції флюктуацій. Для відповідних відмінних від нуля фур'є-образів маємо:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\omega_n) &= \int_0^{\beta} \tilde{G}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \int_0^{\beta} F_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \int_0^{\beta} \exp(i\omega_n \tau) \left[\int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') \times \right. \\ &\times \exp(-\hbar\omega' \tau) d\omega' / 2\pi \Big] d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} I_{AB}(\omega') \frac{1 - (-1)^n \exp(-\hbar\omega' \beta)}{\hbar\omega' - i\omega_n} d\omega' / 2\pi.\end{aligned}$$

Ураховуючи, що при цьому $\eta = (-1)^n$, приходимо до спектрального зображення причинних температурних функцій Гріна

$$\tilde{G}_{AB}^{c\eta}(\omega_n) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{AB}(\omega') [1 - \eta \exp(-\hbar\omega' \beta)]}{\omega' - i\omega_n / \hbar} d\omega', \quad (3.43)$$

яке аналогічне наведеному раніше для загаяних та випереджаючих функцій Гріна (3.31) і має вигляд інтеграла типу Коші. Щоправда, фур'є-образи причинної функції Гріна визначені лише на дискретній множині частот, проте вона має граничну точку згущення на нескінченності, що забезпечує аналітичне продовження у відповідні області комплексних частот (див. [86]). Зіставлення виразів (3.43) та (3.32) дає формальне співвідношення

$$\tilde{G}_{AB}^{cn}(\omega_n) = (i/\hbar)G_{AB}^n(i\omega_n/\hbar), \quad (3.44)$$

з якого з урахуванням конкретних властивостей віток аналітичного продовження загаяних та випереджаючих функцій Гріна випливають розв'язки двох задач: за відомими загаяними та випереджаючими функціями Гріна одержати температурну причинну функцію Гріна і за відомими значеннями фур'є-компонент причинної функції Гріна відновити загаяну та випереджаючу функції Гріна.

При розв'язанні першої задачі треба урахувати властивості аналітичного продовження загаяних та випереджаючих функцій Гріна. Тоді приходимо до такої процедури: причинна функція Гріна для додатних частот одержується з аналітичного продовження загаяної функції Гріна в точках додатної уявної півосі

$\tilde{G}_{AB}^{cn}(\omega_n) = (i/\hbar)G_{AB}^n(i\omega_n/\hbar)$; $\omega_n > 0$, а для від'ємних частот – з аналогічного аналітичного продовження для випереджаючої функції Гріна $\tilde{G}_{AB}^{cn}(\omega_n) = (i/\hbar)G_{AB}^{cn}(i\omega_n/\hbar)$; $\omega_n < 0$.

З точки зору кінетики найбільший інтерес викликає друга, зворотна задача. Її розв'язок одержується також на підставі співвідношення (3.44), що читається у зворотному напрямку:

$$G_{AB}^n(\omega) = (\hbar/i)\tilde{G}_{AB}^{cn}(\omega_n = \hbar\omega/i). \quad (3.45)$$

Знаючи причинну функцію Гріна для дискретних частот, продовжуємо її аналітично в правій півосі до правого берега уявної осі, що дає загаяну функцію Гріна

$$G_{AB}^n(\omega) = (\hbar/i)\tilde{G}_{AB}^{cn}(\hbar\omega/i + \varepsilon), \quad (3.46)$$

а відповідне аналітичне продовження з лівої півосі дійсних частот (дискретних від'ємних) у лівій півплощині до лівого берега уявної осі дає випереджаючу функцію Гріна

$$G_{AB}^{cn}(\omega) = (\hbar/i)\tilde{G}_{AB}^{cn}(\hbar\omega/i - \varepsilon). \quad (3.47)$$

Для наочності треба зобразити відповідну площину комплексних частот, указати дискретні точки та області аналітичного продовження.

Для температурних причинних функцій Гріна було розроблено техніку обчислень, що базується на методах квантової теорії поля:

введення аналога гейзенбергівського та діраківського зображень для температурної змінної (враховується взаємодія частинок усередині самої системи), аналога S -оператора, вираз усіх фізичних характеристик через польові оператори вторинного квантування, використання аналога теореми Віка і побудова ряду узагальненої теорії збурень, застосування діаграмної техніки та методів вибіркового підсумовування у нескінченних рядах і так далі.

Спеціально для розрахунку кінетичних характеристик ці методи розвинуто у роботі [102], а також для суто кореляційних вихідних величин у [103], див. також [84-91].

Завершуючи обміркування часових функцій Гріна, стисло підсумуємо головні методи їх обчислення.

Розв'язання диференційного рівняння в часовому зображенні. Фактично одержується система зв'язаних між собою рівнянь типу ланцюжків Боголюбова [79,80]. Сюди ж приєднуються методи рівнянь для варіаційних похідних. При цьому використовуються конкретні часткові характеристики локального типу.

Пряме обчислення кореляційних функцій за часовим зображенням (3.18) або на підставі розкладу для функцій спектральної інтенсивності в енергетичному зображенні (3.22), а також використання аналітичного продовження у смугу комплексного часу.

Розрахунок причинних температурних функцій Гріна (мацубарівських) за допомогою методів квантової теорії поля та перехід до загально-випереджаючих функцій Гріна на підставі аналітичного продовження в частотному зображенні згідно з (3.46) і (3.47).

Як уже зазначалося, загаяні комутаторні функції Гріна мають безпосередній фізичний сенс, описуючи лінійну реакцію системи на змінні зовнішні впливи. При цьому одержують пряму фізичну трактовку як часове, так і частотне зображення функцій Гріна, що буде показано у наступному параграфі при більш конкретному аналізі узагальнених сприйнятливостей.

Для вправи розгляньте вигляд функції спектральної інтенсивності (3.22) для дворівневої системи. Отримайте функції Гріна одночастинкового типу для ідеального газу: гамільтоніан системи у зображенні вторинного квантування має вигляд $H = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k$, де k – повний набір квантових чисел стаціонарного стану однієї частинки, а величини, що обчислюються, мають білінійну структуру за операторами народження та знищення вигляду $\langle a_k(t_1) a_l^+(t_2) \rangle$.

3.3. Узагальнені сприйнятливості

Нехай на систему діє збурення у вигляді зондів

$$H_1(t) = -A_k F_k(t),$$

де в загальному випадку мається на увазі підсумовування за індексами, що зустрічаються двічі. Вони нумерують узагальнені сили $F_k(t)$ і узагальнені координати системи A_k . Реакція на такого типу зондування в лінійному наближенні згідно з (3.10) дорівнює

$$\langle A_l(t) \rangle = \int_{t_0}^t \langle \{ \tilde{A}_l(t), \tilde{A}_k(t_1) \} \rangle_0 F_k(t_1) dt_1, \quad \text{де припускаємо, що у}$$

незбуреній системі середні значення величин, які нас цікавлять, дорівнюють нулю, тобто $\langle A_l \rangle_0 = 0$. Звідси випливає запис реакцій у вигляді

$$\langle A_l(t) \rangle = \int_{t_0}^t \varphi_{lk}(t - t_1) F_k(t_1) dt_1, \quad (3.48)$$

де введено величини $\varphi_{lk}(t - t_1) = \langle \{ \tilde{A}_l(t), \tilde{A}_k(t_1) \} \rangle_0$, що звуться функціями післядії. Вони мають фізичний смисл l -ї реакції системи на k -й одиничний імпульсний зонд. Справді, якщо $F_k(t) = f\delta(t)$, то $\varphi_{lk}(t) = \langle \tilde{A}_l(t) \rangle / f$. Функції післядії

$$\varphi_{lk}(t) = \langle \{ \tilde{A}_l(t), \tilde{A}_k \} \rangle_0 \quad (3.49)$$

дійсні і в реальних макроскопічних системах спадають із зростанням t , описуючи процес релаксації при імпульсному зондуванні системи. Інші їх властивості будуть обмірковані пізніше.

Зауважимо, що позначення узагальнених сил тою ж літерою, що і допоміжних кореляційних функцій у попередньому параграфі, не повинне приводити до плутанини, оскільки останні не будуть більше фігурувати в явному вигляді.

Розглянутий тип імпульсних зондів є граничним випадком короткодійного збурення і містить у своєму спектрі рівномірно усі частоти. Інший граничний випадок відповідає одній частоті. Це монохроматичні зонди.

Припустимо, що всі зонди є монохроматичними з однією частотою (однокольорові) та включаються адіабатично при $t \rightarrow -\infty$, тобто

$$F_k(t) = \exp(\varepsilon t) \operatorname{Re}[F_k^0 \exp(-i\omega t)] = \exp(\varepsilon t) |F_k^0| \cos(\omega t - \beta_k);$$

$$F_k^0 = |F_k^0| \exp(i\beta_k), \quad \text{де звичайна гранична процедура } \varepsilon \rightarrow +0$$

виконується після всіх інших перетворень. Тоді у відповідності з (3.48) реакція дорівнює

$$\begin{aligned}\langle A_l(t) \rangle &= \int_{-\infty}^t \varphi_{lk}(t-t_1) \exp(\varepsilon t_1) \operatorname{Re}[F_k^0 \exp(-i\omega t_1)] dt_1 = \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \exp[(-\varepsilon + i\omega)\tau] \varphi_{lk}(\tau) d\tau F_k^0 \exp[(\varepsilon - i\omega)t] \right\},\end{aligned}$$

або

$$\langle A_l(t) \rangle = \operatorname{Re} \{ \chi_{lk}(\omega) F_k^0 \exp[(\varepsilon - i\omega)t] \}. \quad (3.50)$$

Величини $\chi_{lk}(\omega)$ звуться узагальненими сприйнятливостями системи (або адмітансами). Частота ω має малий уявний доданок $i\varepsilon$, який явно виписувати у адмітанса не будемо. Сприйнятливості є комплексними величинами, їх модулі визначають модулі відповідних реакцій, а фази визначають заганяння у відношенні до узагальненої сили, що збуджує:

$$\langle A_l(t) \rangle = \exp(\varepsilon t) |\chi_{lk}(\omega)| |F_k^0| \cos(\omega t - \beta_k - \alpha_{lk}); \quad \chi_{lk} = |\chi_{lk}| \exp(i\alpha_{lk}).$$

Узагальнені сприйнятливості безпосередньо зв'язані з функціями післядії:

$$\chi_{lk}(\omega) = \int_0^{\infty} \varphi_{lk}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau. \quad (3.51)$$

З огляду на лінійність зв'язку реакції з узагальненими силами при довільній залежності останніх від часу згідно з

$F_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_k(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega / 2\pi$ маємо для відповідного фур'є-образу реакції співвідношення

$$\langle A_l \rangle_{\omega} = \chi_{lk}(\omega) F_k(\omega), \quad (3.52)$$

чим визначається універсальна роль адмітансів у лінійній теорії реакції.

Вираз (3.51) дозволяє зв'язати узагальнені сприйнятливості безпосередньо з заганяними функціями Гріна:

$$\chi_{lk}(\omega) = i \int_0^{\infty} \Theta(\tau) \langle [\tilde{A}_l(\tau), A_k] \rangle_0 \exp(i\omega\tau) d\tau / \hbar = i \int_{-\infty}^{\infty} G_{lk}^{r,\eta=1}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau / \hbar,$$

так що

$$\chi_{lk}(\omega) = (i / \hbar) G_{lk}^{r\eta=1}(\omega). \quad (3.53)$$

Таким чином установлюється прямий фізичний сенс фур'є-образів загаяних комутаторних функцій Гріна, а з іншого боку, переносяться на узагальнені сприйнятливості всі властивості та розрахункові методи функцій Гріна.

Так же само безпосередній фізичний сенс загаяних функцій Гріна в часовому зображенні визначається їх зв'язком з функціями післядії (3.49):

$$G_{lk}^{r\eta=1}(t) = (\hbar / i) \theta(t) \phi_{lk}(t). \quad (3.54)$$

Згідно з (3.53) адмітанси є аналітичними у верхній півплощині комплексної частоти ω і мають низку властивостей симетрії: з (3.36) та (3.37) випливає, що

$$\chi_{kl}^*(\omega) = \chi_{kl}(-\omega). \quad (3.55)$$

Це приводить до парної реальної частини адмітанса і непарності уявної його частини:

$$\chi_{kl}(\omega) = \chi'_{kl}(\omega) + i\chi''_{kl}(\omega); \chi'_{kl}(-\omega) = \chi'_{kl}(\omega); \chi''_{kl}(-\omega) = -\chi''_{kl}(\omega). \quad (3.56)$$

Якщо у адмітансів немає особливостей на дійсній осі частот, то для них є слушними дисперсійні співвідношення типу (3.34), а урахування (3.56) приводить до формул

$$\chi'_{kl}(\omega) = \frac{2}{\pi} \oint_0^\infty \frac{\omega' \chi''_{kl}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'; \quad \chi''_{kl}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \oint_0^\infty \frac{\chi'_{kl}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (3.57)$$

Симетрія функцій Гріна (3.38) переноситься на адмітанси:

$$\chi_{kl}(\omega) = \pm \chi_{lk}^{(\circ)}(\omega). \quad (3.58)$$

Зінтерували частини праву частину формули (3.51), приходимо до співвідношення

$$\chi_{kl}(\omega) = (i / \omega) [\phi_{kl}(0) + \int_0^\infty \dot{\phi}_{kl}(\tau) \exp(i\omega\tau) d\tau],$$

а повторюючи цю процедуру і відокремлюючи дійсну та уявну частини, одержуємо високочастотні асимптотики для адмітансів

$$\chi'_{kl}(\omega) = -\dot{\phi}_{kl}(0) / \omega^2 + \ddot{\phi}_{kl}(0) / \omega^4 - \dots$$

$$\chi''_{kl}(\omega) = \varphi_{kl}(0) / \omega - \ddot{\varphi}_{kl}(0) / \omega^3 + \dots \quad (3.59)$$

Ці формули дають можливість безпосередньо обчислити адмітанси, оскільки вирази, що стоять у правій частини апроксимацій, з функціями післядії та їх похідними за часом при $t = 0$ звичайно можна одержати на підставі співвідношень комутації координат та імпульсів.

Якщо обидві частини рівності (3.51) зінтегрувати за частотою, то з урахуванням властивостей парності адмітансів приходимо до так званого правила сум

$$\int_0^{\infty} \chi'_{kl}(\omega) d\omega = \pi \varphi_{kl}(0) / 2, \quad (3.60)$$

оскільки в правій частині звичайно стоїть певна адитивна багаточастинкова величина – сума за частинками системи. Якщо ж $\varphi_{kl}(0) = 0$, то аналогічним способом з результату інтегрування частинами (за t) можна вивести правило сум виду

$$\int_0^{\infty} \omega \chi''_{kl}(\omega) d\omega = \pi \dot{\varphi}_{kl}(0) / 2. \quad (3.61)$$

Якщо для деякої величини f комутатор $[f, e^{-\beta H}]$ записати у вигляді $e^{-\beta H} X(\beta)$, то $X(\beta) = e^{\beta H} f e^{-\beta H} - f$ і $X(0) = 0$, а похідна

$$\partial X / \partial \beta = e^{\beta H} [H, f] e^{-\beta H} = -i \hbar \tilde{f}(-i \hbar \beta). \text{ Інтегруючи, одержуємо}$$

$$X(\beta) = -i \hbar \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i \hbar \lambda), \text{ так що}$$

$$[f, e^{-\beta H}] = e^{-\beta H} (-i \hbar) \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i \hbar \lambda).$$

Помножуючи обидві частини на $i / \hbar$ та ділячи на статсуму $\text{Sp} e^{-\beta H}$, приходимо до тотожності Кубо

$$\{f, \rho\} = \rho \int_0^{\beta} d\lambda \tilde{f}(-i \hbar \lambda), \quad (3.62)$$

за допомогою якої перетворюємо функції післядії:

$$\varphi_{lk}(t) = \text{Sp}[\{\tilde{A}_l(t), A_k\} \rho] = \text{Sp}[\{A_k, \rho\} \tilde{A}_l(t)] = \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp}[\rho \tilde{A}_k(-i \hbar \lambda) \tilde{A}_l(t)],$$

або

$$\varphi_{lk}(t) = \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(t + i \hbar \lambda) \rangle_0, \quad (3.63)$$

де існування корелятора в правій частині забезпечується тим, що аргумент $-t - i\hbar\lambda$ лежить у смузі аналітичності кореляційних функцій (див. попередній параграф). Підставляючи цей вираз у (3.51), одержуємо формулу Кубо для узагальнених сприйнятливостей

$$\chi_{lk}(\omega) = \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0. \quad (3.64)$$

Якщо нас цікавлять струменеві характеристики $\langle \dot{A}_l \rangle$, то відповідні узагальнені сприйнятливості – кінетичні коефіцієнти – виражаються через квантовий корелятор струменів $\beta^{-1} \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{A}_k \tilde{A}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0$, який переходить у класичній границі в матрицю кореляції швидкостей $\langle \dot{A}_k \dot{A}_l(\tau) \rangle_0$.

Похідна за часом від середньої енергії системи (середня потужність, що виділяється в системі) у випадку монохроматичних зондів дорівнює

$$\begin{aligned} d\langle E \rangle / dt &= -\langle A_k \rangle \dot{F}_k(t) = \\ &= (i\omega/4) (\chi_{kl} F_l^0 e^{-i\omega t} + \chi_{kl}^* F_l^{0*} e^{i\omega t}) (F_k^0 e^{-i\omega t} - F_k^{0*} e^{i\omega t})^*. \end{aligned}$$

Усереднюючи цю величину за періодом діючих сил, одержуємо зв'язок дисипації зі сприйнятливостями:

$$\overline{(d\langle E \rangle / dt)} = (i\omega/4) [\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega)] F_l^{0*} F_k^0. \quad (3.65)$$

Якщо матрицю узагальнених сприйнятливостей розбити на симетричну χ_{kl}^s та антисиметричну χ_{kl}^a частини, то дисипацію визначають такі величини: $\overline{(d\langle E \rangle / dt)} = (\omega/2) (\chi_{kl}^{s*} + i\chi_{kl}'^a) F_l^{0*} F_k^0$,

у зв'язку з чим χ_{kl}^{s*} і $\chi_{kl}'^a$ зовуть дисипативними частинами адмітансів.

Коли діє поодинокий зонд, то $\overline{(d\langle E \rangle / dt)} = (\omega/2) \chi_{AA}''(\omega) |F|^2$, так що уявна частина діагональних елементів матриці адмітансів безпосередньо визначає потужність, яка дисипується в системі.

Комбінацію адмітансів, що входить у вираз (3.65), можна зв'язати зі стрибком функцій Гріна:

$$\begin{aligned} \chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) &= [iG_{kl}^{r\eta=1}(\omega)/\hbar]^* - iG_{lk}^{r\eta=1}(\omega)/\hbar = \\ &= -i\hbar^{-1} [G_{lk}^{r\eta=1}(\omega) - G_{lk}^{a\eta=1}(\omega)] = -i\hbar^{-1} [I_{lk}(\omega) - I_{kl}(-\omega)]. \end{aligned}$$

У температурному випадку згідно з (3.24) маємо

$\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) = -i\hbar^{-1} I_{lk}(\omega) (1 - e^{-\hbar\omega/T})$, а для відповідної матриці кореляційних моментів, яка описує спонтанні флюктуації, фур'є-образ дорівнює $D_{lk}(\omega) = I_{lk}(\omega) (1 + e^{-\hbar\omega/T}) / 2$. Отже, $\chi_{kl}^*(\omega) - \chi_{lk}(\omega) = -2i\hbar^{-1} \text{th}(\hbar\omega/2T) D_{lk}(\omega)$. Звідси, по-перше, впливає флюктуаційно-дисипаційне співвідношення з огляду на (3.65)

$$(d\langle E \rangle / dt) = (\omega / 2\hbar) \text{th}(\hbar\omega / 2T) D_{lk}(\omega) F_l^{0*} F_k^0, \quad (3.66)$$

а, по-друге, згідно з (3.53) та (3.29) одержуємо зв'язок узагальнених сприйнятливостей з кореляціями флюктуацій

$$\chi_{lk}(\omega) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th}(\hbar\omega' / 2T) D_{lk}(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} d\omega'. \quad (3.67)$$

З огляду на додатну визначеність матриці кореляцій (покажіть невід'ємність за допомогою розкладу функції спектральної інтенсивності $I_{lk}(\omega)$ в енергетичному зображенні) енергія в системі справді дисипується (знак середньої потужності в (3.66) додатний). Формули (3.66) і (3.67) виражають так звану флюктуаційно-дисипаційну теорему, яка зв'язує міру спонтанних рівноважних флюктуацій з мірою дисипації енергії при зондуванні системи. Якщо система піддається зовнішньому впливу, то реакція і дисипація енергії визначаються спектральним складом кореляції спонтанних флюктуацій згідно з формулами (3.66) та (3.67). Спонтанні квадратичні відхилення визначають вимушені лінійні відхилення.

Для конкретного прикладу зовнішніх впливів розглянемо випадок, коли на систему зарядів діє однорідне змінне електричне поле. Гамільтоніан збурення можна записати у вигляді $H_1(t) = -P_k E_k(t)$, де узагальненими координатами є компоненти вектора поляризації системи (дипольного моменту) $P_k = \sum_a e_a x_k^a$, а узагальненими силами – компоненти напруженості електричного поля.

Для реакції у вигляді вектора густини електричного струму згідно з (3.52) маємо закон Ома $\langle j_l \rangle_\omega = \chi_{j_l P_k}(\omega) E_k(\omega)$, а тому тензор електропровідності (провідності) визначається адмітансом типу $\sigma_{lk}(\omega) = \chi_{j_l P_k}(\omega)$. Згідно з формулою Кубо (3.64)

$\sigma_{lk}(\omega) = \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) \langle \dot{P}_k \tilde{j}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0$. Зауваживши, що у випадку однорідних системи і поля (на відсутність просторової дисперсії) вектор густини струму та похідна від вектора поляризації зв'язані один з одною: $\dot{P}_k = \sum_a e_a v_k^a$;

$j_l(\mathbf{r}) = \sum_a e_a v_l^a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^a)$; $j_l = V^{-1} \int dV j_l(\mathbf{r}) = \dot{P}_l / V$, одержуємо формулу Кубо для тензора електропровідності

$$\sigma_{lk}(\omega) = V \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) \langle j_k \tilde{j}_l(\tau + i\hbar\lambda) \rangle_0. \quad (3.68)$$

Обмірковування питань, зв'язаних з урахуванням просторової дисперсії, а також загальне зондування електромагнітним полем див. у [107].

На цьому закінчується стислий розгляд теорії реакції системи на зовнішні впливи. Докладніше з цим напрямком можна ознайомитися за книгами [69-80, 86-91, 132].

У вигляді вправи дослідіть властивості симетрії матриці кореляційних моментів у часовому та частотному зображеннях.

Задачі за темою методу Кубо, функцій Гріна та узагальнених сприйнятливостей див. у книзі [16, пар. 23, 24].

Зауважимо, що цікавий підхід до опису періодичних зовнішніх впливів поза теорією збурень запропоновано Зельдовичем [11, 36] – метод квазіенергії.

Іншим напрямком квантової теорії нерівноважних процесів є дослідження властивостей систем на підставі більш детального аналізу різного роду частинних квантових кінетичних рівнянь [70, 74, 79, 97, 98].

Плідними виявились підходи на підставі побудови спеціальних форм статистичного оператора: вігнерівська квантова функція розподілу [84, 108] і метод нерівноважного статистичного оператора [69].

В останні роки ведеться планомірне дослідження процесів, що є далекими від рівноважних. Тут проблеми квантової кінетики змикаються із задачами інших сучасних нелінійних напрямків у фізиці (нелінійної оптики, солітоніки) і поза її межами. Узагальнюючий підхід одержав назву синергетики [62-67, 136-137].

П І С Л Я М О В А

Питання, які розглянуто в книзі, можна поділити на такі групи. Перша включає загальні методи, що є основою, фундаментом апарату квантової кінетики. Сюди можна віднести канонічні перетворення, зображення взаємодії, функції Гріна, операторні кінетичні рівняння, часові кореляції флюктуацій, змінні збурення та ін. Друга містить елементарні акти, які є основою фізичних уявлень про першопричини явищ та ефектів квантової кінетики. Це – розсіяння на неоднорідностях, взаємодія квазічастинок, межові впливи, релаксація і розпад нестаціонарних станів, процеси переносу частинок, маси, заряду, квантова дифузія у вигляді розпливання хвильових пакетів (див. також дифузію в квантових кристалах [114, 115]). Третя група об'єднує питання чисельних методів, що надто актуальні на цей час, коли здійснюється перехід на нову технологію розв'язання задач з програмуванням за терміналом та розвитком відповідного стилю мислення (комп'ютерне моделювання, методи дискретизації, різницеві схеми, обчислювальний експеримент, комп'ютерні методи дослідження та ін.). Четверта зв'язує питання квантової кінетики та солітонної фізики (зіставлення взаємодії хвильових пакетів і солітонів, розсіяння квантових частинок на солітонах, що нерухомі або рухаються, тощо). Таким чином, основна мета книги полягає в тому, щоб, по-перше, дати загальний вступ до методів кінетичних рівнянь, по-друге, розглянути елементарні фізичні акти кінетики, по-третє, показати нові напрямки та реалізувати ідею наочності на підставі комп'ютерного моделювання, по-четверте, установити зв'язки з солітонною фізикою, по-п'яте, викласти основи лінійної теорії реакції.

Досвід викладання показав, що вступні розділи дозволяють природнішим способом переходити до складних питань кінетики у конкретних макроскопічних системах, до окремих проблем, що досліджуються в спецкурсах (кінетичні рівняння в теорії плазми, теорії металів, напівпровідників, надпровідників, тощо). Під час навчання важливо, крім того, пробудити інтерес до предмету взагалі. А це звичайно досягається за допомогою розглядання простих прикладів з максимально досяжною наочністю. Потім уже можна переходити до абстрактніших побудов теорії кінетичних явищ, яка базується на функціях Гріна, польових методах, діаграмній техніці й так далі. У вигляді загальнофізичного вступу до конкретних систем можна пропонувати книги Каганова [113] та Каганова та Ліфшиця [114], а також учбовий посібник Клімонтовича [116], де "теорія нерівноважних систем є стрижнем усього курсу". Нарешті, за всіма питаннями слід, як завжди, звертатися до фізичних енциклопедій [68, 117].

Даний посібник на українській мові є заснованим на книзі автора [131], яку було перероблено та доповнено.

ДОДАТОК 1

ОДНОЧАСТИНКОВІ ФУНКЦІЇ ГРІНА НЕСТАЦІОНАРНОГО РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА (ФУНКЦІЇ ПОШИРЕННЯ, ПРОПАГАТОРИ)

1. Вільний n -вимірний рух:

$$U(r, t; r_0, 0) = (m / 2\pi i \hbar t)^{n/2} \exp \frac{im(r - r_0)^2}{2\hbar t}.$$

2. Гармонічний осцилятор:

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

3. Тривимірний рух у постійному однорідному силовому полі:

$$U(r, t; r_0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(r - r_0)^2}{2t} + \frac{(r + r_0)Ft}{2} - \frac{F^2 t^3}{24m} \right].$$

4. Одновимірний напівобмежений рух ($x, x_0 < 0$):

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

$$U = 0 \quad \forall \quad x, x_0 > 0.$$

ДОДАТОК 2

ЛІНІЙНІ ЕВОЛЮЦІЙНІ РІВНЯННЯ ТА ОПЕРАТОРИ ГРІНА

Розв'язок операторного еволюційного рівняння $\partial \hat{X} / \partial t = \hat{A}(t) \hat{X}$ з початковою умовою $\hat{X}(t_0) = \hat{X}_0$ можна виразити через оператор Гріна (оператор еволюції, пропагатор) $\hat{J}(t, t_0)$ таким чином: $\hat{X}(t) = \hat{J}(t, t_0) \hat{X}_0$. Пропагатор задовольняє те ж еволюційне рівняння з початковою умовою $\hat{J}(t_0, t_0) = 1$ та має властивості: $\hat{J}(t, t_0) = \hat{J}(t, t_1) \hat{J}(t_1, t_0)$; $\hat{J}^{-1}(t, t_0) = \hat{J}(t_0, t)$; $\hat{J}_A^+(t, t_0) = \hat{J}_{-A^*}^{-1}(t, t_0)$ (аргумент t вважається за дійсний). Якщо параметричний оператор $\hat{A}$ є антиермітовим, то пропагатор є унітарним.

У вигляді вправи перевірте виконання вказаних властивостей пропагаторів, а також виявіть властивості пропагатора $\hat{J}^{(c)}(t, t_0)$ аналогічного еволюційного рівняння $\partial \hat{Y} / \partial t = \hat{Y} \hat{A}(t)$. Покажіть, що $\hat{J}_A^{(c)}(t, t_0) = \hat{J}_{-A}^{-1}(t, t_0)$.

Запишіть розв'язки рівнянь $\partial \hat{Z} / \partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]$ та $\partial \hat{Z} / \partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_+$ з початковими умовами $\hat{Z}(t_0) = \hat{Z}_0$ за допомогою пропагаторів $\hat{J}(t, t_0)$.

Пропагатори дозволяють подати загальний розв'язок неоднорідного рівняння $\partial \hat{X} / \partial t = \hat{A}(t) \hat{X} + \hat{B}(t)$ у вигляді

$$\hat{X}(t) = \hat{J}_A(t, t_0) \hat{X}_0 + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1).$$

Знайдіть відповідні розв'язки для рівнянь типу $\partial \hat{Y} / \partial t = \hat{Y} \hat{A}(t) + \hat{B}(t)$ і $\partial \hat{Z} / \partial t = [\hat{A}(t), \hat{Z}]_{\pm} + \hat{B}(t)$.

Зокрема, звідси випливає, що пропагатор для суми параметричних операторів $\hat{J}_{A+B}(t, t_0)$ задовольняє інтегральне рівняння

$$\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = \hat{J}_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_{A+B}(t_1, t_0).$$

Такий неявний вираз можна назвати адитивним зображенням для розглянутого пропагатора. Ітерації приводять до ряду за степенями величини B :

$$\begin{aligned} \hat{J}_{A+B}(t, t_0) = & \hat{J}_A(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0) + \\ & + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{J}_A(t, t_1) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_2) \hat{B}(t_2) \hat{J}_A(t_2, t_0) + \dots \end{aligned}$$

З іншого боку, неважко переконатися, що є слушним мультиплікативне зображення $\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = \hat{J}_A(t, t_0) \hat{J}_{\tilde{B}}(t, t_0)$,

$$\text{де } \tilde{B}(t_1) = \hat{J}_A^{-1}(t_1, t_0) \hat{B}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0).$$

Аналогічні співвідношення можна одержати і для пропагатора $\hat{J}_{A+B}^{(c)}(t, t_0)$.

Якщо параметричний оператор не залежить явно від аргументу ($\partial \hat{A} / \partial t = 0$), то $\hat{J}_A(t, t_0) = \exp[(t - t_0) \hat{A}]$. Аналогічно у випадку $[\hat{A}(t_1), \hat{A}(t_2)] = 0 \quad \forall \quad t_1, t_2 \in [t_0, t]$ для пропагатора маємо явний вираз $\hat{J}_A(t, t_0) = \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1]$.

З адитивного зображення випливає правило диференціювання пропагаторів за параметрами, від яких залежить генератор A :

$\partial \hat{J}_A(t, t_0) / \partial \lambda = \int_{t_0}^t dt_1 \hat{J}_A(t, t_1) (\partial \hat{A} / \partial t) \hat{J}_A(t_1, t_0)$. Зокрема, одержуємо

спосіб диференціювання операторної експоненти

$$\partial e^{\hat{A}} / \partial \lambda = e^{\hat{A}} \int_0^1 dt e^{-t\hat{A}} (\partial \hat{A} / \partial \lambda) e^{t\hat{A}}.$$

Диференційне рівняння для пропагатора $\partial \hat{J} / \partial t = \hat{A}(t) \hat{J}$ та початкова умова $\hat{J}(t_0, t_0) = 1$ є еквівалентними інтегральному рівнянню

$$\hat{J}_A(t, t_0) = 1 + \int_{t_0}^t dt_1 \hat{A}(t_1) \hat{J}_A(t_1, t_0). \text{ Ітерації дають вираз}$$

$$\hat{J}_A(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{A}(t_1) \hat{A}(t_2) \dots \hat{A}(t_n), \text{ до якого зводиться і}$$

хронологізована експонента $T \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1]$ при $t > t_0$. Якщо поряд із

звичайною (прямою) хронологізацією $T \equiv T^>$ скористатися зворотною хронологізацією $T^<$, то у подібний же спосіб можна переконатися, що

$$\hat{J}_A(t, t_0) = T^< \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1] \text{ при } t < t_0. \text{ Аналогічно}$$

$$\hat{J}_A^{(<)}(t, t_0) = T^< \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1] \text{ при } t > t_0 \text{ і}$$

$$\hat{J}_A^{(<)}(t, t_0) = T^> \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1] \text{ при } t < t_0.$$

Такий зв'язок хронологізованих експонент з пропагаторами дозволяє перенести властивості останніх на відповідні Т-експоненти. Так, можна одразу ж обчислити зворотний і спряжений оператори:

$$(T^> \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1])^{-1} = T^< \exp[-\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1];$$

$$(T^> \exp[\int_{t_0}^t \hat{A}(t_1) dt_1])^{+} = T^< \exp[+\int_{t_0}^t \hat{A}^{+}(t_1) dt_1].$$

З іншого боку, використання Т-експоненти та мультиплікативного зображення для пропагатора приводить до формули для експоненти від суми двох операторів $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} T \exp(\int_0^1 dt e^{-t\hat{A}} \hat{B} e^{t\hat{A}})$. У випадку комутуючих

операторів Т-експонента зводиться до звичайної експоненти, так що одержується просте правило комутативної алгебри $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp \hat{A} \cdot \exp \hat{B}$.

На закінчення розгляньте у вигляді вправ декілька прикладів операторної симетризації експонент, використовуючи властивості пропагаторів. Покажіть, що

$$1. e^{i\hat{A}} \hat{B} e^{-i\hat{A}} = \hat{B} + i[\hat{A}, \hat{B}] + i^2[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] / 2! + \dots$$

2.

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A} / 2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A} / 2) = \exp \hat{A} \exp \hat{B} \exp([\hat{B}, \hat{A}] / 2),$$

якщо $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$.

$$3. \exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A} / 2) \exp \hat{B} \exp(\hat{A} / 2) \exp([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] / 24),$$

якщо $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ і $[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] = 0$.

У вправах 2 і 3 доцільно скористатися зв'язком експоненти з пропагатором $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{J}_{A+B}(1, 0)$ та мультиплікативним зображенням останнього, а також результатом вправи 1.

4. Покажіть, що для операторів $\hat{A}(t) = \eta(t)\hat{a}^+$ і $\hat{B}(t) = -\eta^*(t)\hat{a}$, де $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$, пропагатор $\hat{J}_{A+B}(t, t_0) = e^{i\chi} e^{z\hat{a}^+ - z^*\hat{a}}$, де $z(t) = \int_{t_0}^t \eta(t_1) dt_1$ та $\chi(t) = \text{Im} \int_{t_0}^t \eta(t_1) z^*(t_1) dt_1$.

ДОДАТОК 3

ДЕЯКІ СПІВВІДНОШЕННЯ СТАЦІОНАРНОЇ ТЕОРІЇ ОДНОВИМІРНОГО РОЗСІЯННЯ

1. Зв'язок амплітуд відбиття та проходження для двох фундаментальних розв'язків.

У випадку стаціонарного одновимірного рівняння Шредінгера для частинки, що рухається в локалізованому потенціальному полі $U(x)$, $\Psi'' + [k^2 - u(x)]\Psi = 0$, де $\hbar k = \sqrt{2mE}$ і $u(x) = 2mU(x) / \hbar^2$, для кожного значення енергії $E > 0$ розглядаємо два типи розв'язків, які відповідають задачі розсіяння при падінні частинок на розсіювач зліва $\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} [\exp(ikx) + B(k)\exp(-ikx)]$, $x \rightarrow -\infty$;

$$\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} C(k)\exp(ikx); x \rightarrow +\infty \text{ і справа}$$

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

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

амплітудами розсіяння можна встановити співвідношення за допомогою вронскіана $W(\psi, \varphi) = \psi\varphi' - \psi'\varphi$, обчислюючи його для різних варіантів пар

розв'язків та порівнюючи результати розрахунку в областях $x \rightarrow -\infty$ і $x \rightarrow +\infty$ (відповідно $W_{\mp}$).

Перший варіант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)$ та $\Psi_k^{(-)}(x)$. Обчислення дають такі результати: $W_- = -ik\tilde{C}(k)/\pi$ та $W_+ = -ikC(k)/\pi$. Звідси випливає співвідношення $\tilde{C}(k) = C(k)$, що встановлює рівність амплітуд проходження.

Другий варіант: пара розв'язків $\Psi_k^{(+)}(x)$ та $\Psi_k^{(+)}(x)^*$. Результати обчислень дають $W_- = -ik(1-|B|^2)/\pi$ та $W_+ = -ik|C|^2/\pi$, так що одержуємо умову для коефіцієнтів відбиття та проходження при падінні зліва $1 - |B(k)|^2 = |C(k)|^2$.

Третій варіант: пара $\Psi_k^{(-)}(x)$ та $\Psi_k^{(-)}(x)^*$. У відповіді маємо аналогічне попередньому співвідношення для падіння справа $1 - |\tilde{B}(k)|^2 = |\tilde{C}(k)|^2$.

Четвертий варіант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)^*$ і $\Psi_k^{(-)}(x)^*$. Це не дає нового співвідношення, а дає комплексно спряжене відносно результату першого варіанту.

П'ятий варіант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)$ і $\Psi_k^{(-)}(x)^*$. Проробивши викладки, приходимо до співвідношення для амплітуд відбиття $B\tilde{C}^* = -\tilde{B}^*C$.

Шостий варіант: пара $\Psi_k^{(+)}(x)^*$ і $\Psi_k^{(-)}(x)$. Вираз зводиться до комплексного спряження попереднього результату.

Отже, на підставі розрахунку вронскіана для двох розв'язків, що мають однакову енергію та взяті в двох просторових областях, де відомі асимптотики задачі розсіяння, одержуються такі результати.

По-перше, співвідношення взаємності для амплітуд відбиття $\tilde{C}(k) = C(k)$, що означає незалежність коефіцієнтів відбиття і проходження від напрямку розсіяння.

По-друге, збереження потоку (висновок рівняння неперервності) $1 - |B(k)|^2 = |C(k)|^2$.

По-третє, зв'язок характеристик розсіяння ліворуч і праворуч $\tilde{B}(k) = -B(k)^*C(k)/C(k)^*$, що приводить до співвідношення для фаз розсіяння $\tilde{\varphi}_B(k) = \pi - \varphi_B(k) + 2\varphi_C(k)$, де $B = |B|\exp i\varphi_B$ і $C = |C|\exp i\varphi_C$.

Цікавим окремим випадком є розсіяння на δ -потенціалі, для якого $\tilde{B}(k) = B(k)$.

Про термінологію. У книзі прийнято такі назви характеристик одновимірного розсіяння. Амплітуди розсіяння: амплітуда відбиття $B(k)$ та

амплітуда проходження (прозорості) $C(k)$. Коефіцієнти розсіювання: коефіцієнт відбиття $R(k) = |B(k)|^2$ та коефіцієнт проходження (прозорості) $T(k) = |C(k)|^2$.

2. Співвідношення ортонормованості для фундаментальних розв'язків. Розглянемо два розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера Ψ_1^* та Ψ_2 , які належать у загальному випадку різним значенням енергії, так що (потенціал вважаємо дійсним)

$\Psi_1^{**} + (k_1^2 - u)\Psi_1^* = 0$ і $\Psi_2'' + (k_2^2 - u)\Psi_2 = 0$. Помножуючи перше рівняння на Ψ_2 , а друге на Ψ_1^* і віднімаючи з другого перше, приходимо до співвідношення $dW(\Psi_1^*, \Psi_2) / dx + (k_2^2 - k_1^2)\Psi_1^*\Psi_2 = 0$. Інтегруючи, одержуємо зручну для подальших обчислень формулу

$\int_{-A}^A \Psi_1^*(x)\Psi_2(x)dx = (W_+ - W_-) / (k_1^2 - k_2^2)$, де координата A є досить великою, щоб були слушними асимптотики розсіювання (позначення для вронскіана ті ж самі, що й у першому пункті цього додатка). З одержаного співвідношення випливають умови ортонормованості розглянутих фундаментальних розв'язків $(\Psi_{k_1}^{(\pm)}, \Psi_{k_2}^{(\pm)}) = \delta(k_1 - k_2)$; $(\Psi_{k_1}^{(+)}, \Psi_{k_2}^{(-)}) = 0$. У вигляді вправи переконайтесь у цьому, вибираючи відповідні пари розв'язків. Переходячи в остаточних відповідях до границі при $A \rightarrow +\infty$, пам'ятайте, що маєте справу з узагальненими функціями. Зокрема, використайте граничний перехід $\lim_{A \rightarrow \infty} \sin(Ak) / k = \pi\delta(k)$.

3. Зв'язок з іншими фундаментальними розв'язками. У теорії одновимірного розсіювання був досягнутий значний прогрес у зв'язку з розвитком теорії солітонів та розробкою оберненої задачі розсіювання (ОЗР). При цьому використовуються різні фундаментальні системи. Так, у відповідності з визначенням з книги [35], так звані функції Йоста $f_1(x, k)$ і $f_2(x, k)$ зв'язані з розглянутими фундаментальними розв'язками таким чином:

$$\Psi_k^{(+)}(x) = (2\pi)^{-1/2} C(k) f_1(x, k); \quad \Psi_k^{(-)}(x) = (2\pi)^{-1/2} C(k) f_2(x, k).$$

У книзі [36] розглядаються два базиси: $\psi(x, k)$; $\psi^*(x, k)$ і $\phi(x, k)$; $\phi^*(x, k)$, зв'язок яких з функціями Йоста встановлюється співвідношеннями $\psi(x, k) = f_1^*(x, k)$ та $\phi(x, k) = f_2(x, k)$. В основу покладено картину розсіювання під час падіння частинок справа. Вводяться відповідні характеристики розсіювання $r(k)$ і $t(k)$, а також допоміжні величини $a(k)$ і $b(k)$, які зв'язані з розглянутими в нашій книзі величинами таким чином: амплітуда розсіювання вперед (амплітуда проходження) $t(k) = a^{-1}(k) = \tilde{C}(k)$; амплітуда розсіювання назад (амплітуда відбиття)

$r(k) = b(k)a^{-1}(k) = \tilde{B}(k)$. Там же обмірковуються аналітичні властивості і відповідні дисперсійні співвідношення, за допомогою яких за амплітудою розсіяння назад, що задана, можна знайти і амплітуду розсіяння вперед. Докладно розгортається метод оберненої задачі розсіяння (ОЗР).

Додамо, що різні відомості про задачу розсіяння та її тривимірний аналог можна черпнути з книг [94,95].

Доповненням до характеристик неперервного енергетичного спектра є параметри дискретного спектра: якщо хвильові функції зв'язаних стаціонарних станів нормувати умовою $\Psi_n(x) \approx \exp(\alpha_n x)$, $x \rightarrow -\infty$, то $\Psi_n(x) \approx b_n \exp(-\alpha_n x)$, $x \rightarrow +\infty$, а величини $|b_n|$ разом з $\alpha_n = \sqrt{2m|E_n|} / \hbar$ і $r(k)$ утворюють набір, що зветься даними розсіяння [36]: $r(k); \alpha_n, |b_n|, n = 1, 2, \dots, N$.

ДОДАТОК 4

ОБЧИСЛЕННЯ ДЕЯКИХ ІНТЕГРАЛІВ

1. Стандартний пакетний інтеграл.

При описі руху гауссових пакетів зустрічається інтеграл типу

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-D_0(k - k_0)^2 - itE(k) / \hbar + ikx] dk, \quad \text{де} \quad E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$$

(квадратичний закон дисперсії). За допомогою заміни змінних $K = k - k_0$ інтеграл приводиться до табличного [29, с. 494] (що легко перетворюється до інтегралу Пуассона). В результаті одержуємо точну відповідь:

$$I_1 = \sqrt{\pi / [D_0 \gamma(t)]} \exp[-itE(k_0) / \hbar + ik_0 x - (x - v_0 t)^2 / 4D_0 \gamma(t)],$$

де $\gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0$; $v_0 = \hbar k_0 / m$.

$$2. \text{ Інтеграл } I_2 = \int_0^{\infty} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2] dk; \quad D_0 k_0^2 \gg 1, \text{ де функція } f(k)$$

слабко змінюється в околі гострого максимуму гауссової функції, обчислюється у відповідності з методом Лапласа [34] інтегруванням за околom k_0 : $I_2 \approx \int_{(k_0)} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2]$. Розкладаючи фазу $\varphi(k)$

функції $f(k)$ у ряд за степенями $k - k_0$ та нехтуючи внеском кубічних членів і зміною модуля функції $f(k)$, приходимо до виразу $I_2 \approx f(k_0) \int_{(k_0)} \exp[-D_0(k - k_0)^2 + i(k - k_0)\varphi'(k_0) + i(k - k_0)^2 \varphi''(k_0) / 2] dk$

Поширюючи інтегрування в тому ж наближенні на всю вісь k , зводимо

інтеграл до розглянутого в попередньому пункті стандартного, так що $I_2 \approx f(k_0) \sqrt{\pi / (D_0 \gamma)} \exp \{ -[\varphi'(k_0)]^2 / 4 D_0 \gamma \}$, де $\gamma = 1 - i\varphi''(k_0) / 2 D_0$.

$$3. \text{Інтеграл } I_3 = \int_0^{\infty} f(k) \exp[-D_0(k - k_0)^2 - itE(k) / \hbar + ikx] dk$$

обчислюється аналогічно попередньому:

$$I_3 \approx f(k_0) \sqrt{\pi / (D_0 \gamma)} \exp \{ -itE(k_0) / \hbar + ik_0 x - [x - v_0 t + \varphi'(k_0)]^2 / 4 D_0 \gamma(t) \}, \text{ де } \gamma(t) = 1 + i\hbar t / 2mD_0 - i\varphi''(k_0) / 2D_0; \\ v_0 = \hbar k_0 / m.$$

Урахування зміни модуля функції $f(k)$ приводить до зсуву точки максимуму: $k_0 \rightarrow k_0 + |f(k_0)'| / 2D_0 |f(k_0)|$, що у першому наближенні викликає зсування швидкості $v_0 \rightarrow v_0 + \hbar |f(k_0)'| / 2mD_0 |f(k_0)|$.

Розглянуті інтеграли визначаються виглядом гауссова розподілу. Більш загальний підхід до обчислення інтегралів типу I_3 є можливим для інших розподілів за умови $t \rightarrow \infty$ на підставі методу стаціонарної фази [34].

ДОДАТОК 5

МЕТОДИЧНІ ЗАУВАЖЕННЯ ЩОДО ВИКОРИСТАННЯ МАТЕРІАЛУ КНИГИ

У зв'язку з особливою увагою до організації самостійної роботи студентів зробимо деякі додаткові зауваження.

1. Матеріал першої частини книги можна використати в загальному курсі квантової механіки (чи відповідних розділах курсу загальної фізики) перш за все для лекційних демонстрацій. Звичайно курси квантової теорії бідні на ілюстрації (рідкі приклади графіків спецфункцій, таблиці власних значень, тощо), тоді як сучасні методи навчання потребують більш наочного викладання абстрактних теоретичних дисциплін.

Деякі питання можна рекомендувати у вигляді додаткового матеріалу для самостійного вивчення. Окрім того, вправи та задачі з першої частини можуть бути надані студентам як домашні завдання та служити основою контрольних робіт.

2. Книга надає широких можливостей викладачам давати спеціальні індивідуальні завдання для самостійної роботи, що звичайно практикується при вивченні відповідних загальних курсів квантової теорії, зокрема квантової механіки та квантової статистики. Це можуть бути як окремі параграфи, так і більш складні задачі, що містяться в них.

3. Книга може служити основою спеціального курсу, що попереджає спецкурси з кінетики конкретних систем ("Кінетика напівпровідників", "Кінетика надпровідників", "Квантові кінетичні рівняння", тощо).

4. Окремі питання, що доторкнені в книзі, можуть складати додаткові глави з солітонної фізики (1.8, с. 52; 1.12, с. 78-81; 2.4, с. 101-110).

5. Особливої уваги треба приділити тим питанням з першого та другого розділів книги, які зв'язані з комп'ютерним моделюванням. Зараз студентам вже доступні сучасні персональні комп'ютери з багатими графічними можливостями. Книгу орієнтовано перш за все на такі обчислювальні системи. Робота з персональним комп'ютером вирішує одночасно декілька задач навчання: вивчення конкретної фізичної дисципліни (в нашому випадку – квантової теорії), виробка навиків дослідницької роботи з комп'ютером, природне опанування програмування та відповідних мов спілкування з ЕОМ, а також одночасно закріплення знань іноземної мови (в основному англійської). Таким чином, реалізується самостійна, індивідуальна, активна, творча, цілеспрямована, навчаюча діяльність студента, що контролюється викладачем. Зрозуміло, можливе об'єднання декількох користувачів для виробки навичок колективної роботи.

6. Матеріал книги можна використати для розробки лабораторних робіт для практикуму з обчислювальних методів теоретичної фізики на базі різноманітних персональних комп'ютерів.

7. Книга може бути посібником для курсу з основ інформатики та обчислювальної техніки – використання в конкретних галузях фізики (квантова механіка, квантова кінетика, солітонна фізика).

8. Матеріали книги можуть увійти в комп'ютерні системи навчання відповідних дисциплін теоретичної фізики.

9. Застосування персональних комп'ютерів у наукових дослідженнях та учбовому процесі – одна з важливих галузей автоматизації інтелектуальних видів діяльності. Треба зауважити, що досі ще мало посібників, присвячених роботі на персональних комп'ютерах у конкретній галузі (наприклад, фізиці). Книга в деякій мірі повинна заповнити цю прогалину. На черзі розробка програмного забезпечення систем комп'ютерного навчання спеціальним предметам з залученням зусиль спеціалістів різного профілю (математиків, психологів, педагогів, фізиків та ін.).

10. У книзі значне місце приділено різним аспектам комп'ютерної графіки, створенню демонстрацій з виведенням динамічних зображень на екрани дисплеїв з графікою високого розрізнення (спеціальних моніторів чи звичайних телевізійних приймачів).

При розробці демонстрацій треба багато уваги приділяти оформленню (екранні заголовки та стислі пояснення, компоновка частин зображення, кольорове та звукове супроводження, документація та докладні пояснення в розпечатках та додатках до них, тощо). На основі таких розробок можна потім створювати комп'ютерні навчальні програми з квантової теорії, а також знімати учбові та дослідницькі анімаційні фільми.

На с. 113-114 є перелік прикладів комп'ютерного моделювання, розглянутих у першому та другому розділах книги.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - М.: Наука, 1989. - 768 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. Теоретична фізика: Підручник: У 2 т. Т. 2. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. - К.: Вища шк., 1993. - 415 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. Бурштейн 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 их применения. - М.: Наука, 1987. - 272 с.
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., Рябенький 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.T. Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena // Am. J. Phys. - 1967. - **35**, № 3. - P. 177-186.
46. Березин Ю.А. Моделирование нелинейных волновых процессов. - Новосибирск: Наука, 1982. - 160 с.
47. Zabusky Y.J. Solitons and Bound States of the Time-Independent Schrodinger Equation // Phys. Rev. - 1968. - **168**, № 1. - P. 124-128.
48. Жаблон Л., 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. Стил, разработка, эффективность, отладка и испытание программ. - М.: Мир, 1981. - 320 с.
53. Епанешников А.М., Епанешников В.А. Программирование в среде Turbo Pascal 7.0. - М: ДИАЛОГ-МИФИ, 1993. - 288 с.
54. Поляков Д.Б., Круглов И.Ю. Программирование в среде Турбо Паскаль. - М.: Изд-во МАИ, 1992. - 576 с.
55. Довгаль С.И., Сбитнев А.И. Паскаль, Турбо Паскаль, многооконная среда на персональных ЭВМ. - К.: Информсистема сервис, 1992. - 181 с.
56. Зуев Е.А. Язык программирования Turbo Pascal 6.0. - М.: Унитех, 1992. - 298 с.
57. Мизрохи С.В. TURBO PASCAL и объектно-ориентированное программирование. - М.: Финансы и статистика, 1992. - 192 с.

58. Schneider D.I. Handbook of BASIC: For the IBM PC, XT, AT, PS/2 and Compatibles. - New York: Brady, 1988. - 750 с.
59. Михайлов В.Ю., Степанников В.М. Современный Бейсик для IBM PC. Среда, язык, программирование. - М.: Изд-во МАИ, 1993. - 288 с.
60. Кетков Ю.Л. GW-, Turbo- и Quick-BASIC для IBM PC. - М.: Финансы и статистика, 1992. - 240 с.
61. Райманс Х.Г. Вводный курс Visual Basic. - К.: BHV, 1993. - 272 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., Рыдник 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. энциклопедия, 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., Клингер 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. Гленсдорф 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. Эксперимент на дисплее. - М.: Наука, 1989. - 175 с.
110. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. - М.: Наука, 1990. - 176 с.
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: Идеи и принципы квантовой физики твердого тела. - М.: Наука, 1989. - 91 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 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. Симпсон Г. Профессиональная работа на персональном компьютере. - М.: Финансы и статистика, 1988. - 286 с.
121. Трейстер Р. Персональный компьютер фирмы ИБМ. - М.: Мир, 1986. - 208 с.
122. Пул Л. Работа на персональном компьютере. - М.: Мир, 1986. - 383 с.
123. Брябрин В.М. Программное обеспечение персональных ЭВМ. - М.: Наука, 1988. - 272 с.
124. Фигурнов В.Э. IBM PC для пользователя. - М.: Финансы и статистика, 1991. - 288 с.
125. Смирнов Н.Н. Программные средства персональных ЭВМ. - Л.: Машиностроение, 1990. - 272 с.
126. Кенин А.М., Печенкина Н.С. Работа на IBM PC. - М.: АО Книга и бизнес, 1992. - 368 с.
127. Ulyanov V.V, Zaslavskii O.B. New methods in the theory of quantum spin systems // Phys. Rep. - 1992. - **216**, № 4. - Р. 179-251.
128. Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. - М.: Мир, 1988. - 694 с.
129. Абловиц М., Сигур Х. Солитоны и метод обратной задачи. - М.: Мир, 1987. - 479 с.
130. Раджараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля. - М.: Мир, 1985. - 416 с.
131. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Вища шк., 1987. - 144 с.
132. Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. - М.: Изд-во МГУ, 1989. - 240 с.
133. Федер Е. Фракталы. - М.: Мир, 1991. - 254 с.
134. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. - М.: Наука, 1991. - 136 с.
135. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. - М.: Мир, 1990. - Ч. 1. - 349 с.; Ч. 2. - 400 с.
136. Компьютеры и нелинейные явления. - М.: Наука, 1988. - 192 с.
137. Компьютеры, модели, вычислительный эксперимент. - М.: Наука, 1988. - 176 с.
138. Хирн Д., Бейкер М. Микрокомпьютерная графика. - М.: Мир, 1987. - 352 с.
139. Грайс Д. Графические средства персонального компьютера. - М.: Мир, 1989. - 376 с.

ОСНОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ

- A - оператор, узагальнена координата;
 a - знак випередження, ширина;
 a, a^+ - оператори знищення та народження (квазі)частинок;
 B - амплітуда відбивання, оператор фізичної величини;
 b - початкова координата пакета;
 C - амплітуда проходження, нормуючий множник;
 c - вектор стану в енергетичному зображенні, знак причинності;
 D - дисперсія;
 D_{fg} - кореляційний момент другого порядку для величин f і g ;
 E - повна енергія системи, коефіцієнт проганання;
 e - електричний заряд частинки;
 F - узагальнена сила, кореляційна функція;
 f - фізична величина;
 G - функції та оператори Гріна;
 g - фізична величина;
 H - гамільтоніан;
 h - стала Планка, $h = 2\pi \hbar$;
 I - функція спектральної інтенсивності;
 J - оператори еволюції, номер вузла різницевої схеми;
 j - вектор густини потоку ймовірності;
 K - безрозмірне хвильове число;
 k - хвильове число;
 L - довжина інтервалу руху, ймовірність нерозпаду;
 m - маса частинки;
 N - кількість солітонів або часових кроків різницевої схеми;
 n - номер енергетичного рівня;
 P - поляризація;
 p - імпульс;
 Q - безрозмірний аналог хвильового числа;
 q - аналог хвильового числа;
 R - безрозмірна густина ймовірності координат; коефіцієнт відбивання;
 r - знак заганяння;
 S - оператор руху в зображенні взаємодії;
 T - безрозмірний час, температура, оператор хронологізації;
 t - час;
 U - оператор руху в картині Шредінгера, потенціальна енергія;
 u - хвильове поле в солітонній фізиці, інтенсивність дельта-потенціалу;
 V - безрозмірний потенціал, об'єм;
 u - швидкість;
 W - ймовірність переходу;
 w - коефіцієнт неявності різницевої схеми;
 X - безрозмірна координата, розв'язок операторного еволюційного рівняння;
 x - координата;
 Y - хвильова функція;
 y - координата;
 Z - статсума;
 z - параметр когерентних станів;
 α - допоміжна фаза;
 β - зворотна температура;
 γ - допоміжна комплексна величина;
 Δ - приріст;
 Δf - невизначеність фізичної величини f ;
 δ - дельта-функція Дірака;
 ε - енергія, нескінченно мала величина;
 η - комутаторний знак;
 θ - функція Хевісайда;
 ε - аналог хвильового числа;
 λ - довжина хвилі;
 ρ - статистичний оператор, густина ймовірності координат;
 σ - тензор електропровідності;
 τ - температурна змінна;
 Φ - вектор стану, фаза хвильової функції;
 φ - функція післядії, фаза розсіювання;
 χ - узагальнена сприйнятливості;
 Ψ - хвильова функція;
 ψ - вектор стану;
 Ω - частота;
 ω - частота;
 $\langle A \rangle$ та $\bar{A}$ - середнє значення величини A ;
 $\hat{A}$ - оператор;
 $[A, B] = AB - BA$ - комутант;
 $\{A, B\} = i[A, B] / \hbar$ - квантові дужки Пуассона;
 ΦP - функція поширення.

ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК

- Автокореляція 26
Адмітанс 137, 138, 140
Алгоритм Забускі 108, 109
Амплітуди відбиття та проходження 57, 65, 68, 70, 74, 147, 148
Аналітичне продовження 129, 130, 134
Аналітичні властивості функцій Гріна 129, 132
Антикомутатор 23
- Бар'єр Еккарта 99
- прямокутний 98
Безвідбитковий потенціал 78, 81, 103, 104, 105
- Вакуум 20, 21
Вакуумні початкові стани 27
Вектор густини потоку 27, 122, 141
Вектор стану 6
Вектор поляризації 142
Векторний потенціал 20
Взаємодія 51, 55, 56
- солітонів 52, 106, 107
- хвильових пакетів 52
Вимушені коливання 12, 13, 18, 20, 21, 25
Випромінювання 14
- індуковане 12
- спонтанне 12
Високочастотні асимптотики адмітансів 138, 139
Вільні коливання 26
Властивості симетрії 128, 131, 132, 138
- Гамільтоніан взаємодії (збурення) 6, 12
Гармонічний осцилятор 11, 17, 22, 29, 144
Гауссів пакет (гауссіан) 33, 53, 58, 113
- подвійний 43
Генератор руху 5,7
Густина ймовірності координат 32, 66, 72, 85, 88
- Дані розсіяння 150
Двохсолітонний розв'язок 104, 109, 114
Демонстраційний експеримент 38, 82, 105
Динаміка кореляцій 23
Дисипація енергії 140, 141
Дисперсійні співвідношення 130, 138
Дисперсія 23
- імпульсу 24, 35, 60
- координати 23, 35, 48, 60,
- хвильового числа 44
- Еволюційне рівняння 7, 16, 20, 122, 144
Ефект випередження 106
- загання 63
- межовий 83
- розмірний 83, 86, 90
- Закон дисперсії анізотропний 29
-- довільний 16, 24
-- квадратичний 16, 28, 31, 58
-- четверний 41, 53

- Закон Ома 141
- Закон зберігання енергії 8
 - імпульсу 17, 24, 34
 - парності 33
- Закони зберігання рівняння КдФ 106, 109
- Збурення механічні 123
 - термічні 123
- Зіткнення двох пакетів 48, 97, 113
 - пакета зі стінкою 53, 87, 113
 - солітонів 51, 104, 114
- Змінний вплив (збурення) 9, 119, 135
- Зображення адитивне 145
 - взаємодії 6, 120, 124
 - вторинного квантування 135
 - енергетичне 19, 64, 82, 84, 86
 - мультиплікативне 7, 145
 - спектральне 127, 129
 - часове 138, 142
 - частотне 127, 142
 - чисел заповнення 11
- Зонд 136, 140
- Імпульсне зображення 33, 44, 101
- Інтеграли за траєкторіями 30
- Інтеграли типу Коші 129, 130
 - Френеля 28, 38
- Інтегральне перетворення 28
- Канонічний розподіл 128
- Канонічні перетворення 15, 44, 122, 124
- Картина Гейзенберга 6, 15, 25
 - Дірака 6, 15, 20
 - Шредінгера 5, 7, 14, 22, 25, 119
- Квазірівні 70, 99
- Квазістаціонарні стани 76
- Квантова дифузія 41, 42
- Кінетична задача 14, 28, 119
- Кінетичне рівняння 5, 120, 121, 142
- Кінетичний полігон 95, 112, 114
- Кінетичні коефіцієнти 140
- Когерентні стани 14, 21, 42
- Коефіцієнти відбиття та проходження 63, 76, 77, 148, 149
- Комплексний потенціал 100
- Комп'ютер 110, 111
 - персональний 37, 111
- Комп'ютерне моделювання 46, 55, 82, 110, 113
- Координатне зображення (простір) 9, 24, 27, 86, 91
- Кореляція 26, 49
 - імпульсів 26
 - координат 26
 - координати та імпульсу 23, 26, 27, 36
 - різночасова 26
 - флюктуацій 23, 125, 141
- Лінійна теорія реакції 27, 121, 137
- Межові умови 95, 108
 - непроникності 83, 90, 95
 - періодичності 83, 90
- Метод динаміки кореляцій 23
 - дискретизації 82, 85, 89, 90
 - змінних збурень 9
 - ітерацій 120
 - когерентних станів 14, 21
 - Кубо 119, 121, 123, 142, 143
 - Мацубари 133
 - проганняння 92

- рівнянь руху 14
- різницевих схем 90, 91
- унітарних перетворень 6
- Фейнмана 30
- функції поширення 28, 53, 58, 84
- чисельний 110
- Методи квантової теорії поля 124, 132, 135, 142

- Напівобмежений рух 29, 53? 144
- Невизначеність 23
- енергії 42
- Нелінійне еволюційне рівняння 102
- Нелінійне рівняння Шредінгера 110
- Нелінійні ефекти 123
- Нелінійні реакції 123
- Нестационарна теорія розсіяння 56, 69
- Нестационарне рівняння Шредінгера 42, 90, 94, 102, 109
- Нестационарні стани 8
- Нульові коливання 12, 18, 20

- Обернена задача розсіяння (ОЗР) 102, 105, 108, 149
- Одноквантові процеси 12
- Однорідне силове поле 17, 24, 27, 144
- Односолітонний розв'язок 103
- Оператори Гріна 28, 144
- знищення 18, 135
- народження 18, 135
- Операторна експонента 8, 146

- Пакет прямокутний 33, 113
- Параболічний потенціал 30
- Плоскошаруваті середовища 56, 99
- Поглинання 12, 100

- Подвійна кінетика 102, 109
- Потенціал Еккарта 79, 103
- прямокутний 67, 98
- Потенціальна яма подвійна 104
- Правила сум 139
- Природна еволюція 7, 10, 20, 22, 119, 125
- Пропагатори 5, 9, 22, 29
- Процеси переносу 27

- Реакція системи 121, 136
- Резонанс 99
- Резонансні ефекти 98
- Релаксація 122, 136
- Рівняння балансу 13
- Кортевега-де Фріза (КдФ) 52, 81, 102-110
- Ліувілля 5, 120
- неперервності 57, 148
- Шредінгера 5, 147
- Різницеві схеми 90
- для нестационарного рівняння Шредінгера 91
- рівняння КдФ 108
- Розпад 99
- Розпливання хвильових пакетів 24, 31, 43, 95, 113
- Розподіл Пуассона 21
- Розсіяння 56, 69
- на солітонах 78
- резонансне 56, 69
- Рух вільний 17, 23, 144
- Ряд Кубо 122

- Симетризація 29, 147
- Солітони 52, 78, 101, 114
- Спектральна інтенсивність 127, 128
- Співвідношення невизначеностей 44

- для енергії та часу 42
- Спонтанні флюктуації 141
- Стабільність власних значень 8
- гауссова пакета 36
- Стани зв'язані 59, 78, 104
- змішані 5, 19, 26
- рівноваги 119, 121, 124, 126
- стаціонарні 8, 19, 26
- Статистичний оператор 120, 127
- Стаціонарна теорія розсіювання 57
- Стаціонарне рівняння Шре-
дінгера 57, 147
- Стійкість різницевої схем 108
- Схема двокрокова 108
- двошарова 91, 108
- Лакса-Вендрофа 108
- неявна 91
- триточкова 91
- S-оператор 6, 9, 10, 16, 20
- Температурна змінна 132
- Тензор електропровідності 141,
142
- Теорема Еренфеста 16, 23
- Теорія збурень 11, 13, 120, 135
- Термостат 26, 123
- Тотожність Кубо 139
- Тунелювання 75, 98
- T-експонента 10, 146
- Узагальнена інверсія 128
- координата 136, 141
- сила 136, 137, 141
- Узагальнене співвідношення
невизначеностей 24, 27
- Узагальнені сприйнятливості 137,
140
- Уловлювачі двобічні 99
- однобічні 100

- Унітарні перетворення 6
- Фаза адміттанса 137
- амплітуди відбиття 61
- солітона 103
- хвильової функції 27, 35, 49
- Фазовий множник 8, 35
- Флюктуаційно-дисипаційна
теорема 141
- Формула Кубо 140, 141, 142
- Формули Сохоцького 130
- Функція Гріна 28, 42, 125
- випереджуюча 126
- двочасова 125
- загаяна 125
- причинна 126
- Йоста 149
- кореляційна 126
- мацубарівська 133
- післядії 27, 136
- поширення 10, 28, 83, 144
- Хевісайда 124, 125, 129
- Хвильовий пакет 32, 42
- Хронологізація 146
- Час розпливання 24, 42
- Чисельні методи 5, 82, 102, 112
- Яма Еккарта 104, 107, 109

ПЕРЕДМОВА	3
1. НЕСТАЦІОНАРНІ СТАНИ	
1. 1. Метод унітарних перетворень руху. Картини Шредінгера, Гейзенберга та Дірака.	5
1. 2. Методи теорії змінних збурень.	9
1. 3. Метод рівнянь руху	14
1. 4. Метод динаміки флуктуацій та кореляцій	23
1. 5. Метод функцій поширення.	28
1. 6. Ефект розпливання хвильових пакетів.	31
1. 7. Розпливання подвійного гауссіана	43
1. 8. Зіткнення двох хвильових пакетів	48
1. 9. Зіткнення хвильового пакета зі стінкою	53
1.10. Нестационарна теорія розсіювання частинок короткодійним потенціалом.	56
1.11. Нестационарна теорія резонансного розсіювання.	69
1.12. Резонансне розсіювання на солітонах.	78
2. МЕТОДИ ДИСКРЕТИЗАЦІЇ. РІЗНИЦЕВІ СХЕМИ.	
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ	
2.1. Рух на скінченному інтервалі	82
2.2. Метод різницьових схем.	90
2.3. Обчислювальні експерименти на кінетичному полігоні	95
2.4. Квантова кінетика і солітонна фізика	101
2.5. Чисельне моделювання	110
2.6. Комп'ютерне моделювання фізичних процесів	114
3. НЕРІВНОВАЖНІ ПРОЦЕСИ	
3.1. Реакція системи на зовнішні впливи. Метод Кубо	119
3.2. Часові функції Гріна	125
3.3. Узагальнені сприйнятливості.	136
ПІСЛЯМОВА	143
ДОДАТОК 1. Одночастинкові функції Гріна стаціонарного рівняння Шредінгера.	144
ДОДАТОК 2. Лінійні еволюційні рівняння та оператори Гріна.	144
ДОДАТОК 3. Деякі співвідношення стаціонарної теорії одновимірного розсіювання.	147
ДОДАТОК 4. Обчислення деяких інтегралів	150
ДОДАТОК 5. Методичні зауваження щодо використання матеріалу книги	151
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	153
ОСНОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ.	158
ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК	159

Навчальне видання

Володимир Володимирович Ульянов

ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ

Навчальний посібник

Відповідальний за випуск О.М.Єрмолаєв

Підп. до друку 12.05.04. Формат 60х84 1/16. Папір офсетний.
Друк різнографічний. Ум. друк. арк. 10.0. Обл.-вид. арк. 11.7.
Тираж 25 прим. Ціна договірна.

ХНУ, 61077 Харків, пл. Свободи, 4.

Видавничий центр

Віддруковано П.П. “Азамаєв”

61144, Харків, вул. Героїв праці, 17

