

В. В. Ульянов

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ



В. В. Ульянов

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

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

1982

Ульянов В. В. Интегральные методы в квантовой механике.— Харьков: Вища школа. Изд-во при Харьк. ун-те, 1982.—160 с.

Монография посвящена развитию и применению некоторых современных интегральных (нелокальных) методов в нерелятивистской квантовой механике. Изложены основы нового нелокального подхода в квазиклассике, метода функций Грина и интегральных уравнений в проблеме связанных состояний. Рассмотрены также другие методы, имеющие интегральный характер: обобщенное соотношение неопределенностей, энергетическая плотность состояний, эффективное поле. С помощью этих методов исследованы резонансные явления при движении квазичастиц в слоистых средах, критические свойства локальных полей, влияние одной среды на связанные состояния в другой, аномальные свойства некоторых квантовых газов, системы с искусственно созданными периодическими свойствами, некоторые квантовые граничные и размерные эффекты и т. п.

Значительная часть материала еще не освещалась в книгах по квантовой теории.

Для научных работников, преподавателей вузов, аспирантов и студентов старших курсов физических специальностей.

Ил. 4. Библиогр.: 150 назв.

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. *А. М. Федорченко*

Редакция естественнонаучной литературы

И. о. зав. редакцией *Е. Е. Кравченко*

ПРЕДИСЛОВИЕ

Метод для корабля науки одновременно компас и штурвал,— он указывает направление и способы действия.

А. Н. Крылов

Книга посвящена теоретическому исследованию некоторых современных квантовомеханических методов, имеющих интегральный характер. Такие методы привлекают в последние годы все большее внимание специалистов в разных областях квантовой физики, квантовой химии, прикладной радиофизики, оптики и др. В их основе заложена идея формулировки и решения задач не на языке локальных величин и соотношений (дифференциальные уравнения, локальные уравнения переноса и т. п.), а с помощью нелокальных, интегральных выражений и характеристик, позволяющих к тому же охватить и объединить широкий круг разнородных проблем. Имеются в виду различные аспекты интегрального подхода: функции Грина, интегральные уравнения, интегральные преобразования, операторные инварианты, универсальная связь локальных решений с помощью особых матриц, феноменологические способы описания на основе моделей эффективных потенциальных полей, изучение структуры энергетического спектра в целом, закономерности движения типа соотношения неопределенностей и т. д.

В первой главе монографии рассматриваются вопросы, связанные в основном с методом квазиклассического приближения в квантовой механике. Изложены основы принципиально нового нелокального подхода, условно названного «нефункциональным», т. е. явно не использующим волновых функций. Смысл его заключается в отказе от традиционных локальных ВКБ-решений дифференциального уравнения Шредингера и в переходе к непосредственному отысканию основных характеристик движения (правил квантования энергии, средних значений, вероятностей и т. п.), минуя стадию вычисления волновых функций.

Во второй главе дан подробный анализ чисто квантовой проблемы существования и условий появления локальных свя-

занных состояний квазичастиц в неоднородных средах, а также некоторых резонансных явлений. Основные результаты получены с помощью метода интегральных уравнений, не освещавшегося ранее в монографиях по квантовой механике при изучении связанных состояний.

В третьей главе описаны другие квантотеоретические методы, которые также можно отнести к группе интегральных: обобщенное соотношение неопределенностей, энергетическая плотность состояний, эффективное поле.

В заключении (послесловии) подводятся некоторые итоги и намечаются новые вопросы, требующие разработки. В приложениях собраны конкретные функции Грина и вычислительные детали.

Список литературы содержит ссылки на издания (главным образом монографии), опубликованные до 1980 года.

Развиваемые методы находят многочисленные применения в различных областях квантовой теории и ее приложениях. В качестве примеров исследованы вопросы влияния одной среды на связанные состояния в другой, резонансные эффекты при прохождении квазичастиц сквозь плоскостонные системы, среды с искусственно созданными периодическими свойствами, аномальные явления в некоторых квантовых газах и т. п.

В основу монографии положены работы автора. Она предназначена для научных работников, преподавателей вузов, аспирантов, студентов старших курсов физических специальностей, а также для всех, кто интересуется вопросами конкретного применения современных методов квантовой механики. Можно надеяться, что книга послужит руководством при решении аналогичных проблем, встречающихся в других разделах квантовой физики и вне ее.

Замечания и предложения будут приняты с благодарностью.

Автор глубоко признателен профессору А. М. Федорченко и доцентам Л. Э. Паргаманику и А. М. Ермолаеву за конструктивную и доброжелательную критику, конкретные советы при написании книги и замечания. Спасибо всем, кто сотрудничал с автором.

Автор благодарит академика И. М. Лифшица и всех преподавателей кафедры теоретической физики ХГУ за поддержку и советы, а И. П. Ульянову — за большую помощь при подготовке рукописи.

*Но вот торжественной гармонии разливы
Сливаются в одну мелодию...*

А. Н. Майков

Цель изложения — описать некоторые методы, имеющие глубокие общие черты, развить их, установить взаимосвязи (теоретическая сторона) и применить к решению важных квантовомеханических проблем (практическая, прикладная сторона).

Выбранные методы рассматриваются и как объект исследования, и как средство решения практических задач.

Существенна следующая связь рассматриваемых в монографии вопросов с проблематикой физики конденсированного состояния. Зонная теория: структура энергетических зон в одномерном случае (модели, оценки, методы приближенных расчетов, плоскостные среды). Новые материалы: среды с искусственно созданными периодическими свойствами на основе пленочных и нитевидных образований. Дефекты, легированные материалы, неупорядоченные среды: критические свойства локальных связанных состояний квазичастиц. Квазичастицы в неоднородных и анизотропных средах: резонансные явления при их распространении, влияние одной среды на связанные состояния в другой, аномалии и фазовые переходы в некоторых особых квантовых газах, распространение возбуждений в узких каналах и граничные эффекты.

Таким образом, основным объектом исследования являются квантовые явления в макроскопических телах, квантовые закономерности движения квазичастиц в сложных системах типа твердых тел, а также проблема разработки принципов создания новых физических систем, материалов, устройств для современных научно-технических отраслей, в частности для микроэлектроники.

При подготовке книги перед автором стояла проблема отбора материала, особенно примеров, иллюстрирующих теорию. Выбраны достаточно простые модельные задачи, не затемняющие основных целей изложения второстепенной сложностью и громоздкостью вычислений.

Следует заметить, что из большого библиографического списка работ по квантовой механике автору в силу ограничения числа ссылок пришлось отобрать только некоторые тесно связанные с исследуемыми вопросами книги и статьи, а также обзоры, из которых можно почерпнуть сведения о других работах обсуждаемого в книге направления.

Глава I

НЕФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ ПОДХОД В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

А что для нас является более важным и решающим, чем «интегральный образ»...?

А. А. Ухтомский

§ 1. Число и плотность состояний

Часто нас интересует не волновая функция системы сама по себе, а гораздо более скромная информация — сечение рассеяния..., несколько дискретных энергетических уровней и т. п.

В. Л. Бонч-Бруевич

В квантовой механике широко используется понятие энергетической плотности состояний. Соответствующая величина может быть записана в виде

$$\nu(E) = \sum_k \delta(E - E_k). \quad (1.1)$$

Суммирование ведется по всем стационарным состояниям системы (полный набор k). Число состояний связано с плотностью соотношением

$$\Gamma(E) = \int_{-\infty}^E dE' \nu(E') = \sum_k \theta(E - E_k), \quad (1.2)$$

где ступенчатая функция Хевисайда $\theta(E) = \int_{-\infty}^E dE' \delta(E')$, так что $\theta(E > 0) = 1$; $\theta(E < 0) = 0$; $\theta(0) = 1/2$. Более подробно метод энергетической плотности состояний обсуждается в третьей главе книги. Пока же отметим некоторые важные для дальнейшего свойства этой величины.

Часто возникает необходимость (особенно в квантовой статистике) вычислить сумму типа $S = \sum_k f(E_k)$. Здесь f зависит только от энергии системы (считаем эту функцию плавной). Такую сумму

можно записать в виде интеграла по энергии с помощью плотности состояний:

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} dE \nu(E) f(E). \quad (1.3)$$

Нижний предел интегрирования должен быть меньше $\min E_k$.

Упомянутые величины представимы в инвариантной форме: $\nu(E) = \text{Sp } \delta(E - \hat{H})$; $\Gamma(E) = \text{Sp } \theta(E - \hat{H})$; $S = \text{Sp } f(\hat{H})$.

Значит, их не обязательно вычислять с помощью энергетического представления в виде сумм, предполагающего знание уровней энергии и кратности их вырождения. Наоборот, пользуясь другими представлениями, например координатным, мы можем находить такие характеристики энергетического спектра, как $\nu(E)$. Эта идея положена в основу подхода к проблеме квантования энергии, который будет рассмотрен в следующем параграфе.

В одномерном случае для связанных состояний функция $\Gamma(E)$ имеет ступенчатый характер с единичными скачками при значениях аргумента, совпадающих с уровнями энергии системы, а плотность состояний $\nu(E)$ обладает δ -образными сингулярностями. Однако обычно одномерные ветви движения относятся к более сложным системам. Так, одночастичная плотность состояний в плоскостной среде определяется числом состояний одномерного движения сквозь слои. Особенности ее по сравнению с чисто одномерной плотностью сглаживаются, возникают характерные квантовые осцилляции числа и плотности состояний.

Рассмотрим пример, когда энергия системы зависит только от одного квантового числа. Пусть имеется сумма $S = \sum_{n=0}^{\infty} f(E_n)$. Тогда в первом приближении ее можно заменить интегралом: $S \approx \int_0^{\infty} dn f(E_n) \approx \int_0^{\infty} dE f(E) dn/dE$, т. е. роль плотности состояний играет величина dn/dE . Можно уточнить аппроксимацию суммы интегралом, используя формулу суммирования Пуассона:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} f(E_n) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_{-\sigma}^{\infty} dn f(E_n) \exp(2\pi i l n) = \\ &= \int_{-\sigma}^{\infty} dn f(E_n) + \sum'_{l=-\infty}^{\infty} \int_{-\sigma}^{\infty} dn f(E_n) \exp(2\pi i l n); \quad 0 < \sigma < 1, \end{aligned} \quad (1.4)$$

поскольку $\sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp(2\pi i l n)$ определяет периодическую δ -функцию

(единичного периода для переменной n). Конкретный выбор σ перераспределяет вклады от интеграла и остаточной суммы (будем говорить условно о плавной и осциллирующих частях). Так, иногда удобен выбор $\sigma = 0$. В таком случае в плавной части будет дополнительный член:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(E_n) = \int_0^{\infty} dn f(E_n) + f(E_0)/2 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn f(E_n) \exp(2\pi i l n).$$

Для наших целей выберем σ таким образом, чтобы $E_{-\sigma} = 0$. Тогда, переходя к переменной E , получаем из формулы (1.4):

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(E_n) = \int_0^{\infty} dE f(E) n'(E) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dE f(E) n'(E) \exp[2\pi i l n(E)].$$

Сравнивая с записью (1.3) суммы через энергетическую плотность состояний (1.1), приходим к заключению, что $\nu(E) = n'(E) + n'(E) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp[2\pi i l n(E)]$, $E > 0$. Отсюда для числа состояний

$$\text{вытекает выражение } \Gamma(E) = n(E) + 1/2 + \sum_{l=1}^{\infty} \sin[2\pi l n(E)]/\pi l.$$

Таким образом, плавная часть плотности состояний $\tilde{\nu}(E) = n'(E)$ определяется грубой, усредненной характеристикой структуры уровней энергии — величиной dE_n/dn . Осцилляции же зависят от $n(E)$ и $n'(E)$. Число состояний имеет плавную часть $\tilde{\Gamma}(E) = n(E) + 1/2$, а осцилляции определяются только этой плавной частью: $\Gamma_{\text{осц}}(E) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \sin[2\pi l \tilde{\Gamma}(E)]/\pi l$. Последнее свойство особенно важно для нахождения осциллирующих вкладов, поскольку достаточно получить приближенное выражение для плавной части числа состояний (например, в квазиклассическом приближении).

Подводя итоги, имеем для числа состояний цепочку соотношений (в случае, когда энергия нумеруется одним квантовым числом):

$$\Gamma(E) = \text{Sp } \theta(E - \hat{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \theta(E - E_n) = \tilde{\Gamma}(E) + \Gamma_{\text{осц}}(E);$$

$$\tilde{\Gamma}(E) = n(E) + 1/2; \quad \Gamma_{\text{осц}}(E) = \sum_{l=1}^{\infty} \sin[2\pi l n(E)]/\pi l.$$

Аналогичные формулы для энергетической плотности состояний имеют вид $\nu(E) = \text{Sp } \delta(E - \hat{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - E_n) = \tilde{\nu}(E) + \nu_{\text{осц}}(E);$

$\tilde{\nu}(E) = n'(E)$; $\nu_{\text{осц}}(E) = 2n'(E) \sum_{l=1}^{\infty} \cos[2\pi l n(E)]$. Добавим, что входящая в $\Gamma_{\text{осц}}(E)$ сумма определяет разрывную периодическую функцию [62]

$$\varphi(x) = \sum_{l=1}^{\infty} \sin(2\pi l x)/\pi l = 1/2 - x, \quad 0 < x < 1; \quad \varphi(0) = \varphi(1) = 0. \quad (1.5)$$

Наконец, заметим, что при $E = E_n$ плавная часть числа состояний равна $\tilde{\Gamma}(E_n) = n + 1/2$, а осциллирующий член обращается в нуль, так что число состояний равно $\Gamma(E_n) = n + 1/2$. К этому важному соотношению мы вернемся в следующем параграфе при обсуждении проблемы квантования энергии.

Для вычисления числа и плотности состояний в квазиклассическом приближении выражения $\nu(E) = \text{Sp } \delta(E - \hat{H})$ и $\Gamma(E) = \text{Sp } \theta(E - \hat{H})$, содержащие сингулярные функции, вообще говоря, неудобны. Желательно перейти к плавным функциям гамильтониана, для чего целесообразно воспользоваться интегральным преобразованием Лапласа или связью плотности состояний с функциями Грина. Тем не менее в первом квазиклассическом приближении результаты можно получить непосредственно в самом общем виде. Действительно, пусть нас интересует разложение следа некоторой функции гамильтониана $f[H(\hat{p}, \hat{r})]$. В частности, в качестве f можно взять $\delta(E - \hat{H})$, $\theta(E - \hat{H})$ или какие-либо другие функции с конечным следом. Тогда записываем след, используя координатное представление: $\text{Sp } f[H(\hat{p}, \hat{r})] = \int dr \langle r | f[H(\hat{p}, \hat{r})] | r \rangle$. Затем привлекаем собственные векторы операторов импульсов (неограниченное движение в n -мерном пространстве): $\iint dr dp \langle r | p \rangle \langle p | f[H(\hat{p}, \hat{r})] | r \rangle$. В первом приближении пренебрегаем некоммутативностью операторов импульсов и координат, что дает* $\iint dr dp \langle r | p \rangle |^2 f[H(p, r)]$. Учитывая нормировку собственных векторов импульса, приходим к искомому выражению для следа

$$\text{Sp } f[H(\hat{p}, \hat{r})] = h^{-n} \iint dr dp f[H(p, r)]. \quad (1.6)$$

* Более подробно:

$$\begin{aligned} \text{Sp } f[H(\hat{p}, \hat{r})] &= \int dr \langle r | f[H(\hat{p}, \hat{r})] | r \rangle = \\ &= \int dr \langle r | f[H(\hat{p}, \hat{r})] | r \rangle = \iint dr dp \langle r | p \rangle \langle p | f[H(\hat{p}, \hat{r})] | r \rangle \approx \\ &\approx \iint dr dp \langle r | p \rangle f[H(p, r)] \langle p | r \rangle = \iint dr dp |\langle r | p \rangle|^2 f[H(p, r)]. \end{aligned}$$

Таким образом, в первом квазиклассическом приближении плотность состояний равна

$$\nu(E) = h^{-n} \iint dr dp \delta[E - H(p, r)], \quad (1.7)$$

а число состояний

$$\Gamma(E) = h^{-n} \iint dr dp \theta[E - H(p, r)] = h^{-n} \iint_{H(p, r) < E} dr dp \quad (1.8)$$

соответствует известному полуклассическому правилу ячеек фазового пространства [1].

Для получения второго и более высоких приближений можно воспользоваться известной связью энергетической плотности состояний с резольвентой гамильтониана $\bar{R}(z) = (\hat{H} - z)^{-1}$, которая состоит в том, что $\nu(E) = (2\pi i)^{-1} \text{Sp} [\hat{R}_+(E) - \hat{R}_-(E)] = (2\pi i)^{-1} \times \times \int dr < r | \hat{R}(E + i0) - \hat{R}(E - i0) | r >$. Квазиклассическое разложение для соответствующих диагональных элементов (разности функций Грина $R_+(r, r'; E) - R_-(r, r'; E)$ при $r' \rightarrow r$) рассмотрено в прил. 2. В частности, для движения частицы с квадратичным изотропным законом дисперсии $T(p) = p^2/2m$ в потенциальном поле $U(r)$ имеем с точностью до членов порядка $\hbar^2$ включительно (многомерное пространство):

$$\begin{aligned} R_+(r, r; E) - R_-(r, r; E) = \\ = \frac{2\pi i}{h^n} \int dp \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2\Delta U \frac{\partial^2}{\partial E^2} - (\nabla U)^2 \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] \right\} \delta[E - p^2/2m - U(r)]. \end{aligned}$$

Значит, энергетическая плотность состояний во втором квазиклассическом приближении равна

$$\begin{aligned} \nu(E) = \frac{1}{h^n} \iint dr dp \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2\Delta U \frac{\partial^2}{\partial E^2} - (\nabla U)^2 \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] \right\} \delta[E - \\ - p^2/2m - U(r)]. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Отсюда вытекает уточнение формулы (1.6) для следа произвольной функции:

$$\begin{aligned} \text{Sp} f(\hat{p}^2/2m + U(\hat{r})) = h^{-n} \iint dr dp \{ f(p^2/2m + U) - \\ - (\hbar^2/24m) [2\Delta U f''(p^2/2m + U) + (\nabla U)^2 f'''(p^2/2m + U)] \}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

а также аппроксимация для числа состояний

$$\begin{aligned} \Gamma(E) = \frac{1}{h^n} \iint dr dp \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2\Delta U \frac{\partial^2}{\partial E^2} - (\nabla U)^2 \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] \right\} \theta[E - \\ - p^2/2m - U(r)]. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Теперь перейдем к другому намеченному пути реализации квазиклассического приближения — использованию преобразования Лапласа для сингулярных функций [41]. Для θ -функции имеем

$$\int_0^{\infty} dE \theta(E - E_k) \exp(-\beta E) = \beta^{-1} \exp(-\beta E_k), \quad E_k \geq 0;$$

$$\theta(E - E_k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \frac{d\beta}{\beta} e^{\beta(E - E_k)}, \quad \sigma \rightarrow +0.$$

Аналогичные выражения получаются и для δ -функции. Отсюда для числа состояний выводим формулу

$$\Gamma(E) = \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \frac{d\beta}{2\pi i \beta} e^{\beta E} \text{Sp } e^{-\beta \hat{H}}. \quad (1.12)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению квазиклассического разложения следа $\text{Sp } \exp(-\beta \hat{H})$ при $\text{Re } \beta > 0$. Здесь уместно сравнение с квантовой статистикой, где хорошо известна связь между плотностью состояний и статистической суммой. В нашем случае рассматривается чисто механическая система, так что переменная β играет роль формального комплексного параметра. Однако соотношению (1.12) можно придать соответствующий смысл, опираясь на указанную аналогию с квантовой статистикой, где величина $Z(\beta) = \text{Sp } \exp(-\beta \hat{H})$ есть статистическая сумма канонического ансамбля для вещественных значений обратной температуры β . При этом $Z(\beta)$ необходимо аналитически продолжить в надлежащую область комплексной температурной переменной β .

Итак, можно было бы использовать известные квазиклассические разложения в статистической физике [16—18, 96]. Однако поступим иначе, поскольку, во-первых, постараемся получить более общие результаты для различных законов дисперсии, а во-вторых, продемонстрируем один простой прием операторной симметризации.

Ради простоты ограничимся рассмотрением одномерного движения с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{T}(p) + \hat{U}(x)$. Предполагаем, что $T(p)$ и $U(x)$ не имеют особенностей типа изломов, скачков, полюсов и т. п.

Для получения поправок второго квазиклассического приближения удобна следующая симметризация интересующей нас экспоненты (см. прил. 3):

$$\exp(-\beta \hat{H}) = \exp(-\beta \hat{U}/2) \exp(-\beta \hat{T}) \exp(-\beta \hat{U}/2) [1 + \\ + \hbar^2 \beta^3 (\hat{U}')^2 \hat{T}''/24 - \hbar^2 \beta^3 U'' (\hat{T}')^2/12 + O(\hbar^3)],$$

где штрихи означают производные по соответствующим аргументам. Отсюда, используя плоские волны $\langle x | p \rangle = h^{-1/2} \exp(ixp/h)$, получаем в результате несложных преобразований диагональные матричные элементы экспоненты

$$\begin{aligned} & \langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | x \rangle = \\ & = h^{-1} \int dp \{ 1 - (\hbar^2/24) [2U''\beta^2 - (U')^2 \beta^3] T'' \} \exp[-\beta(T+U)]. \quad (1.13) \end{aligned}$$

Учитывая, что при обратном преобразовании Лапласа (1.12) умножение величин на β приводит к дифференцированию по E , и вычисляя след экспоненты, приходим к искомому квазиклассическому разложению для числа состояний:

$$\Gamma(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \left[\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) \right]. \quad (1.14)$$

Кроме того, с помощью формулы (1.13) находим диагональные матричные элементы операторных δ -функций (на основании обратного преобразования Лапласа):

$$\begin{aligned} & \langle x | \delta(E - \hat{H}) | x \rangle = \\ & = \frac{2}{h} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24} \left[2U'' \frac{\partial^2}{\partial E^2} - (U')^2 \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] T'' \right\} \frac{\theta(E-U)}{v}, \quad (1.15) \end{aligned}$$

которые потребуются в § 3, а также след такого оператора, являющийся плотностью состояний:

$$\begin{aligned} & \nu(E) = \int dx \langle x | \delta(E - \hat{H}) | x \rangle = \\ & = \frac{2}{h} \left[\int \frac{dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \cdot \frac{dx}{v} + O(\hbar^4) \right], \quad (1.16) \end{aligned}$$

где $v = \partial T / \partial p$ — скорость. При выводе формул (1.14) — (1.16) предполагалось, что $U \rightarrow \infty$ (или $U' \rightarrow 0$) при $x \rightarrow \pm \infty$, а также $T(-p) = T(p)$, $T(0) = 0$ и $T \rightarrow \infty$ при $p \rightarrow \infty$. Интегралы в формулах (1.14) и (1.16) берутся между классическими точками поворота, а $p(x, E)$ — положительный корень уравнения $E = T(p) + U(x)$. Для квадратичного закона дисперсии $v = p/m$, $T'' = 1/m$.

Таким образом, использованная простая симметризация экспоненты позволила сразу же получить результаты второго квазиклассического приближения для числа и плотности состояний (более высокие приближения можно найти с помощью еще одного приема, примененного в [98]).

Еще раз подчеркнем, что, с одной стороны, рассмотрено только одномерное движение в поле без особенностей, а с другой, получена квантовая поправка второго ВКБ-приближения, причем не только для квадратичного закона дисперсии (много-

мерный случай был разобран выше — формулы (1.9) и (1.11) для квадратичного закона дисперсии). Мы не станем сейчас заниматься обсуждением полученных выражений, которые найдут непосредственное применение в последующих параграфах (см. также § 14, целиком посвященный методу энергетической плотности состояний).

§ 2. Квантование энергии в нефункциональном подходе

Проблема кванта действия не перестанет побуждать и оплодотворять мысль исследователей...

М. Планк

Несколько предварительных замечаний.

Первое. Можно достаточно четко выделить два типа проблем квазиклассического приближения в квантовой механике: вопросы квантования энергии и задачи аппроксимации различных характеристик движения системы.

Первая проблема — проблема вычисления отдельных уровней энергии — решается на основе так называемых правил квантования, простейшая форма которых получила название правил квантования Бора — Зоммерфельда. Нахождение уровней энергии системы — один из центральных вопросов квантовой механики. Задача о спектре других физических величин обычно решается в квантовой механике раз и навсегда для всех случаев движения. Проблема же энергетического спектра неисчерпаема, поскольку в каждой конкретной ситуации и для каждой системы она имеет свою специфику, требует разработки все новых и новых методов, привлечения способов, используемых в других разделах квантовой теории и за ее пределами.

Вторая проблема — получение квазиклассических аппроксимаций для различных физических характеристик — касается стационарных и нестационарных состояний. В традиционном изложении ВКБ-метода, когда решается дифференциальное уравнение для волновой функции — «функциональный» подход, — проблемы переплетаются, хотя их целесообразно исследовать (в рамках «нефункционального» подхода) отдельно. Ко второй группе вопросов можно отнести вычисление таких величин, как распределения вероятностей (прежде всего координат и импульсов), средние значения. В частности, в стационарных состояниях эти величины будут функциями энергии, однако сама квазиклассическая аппроксимация не зависит от того, знаем ли мы

уровни энергии или нет. Далее можно назвать число ρ плотность состояний, которые могут быть найдены «в обход» уровней энергии. Более того, сами уровни можно вычислить с их помощью. Отметим также квантовые периоды и частоты пакетных движений, коэффициенты прозрачности и отражения, квазиуровни, сечения рассеяния и т. п.

Второе. В первом параграфе уже частично затронут один из вопросов второй проблемы (квазиклассическое разложение для числа и плотности состояний). Перейдем теперь к проблеме энергетических уровней, а затем вновь сосредоточим внимание на квазиклассических аппроксимациях для характеристик движения.

Третье. Правила квантования Бора — Зоммерфельда (первое квазиклассическое приближение) в обычных случаях имеют вид

$$\oint p dx = (n + 1/2) h, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Возникает ряд вопросов. Почему в правой части стоит полуцелое число? Стандартный вывод этих правил (ВКБ-метод), основанный на приближенном решении стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении, позволяет ответить на этот вопрос приближенно. Квантовое число n показывает число узлов волновой функции (в соответствии с так называемой осцилляционной теоремой [1]), а $1/2$ в формуле (2.1) возникает за счет граничных фаз волновой функции (от каждой плавной границы по $1/4$). В более сложных случаях эти фазы могут принимать различные значения [1] и даже зависеть от энергии [76, 101, 102], так что вместо $1/2$ фигурирует некоторая фазовая добавка $\gamma(E)$.

Остается неясным, что же раскладывается в соотношении (2.1) по степеням постоянной Планка. Каковы квазиклассические поправки (особенно в случае произвольного закона дисперсии)?

Основной нефункционального подхода к построению правил квантования в одномерном случае может служить отмеченное в предыдущем параграфе точное соотношение

$$\Gamma(E_n) = n + 1/2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

Именно оно играет роль правил квантования энергии. Однако для его реализации необходимо каким-то способом вычислить функцию $\Gamma(E)$. Например, это можно сделать с помощью квазиклассического приближения или путем точного расчета следа в формуле $\Gamma(E) = \text{Sp} \theta(E - \hat{H})$. Ниже обсудим и другие пути использования соотношения (2.2).

Таким образом, найденное в предыдущем параграфе квазиклассическое разложение для числа состояний $\Gamma(E)$ с учетом сделанных предположений относительно гамильтониана сразу же приводит к правилам квантования второго приближения:

$$\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) = \pi \hbar (n + 1/2). \quad (2.3)$$

В случае квадратичного закона дисперсии $T(p) = p^2/2m$ эта формула дает известный результат [119—121]:

$$\int p dx - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \int U'' p dx = \pi \hbar (n + 1/2). \quad (2.4)$$

Традиционный ВКБ-метод квантовой механики связан с решением дифференциального уравнения второго порядка — уравнением Шредингера для стационарных состояний в координатном представлении. При этом используются аппроксимации для волновой функции вне поворотных точек (приближение Лиувилля — Грина). Затем такие асимптотические разложения по разные стороны от классических точек поворота сшиваются, чтобы получить так называемые формулы связи (собственно ВКБ-метод). Далее на этом пути в случае финитного движения удастся установить правила квантования энергии. Это — типичный дифференциальный, «функциональный», локальный подход к вычислению уровней энергии. В противоположность ему подход на основе соотношения (2.2) можно назвать интегральным, «нефункциональным», нелокальным. Казалось бы, можно употребить другие названия, основываясь на иных аналогиях: чисто операторный, гейзенберговский, матричный, алгебраический. В то же время, термин «операторный» отражает лишь одну черту подхода, к тому же операторы применяются и в обычном методе. В свою очередь слово «гейзенберговский» ассоциируется с изменением величин во времени, а матричный метод обычно связан с диагонализацией матрицы энергии в каком-либо хорошо изученном базисе или с приемом факторизации. Название же «алгебраический» закрепилось за методом динамических симметрий [38].

Название «нефункциональный» содержит невольный намек на противопоставление методам функционального анализа, хотя именно они являются математической основой подхода. Термин «нелокальный» также может быть истолкован в смысле нелокальных операторов поля или в значении рассредоточения потенциала. Понятие же «интегральный» является слишком общим. Правда, именно оно отражает многие стороны рассматриваемого подхода. Во-первых, применяется интегральная харак-

теристика структуры энергетического спектра — число состояний. Во-вторых, используется инвариантная относительно представлений форма записи. В-третьих, интегральное преобразование позволяет связать рассматриваемые величины с характеристиками из других разделов квантовой теории (например, со статистической суммой из квантовой статистики).

Название «нелокальная квазиклассика», по-видимому, больше подходит к направлению обобщенного ВКБ-приближения (метод Фока — Петрашень — Миллера — Гуда — Жирнова [66, 100, 122]), развивающего идеи равномерных асимптотических разложений Лангера [13] и метода эталонного уравнения [22].

Таким образом, можно остановиться все же на слове «нефункциональный», тогда как «интегральный» выступает как наиболее общее понятие, собирательное, объединяющее различные методы, рассматриваемые в книге, включая и данный подход.

Следует отметить, что не только в книгах по квантовой механике [1—5, 8, 9, 44—52], но и в специальных монографиях, посвященных ВКБ-методу [6, 7], поправки к правилам квантования Бора — Зоммерфельда не приводятся. Лишь в журнальных работах имеются квазиклассические правила квантования во втором [97, 119—121] и третьем [119, 120] приближениях (а также в книгах математического плана [20, 23]), но только для квадратичного закона дисперсии (что естественно, поскольку рассматриваются дифференциальные уравнения второго порядка, соответствующие координатному представлению) и потенциальной энергии без особенностей.

Нефункциональный подход (НФП) оказывается менее громоздким, чем обычно используемые способы получения квазиклассических правил квантования. Причем существенно, что решение задачи о спектре энергии в рамках НФП не ограничивается квадратичным законом дисперсии. Достоинством является также возможность использовать подобный подход при нахождении других характеристик системы (и не только в одномерном случае). Кроме того, точная запись правил квантования (2.2) допускает применение других приближенных методов (помимо квазиклассического).

Возвращаясь к точным правилам квантования (2.2), видим, что в правой части находится полуцелое число $n + 1/2$, тогда как в общем случае должна стоять величина $n + \gamma$. Дело в том, что в особых условиях (ограниченное движение, резкое изменение потенциала, разрывы Пуанкаре [19]) анализ приближенных выражений для функции $\Gamma(E)$ показывает, что квазиклассическое разложение дает наряду с членом $\hbar^{-1} \oint p dx$ поправки особой

природы, которые можно объединить с половинкой в правой части (2.2). Это и приводит к замене полуцелого квантования правилом с фазовой добавкой γ .

Проиллюстрируем сказанное на примере движения частицы с квадратичным законом дисперсии $T(p) = p^2/2m$ на интервале $0 < x < L$ (две непроницаемые границы). Применяя тот же метод, что и в неограниченном случае, мы должны пользоваться вместо плоских волн базисом стоячих волн ограниченного движения.

Хорошо известные [1] нормированные собственные функции оператора кинетической энергии на интервале $0 < x < L$ имеют вид $\langle x | s \rangle = (2/L)^{1/2} \sin(\pi s x / L)$, $s = 1, 2, \dots$, а собственные значения равны $E_s^0 = \langle s | T | s \rangle = \pi^2 s^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Для следа типа $\text{Sp } f(\hat{H}) = \int dx \langle x | f(\hat{T} + U) | x \rangle$ в первом квазиклассическом приближении, пренебрегая некоммутативностью операторов T и U , получаем для плавного вклада:

$$\int dx \sum_{s=1}^{\infty} |\langle x | s \rangle|^2 f[E_s^0 + U(x)] \simeq L^{-1} \int dx \sum_{s=1}^{\infty} f[E_s^0 + U(x)].$$

Используя формулу суммирования Пуассона и отбрасывая осциллирующие члены, приходим к выражению

$$\text{Sp } f(\hat{H}) \simeq h^{-1} \iint dx dp f[H(p, x)] - \int dx f[U(x)] / 2L.$$

В частности, для числа состояний $\Gamma(E) = \text{Sp } \theta(E - \hat{H})$ при $E > U \forall x$, т. е. в интересующем нас случае, когда точки поворота совпадают с границами движения, откуда вытекает формула

$$\Gamma(E) = h^{-1} \oint p dx - 1/2. \quad (2.5)$$

Полученному ответу можно придать простой физический смысл. Найденное число состояний пропорционально плотности состояний трехмерного движения в слое шириной L между двумя параллельными плоскостями. Добавка $-1/2$ соответствует чисто квантовому поверхностному вкладу (более подробно этот вопрос рассмотрен в § 14, посвященном методу энергетической плотности состояний). В данном случае есть две поверхности, так что на каждую приходится по $\Delta\Gamma = -1/4$.

Таким образом, в соответствии с (2.2) и (2.5) правила квантования первого квазиклассического приближения в рассматриваемом ограниченном движении имеют вид $h^{-1} \oint p dx = n + 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$ и содержат фазовую добавку $\gamma = 1$ (по $1/2$ от каждой непроницаемой границы).

Еще раз следует подчеркнуть, что правила квантования (2.2) справедливы, вообще говоря, только в одном измерении,

поскольку в этом случае нет вырождения уровней энергии финитного движения.

Безусловно, заманчиво установить аналогичные правила для любого числа измерений. С одной стороны, если известны кратности вырождения уровней, не превышающих искомый, то соотношение (2.2) обобщается в соответствии с формулой (1.2) следующим образом:

$$\Gamma(E_k) = N + g(E_k)/2, \quad (2.6)$$

где индекс k соответствует полному набору квантовых чисел, классифицирующих стационарные состояния, число N есть суммарная кратность вырождения всех уровней энергии, меньших искомого значения: $N = \sum_{E_{k'} < E_k} g(E_{k'})$, а $g(E_k)$ — кратность вырождения отдельных уровней. Однако на практике возникают затруднения в связи с тем, что в общем случае заранее не ясен порядок следования уровней с разными квантовыми числами.

Существуют, конечно, особые случаи, например трехмерные кулоново поле и изотропный осциллятор, когда нумерация с помощью одного квантового числа (в силу дополнительной симметрии) и известная кратность вырождения позволяют записать правила квантования. Правда, здесь конкурирует обычный способ разделения переменных с переходом к эффективно одномерному радиальному движению с соответствующим правилом квантования (не говоря уже о возможности точного решения). Например, в кулоновом поле притяжения уровни энергии E_n нумерует главное квантовое число $n = 1, 2, \dots$. При этом, как известно [1], кратность вырождения равна $g(E_n) = n^2$, так что в соотношении

$$(2.6) \quad N = \sum_{n'=1}^{n-1} (n')^2 = n(n-1)(2n-1)/6, \quad \text{а правило квантования}$$

приобретает вид $\Gamma(E_n) = (1 + 1/2n^2)n^3/3$. Нетрудно убедиться, что вычисления в первом квазиклассическом приближении, когда $\Gamma(E) \approx h^{-3} \iint dr dp \, \theta(a/r - p^2/2m - |E|)$, где потенциальная энергия $U(r) = -a/r$, дают ответ для энергии связи $|E_n|$ с относительной ошибкой $1/3n^2$. Заметим, что в рассмотренном примере $n_{\min} = 1$.

Далее, можно перенумеровать все уровни энергии системы в порядке возрастания одним квантовым числом n , невзирая на возможность другой классификации (при наличии вырождения включаем в гамильтониан снимающую его поправку, которую в окончательном ответе нужно положить равной нулю). Тогда формально правила квантования сохраняют вид (2.2).

Следует выделить один особый случай — основной уровень энергии. Если, как это обычно бывает в механических системах, основной уровень невырожден, то правило квантования принимает вид

$$\Gamma(E_0) = 1/2, \quad (2.7)$$

хотя в рамках квазиклассического приближения здесь нельзя, конечно, ожидать высокой точности.

Квазиклассические правила квантования (2.3), (2.4) содержат в левой части асимптотическое разложение, так что возникает вопрос о числе поправок, требуемых для достижения наилучшей точности, особенно при расчете основного ($n=0$) и слабо-возбужденных ($n \sim 1$) уровней энергии. Обычно принято считать, что правила квантования Бора — Зоммерфельда (первое ВКБ-приближение) дают хорошую точность лишь при $n \gg 1$. Однако оценки с помощью численных методов [120, 123] и на основе допускающих точный расчет моделей [118, 125, 21] показывают, что даже для основного уровня энергии относительная ошибка оказывается порядка 1—10%, а уже для первого возбужденного она уменьшается почти на порядок. Поправка же в правилах квантования (2.4), соответствующая второму квазиклассическому приближению, мала и значительно увеличивает точность, так что может служить как для оценки первого приближения, так и для фактических расчетов. Для основного уровня энергии следующие члены разложения (третье ВКБ-приближение), вообще говоря, не улучшают точности.

В книгах по квантовой механике высказывания о пределах применимости квазиклассических правил квантования весьма скупы. По тем заключениям, которые сделаны по поводу правил квантования Бора — Зоммерфельда, их можно разделить на три группы: а) подчеркивается категорическое требование больших квантовых чисел $n \gg 1$ [1, 2, 3, 8, 44, 60] либо говорится об увеличении точности с ростом n [7, 48]; б) содержатся замечания о возможности с оговорками распространения результатов и на случай низших квантовых состояний [24, 45] (для качественных оценок, в специальных благоприятствующих полях типа гармонического осциллятора); в) отмечается возможность получить результаты и для слабовозбужденных состояний [5, 46, 97].

Однако в книгах нет конкретных примеров с оценкой точности даже для первого квазиклассического приближения (правила квантования Бора — Зоммерфельда), нет поправок к правилам квантования, хотя они имеют достаточно простой вид, нет анализа возможных критических ситуаций при больших квантовых числах, когда структура энергетического спектра может

существенно отличаться от предсказываемой квазиклассическими правилами квантования Бора — Зоммерфельда. Ничего не говорится о случае неквадратичного закона дисперсии.

Правила квантования нефункционального подхода (2.2) построены на основе числа состояний как функции от энергии. Плотность состояний также может указывать уровни энергии дискретного спектра: нужно выделить те точки на энергетической оси, в которых эта функция имеет δ -особенность. Этот же качественный подход относится и к θ -функциям в числе состояний — необходимо найти точки, в которых имеются разрывы этой функции. Однако такая наивная индикация уровней энергии была бы возможной, если бы удалось получить точное выражение соответствующих функций $\nu(E)$ и $\Gamma(E)$. Либо применяемая аппроксимация сохраняла бы особенности этих функций, подобно тому, как в методе полевых функций Грина используются полюсные особенности, а в методе интегральных уравнений для связанных стационарных состояний — нули определителя Фредгольма. В основу же построения правил квантования (2.2) положен иной принцип, адекватный применению сглаживающих приближений (прежде всего квазиклассического) и основанный не на сингулярных свойствах величины $\Gamma(E)$, а на ее «усредненном» поведении. В точках разрыва $\Gamma(E)$ берется полусумма предельных значений справа и слева — именно такое значение в соответствии с определением (1.2) имеет входящая в число состояний ступенчатая функция Хевисайда в нуле $\theta(0) = 1/2$.

Квазиклассическое разложение «не улавливает» осцилляций $\Gamma(E)$, но они и не требуются по двум причинам: а) осциллирующая часть числа состояний восстанавливается, как уже отмечалось, по плавной части; б) для целей квантования энергии они вообще несущественны, так как обращаются в нуль при значениях энергии, отвечающих уровням системы: $\Gamma_{\text{осц}}(E_n) = 0$.

Добавим, что принципиально возможны и другие формы правил. Так, соотношения $\text{Sp} [\hat{H}\theta(E_0 - \hat{H})] = E_0/2$, $\text{Sp} [\hat{H}\theta(E_1 - \hat{H})] = E_0 + E_1/2$ и т. д. дают рекуррентные связи, позволяющие перейти от E_0 к расчету E_1 и др.

§ 3. Нефункциональный подход для характеристик движения

Это фундаментальное соотношение является вершиной...; остальное... содержание есть либо спуск с вершины, когда основные принципы применяются к частным вопросам, либо восхождение на нее, когда выводятся основные соотношения и уточняются понятия.

Р. Фейнман

Перейдем к решению других вопросов квазиклассического приближения в рамках нефункционального подхода, не используя стандартной процедуры асимптотического разложения

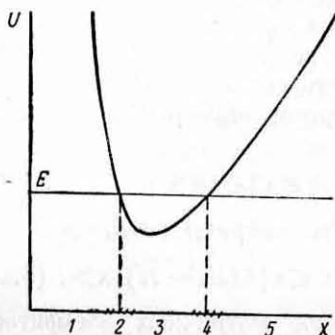


Рис. 1

решений уравнения Шредингера в координатном представлении с последующим сшиванием их в различных пространственных областях. Развивая НФП, мы рассмотрим прежде всего аппроксимации для вероятностей и средних значений в стационарных состояниях дискретного энергетического спектра.

Начнем с вычисления средних значений функций координат $f(x)$. Каким образом можно найти такое среднее $\langle f \rangle_n$ в обычном функциональном подходе ВКБ-метода? Нужно получить приближенные

выражения для координатной волновой функции стационарного состояния в классической и подбарьерной областях движения вдали от точек поворота, а также в их окрестности и «сшить» эти асимптотики. Затем, вычислив координатный интеграл от усредняемой величины, умноженной на квадраты модулей указанных разложений волновой функции, и нормировочный интеграл, собрать вклады от пяти (!) областей интегрирования. (Характерные области в случае потенциальной ямы: 1,5 — неклассические, 3 — классическая; 2, 4 — окрестности поворотных точек показаны на рис. 1). В первом квазиклассическом приближении это сделать несложно, однако достаточно обратиться ко второму приближению, как сразу возникают затруднения с нормировкой и оценкой вкладов от различных областей интегрирования. Правда, существует метод равномерных асимптотических разложений (обобщенный ВКБ-метод [100]), использующий эталонное уравнение, когда удается получить единое выражение для волновой функции во

всех областях пространства. Однако он пригоден лишь в случае такого профиля поля, при котором известно точное решение для соответствующего аппроксимирующего аналога (например, для потенциала с простым минимумом). К тому же такая схема годится, вообще говоря, только при квадратичном законе дисперсии.

Гораздо проще выглядит расчет таких средних значений в рамках НФП. Удобно записать при этом статистический оператор рассматриваемого стационарного состояния в виде

$$\hat{\rho}_n = \delta(E_n - \hat{H}) / \text{Sp } \delta(E_n - \hat{H}), \quad (3.1)$$

где функцию $\delta(E)$ можно считать «размытой», а в тех случаях, когда это возможно (например, для квазиклассических разложений), — δ -функцией Дирака. Подробнее вопрос о таком представлении обсуждается в § 15 при рассмотрении сепарабельной аппроксимации. Тогда можно использовать тот же прием, что и при вычислении плотности состояний в первом параграфе. Для вычисления среднего значения

$$\langle f \rangle_n = \text{Sp } (\hat{f} \hat{\rho}_n) = \int dx f(x) \langle x | \rho_n | x \rangle \quad (3.2)$$

достаточно знать диагональные элементы матрицы плотности

$$\langle x | \rho_n | x \rangle = \langle x | \delta(E_n - \hat{H}) | x \rangle / \int dx \langle x | \delta(E_n - \hat{H}) | x \rangle. \quad (3.3)$$

Тем самым сводим задачу к нахождению матричных элементов δ -функции, которые фактически уже были получены. Таким образом, на основании выражений (1.15) и (1.16) приходим к следующей формуле для диагональных элементов матрицы плотности согласно (3.3) во втором квазиклассическом приближении;

$$\langle x | \rho_n | x \rangle = \frac{2}{\tau_{\text{кв}}} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2U'' \frac{\partial^2}{\partial E_n^2} - (U')^2 \frac{\partial^3}{\partial E_n^3} \right] \right\} \frac{\theta[E_n - U(x)]}{v}. \quad (3.4)$$

Физический смысл результата заключается в том, что это есть плотность вероятности координат. Любопытно, что распределение по координатам определяется классическим интервалом движения между точками поворота не только в первом ВКБ-приближении, но и в последующих. Возможность же квантового движения вне этого интервала проявляется в том, что поправки второго и более высоких приближений содержат производные от потенциальной энергии. Классический интервал движения как бы «впитывает» информацию о квантовом движении за его пределами. Вместо характерного для асимптотик волновой функции разделения на осциллирующую классическую и экспоненциально убывающую неклассическую части (плюс окрестность точек

поворота) имеем единое выражение, «дотянутое» до поворотных точек, интегральным образом описывающее распределение по координатам.

Нормировочный множитель

$$\tau_{\text{кв}} = h \operatorname{Sp} \delta(E_n - \hat{H}) = \oint \frac{dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{d^2}{dE_n^2} \oint \frac{U'' dx}{v}, \quad (3.5)$$

пропорциональный плавной части энергетической плотности состояний, представляет собой величину, обобщающую понятие классического периода колебаний. Он также содержит члены второго квазиклассического приближения (порядка $\hbar^2$), однако объединять их с аналогичными поправками в скобках выражения (3.4) нецелесообразно, поскольку при этом теряется смысл отдельных вкладов и всей структуры разложения в целом. Возникнув в процессе получения формулы (3.4), квантовый период $\tau_{\text{кв}}$ (3.5) имеет самостоятельный смысл (см. ниже).

Искомые средние значения в соответствии с формулами (3.2) и (3.4) получаются в результате несложных преобразований и могут быть представлены в следующей форме:

$$\langle f \rangle_n = \frac{1}{\tau_{\text{кв}}} \left[\oint \frac{f dx}{v} - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{d^2}{dE_n^2} \oint \frac{U'' f - U' f'}{v} dx + O(\hbar^4) \right]. \quad (3.6)$$

Основная часть этого соотношения (первое квазиклассическое приближение) имеет смысл классического среднего значения рассматриваемой величины для колебаний с данной энергией E_n . Квантовые добавки имеют, как и следовало ожидать, порядок $\hbar^2$ и содержат классическое усреднение производных потенциальной энергии и изучаемой величины. Это можно истолковывать как проявление чисто квантовой возможности движения вне классически доступной области координат.

При больших значениях энергии (номер возбуждения $n \gg 1$) квантовые добавки должны быть малы по сравнению с главной, классической частью среднего значения. Интересно, однако, что они могут оставаться достаточно малыми и для слабовозбужденных состояний, даже для основного (примеры приведены в [99]).

Добавим также, что здесь мы имеем дело с выражением, зависящим от энергии того стационарного состояния, к которому относится усреднение. Неважно при этом, знаем ли мы само значение энергии точно или же будем в дальнейшем использовать для него соответствующее квазиклассическое разложение тоже.

Аналогичным образом можно прийти к формулам для распределения вероятностей импульсов и для средних значений

функции от импульсов в стационарных состояниях дискретного спектра энергии. Кроме того, в случае гамильтониана с произвольной зависимостью кинетической энергии от импульса $T(p)$ также нетрудно получить соответствующие выражения. Важным обстоятельством является и то, что формулы (3.4), (3.6), как и результаты для плотности и числа состояний, можно обобщить на случай любого числа измерений (ради простоты рассмотрен одномерный случай).

Далее перейдем к обсуждению еще одной группы характеристик движения — квантовых периодов и частот.

При получении квазиклассической формулы для средних значений (3.6) мы встретились с величиной квантового периода $\tau_{\text{кв}}$, который фигурировал в качестве некоего формального обобщения классического периода колебаний, связанного с плавной частью энергетической плотности состояний. Можно выявить более глубокий физический смысл этой величины.

Как известно [1], одним из проявлений принципа соответствия является квазиклассическое соотношение для расстояния между соседними уровнями энергии и классической частотой колебаний $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}$. Оно может быть уточнено более детальным анализом разности $E_{n+1} - E_n$, либо рассмотрением другой меры структуры уровней — плавной части плотности состояний dn/dE . Как показано в работах [101, 102], величина dn/dE непосредственно связана с периодом (и соответствующей частотой) колебаний пакетов стационарных состояний (квантовые периоды и частоты):

$$\tau_{\text{кв}} = \hbar dn/dE; \quad dE/dn = \hbar \omega_{\text{кв}}; \quad \omega_{\text{кв}} = 2\pi/\tau_{\text{кв}}. \quad (3.7)$$

Именно такая величина $\tau_{\text{кв}}$ и вошла в нормировочный множитель формул (3.4), (3.6). Полученное в § 1 квазиклассическое разложение для энергетической плотности состояний является по существу аппроксимацией для $\tau_{\text{кв}}$.

Таким образом, согласно (3.5) во втором квазиклассическом приближении квантовые периоды имеют вид

$$\tau_{\text{кв}} = \tau_{\text{кл}} - \frac{\hbar^2}{24m} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \oint \frac{U'' dx}{v} + O(\hbar^4). \quad (3.8)$$

Аналогичное выражение вытекает отсюда и для квантовых частот:

$$\omega_{\text{кв}} = \omega_{\text{кл}} \left[1 + \frac{\hbar^2 \omega_{\text{кл}}}{48\pi m} \cdot \frac{d^2}{dE^2} \oint \frac{U'' dx}{v} + O(\hbar^4) \right]. \quad (3.9)$$

Анализ на конкретных примерах [118, 125] показывает, что формулы (3.8), (3.9) достаточно хорошо аппроксимируют структуру энергетического спектра даже при слабом возбуждении, а

квантовые поправки к классическим частотам могут оставаться малыми вплоть до основного состояния системы.

Подчеркнем, что в отличие от рассмотренных в этом параграфе других характеристик квантовые периоды и частоты описывают нестационарные состояния (пакетное движение) [21, 101, 125]. Правда, они относятся только к одномерному случаю.

Формулы (3.8), (3.9) получены в предположении отсутствия особенностей поля. Как уже отмечалось, в общем случае правила квантования энергии содержат наряду с чисто квазиклассическими поправками особые фазовые добавки: в первом квазиклассическом приближении их можно представить в виде

$$\oint p dx = h(n + \gamma). \quad (3.10)$$

В случае полей с резкой неоднородностью фазовая добавка γ может зависеть от энергии в некотором критическом диапазоне [101]. Тогда квантовые периоды согласно (3.7) и (3.10) равны $\tau_{кв} = \tau_{кл} - h d\gamma/dE$ и могут существенно отличаться от классических $\tau_{кл}$, так как добавка $-h d\gamma/dE$ компенсирует (например, при наличии максимума потенциала) или сглаживает (в случае излома) особенности классического периода $\tau_{кл}$. Конкретные примеры рассмотрены в [101, 102].

Таким образом, в отличие от общепринятых представлений о роли классической частоты колебаний $\omega_{кл}$ в описании структуры энергетического спектра складывается своеобразная картина. В области малых квантовых чисел n квазиклассика дает достаточно высокую точность, тогда как среди больших n могут возникнуть островки (критический диапазон энергий, например, вблизи максимума потенциала), где структура энергетического спектра не описывается $\omega_{кл}$.

Итак, мы рассмотрели следующие вопросы. Свойства и квазиклассический расчет основных характеристик структуры энергетического спектра — числа и плотности состояний. Формулировка общих уравнений квантования энергии на основе числа состояний и соответствующих квазиклассических правил. Вычисление средних значений в отдельно взятых стационарных состояниях, а также распределений вероятностей координат и импульсов. Квантовые периоды и частоты.

Отдельные примеры показывают пути решения в более общих случаях. Так, в одном месте продемонстрировано обобщение на многомерные случаи — формула (1.11), в другом — учтены особенности поля (2.5), в третьем — принят во внимание произвольный вид закона дисперсии (1.14). Наконец, в четвертом — указан способ получения поправок более высокого

приближения (рекуррентные соотношения для функций Грина (прил. 2), а также специальное интегральное уравнение в [98]).

Подчеркнем, что мы стремимся найти такие формулировки на языке НФП, которые не ограничиваются приложениями в рамках квазиклассической аппроксимации, хотя именно она находится в центре внимания первой главы книги.

В основе НФП лежит принцип записи физических величин с помощью операторных инвариантов — следов, величина которых не зависит от выбора системы функций, используемых при их вычислении. Тогда как традиционный подход ВКБ-метода связан с решением дифференциальных уравнений для волновой функции. В этом отношении НФП аналогичен методу Кубо квантовой кинетики [53], где тоже сразу переходят к выражениям для искомых величин (средних значений — реакций на внешние воздействия), минуя промежуточную в такой задаче стадию кинетических уравнений. Кроме того, оба метода связаны с некоторыми приближениями: в первом случае это квазиклассика, во втором — теория возмущений.

§ 4. Некоторые вопросы квазиклассического приближения

Вместе с тем в этой области есть вопросы, которые полностью остаются в тени.

Дж. Займан

Слова Займана с полным правом можно отнести к положению, сложившемуся в одном из самых старых разделов квантовой механики. Любопытно, что правила квантования Бора — Зоммерфельда появились еще до создания самой квантовой механики (в лоне так называемой старой квантовой теории Бора). Они долгое время оставались загадкой. Попытка раскрыть тайну боровского правила привела де Бройля к выдвижению волновой идеи. Развитие квантовой теории, в первую очередь разработка Шредингером волновой механики, позволили Вентцелю, Крамерсу и Бриллюэну вывести эти правила на основании аппарата квантовой механики. Однако многие вопросы оставались неясными, хотя каждое десятилетие приносило новые успехи в теории и практике метода, получившего имя первых исследователей — ВКБ-приближение.

С одной стороны, важность каждого приближенного способа решения задач квантовой механики связана с чисто практическими целями, поскольку и простые модели движения одночастичных систем не позволяют получить точного решения. С другой

стороны, как оказалось, квазиклассический метод обеспечивает достаточно высокую точность расчетов, несмотря на диктуемую ему математическими соображениями узкую область применимости (возникающие разложения в общем случае являются асимптотическими). Как это уже неоднократно бывало с такого рода приближениями, фактическая точность вычислений и круг описываемых явлений превосходят все ожидания. Даже там, где казалось бы нечего и пытаться применять квазиклассику, в святой святых чисто квантового движения — для основного состояния, где волновые функции не только не обладают достаточным для квазиклассической аппроксимации количеством узлов, но вообще не имеют таковых, — даже здесь квазиклассические правила квантования конкурируют с «хозяином» этой области энергий — вариационным методом.

Главная же причина особого интереса к квазиклассике лежит в другом. На заре развития квантовой механики подчеркивался радикальный отход от классических представлений. Как и всегда при создании новой теории, на передний план выходят те вопросы, которые являются новыми, больше говорится о ломке старых понятий, о неспособности классической механики объяснить явления в микромире и т. п. Это неизбежно на революционном этапе развития теории. Однако прошла пора угара, пришло время спокойно разобраться в ситуации, выяснить физический смысл новой теории. Тут-то и оказалось, что в соответствии с общими диалектическими законами новое не порывает связей со старым, не уничтожает достигнутого, а наоборот, заботливо указывает пределы применимости старой теории. В квантовой механике такая взаимосвязь проявилась и в особом оттенке принципа соответствия — нельзя объяснить квантовую механику без обращения к классическим понятиям. При этом имеет особое значение переходная область — квазиклассика, где сохраняются многие классические черты движения (относительная локализация частиц, размытые траектории, пакетное представление о движении и т. д.) и одновременно охватываются основные квантовые эффекты (квантование энергии, туннелирование, нулевые колебания, надбарьерное отражение, резонансы рассеяния, зонный характер энергетического спектра и т. д.).

В этом отношении также чрезвычайно полезным оказался метод интегралов по траекториям Фейнмана [51], позволивший установить более тесный контакт с классическими представлениями, раскрывший секрет классического принципа стационарности действия (пример обратной связи — квантовая механика помогает понять классическую).

Вот некоторые этапы развития метода квазиклассического

приближения. Двадцатые годы — основы ВКБ-метода. Тридцатые — начало применения Цвангом и Кемблом аналитических методов обхода поворотных точек в комплексной области (Данхэм [119]). Сороковые и пятидесятые — развитие идеи Лангера о равномерных асимптотических разложениях, включая поворотные точки (Фок [66], Миллер и Гуд [122]); квазиклассика в импульсном пространстве в связи с концепцией произвольного закона дисперсии и особыми «траекториями» (школа И. М. Лифшица [76]). Шестидесятые годы — усовершенствование метода эталонного уравнения (Жирнов [100]); новый подход Фреманов [7]; успехи теории рассеяния; нестационарная [1, 4] и многомерная [4] квазиклассика; первые книги по ВКБ-методу [6, 7, 14, 25] (а также [26, 15]).

Большое влияние на развитие ВКБ-метода в квантовой механике оказывают математические идеи [11, 15, 23], а также аналоги из различных волновых теорий [12]. Полуклассические методы получили широкое распространение и в квантовой статистике [10, 16—18].

Несмотря на несомненные успехи квазиклассического метода в квантовой механике, требуются дальнейшие исследования. Отметим некоторые проблемы. Особенности квазиклассического движения в случае разрывов Пуанкаре [19] (критические диапазоны энергии вблизи максимумов потенциала, на границе с непрерывной частью энергетического спектра и т. п.). Влияние различных граничных условий и таких сингулярностей поля, как скачки, изломы и др. Учет неквадратичной зависимости кинетической энергии от импульса, а в более общем случае — от квазиимпульса (произвольный закон дисперсии). Более высокие приближения. Оценка точности получаемых асимптотических разложений. Многомерные обобщения ВКБ-метода (особенно проблема квантования энергии в случае неразделяющихся переменных). Нестационарные состояния (квазистационарные, а также возникающие при переменных внешних воздействиях).

Думается, что дальнейшее продвижение в решении этих вопросов будет связано с: а) более широким использованием связей квазиклассики с другими методами квантовой механики (резольвентой и функциями Грина, интегральными уравнениями, теорией возмущений, вариационными методами); б) развитием подходов, позволяющих непосредственно получать результаты для интересующих нас физических величин, не обращаясь к традиционным дифференциальным уравнениям для волновых функций, т. е. с разработкой прямых квазиклассических методов; в) сочетанием квазиклассических разложений с локально точными решениями (в рамках «функциональных» подходов); г) даль-

нейшим упрощением все еще весьма громоздких построений квазиклассического разложения (особенно правил квантования энергии и «глобальной» квазиклассики обобщенного ВКБ-метода); д) популяризацией второго квазиклассического приближения.

Укажем еще одну черту квазиклассического метода — его интегральный характер. Он особенно ярко проявился в рамках рассмотренного в предыдущих параграфах нефункционального подхода: все соотношения имеют вид интегралов в фазовом пространстве. Квазиклассическое приближение оказывается «сглаживающим», что позволяет сразу переходить к сингулярным функциям типа δ -функции Дирака при описании плотности состояний, статоператора стационарных состояний и др. Это сближает квазиклассику с методом интегральных уравнений, в котором также удобно использовать сингулярные модели (скачки поля, δ -образные потенциалы и т. п.). Кроме того, такое свойство квазиклассического приближения позволяет избежать ограничений обычного «функционального» подхода («бойся точек поворота», «бери большие квантовые числа»), охватить движение в целом, в усредненном виде, обеспечить хорошую точность даже для слабозбужденных состояний.

Отметим аналоги правил квантования (2.2) и всего нефункционального подхода. В теории дифференциальных уравнений часто интересуются числом нулей (узлов) соответствующего решения [23], стремясь выразить его через параметры уравнения. В случае одномерных правил квантования энергии возникает обратная задача — искомые значения энергии нужно связать с числом узлов волновой функции, играющим в этом случае роль квантового числа, нумерующего стационарные состояния в порядке возрастания энергии (и являющегося адиабатическим инвариантом). В рамках аналитических методов квазиклассического приближения (контурные интегралы в комплексной плоскости координат) последовательное рассмотрение этой задачи проведено Пономаревым [14]. В работе Аргиреса [121] в связи с вопросом о правилах Вейля симметризации гамильтониана используется нефункциональный способ записи связи энергии с квантовым числом. В монографии Киржница [10] на основе методов квантовой теории поля в квантовой статистике реализуется идея формулировки соотношений между физическими величинами на языке операторного исчисления.

Основные положения нефункционального подхода в квазиклассическом приближении квантовой механики изложены в [21, 98, 99].

Учет особенностей поля и исследование критического диапазона энергий проведены в работах [101, 102, 117, 146—149] (см. также [21]).

§5. Нефункциональный подход вне квазиклассики

Существует настоятельная потребность в таком приближенном методе, который, обладая достаточной общностью, приводил бы к достаточно простым формулам.

В. А. Фок

Применение нефункционального подхода, как уже говорилось, не ограничивается областью квазиклассического приближения, хотя он и является весьма подходящим для квазиклассической аппроксимации. Приведем некоторые примеры НФП вне квазиклассики.

На всех этапах развития квантовой механики осциллятор был тем объектом, на котором проверялись вновь появлявшиеся направления теории (так было и на заре развития квантовой механики — в работах матричного и волнового направлений). Нельзя пройти мимо этого примера и в рамках НФП. Существует много приемов получения энергетического спектра осциллятора. К ним добавляется еще один.

Известно, что квазиклассические правила квантования дают точный ответ для уровней энергии гармонического осциллятора уже в первом приближении, а поправки более высокого порядка обращаются в нуль (другой известный случай — потенциал Морза). Это вовсе не означает, конечно, что все свойства движения такого осциллятора полностью описываются первым квазиклассическим приближением. Отнюдь нет: во многих отношениях задача об осцилляторе не является чем-то исключительно благоприятным для квазиклассического описания (достаточно обратиться к аппроксимации для волновой функции стационарных состояний). Правда, возможность точного решения с помощью функций Эрмита упрощает дело, тогда как даже простейший аналог — четверной осциллятор [123] — в этом отношении значительно сложнее.

Гамильтониан осциллятора равен $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$. Вычислим матричные элементы $\langle x | \exp(-\beta\hat{H}) | p \rangle$, которые позволяют получить различные характеристики движения. Используем симметризацию экспоненты для суммы операторов $\hat{A} + \hat{B}$ с алгеброй, определяемой соотношениями коммутации $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] =$

$= -2\lambda^2 \hat{A}$; $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 2\lambda^2 \hat{B}$. Тогда, как показано в [10], $\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A} \operatorname{th} \lambda/\lambda) \exp([\hat{B}, \hat{A}] \ln \operatorname{ch} \lambda/\lambda^2) \exp(\hat{B} \operatorname{th} \lambda/\lambda)$. В нашем случае $\hat{A} = -(m\omega^2\beta/2) x^2$; $\hat{B} = -(\beta/2m) p^2$; $[\hat{B}, \hat{A}] = (\hbar\omega^2\beta^2/2i) \times (\hat{p}x + x\hat{p})$; $\lambda = \hbar\omega\beta$. Несложные вычисления дают матричные элементы

$$\langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | p \rangle = \exp[-(m\omega x^2/2\hbar + p^2/2m\hbar\omega) \operatorname{th}(\hbar\omega\beta) + i x p / \hbar \operatorname{ch}(\hbar\omega\beta)] / \sqrt{2\pi\hbar \operatorname{ch}(\hbar\omega\beta)}.$$

Отсюда, в частности, $\operatorname{Sp} \exp(-\beta \hat{H}) = [2\operatorname{sh}(\hbar\omega\beta/2)]^{-1}$. Далее переходим к функции числа состояний $\Gamma(E)$. На основании формулы обратного преобразования Лапласа (1.12) имеем

$$\Gamma(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{d\beta}{2\beta \operatorname{sh}(\hbar\omega\beta/2)} e^{\beta E}.$$

Подходящая деформация контура в комплексной плоскости β с учетом вычетов подынтегральной функции в точках $\beta_l = 2\pi i l / \hbar\omega$, $l = 0, \pm 1, \dots$ (при $\beta = 0$ полюс второго порядка) дает выражение

$$\Gamma(E) = E/\hbar\omega + \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \sin(2\pi l E/\hbar\omega) / \pi l, \quad E > 0. \quad (5.1)$$

Уровни энергии получаем, решая уравнение квантования НФП (2.2)

$$\Gamma(E_n) = n + 1/2, \quad n = 0, 1, \dots \quad (5.2)$$

Если выделить целую часть величины $E/\hbar\omega$, т. е. записать $E/\hbar\omega = N + a$, и считать, что остаток $-1/2 < a < 1/2$, то слева в уравнении (5.2) окажется согласно (5.1) целое число N , а справа — полуцелое. Остается полагать $a = 1/2$, тогда уравнение (5.2) сводится к равенству $N + 1/2 = n + 1/2$, т. е. $N = n$, а уровни энергии равны $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$; $n = 0, 1, \dots$, что совпадает с хорошо известным результатом.

Выражение (5.1) можно применить и для качественной диагностики уровней энергии: сумма в (5.1) представляет собой разрывную функцию (1.5), так что места разрывов $E/\hbar\omega = n + 1/2$ в области $E > 0$ отвечают уровням энергии $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$; $n = 0, 1, \dots$

Наконец, если использовать только плавную часть функции (5.1) $\tilde{\Gamma}(E) = E/\hbar\omega$, то в соответствии с уравнением квантования $\tilde{\Gamma}(E_n) = n + 1/2$ также сразу получаем уровни энергии.

Разумеется, рассмотренный пример лишь иллюстрирует общий принцип отыскания спектра энергии с помощью известной функции числа состояний $\Gamma(E)$ (либо на основе «всей» функции, либо только по осцилляциям (разрывам), либо по плавной части). Существен, однако, и сам факт наличия еще одного пути получения уровней энергии гармонического осциллятора.

Нефункциональный подход используется и в других разделах книги. Рассматривая интегральные уравнения для стационарных состояний (вторая глава книги), мы будем применять инвариантную форму записи характеристик (к их числу принадлежит и определитель Фредгольма). Здесь в основе НФП-формулировок лежит метод резольвенты, которая связывает широкий круг вопросов. Через нее выражается плотность состояний, а благодаря преобразованию Лапласа — и статистическая сумма. Нестационарные проблемы решаются на основе другого интегрального преобразования резольвенты — Фурье-образа (операторы эволюции). Она используется для построения современных вариантов теории возмущений [69], может служить основой для симметризации операторных выражений [124] и т. д. Словом, в одном объекте сконцентрированы: описание стационарных и нестационарных состояний, теория возмущений и интегральные уравнения, квазиклассическое приближение и метод энергетической плотности состояний, вопросы квантовой механики и квантовой статистики.

Далее, при обобщении соотношения неопределенностей (§ 13) также основные величины мы выражаем в виде операторных инвариантов.

Добавим, что в том же «нефункциональном русле» лежит бурно развивающаяся «двухуровневая» аппроксимация сложных систем (особенно в связи с запросами квантовой электроники). По существу, это есть разновидность метода эффективного поля (в широком понимании), которая дала толчок еще одному аналогичному методу — эффективным температур [60, т. 2, с. 478] (см. также обобщение формулы Кубо квантовой кинетики для систем с микроканоническим распределением и с матрицей эффективных температур в [21]).

Кратко о других конкретных примерах НФП. Если вновь вернуться к проблеме квантования энергии, то нужно сказать, что в общем случае нет, конечно, надежды получить точное выражение для числа состояний. По этой причине необходимо сформулировать соответствующий способ теории возмущений. Рассмотрим случай, когда известна функция числа состояний для некоторой невозмущенной простой системы (модель) $\Gamma_0(E)$, а учт

возмущения (реальность) приводит к добавке $\Gamma_1(E)$. Тогда и уровни энергии получают сдвиг $\Delta E_n = E_n - E_n^0$. Из уравнения квантования НФП (2.2) $\Gamma(E_n) = n + 1/2$ (подразумевается плавная часть числа состояний, но для простоты специальный значок опускаем) вытекает, что $\Gamma_0(E_n^0) = \Gamma_0(E_n^0 + \Delta E_n) + \Gamma_1(E_n^0 + \Delta E_n)$. Отсюда, с одной стороны, получаем явное выражение для сдвига (ограничиваемся первым приближением):

$$\Delta E_n = -\Gamma_1(E_n^0)/v_0(E_n^0), \quad (5.3)$$

а с другой стороны, после несложных преобразований приходим к компактной формуле для плотности состояний $v(E_n) = v_0(E_n^0) \times \times (1 - d\Delta E_n/dE_n^0)$. Так как речь идет о плавной части функции $v(E)$, т. е. $v(E_n) = dn/dE$, замечаем, что это есть не что иное, как соотношение для квантового периода $\tau_{\text{кв}} = \hbar dn/dE$:

$$\tau_{\text{кв}}(E_n) = \tau_{\text{кв}}^0(E_n^0) (1 - d\Delta E_n/dE_n^0). \quad (5.4)$$

Полученные результаты описывают также и квазиклассические разложения, если в качестве поправок иметь в виду второе ВКБ-приближение (ответы могут быть получены в этом случае, конечно, и непосредственно из уточненных квазиклассических правил квантования). Формула (5.4) напоминает соответствующее выражение для теплоемкости вырожденного ферми-газа (см. работу Недорезова [150], а также [21]). В обоих случаях фигурирует плотность состояний; кроме того, в (5.4) роль фермиевской энергии играет E_n , а роль числа частиц — квантовое число n .

Отметим также, что на основе правил квантования НФП удобно исследовать в общем виде расстояние между соседними уровнями энергии (частоты перехода), что особенно интересно в области слабого возбуждения. В соотношении $\Gamma(E_{n+1}) - \Gamma(E_n) = 1$ используем разложение по степеням $\Delta E = E_{n+1} - E_n$, привлекая квантовые периоды $\tau_{\text{кв}} = \hbar \Gamma' : \Delta E \tau_{\text{кв}} + (\Delta E)^2 \tau_{\text{кв}}'/2 + \dots = \hbar$ и т. д.

Правила квантования НФП подходят и для параметрического варьирования энергии. В первом приближении получаем известный результат $\partial E_n/\partial \lambda = \langle \partial \hat{H}/\partial \lambda \rangle_n$ — так называемую теорему Хелльмана — Фейнмана [42], а далее можно найти вариации более высокого порядка, что весьма затруднительно в «функциональном» подходе. В частности, варьирование масштаба координат [33] (дифференцирование по $\hbar$ [21]) дает теорему вириала, а на основе более высоких производных строится теория возмущений, в которой интересно квазиклассическое истолкование квадратичного по возмущению члена в уровнях энергии.

§ 6. Итоги и перспективы развития нелокальной квазиклассики

Рассмотрение целостного процесса... лежит в самой постановке проблем микромеханики.

Л. И. Мандельштам

1. В методе квазиклассического приближения отчетливо выделяются две основные проблемы: квантование энергии и описание различных характеристик движения (вероятностей, средних, плотности состояний, сечений рассеяния, пакетных частот, квазиуровней, зон и т. п.).

2. Приведены образцы расчетов для типичных случаев (многомерные системы, учет особенностей поля, произвольная зависимость кинетической энергии от импульса, пути получения третьего и более высоких квазиклассических приближений), отдельных конкретных характеристик (энергетическая плотность состояний, функция числа состояний в зависимости от энергии, квантовые частоты и периоды, распределение вероятностей для координат в стационарных состояниях и вычисление средних значений функций от координат) и реализаций основного правила квантования энергии НФП.

3. Отбирались достаточно простые примеры, наглядно иллюстрирующие основные идеи нефункционального подхода и не требующие громоздких расчетов.

4. В основу уравнения квантования НФП кладется связь выражения для числа состояний как функции энергии с квантовым числом, нумерующим уровни энергии.

5. Привлекает простота вывода квазиклассических правил квантования энергии с помощью уравнения НФП, особенно в первом и втором приближениях. Механизм более высоких приближений открывается, пожалуй, лучше всего в рекуррентных соотношениях для функций Грина.

6. Кроме практической ценности уравнений квантования энергии НФП всегда полезно иметь точное соотношение, чтобы, в частности, получить возможность оценивать эффективность используемых аппроксимаций. В этом отношении НФП-квантование перекликается с методом статистической суммы в квантовой статистике и методом Кубо для кинетических величин. Существенно и другое обстоятельство: важно знать, что ты раскладываешь (например, в обычном ВКБ-методе ведь остается неясным, вообще говоря, что именно раскладывается в процессе получения правил квантования). НФП-формулировка позволяет пролить свет на физический смысл стандартных квазиклассических правил квантования.

7. В отличие от традиционных «функциональных» подходов ВКБ-метода, опирающихся на теорию дифференциальных уравнений (чаще всего второго порядка) и аналитические свойства входящих в эти уравнения величин, правила квантования НФП не ограничиваются ни квадратичным законом дисперсии, ни плавным поведением потенциала. При этом не нужно остерегаться точек поворота, учитывать только состояния высокого возбуждения и т. п.

8. Квазиклассические правила квантования обеспечивают достаточно высокую точность не только при больших квантовых числах, но даже для основного (!) уровня энергии, а поправки второго порядка позволяют улучшить аппроксимацию.

9. Поправки к стандартным правилам полуцелого квантования Бора — Зоммерфельда бывают двух типов — обычные квазиклассические (разложение по степеням $\hbar^2$) и особые, связанные с конкретными условиями движения вблизи классических точек поворота и входящие в так называемую фазовую добавку γ .

10. Исследование квазиклассического движения частицы в потенциальных полях с особыми точками типа максимумов, изломов, скачков и т. п. показало, что в некотором критическом диапазоне энергий отражение волновых пакетов и структура энергетического спектра могут существенно отличаться от обычных для квазиклассического приближения. Это связано с тем, что зависимость фазовой добавки $\gamma(E)$ компенсирует особенности соответствующих классических величин, возникающие вследствие разрывов Пуанкаре.

11. Особый интерес вызывает всякая попытка найти правила квантования энергии в случае многомерного движения для неразделяющихся переменных. Формально уравнение квантования НФП можно применить и для большого числа измерений, хотя возникают трудности в связи с классификацией стационарных состояний. Правда, для основного уровня энергии полученные правила НФП сохраняют силу всегда, но здесь нельзя надеяться на большую точность при квазиклассическом разложении.

12. Важна связь двух интегральных подходов, являющихся главным объектом исследования в книге, — НФП в квазиклассике и метода интегральных уравнений в проблеме связанных состояний. Резольвента, позволяющая сформулировать интегральные уравнения для стационарных состояний, определяет и энергетическую плотность состояний. Вторая нить соответствует способу записи в НФП статистического оператора чистого стационарного состояния на основе перехода к непрерывному

энергетическому аргументу (прием, обратный используемому в теории локальных связанных состояний, когда короткодействующий потенциал моделируется конечномерным оператором проектирования — сепарабельная аппроксимация).

13. НФП оказывается адекватным квазиклассическому приближению (он хорошо приспособлен для реализации процедуры разложения по степеням постоянной Планка), хотя его удобно применять и вне рамок квазиклассики (точный расчет для гармонического осциллятора, теория возмущений, расстояние между уровнями энергии, параметрическое варьирование энергии и т. д.).

14. Очень важным обстоятельством является также возможность на примере одного соотношения — записи правил квантования с помощью функции числа состояний — проиллюстрировать целый ряд фундаментальных результатов квантовой механики, вскрывая их единство и взаимосвязи и не прибегая к обычной локальной координатной схеме рассуждений. Здесь затронуты: квазиклассика, теория возмущений, метод функций Грина и интегральных уравнений, параметрическое варьирование, энергетическая плотность состояний, пакетное движение, теорема вириала, метод эффективных полей, критические условия движения и др.

15. Непосредственная связь правил квантования НФП с аналогом статсуммы позволяет использовать некоторые результаты, полученные в квантовой статистике, перенеся их на почву механики.

16. Интересно выяснить, является ли рассмотренная форма уравнений квантования НФП на базе функции числа состояний оптимальной для квазиклассического приближения.

17. Квантование НФП является одним из методов расчета уровней энергии наряду с такими, как вариационные принципы (например [33, 34, 37]), теория возмущений, квазиклассика, интегральные уравнения, факторизация [3], численные методы приближенной диагонализации матрицы энергии и др.

18. Отметим также еще один прием записи правил квантования энергии, связанный с учетом размытия границ путем введения феноменологической зависимости фазовой добавки от энергии («на фоне» эталонного решения для модели непроницаемых границ [21]). С его помощью можно учесть влияние размытия границ металла на некоторые свойства электронов проводимости [131—133].

КРИТИЧЕСКИЕ И РЕЗОНАНСНЫЕ СВОЙСТВА ЛОКАЛЬНЫХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ КВАЗИЧАСТИЦ

Согласно старому химическому правилу, вещество наиболее активно действует в стадии своего зарождения.

А. Зомерфельд

§ 7. Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных состояний

Желательно разработать на основе квантовой механики приближенные практические методы, с помощью которых можно было бы без лишних расчетов выяснять особенности систем.

П. А. М. Дирак

Вначале рассмотрим переход к интегральной форме записи стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении. Далее кратко остановимся на основных свойствах появляющихся интегральных уравнений, приближенных методах их решения и связи интересующих нас физических характеристик с параметрами таких уравнений. После этого перейдем к обсуждению проблемы существования локальных связанных состояний квазичастиц. Затем применим метод интегральных уравнений к решению задач о влиянии одной среды на связанные состояния в другой, о резонансных явлениях при распространении возбуждений в плоскостных структурах и т. д. В конце главы сделаем некоторые общие выводы об эффективности метода функций Грина и интегральных уравнений для исследуемого круга вопросов.

Известно, что между дифференциальными и интегральными уравнениями существуют взаимные связи. Например, стационарное уравнение Шредингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$ в общем случае является интегральным уравнением: в произвольном непрерывном q -представлении оно имеет вид $\int dq' H_{qq'} \Psi(q') = E\Psi(q)$. Для гамильтониана частицы $\hat{H} = \hat{T}(\mathbf{p}) + \hat{U}(\mathbf{r})$ в случае обычного закона дисперсии $T(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$ получаем традиционное дифференциальное уравнение второго порядка в координатном представлении

$$\Delta\Psi(\mathbf{r}) + 2m\hbar^{-2} [E - U(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (7.1)$$

В случае произвольной зависимости $T(\mathbf{p})$ более удобно импульсное представление, в котором уравнение имеет интегральную форму $\{T(\mathbf{p}) - E\}\Psi(\mathbf{p}) + \int d\mathbf{p}' U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\Psi(\mathbf{p}') = 0$. Впрочем, в специальных случаях оно вновь сводится к дифференциальному (например, для гармонического осциллятора).

Однако та интегральная форма стационарного уравнения Шредингера, о которой будет идти речь в дальнейшем, получается иначе. Переписываем уравнение для собственных значений гамильтониана в духе теории возмущений, которые считаем в общем случае отнюдь не малыми и способными вызвать существенную перестройку энергетического спектра: $H = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$; $(\hat{H}_0 - E)\Psi = -\hat{H}_1\Psi$.

Используя резольвенту невозмущенного гамильтониана

$$\hat{R}^0(z) = (\hat{H}_0 - z)^{-1}, \quad (7.2)$$

приходим к новой форме записи исходного уравнения:

$$\Psi = -\hat{R}^0(E) \hat{H}_1 \Psi. \quad (7.3)$$

В данном случае от одного однородного уравнения мы переходим к другому однородному, так как считаем, что интересующие нас значения энергии лежат вне спектра невозмущенного гамильтониана. Именно такая задача о новых участках энергетического спектра представляет наибольший интерес, в частности, когда невозмущенное движение является свободным, а возмущение способно создать качественно новые состояния — связанные. В общем случае уравнение будет неоднородным, так как к частному решению (с определенным правилом обхода особенностей резольвенты) нужно добавить общее решение невозмущенного уравнения: $\Psi = \Psi^0_{\text{общ}} - \hat{R}^0(E) \hat{H}_1 \Psi$.

Возвращаясь к уравнению (7.3), записанному в символической операторной форме, отметим, что оно соответствует линейному однородному интегральному уравнению Фредгольма второго рода. Ядро этого уравнения не является эрмитовым (симметричным), однако можно перестроить уравнение, чтобы воспользоваться преимуществами теории Гильберта — Шмидта. Впрочем, многие важные результаты в интересующей нас проблеме связанных состояний можно получить без обращения к этой теории, т. е. не проводя симметризации ядра.

В дальнейшем будем использовать запись интегрального уравнения в координатном представлении, в котором гамильтониан возмущения диагонален (в качестве возмущения, если не оговорено противное, будет фигурировать потенциальная

энергия, т. е. H_1 будем считать локальным в операторном смысле потенциалом). В таком случае уравнение для связанных стационарных состояний приобретает вид

$$\Psi(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'). \quad (7.4)$$

Здесь $R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ — функция Грина невозмущенного движения, т. е. координатные матричные элементы резольвенты невозмущенного гамильтониана: $R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \equiv \langle \mathbf{r} | (\hat{H}_0 - E)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle$. Искомые значения энергии находятся вне особых точек резольвенты. Добавим, что рассматриваются пространства различной размерности n .

Заметим, что иногда используют определение оператора резольвенты, отличающееся знаком от выражения (7.2).

Таким образом, исследование связанных состояний методом интегральных уравнений предполагает предварительный этап вычисления конкретных функций Грина невозмущенного движения. Правда, в некоторых случаях можно получить полезные общие выводы о закономерностях движения, не вычисляя явно ФГ (см. изучение вопроса о критерии существования локальных связанных состояний и о применимости дельта-моделей потенциальных полей).

Так, в случае невозмущенного свободного движения частицы с гамильтонианом $H_0 = T(\mathbf{p})$ расчет ФГ удобно выполнить в импульсном пространстве:

$$R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E < 0) = h^{-n} \int d\mathbf{p} \frac{\exp[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar]}{T(\mathbf{p}) + |E|}. \quad (7.5)$$

Результат вычисления для квадратичного изотропного закона дисперсии в пространстве любого числа измерений приведен в прил. 1.

Говоря о вычислении ФГ в общем случае, отметим следующие способы.

1. Использование разложения по собственным функциям гамильтониана:

$$\langle \mathbf{r} | (\hat{H} - z)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle = \sum \psi_k(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r}') / (E_k - z). \quad (7.6)$$

Здесь k — полный набор квантовых чисел, классифицирующих стационарные состояния. Частным случаем является формула (7.5).

2. Решение интегрального уравнения типа Дайсона, если известна функция Грина для более простой системы: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$;

$$\hat{R} = \hat{R}^0 - \hat{R}^0 \hat{H}_1 \hat{R}. \quad (7.7)$$

3. Метод частных решений ($\chi\varphi$ -метод). Если $\chi(x)$ и $\varphi(x)$ — два линейно независимых решения дифференциального уравнения (7.1)

в одномерном случае с требуемыми свойствами (учет граничных условий и асимптотического поведения), то ФГ могут быть построены, например, следующим образом:

$$R(x, x') = (2m/\hbar^2 W) [\theta(x - x') \chi(x) \varphi(x') + \theta(x' - x) \varphi(x) \chi(x')],$$

где вронскиан $W(\chi, \varphi) \equiv \chi \varphi' - \varphi \chi'$.

4. Для плоскостной среды можно вычислить трехмерную ФГ частицы на основе функции Грина $R_{\perp}$ одномерной ветви движения сквозь слои. Используя формулу (7.6), приходим к соотношению

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \hbar^{-2} \int d\vec{p}_{\parallel} \exp[i\vec{p}_{\parallel}(\vec{r} - \vec{r}')/\hbar] R_{\perp}(x, x'; E - p_{\parallel}^2/2m).$$

Переходя к цилиндрическим импульсным координатам в плоскости слоев, получаем формулу

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = (2\pi)^{-1} \int_0^{\infty} q dq J_0(q|\vec{r} - \vec{r}'|) R_{\perp}(x, x'; E - \hbar^2 q^2/2m), \quad (7.8)$$

где J — функция Бесселя.

Соответствующее обратное преобразование Ганкеля позволяет по трехмерным ФГ найти одномерные:

$$R_{\perp}(x, x'; E) = 2\pi \int_0^{\infty} R(x, x', |\vec{r} - \vec{r}'|; E) |\vec{r} - \vec{r}'| d|\vec{r} - \vec{r}'|.$$

Аналогичное соотношение имеет место при переходе от двумерной ФГ к трехмерной, если поле однородно вдоль одной из осей (z):

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \hbar^{-1} \int dp_z \exp[ip_z(z - z')/\hbar] R_{\perp}(\vec{r}, \vec{r}'; E - p_z^2/2m).$$

Существуют и другие особые приемы вычисления ФГ. Например, в случае свободного движения в полупространстве можно использовать прием «зеркального отражения»: $R(x, x') = R^0(x - x') - R^0(x + x')$.

Часто удобно представить потенциальную энергию, введя «профильную» функцию $u(\mathbf{r})$ и характерную величину U_0 : $U(\mathbf{r}) = -U_0 u(\mathbf{r})$. Тогда интегральное уравнение (7.4) приобретает стандартный для теории интегральных уравнений вид $\Psi(\mathbf{r}) = U_0 \int d\mathbf{r}' R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) u(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')$, где U_0 выступает в роли параметра λ интегрального уравнения, ядро которого равно $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) u(\mathbf{r}')$.

Таким образом, переходя к интегральной форме уравнения Шредингера для связанных стационарных состояний в духе теории возмущений, мы получаем возможность сопоставить две задачи. Одна — исходная, основная, физическая — заключается в нахождении уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, т. е. собственных значений и собственных функ-

ций полного гамильтониана системы); вторая — промежуточная, вспомогательная, математическая — состоит в отыскании характеристических значений и характеристических функций интегрального уравнения. Если не стремиться к симметризации ядра интегрального уравнения, то у обеих задач собственные функции одни и те же. В первом случае они классифицируются квантовыми числами, нумерующими уровни энергии, а в аппарате интегральных уравнений — номерами собственных значений параметра λ , т. е. характерных «глубин» потенциала U_0 (отвлекаясь от возможного вырождения собственных значений). Следовательно, соответствие между двумя задачами заключается в сопоставлении каждому фиксированному значению энергии системы E , входящему в интегральное уравнение на правах вспомогательного параметра, набора характеристических значений ($U_0^{(1)}, U_0^{(2)}, \dots$, при фиксированном профиле поля). Физический смысл этой ситуации ясен: данное значение энергии всегда может реализоваться по мере углубления ямы как основное, затем, в более глубокой яме, оно будет играть роль первого возбужденного уровня и т. д. Спектр глубин потенциальных ям при фиксированной энергии не имеет ограничений в сторону возрастания. При этом в достаточно глубоких ямах уровни энергии расположены весьма плотно, так что значения глубин, при которых данный уровень становится более возбужденным, также очень тесно распределены. Математически это проявляется в возможности применения квазиклассических методов. Обратная сторона указанного соответствия заключается в том, чтобы при фиксированном поле найти возможные значения энергии: если получены глубины $U_0^{(n)} = f_n(E)$, то обращение этих зависимостей дает искомые уровни энергии. Впрочем, наибольший интерес будет представлять для нас вопрос о критических свойствах полей: изучение ситуации *in statu nascendi* (в момент возникновения) связанного состояния, исследование энергии связи в околочритических условиях и т. п. Таким образом, одним из малых параметров задачи будет величина энергии системы.

Что касается волновых функций, то интегральное уравнение обычно дает возможность проследить за их поведением вдали от области действия поля в общем виде. Внутри этой области для слабосвязанных основных состояний волновая функция практически остается постоянной, что служит основанием развития соответствующих приближенных методов расчета.

Практическое решение поставленных задач опирается на некоторые общие свойства интегральных уравнений. Так, собственные значения находятся в теории Фредгольма как корни

уравнения $D(\lambda) = 0$, где $D(\lambda)$ — определитель (знаменатель) Фредгольма. При вычислении этого определителя можно использовать разложения по упомянутым малым параметрам. Такой путь решения оказывается удобным в случае слабых одномерных полей. Можно также получить вариационные оценки на основе метода Кона — Ростокера [36] (вариационного принципа для интегральных уравнений, не связанного с теорией Гильберта — Шмидта). В некоторых случаях эффективна аппроксимация одномерных локализованных слабых полей с помощью δ -образных моделей потенциала, что позволяет свести интегральные уравнения к системам линейных алгебраических уравнений. Те же цели преследует приближенная замена ядра вырожденным (сепарабельная аппроксимация). Наконец, после соответствующей симметризации можно применить аппарат теории Гильберта — Шмидта (вариационный принцип, оценки на основе рядов обратных степеней собственных значений, метод следов и т. д.). Основы теории интегральных уравнений изложены в книгах [28—32].

Рассмотрим несколько примеров, иллюстрирующих изложенное и полезных для дальнейшего.

Функция Грина свободного движения частицы. Для одномерного свободного движения частицы с квадратичным законом дисперсии ФГ

$$R^0(x, x'; z) = h^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp[ip(x - x')/\hbar] / (p^2/2m - z)$$

при $x > x'$ вычисляется с помощью замыкания контура интегрирования в верхней полуплоскости, что по теореме о вычетах дает

$$i(m/\hbar^2 k) \exp[ik(x - x')]; \quad \hbar k = \sqrt{2mz}, \quad \text{Im } k > 0.$$

В силу зависимости ФГ только от $|x - x'|$ (однородность и изотропность внешних условий) достаточно в полученном выражении заменить $x - x'$ на $|x - x'|$. Таким образом, ФГ имеет вид

$$R^0(x, x'; z) = i(m/\hbar^2 k) \exp(ik|x - x'|); \quad \hbar k = \sqrt{2mz}, \quad \text{Im } k > 0. \quad (7.9)$$

Если рассматриваются положительные значения энергии, то для предельного перехода $z = E + i0$ получаем

$$R_+^0(x, x'; E) \equiv R^0(x, x'; E + i0) = i(m/\hbar^2 k) \exp(ik|x - x'|); \\ \hbar k = \sqrt{2mE}, \quad (7.10)$$

тогда как предел при стремлении к вещественной оси из нижней полуплоскости равен

$$R_-^0(x, x'; E) \equiv R^0(x, x'; E - i0) = -i(m/\hbar^2 k) \exp(-ik|x - x'|).$$

Если же нас интересуют отрицательные значения энергии, то явный вид $\Phi\Gamma$ не зависит от характера предельного перехода:

$$R^0(x, x'; E < 0) = (m/\hbar^2 \kappa) \exp(-\kappa|x - x'|); \quad \hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}. \quad (7.11)$$

Рассмотренная функция Грина имеет разрез вдоль положительной полуоси энергий.

Добавим, что при расчете $\Phi\Gamma$ для задач рассеяния ($R_{\pm}$) можно использовать и формулу Дирака

$$[p^2/2m - E \mp i0]^{-1} = P[p^2/2m - E]^{-1} \pm i\pi\delta(p^2/2m - E),$$

а между рассмотренными предельными значениями $\Phi\Gamma$ существует связь

$$R_-(x, x'; E) = [R_+(x', x; E)]^*,$$

вытекающая из общего соотношения для резольвенты эрмитова оператора: $[\hat{R}(z)]^+ = \hat{R}(z^*)$. В случае произвольного числа измерений при $E < 0$ в соответствии с формулой (7.5), применяя параметрическое интегрирование

$$(p^2/2m + |E|)^{-1} = \int_0^\infty dt \exp[-t(p^2/2m + |E|)],$$

приводим импульсный интеграл к произведению n одномерных:

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E < 0) = \hbar^{-n} \int_0^\infty dt \exp(-t|E|) \times \\ \times \prod_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^\infty dp_\alpha \exp[-tp_\alpha^2/2m + ip_\alpha(x_\alpha - x'_\alpha)/\hbar].$$

Воспользовавшись одним из интегральных представлений для функции Макдональда $K_\nu(z)$, получаем, опуская детали вычислений:

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E < 0) = \frac{m\kappa^{n/2-1}}{2^{n/2-1}\pi^{n/2}\hbar^2} \cdot \frac{K_{n/2-1}(\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{n/2-1}}; \\ \hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}.$$

В частности, для $n = 1, 2, 3$ отсюда следуют хорошо известные выражения. В одномерном случае приходим к формуле (7.11), в двумерном $\Phi\Gamma$ равна

$$R(\vec{r}, \vec{r}'; E < 0) = (m/\pi\hbar^2) K_0(\kappa|\vec{r} - \vec{r}'|),$$

а в трехмерном имеем

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E < 0) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(-\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (7.12)$$

Функция Грина в случае δ -поля. Рассмотрим вначале движение частицы в поле притяжения $U(x) = -u\delta(x)$. Из общего уравнения для резольвенты полного гамильтониана (7.7) в координатном представлении получаем соотношения для $\Phi\Gamma$:

$$R(x, x') = R^0(x, x') - \int dx'' R^0(x, x'') U(x'') R(x'', x'); \\ R(x, x') = R^0(x, x') + u R^0(x, 0) R(0, x').$$

Полагая $x = 0$, приходим к выражению

$$R(0, x') = R^0(0, x')/[1 - uR^0(0, 0)],$$

откуда

$$R(x, x') = R^0(x, x') + u R^0(x, 0) R^0(0, x')/[1 - uR^0(0, 0)].$$

Ответ можно записать в явном виде, подставив $\Phi\Gamma$ свободного движения (7.9):

$$R(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} \left[e^{ik|x-x'|} + \frac{ix_0}{k - ix_0} e^{ik(|x| + |x'|)} \right];$$

$$\kappa_0 = mu/\hbar^2; \quad \hbar k = \sqrt{2mE}, \quad \text{Im } k > 0.$$

Заметим, что в соответствии с общими свойствами функций Грина (7.6) полюс $E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2/2m$, или $k_0 = ix_0$, отвечает связанному состоянию в δ -яме, а вычет равен $-\psi_0(x)\psi_0^*(x') = -\kappa_0 \exp[-\kappa_0 \times (|x| + |x'|)]$. Здесь мы имеем возможность проиллюстрировать еще один способ получения уровней энергии и волновых функций связанных стационарных состояний — на основе полной функции Грина, выявляя энергетические особенности (полюсы).

Без детальных пояснений проделаем аналогичные расчеты в импульсном представлении:

$$R(p, p') = R^0(p, p') - \int \int dp'' dp''' R^0(p, p'') \langle p'' | U | p''' \rangle R(p''', p'); \\ R^0(p, p') = \delta(p - p')/(p^2/2m - E); \quad \langle p | U | p' \rangle = -u/\hbar;$$

$$\int R(p, p') dp = (p'^2/2m - E)^{-1} (1 - ix_0/k)^{-1};$$

$$R(p, p') = R^0(p, p') + \frac{u/\hbar}{1 - ix_0/k} \frac{1}{(p^2/2m - E)(p'^2/2m - E)};$$

$$\hbar k = \sqrt{2mE}, \quad \text{Im } k > 0; \quad \psi_0(p) = (2\pi)^{-1/2} m^{-1} (\hbar \kappa_0)^{3/2} / (p^2/2m + |E_0|).$$

Интегральное уравнение для связанного состояния в δ -яме. В качестве простой, но весьма яркой иллюстрации эффективности метода интегральных уравнений при исследовании

связанных стационарных состояний в локализованном поле рассмотрим случай δ -образного потенциала притяжения (для краткости будем говорить о δ -яме).

Пусть частица с энергией $E < 0$ движется в одномерном потенциальном поле $U(x)$. Стационарные состояния согласно формулам (7.4) и (7.11) описываются интегральным уравнением

$$\Psi(x) = - (m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|);$$

$$\hbar \kappa = \sqrt{2m |E|}. \quad (7.13)$$

Полагая $U(x) = -u\delta(x)$, получаем соотношение

$$\hbar^2 \kappa \Psi(x) = m u \Psi(0) \exp(-\kappa |x|),$$

из которого, во-первых, при $x=0$ в силу $\Psi(0) \neq 0$ вытекает значение энергии связи: $\hbar^2 \kappa = m u$, т. е. $|E| = m u^2 / 2 \hbar^2$, а во-вторых, явный вид волновой функции единственного связанного состояния $\Psi(x) = \Psi(0) \exp(-\kappa |x|)$. Величину $\Psi(0)$ находим из условия нормировки. Окончательный ответ:

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\chi_0} \exp(-\chi_0 |x|); \quad E_0 = -m u^2 / 2 \hbar^2; \quad \chi_0 = m u / \hbar^2. \quad (7.14)$$

Поучительно сравнить использованный интегральный метод с другими способами (например, решая дифференциальное уравнение с явной «сшивкой» решений «в точке действия» поля или пользуясь заготовленным заранее оператором перехода через δ -особенность), чтобы убедиться в простоте и изяществе метода интегрального уравнения. Что касается результата, то он будет в дальнейшем применяться в более сложных системах, а кроме того, формулы (7.14) описывают в первом приближении свойства локального поля притяжения произвольной формы (слабого), в чем можно будет убедиться из анализа интегрального уравнения (7.13) в общем случае.

§ 8. Проблема существования локальных связанных состояний

В одномерном случае сколь угодно малое локальное возмущение приводит к изолированному уровню, в трехмерном случае появление такого уровня требует некоторой конечной «критической» величины возмущения.

И. М. Лифшиц

Почему столь существенна размерность пространства? Какие еще факторы способны «вмешаться» в процесс формирования связанных состояний? Каков критерий появления

локальных связанных состояний? Как найти критические параметры полей? Каким образом изменяется энергия связи? Какими явлениями сопровождается появление каждого нового связанного состояния? Что имеют в виду, говоря о «локальном поле», «локальном состоянии»? Каковы адекватные квантово-теоретические методы исследования проблемы? Для чего нужно изучать эту проблему?

Эти и многие другие вопросы возникают при знакомстве с известными результатами, полученными при анализе данной проблемы. Попытаемся найти ответы на некоторые из них.

Подчеркнем, что речь идет о чисто квантовом явлении, поскольку согласно классической механике даже очень слабое поле притяжения приводит к образованию связанных состояний при любых условиях.

Впервые математическое исследование проблемы, опирающееся на теорию интегральных уравнений, было проведено И. М. Лифшицем в работах [104, 105], а физические приложения рассмотрены в цикле его статей, завершающихся обзором [103], содержащим ссылки на работы этого направления.

Простейшие сведения о проблеме мы находим в некоторых книгах по квантовой механике [1—4]. Обычно подчеркивается, что в одномерном случае даже в слабом поле всегда существует хотя бы одно связанное состояние, а в трехмерном отмечается отсутствие связанных состояний в достаточно слабом поле.

О ситуации в двумерном случае до сих пор встречаются различные мнения (см. [2; 3, т. 2]). Наиболее четкая формулировка результатов для простых случаев локализованных полей притяжения дана в книге Ландау и Лифшица [1] (в частности, получен ответ для энергии связи в одномерной потенциальной яме произвольного профиля и двумерной с круговой симметрией).

При исследовании проблемы существования связанных состояний основной упор обычно делают на условия, способствующие созданию устойчивых образований, стабилизирующие систему. Например, открыто интересное явление трехмерной локализации заряженных частиц в слабом потенциальном поле при наличии магнитного поля (о соответствующих работах см. в монографии [56]). Хорошо известны эффекты образования куперовских пар, таммовских граничных состояний, центров окраски, флуктуонных состояний и т. д.

Можно выделить два главных момента: образование новой сущности, нового качества при захвате частиц областью притяжения и резко выраженный резонансный характер рассеяния

медленных частиц в критических условиях зарождения связанных состояний. Связанным состояниям присущ коллективный характер, в отличие от состояний инфинитного движения. Так, атом водорода есть нечто цельное, единое, коллективное, тогда как при рассеянии электрона на ядре частицы сохраняют свою индивидуальность, хотя формально оба случая относятся к разным участкам энергетического спектра в одной и той же задаче. Фермионы, эффективно объединяясь, могут превращаться в бозоны. При этом устойчивость возникающего нового физического объекта определяется в первую очередь величиной энергии связи, т. е. энергетической щелью между «отколовшимся» уровнем финитного движения и непрерывной частью энергетического спектра, отвечающего диссоциации системы. С другой стороны, важное значение имеет делокализация частицы в слабосвязанном состоянии, когда движение происходит далеко за пределами области притяжения за счет проникновения в классически недоступную область. Такое состояние обладает очень большими эффективными размерами, повышенной чувствительностью к воздействию на больших расстояниях, к взаимному «перекрыванию» с другими аналогичными объектами. Кроме того, чем слабее связь, тем сильнее резонирующее действие. Тем самым особый интерес представляет задача создания критической ситуации в таких системах, где обычно она не возникает (например, в эффективно одномерных ветвях движения), выяснения, какие факторы способны ослабить связь и даже вытеснить связанное состояние. Речь идет о влиянии граничных условий, дополнительных областей эффективного отталкивания, нелокальностей поля, вида закона дисперсии и т. п. Как будет видно, пороговое явление вытеснения связанных состояний может возникнуть и в одномерном случае. Так расширяется диапазон задач с исследованием критических свойств локальных связанных состояний.

Заметим, что термины, связанные с понятием «локализованный», «локализация», «локальный», отражают различные аспекты пространственного описания. Во-первых, локальный потенциал описывает поле, сосредоточенное либо вблизи некоторой точки пространства (трехмерная локализация), либо в окрестности некоторой плоскости (одномерная локализация в плоскостной среде), либо около оси (двумерная локализация). Считается, что оно резко обрывается за пределами сравнительно малой области пространства соответствующей размерности, хотя во многих случаях требуется лишь достаточно быстрое убывание поля. Потенциальное поле моделирует неоднородности пространства, локализованные области притя-

жения и отталкивания, образуя системы ям и барьеров. Во-вторых, локальные связанные состояния названы так в противовес зонному характеру энергетического спектра, а также в отличие от состояний, «размазанных» за счет переноса системы как целого (например, электрон связан с ядром, но может передвигаться вместе с ним при перемещениях атома). В-третьих, локальность операторов потенциальной энергии, которые считаются функциями координат и вследствие этого в координатном представлении их действие на волновую функцию сводится к умножению на значение потенциала в точке, соответствующей аргументу функции. В отличие, например, от нелокальности псевдопотенциальных [17, 56] и сепарабельных [35] моделей в теории твердого тела и ядра.

Локальные связанные состояния возникают вблизи областей притяжения как в случае локальных полей типа одной или нескольких потенциальных ям и барьеров, так и нелокальных — перепад значений потенциала на границе двух сред, полуограниченное движение и пр. Для них характерно соприкосновение с непрерывной частью энергетического спектра, соответствующей в одномерном случае либо инфинитному движению с двукратным вырождением энергии, либо полуфинитному движению с отражением без вырождения, либо зонной полосе разрешенных значений энергии для периодического поля. При этом уровни энергии связанных состояний могут быть вытеснены в непрерывную область энергетического спектра.

В случае же чисто финитного движения энергетический спектр состоит только из дискретных уровней энергии, все состояния являются связанными. Фактически это лишь математические модели реальных физических ситуаций, приближенно описываемых в некоторой области пространства и значений энергии нелокальными полями с бесконечными асимптотическими значениями во всех направлениях или для одной из ветвей движения. К числу таких моделей относятся гармонический осциллятор, одномерная прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины, полуограниченный осциллятор в задаче о магнитных поверхностных уровнях [57, 76], «полости» и узкие каналы в системах типа резонаторов и волноводов. Отметим некоторые проявления и реализации одномерного движения.

Отделение независимой ветви движения (движение сквозь слои в плоскостных структурах, движение вдоль магнитного поля, радиальное движение в полях сферической и цилиндрической симметрии и т. п.). «Замораживание» поперечных ветвей движения за счет квантового размерного эффекта,

(нитевидные каналы, «трубки», «квантоводы»). Особые топологические аналоги трехмерного движения в молекулярных цепочках (модель свободных электронов для органических веществ в квантовой химии [67, 68]). Наконец, нельзя не подчеркнуть важную методическую роль одномерных моделей в демонстрации основных квантовых явлений и эффектов в исследуемых системах (доступность вычислений, наглядность графического изображения, небольшое число параметров пространственного описания, относительная простота закономерностей).

Общие соображения подсказывают, что существует противодействие тенденции локализовать частицу в координатном пространстве в силу соотношения неопределенностей. Оно может привести к столь большому увеличению неопределенности импульса и средней кинетической энергии, что переводит состояние в область непрерывного спектра. Однако при таком рассуждении, во-первых, не учитывается эффект проникновения в подбарьерную область движения, а во-вторых, это есть лишь наводящее соображение о причине возможной несостоятельности области эффективного притяжения, ничего не говорящее о фактической ситуации в случае той или иной размерности пространства. Можно полагать, что в случае трех измерений «поджатие» частицы при попытке ее локализовать происходит с трех сторон и, вопреки эффекту просачивания за пределы классически доступной области, все же удастся заставить частицу локализоваться настолько, что она «вырывается» в область непрерывного спектра энергии (усиленная локализация доводится до крайности и приводит к своей противоположности — к делокализации). Критические условия при этом служат границей, мерой, порогом равновесия различных тенденций: локализующего действия потенциала, которому противостоит конкуренция подбарьерного просачивания и соотношения неопределенностей, и делокализирующего действия большой размерности пространства. Образно говоря, в трехмерном случае есть слишком много направлений для рассасывания устойчивого образования, для утечки частицы, слишком много возможностей разрушить локализацию, расплескать связанное состояние. Сказанное, конечно, есть лишь попытка представить себе относительное влияние размерности пространства. Все же общая тенденция делокализации с увеличением размерности пространства должна сохраняться для каждой фиксированной формы закона дисперсии.

Не затрагивая пока количественных результатов, более строгих доказательств, отметим еще один качественный подход

к объяснению возникающих явлений. Рассмотрим свойства непрерывной части энергетического спектра до «включения в игру» вызывающий эффект потенциала. Можно предположить, что в случае достаточно большой плотности состояний на границе сплошного спектра энергии (как это имеет место в одномерном движении с обычным законом дисперсии) отклик системы на внешнее воздействие в виде области эффективного притяжения позволит «утащить» одно состояние. В случае же незначительной плотности состояний (как в трехмерном движении) для этого потребуется существенно большее усилие, большее критическое значение поля. Впрочем, такие рассуждения справедливы для локальных полей (это, как мы увидим, подтверждается количественным анализом), а для нелокальных полей необходимо принимать во внимание взаимодействие появляющегося состояния с окружением, а не только с континуумом: нельзя пользоваться невозмущенной картиной. Например, непроницаемая граница, фактически не изменяя плотности состояний, вступает в контакт с возникающим состоянием, уменьшая энергию связи. То же относится и к областям отталкивания локального типа.

Непосредственное исследование локальных связанных состояний начнем с одномерного движения частицы с квадратичным законом дисперсии (эффективная масса m) в потенциальном поле $U(x)$ при $E < 0$. Используя изложенный в предыдущем параграфе метод, еще раз выпишем соответствующее интегральное уравнение:

$$\Psi(x) = -(m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|);$$

$$\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}. \quad (8.1)$$

Если имеется в виду движение в плоскостной среде, то еще до перехода к интегральной форме уравнения отделяем ветви свободного движения вдоль слоев и изучаем одномерное движение сквозь слои, для которого строятся функции Грина и т. д. Заметим, что полная трехмерная ФГ может потребоваться в тех случаях, когда в плоскостной среде имеются трехмерно локализованные неоднородности.

Определитель Фредгольма для уравнения (8.1) вычисляем с помощью ряда Фредгольма [28, 29], сходящегося всюду:

$$D = 1 + \sum_{a=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^a}{a!} \int \dots \int dx_1 dx_2 \dots dx_a K \times$$

$$\times \begin{pmatrix} x_1, x_2, \dots, x_n \\ x_1, x_2, \dots, x_n \end{pmatrix} = 1 - \lambda \int dx K(x, x) + \\ + \frac{\lambda^2}{2} \int \int dx_1 dx_2 \left| \frac{K(x_1, x_1) K(x_1, x_2)}{K(x_2, x_1) K(x_2, x_2)} \right| + \dots$$

Учитывая, что в рассматриваемом случае $\lambda K(x, y) = -R^0(x, y)U(y)$, и опуская несложные преобразования, выпишем несколько членов разложения, которые потребуются в дальнейшем:

$$D = 1 + \int dx R^0(x, x) U(x) + 2^{-1} \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) \times \\ \times [R^0(x_1, x_1) R^0(x_2, x_2) - R^0(x_1, x_2) R^0(x_2, x_1)] + \\ + 6^{-1} \iiint dx_1 dx_2 dx_3 U(x_1) U(x_2) U(x_3) [R^0(x_1, x_1) R^0(x_2, x_2) R^0(x_3, x_3) - \\ - 3R^0(x_1, x_1) R^0(x_2, x_3) R^0(x_3, x_2) + \\ + 2R^0(x_1, x_2) R^0(x_2, x_3) R^0(x_3, x_1)] + O(U^4).$$

Подставляя явный вид свободной функции Грина $R_0(x, y) = (m/\hbar^2 \kappa) \exp(-\kappa |x - y|)$, получаем

$$D = 1 + (m/\hbar^2 \kappa) \int dx U(x) + (m^2/2\hbar^4 \kappa^2) \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) [1 - \\ - \exp(-2\kappa |x_1 - x_2|)] + (m^3/6\hbar^6 \kappa^3) \iiint dx_1 dx_2 dx_3 U(x_1) U(x_2) U(x_3) \times \\ \times \{1 - 3\exp(-2\kappa |x_1 - x_2|) + 2\exp[-\kappa(|x_1 - x_2| + \\ + |x_2 - x_3| + |x_3 - x_1|)]\} + O(U^4).$$

В соответствии с теорией Фредгольма для нахождения собственных значений интегрального уравнения (или уровней энергии) приравниваем нулю определитель Фредгольма, что приводит к соотношению

$$\kappa = -(m/\hbar^2) \int dx U(x) - (m^2/2\hbar^4 \kappa) \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) [1 - \\ - \exp(-2\kappa |x_1 - x_2|)] - (m^3/6\hbar^6 \kappa^2) \iiint dx_1 dx_2 dx_3 U(x_1) U(x_2) U(x_3) \times \\ \times \{1 - 3\exp(-2\kappa |x_1 - x_2|) + \\ + 2\exp[-\kappa(|x_1 - x_2| + |x_2 - x_3| + |x_3 - x_1|)]\} + O(U^4).$$

Производя разложение экспонент в подынтегральных выражениях с учетом малого параметра $\kappa a \ll 1$ (a — размер области действия поля) в слабом поле, выводим общую формулу для величины κ , характеризующей энергию связи единственного связанного состояния:

$$\kappa = -(m/\hbar^2) \int dx U(x) - (m^2/\hbar^4) \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) \times \\ \times |x_1 - x_2| + O(U_0^3 a^5). \quad (8.2)$$

Если имеется только одна область притяжения (яма с характерными значениями глубины U_0 и ширины a), то $\kappa \sim maU_0/\hbar^2$,

так что условие $\kappa a \ll 1$ означает малость параметра $ma^2 U_0 / \hbar^2$ (чисто квантовое условие). Именно по такому малому параметру идет разложение в формуле (8.2). Таким образом, полученный результат охватывает как случай достаточно узких потенциальных ям ($a \rightarrow 0$), так и мелких ($U_0 \rightarrow 0$). В дальнейшем, говоря о слабом поле, будем иметь в виду оба случая. В первом приближении можно использовать δ -аппроксимацию для таких полей (более тонкие эффекты, описываемые поправочными членами формулы (8.2), эта аппроксимация не «улавливает»). При этом достаточно получить результаты для поля $U(x) = -u\delta(x)$, заменив далее интенсивность u абсолютным значением величины интеграла $|\int dx U(x)|$ для фактического поля.

В связи с этим заметим, что условием применимости теории Фредгольма служит требование конечности величины

$$\iint dx dy |K(x, y)|^2, \text{ или } \iint dx dy |R^0(x, y)|^2 U^2(y) \quad (8.3)$$

(нормируемое, фредгольмово ядро). Это условие сходимости рядов Фредгольма оказывается, однако, излишним, если ядро является вырожденным (разделяющимся, сепарабельным), ряды обрываются. В частности, таким будет ядро интегрального уравнения в случае сепарабельного потенциала. Например, для нелокального мультипликативного оператора возмущения

$$\langle x | H_1 | y \rangle = a(x) b(y)$$

ядро интегрального уравнения также становится мультипликативным:

$$\langle x | R^0 H_1 | y \rangle = \int dx' R^0(x, x') a(x') b(y) = A(x) b(y),$$

а определитель Фредгольма сводится к простому выражению:

$$D = 1 + \text{Sp}(\hat{R}^0 \hat{H}_1), \quad (8.4)$$

т. е. ряд Фредгольма для определителя обрывается на члене первого порядка по степеням возмущения. К числу мультипликативных относится и δ -модель потенциала — любопытный случай, когда локальное поле $U(x) = u\delta(x)$ описывается нелокальным мультипликативным оператором: $\langle x | U | y \rangle = u\delta(x)\delta(y)$. Хотя формально для δ -поля норма ядра интегрального уравнения оказывается бесконечной, но это не препятствует применению результатов теории Фредгольма для этой модели.

Возвращаясь к полученной формуле (8.2), видим, что в первом приближении выражение для энергии совпадает с известным [1]: $|\bar{E}| = (m/2\hbar^2) |\int dx U(x)|^2$. Формула (8.2) уточняет этот результат, однако ее значение, как мы увидим, выходит далеко за эти рамки. При этом можно не выписывать значение энергии

связи с поправочными членами в общем виде, поскольку формула для κ более удобна.

Существенно, что энергия связи во всех случаях (как в узкой яме, так и в мелкой) мала по сравнению с глубиной ямы:

$$|E| \sim U_0 (ma^2 U_0 / \hbar^2) \ll U_0.$$

До сих пор рассматривалась отдельная неоднородность среды — область притяжения, моделируемая потенциальной ямой. Возникает вопрос: как повлияют на формирование связанного состояния области отталкивания? При каких условиях даже в одномерном случае не будет связанных состояний?

Особый интерес вызывает случай в среднем равного нулю потенциала, когда $\int dx U(x) \approx 0$ (например, яма и барьер взаимно компенсируют друг друга). Любопытно, что связанное состояние все еще сохраняется, а найденное выражение (8.2) описывает эффект и в этом случае (второе слагаемое). В следующем приближении на основе малости $\kappa L \sim (maLU_0/\hbar^2)^2$, где L — наибольшее расстояние между неоднородностями поля, имеем

$$\begin{aligned} \kappa = & - (m^2/\hbar^4) \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) |x_1 - x_2| - \\ & - (m^3/\hbar^6) \iiint dx_1 dx_2 dx_3 U(x_1) U(x_2) U(x_3) |x_1 - x_2| |x_2 - x_3| + \\ & + O(U_0^4 a^4 L^3). \end{aligned}$$

Можно показать, что

$$\iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) |x_1 - x_2| < 0$$

при $\int dx U(x) = 0$.

Таким образом, для равного нулю в среднем потенциала энергия связи оказывается, как и следовало ожидать, значительно меньше, чем в случае отдельной ямы:

$$|E| \sim U_0 (ma^2 U_0 / \hbar^2) (maLU_0 / \hbar^2)^2,$$

что вызывает резкое усиление резонансного рассеяния медленных частиц.

Наконец, соотношение (8.2) можно использовать и для нахождения критических параметров потенциала разного знака с $\int dx U(x) > 0$, при которых связанное состояние исчезает. Еще раз подчеркнем, что в как угодно слабом одномерном поле притяжения связанное состояние существует всегда, тогда как наличие областей отталкивания — барьеров — способно вытеснить связанное состояние. Это чисто квантовое явление есть следствие интегрального, нелокального характера движения. Физический смысл его заключается в том, что частица, будучи связана вблизи ямы, за счет эффекта проникновения в подбарьерную область далеко

за пределы ямы (на расстояние порядка κ^{-1}) «чувствует» области отталкивания. По классическим же представлениям никакое поле вне ямы не может повлиять на локальное движение частицы в яме. Критическое условие получаем из формулы (8.2) при $\kappa \rightarrow 0$:

$$\int dx U(x) = - (m/\hbar^2) \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) |x_1 - x_2| + O(U_0^3 a^3 L^2).$$

Итак, выражение (8.2) содержит три результата: уточнение обычной формулы для энергии связи в случае одномерного слабого поля притяжения ($\int dx U(x) < 0$), утверждение о сохранении связанного состояния и значение энергии связи в случае скомпенсированного поля ($\int dx U(x) = 0$) и критическое условие вытеснения связанного состояния в случае преобладания отталкивания ($\int dx U(x) > 0$).

Переходя к нахождению волновых функций связанных стационарных состояний, рассмотрим поведение решения уравнения (8.1) на небольших расстояниях $|x| < L$ (в пределах области действия поля). Разлагая экспоненциальный множитель под знаком интеграла, получаем

$$\begin{aligned} \Psi(x) = & - (m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') + \\ & + (m/\hbar^2) \int dx' U(x') \Psi(x') |x - x'| + \dots \end{aligned}$$

Вводя обозначение $C = - (m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x')$, имеем

$$\Psi(x) = C [1 + (m/\hbar^2) \int dx' U(x') |x - x'| + O(U^2)],$$

т. е. в первом приближении волновая функция постоянна внутри области действия поля. Кстати, подстановка этого выражения в предыдущую формулу для C дает еще один способ вычисления энергии связи. Вне области действия поля, т. е. при $|x| > L$, волновая функция экспоненциально убывает:

$$\begin{aligned} \Psi(x) = & - (m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(\kappa x' \operatorname{sgn} x) \exp(-\kappa |x|) = \\ = & C [1 - (m/\hbar^2) \int dx' U(x') x' \operatorname{sgn} x + O(U^2)] \exp(-\kappa |x|). \end{aligned}$$

Малым параметром задачи, напомним, является величина $\kappa L \ll 1$. Как видим, физический смысл этого условия состоит в том, что «радиус» связанного состояния κ^{-1} значительно превосходит размеры поля L . Постоянную C можно вычислить с помощью условия нормировки, однако покажем, как это сделать иначе, если известно значение величины κ . Замечаем, что среднее значение потенциальной энергии в рассматриваемом связанном стационарном состоянии равно

$$\langle U \rangle = \int dx U(x) |\Psi(x)|^2 = |C|^2 \left[\int dx U(x) + \right.$$

$$+ 2(m/\hbar^2) \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(U^3)].$$

С другой стороны, используя параметрическое варьирование [1,21] уровней энергии $U_0 \partial E / \partial U_0 = \langle U \rangle$, находим

$$\langle U \rangle = -(\hbar^2/m) \kappa U_0 \partial \kappa / \partial U_0 = \kappa \left[\int dx U(x) + \right. \\ \left. + 2(m/\hbar^2) \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(U^3) \right].$$

Из сравнения этих двух выражений для $\langle U \rangle$ получаем в требуемом приближении (с точностью до фазового множителя) искомый коэффициент $C = \sqrt{\kappa}$, а также средние значения потенциальной и кинетической энергии:

$$\langle U \rangle = 2E + \kappa (m/\hbar^2) \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + \\ + O(\kappa U^3); \quad \langle T \rangle = E - \langle U \rangle = \\ = -E - \kappa (m/\hbar^2) \iint dx dx' U(x) U(x') |x - x'| + O(\kappa U^3).$$

В случае поля притяжения главным является первый член, в скомпенсированном поле оба члена одного порядка, а в критической ситуации основной вклад вносит второй член (отброшенные слагаемые всегда малы).

Итак, волновая функция связанного стационарного состояния имеет вид

$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa} [1 + (m/\hbar^2) \int dx' U(x') |x - x'| + O(U^2)], \quad |x| < L;$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\kappa} [1 - (m/\hbar^2) \int dx' U(x') x' \operatorname{sgn} x + \\ + O(U^2)] \exp(-\kappa |x|), \quad |x| > L.$$

При переходе к δ -яме получаем результаты (7.14).

Использованный способ расчета заключается в разложении искомых величин (волновой функции и энергии связи) по степеням малого поля. Для потенциала притяжения простой вариант (первое приближение) соответствует $\Psi = \text{const}$ внутри области действия поля, или эквивалентный прием — использование теоремы о среднем для интеграла в правой части уравнения (8.1):

$$\Psi(x) = -(m/\hbar^2 \kappa) \Psi(x_1) \int dx' U(x') \exp(-\kappa |x - x'|) \cong \\ \cong -(m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x_1),$$

что отвечает аппроксимации (7.14); x_1 — некоторая средняя точка в области действия поля.

Энергию связи в приближении (8.2) можно получить также с помощью вариационного метода Кона — Ростокера [36]. Интегральное уравнение для связанных стационарных состояний

$$\Psi(r) = - \int dr' R^0(r, r'; E) U(r') \Psi(r') \quad (8.5)$$

эквивалентно вариационному принципу

$$\delta \left[\int dr U(r) |\Psi(r)|^2 + \int \int dr dr' R^0(r, r'; E) U(r) U(r') \Psi^*(r) \Psi(r') \right] = 0. \quad (8.6)$$

Причем варьируемый функционал обращается в ноль для решения интегрального уравнения. Таким образом, соотношение

$$\begin{aligned} \int dr U(r) |\Psi(r)|^2 &= \\ &= - \int \int dr dr' R^0(r, r'; E) U(r) U(r') \Psi^*(r) \Psi(r') \end{aligned}$$

при удачном выборе пробной функции $\Psi(r)$ позволяет находить приближенные значения энергии связи (или критические параметры поля). Например, в рассматриваемом одномерном случае, полагая $\Psi = \text{const}$ (фактически, конечно, только для области поля), из уравнения

$$\begin{aligned} \int dx U(x) |\Psi(x)|^2 &= -(m/\hbar^2 \kappa) \times \\ &\times \int \int dx dx' U(x) U(x') \Psi^*(x) \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|) \end{aligned}$$

получаем с точностью до вкладов второго порядка по степеням поля включительно результат для энергии связи

$$\kappa = -(m/\hbar^2) \int dx U(x) - (m^2/\hbar^4) \int \int dx dx' U(x) U(x') |x - x'|,$$

совпадающий с полученным на основе метода Фредгольма.

Характер стационарности функционала (8.6) можно установить для знакопостоянного поля, привлекая методы теории Гильберта — Шмидта. В случае $U(r) = -U_0 u(r) \leq 0$ в интегральном уравнении (8.5) обозначаем

$$G(r, r') = \sqrt{u(r) u(r')} R^0(r, r'; E); \quad \Phi(r) = \sqrt{u(r)} \Psi(r);$$

$\lambda = U_0$ и приходим к уравнению с симметричным (эрмитовым) ядром $G^*(r, r') = G(r', r)$ для новой неизвестной функции $\Phi(r)$:

$$\Phi(r) = \lambda \int dr' G(r, r') \Phi(r'), \quad (8.7)$$

символически $\hat{G}\Phi = \lambda^{-1}\Phi$. В таком случае справедлив вариационный принцип [28, 29]

$$\delta [(\Phi, \hat{G}\Phi)/(\Phi, \Phi)] = 0,$$

где $(\Phi, \chi) \equiv \int dr \Phi^*(r) \chi(r)$. Причем для решений уравнения (8.7) функционал равен $(\Phi, \hat{G}\Phi)/(\Phi, \Phi) = \lambda^{-1}$ и достигает максимума для наименьшего собственного значения $\lambda_{\min} \equiv \lambda_1$. Таким образом, получаем оценку сверху для наименьшего собственного значения интегрального уравнения

$$\lambda_1^{-1} \geq (\Phi, \hat{G}\Phi)/(\Phi, \Phi). \quad (8.8)$$

Равенство достигается для точного решения интегрального уравнения (8.7). Возвращаясь к исходным величинам, имеем для наименьшей глубины потенциала при фиксированной энергии системы (т. е. для основного уровня энергии в заданном поле притяжения):

$$U_0^{-1} \geq \iint dr dr' R^0(r, r'; E) u(r) u(r') \Psi^*(r) \times \\ \times \Psi(r') / \int dr u(r) |\Psi(r)|^2,$$

или

$$\int dr U(r) |\Psi(r)|^2 \leq - \iint dr dr' R^0(r, r'; E) U(r) U(r') \Psi^*(r) \times \\ \times \Psi(r'). \quad (8.9)$$

Таким образом, функционал Кона — Ростокера (8.6) достигает максимума для решения интегрального уравнения, соответствующего основному состоянию системы, в случае поля притяжения.

Простейшая пробная функция $\Psi(r) = \text{const}$ в области действия поля приводит к оценке

$$\int dr U(r) \leq \iint dr dr' R^0(r, r'; E) U(r) U(r').$$

Заметим, что во всех вариационных соотношениях пробные функции обозначены той же буквой, что и истинные.

Наряду с оценкой собственного значения интегрального уравнения λ_1 сверху (8.8) в теории Гильберта — Шмидта существуют и другие оценки. Например, так называемый метод следов [28, 31] приводит к оценкам снизу:

$$\text{Sp}(\hat{G}^N) = \sum_k \lambda_k^{-N} > \lambda_1^{-N}; \quad N = 2, 3, \dots$$

В частности,

$$\lambda_1 > [\text{Sp}(\hat{G}^2)]^{-1/2} = [\iint dr dr' |G(r, r')|^2]^{-1/2}. \quad (8.10)$$

В обычных обозначениях это неравенство выглядит так:

$$U_0 > [\iint dr dr' |R^0(r, r'; E)|^2 u(r) u(r')]^{-1/2},$$

или

$$\iint dr dr' |R^0(r, r'; E)|^2 U(r) U(r') > 1.$$

В одномерном случае оно дает оценку энергии связи сверху:

$$\kappa^2 < (m^2/\hbar^4) \iint dx dx' U(x) U(x') \exp(-2\kappa|x - x'|),$$

откуда также вытекает явное выражение для величины κ , совпадающее с (8.2). Объединяя обе оценки для одномерного примера, имеем:

$$(m/\hbar^2) \int \int dx dx' U(x) U(x') \exp(-\kappa |x - x'|) / \left| \int dx U(x) \right| < \kappa < \\ < (m/\hbar^2) \left[\int \int dx dx' U(x) U(x') \exp(-2\kappa |x - x'|) \right]^{1/2}.$$

В одномерном случае интегральное уравнение для стационарных состояний позволяет получить еще одно соотношение, касающееся критического условия зарождения (вытеснения) связанных состояний. А именно: если в уравнении

$$\hbar^2 \kappa \Psi(x) = -m \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|)$$

перейти к пределу $\kappa \rightarrow 0$, то приходим с учетом локальности поля к критическому условию

$$\int dx U(x) \Psi_{\kappa=0}(x) = 0. \quad (8.11)$$

Для основного состояния в поле притяжения $U \leq 0$ это условие не может быть выполнено, так как волновая функция такого состояния не имеет узлов, т. е. подтверждается невозможность критической ситуации в одномерной потенциальной яме — энергия связи должна иметь конечное значение. Для возбужденных же состояний условие (8.11) показывает расположение узлов волновой функции (в частности, в симметричном поле для всех нечетных состояний оно выполняется автоматически). В случае же знакопеременного поля критическое условие может быть удовлетворено и для основного состояния. Так, грубую оценку можно получить, полагая волновую функцию основного состояния постоянной внутри неоднородностей поля, что дает соотношение $\int dx U(x) \approx 0$ (более тонкие эффекты были рассмотрены выше).

Перейдем к общей проблеме существования связанных стационарных состояний частицы, движущейся в локальном поле притяжения в случае n -мерного пространства и некоторого закона дисперсии $H_0 = T(\mathbf{p})$. Если при $E \rightarrow -0$ предел $R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ существует, то соответствующее интегральное уравнение

$$\Psi(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) U(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')$$

позволяет найти критические параметры поля (с помощью определителя Фредгольма, по формуле следов и т. п.). При этом наименьшее собственное значение этого интегрального уравнения отвечает критической глубине потенциала, при которой появляется основное состояние связанное (в более слабом поле связанных состояний не будет), а остальные собственные значения — другим глубинам, при которых появляется очередной возбуж-

денный уровень энергии. Если же такой предел не существует, то, поскольку поле скалярно и $U \leq 0$, а Ψ не меняет знака, при $E = -0$ нет решений интегрального уравнения для основного состояния даже в как угодно слабом поле, т. е. имеется связанное состояние с конечной энергией связи. Рассматриваемая ФГ

$$R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = h^{-n} \int d\mathbf{p} \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar] / [T(\mathbf{p}) + |E|]$$

остаётся конечной или становится бесконечной при $|E| \rightarrow 0$, если импульсный интеграл соответственно сходится или расходится при малых значениях импульсов, т. е. все зависит от поведения интеграла $\int_{(0)} d\mathbf{p} / T(\mathbf{p}) \sim \int_{(0)} d\varepsilon \nu(\varepsilon) / \varepsilon$, где $\nu(\varepsilon)$ — энергетическая плотность состояний. Так, если при малых энергиях плотность состояний имеет степенную зависимость $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{\alpha-1}$, критерий существования связанных состояний имеет вид $\alpha \leq 1$ (8.12). При $\alpha > 1$ связанное состояние появляется только при критической величине поля. Например, для l -степенного закона дисперсии $T(\mathbf{p}) \sim |\mathbf{p}|^l$ в n -мерном пространстве $\alpha = n/l$, так что связанные состояния в слабом поле существуют при $n \leq l$. В частности, для квадратичного закона дисперсии приходим к известному [1, 103] условию $n \leq 2$: как угодно слабые одно- и двумерные поля притяжения способны удерживать частицу в связанном состоянии. Как видим, подтверждается уже отмечавшаяся в начале этого параграфа общая тенденция к ослаблению связующих свойств поля с ростом размерности пространства.

Заметим, что условие существования связанных состояний (8.12) совпадает с соответствующим признаком отсутствия бозе-конденсации (§ 14). Это можно объяснить следующим образом. Для $\alpha \leq 1$ плотность состояний достаточно велика при $\varepsilon \rightarrow 0$, что способствует «отщеплению» одного из уровней энергии и созданию связанного состояния, но мешает проявлению обменного взаимодействия бозе-частиц из-за рассредоточения их по большому числу состояний. В случае же $\alpha > 1$ плотность состояний мала и труднее «заманить» один из уровней в область дискретного спектра, но легче бозонам, накапливаясь в отдельном, достаточно изолированном состоянии, проявить свое стремление к конденсации. Оба явления отвечают «реакции» квазидискретного спектра энергии на влияние эффективных поля притяжения и обменного бозе-притяжения.

В заключение рассмотрим вопрос о нахождении критических значений полей с трехмерной локализацией. ФГ для свободного движения частицы с квадратичным изотропным законом дисперсии в трехмерном случае (7.12)

$$R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E < 0) = (m/2\pi\hbar^2) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$$

остается конечной при $E \rightarrow -0$, так что критическое поле вычисляем с помощью уравнения

$$\Psi(r) = -(m/2\pi\hbar^2) \int_{\Omega} dr' U(r') \Psi(r') |r - r'|^{-1}.$$

Для потенциала со скачком U_0 на границе области Ω произвольной формы («полости») $U(r) = -U_0$, $r \in \Omega$; $U(r) = 0$, $r \notin \Omega$ получаем уравнение

$$\Psi(r) = A \int_{\Omega} dr' \Psi(r') |r - r'|^{-1},$$

где введено обозначение $A \equiv mU_0/2\pi\hbar^2$.

В первом приближении, полагая $\Psi = \text{const}$ внутри полости, имеем

$$A^{-1} = \int_{\Omega} dr/r = \oint rdS/2r. \quad (8.13)$$

Второй интеграл берется по ограничивающей полость поверхности. Для оценки точности этого результата сравним известное [1, 2] значение критической глубины для сферической полости $U_0 = \pi^2\hbar^2/8mR^2$ с рассчитанным по формуле (8.13) $U_0 = \hbar^2/mR^2$, R — радиус. Относительная ошибка при этом оказывается равной —19%. Уточнение формулы (8.13) существенно снижает ошибку, доводя ее до —3% (см. [109]).

Вариационная оценка (8.9) приводит к формуле

$$A^{-1} = \frac{1}{v} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{dr dr'}{|r - r'|} = -\frac{1}{2v} \oint \oint dS dS' |r - r'|;$$

v — объем полости. Для сферы она дает критическую глубину $U_0 = 5\hbar^2/4mR^2$, что соответствует относительной ошибке +1,3%. В классе степенных пробных функций удастся уменьшить ошибку до +0,3% (см. [21]).

Наконец, метод следов (8.10) дает формулу

$$A^{-2} = \int_{\Omega} \int_{\Omega} dr dr' |r - r'|^{-2} = -\oint \oint dS dS' \ln |r - r'|,$$

с тем же результатом для сферы, что и первый способ (8.13).

Другие примеры расчета критических характеристик трехмерно локализованных полей можно найти в книге [21] и работе [109].

§ 9. Влияние одной среды на связанные состояния в другой

Быть или не быть...

У. Шекспир

Основная группа рассматриваемых в этом параграфе вопросов связана с представлениями о плоскостойких структурах и решается, как уже отмечалось, на основе одномерных моделей поля. Особый интерес вызывает случай двух сред, разделенных плоской границей. Внутри одной из них имеется локализованная (в одном измерении) область эффективного притяжения. Если описывать ситуацию на языке потенциала, то имеем задачу о влиянии скачка (прямоугольной ступеньки) на формирование связанного состояния в яме. Пусть яма расположена в среде с меньшим значением потенциальной энергии. Тогда нас интересуют критические значения параметров системы (интенсивность ямы, масса частицы, скачок потенциала на границе и расстояние от ямы до границы раздела сред), при которых связанное состояние вытесняется. В данном случае речь идет именно о вытеснении, так как в случае одного локального поля притяжения в одномерном движении частица всегда имеет хотя бы одно связанное состояние. При достаточно большом перепаде потенциала нас интересует в первую очередь критическое расстояние (в пределе бесконечного скачка получаем граничное условие непроницаемости, при котором волновая функция обращается в ноль на границе). В данной задаче существен нелокальный характер полного поля — кроме локальной области притяжения есть явно нелокальный потенциал ступенчатого вида.

Далее имеется возможность поместить локализованную область притяжения на стыке двух сред и изучить критическую ситуацию в зависимости от величины скачка поля на границе двух сред. Затем область притяжения может находиться в среде с большим значением потенциала, что приводит, вообще говоря, к появлению квазистационарного состояния, для которого также необходимо указать соответствующие критические параметры.

Одновременно решаются частные, чисто одномерные задачи: а) влияние граничных условий на образование локального связанного состояния; б) влияние перепада предельных значений поля на бесконечности на локализацию частицы в слабой яме. Основные черты движения передает модель δ -образной потенциальной ямы и резкого скачка потенциала, хотя более тонкая структура поля (детали профиля области притяжения

и сглаживание приграничного потенциала) также может быть учтена.

При переходе к областям притяжения, локализованным в нескольких измерениях, возникает возможность влиять на связанные состояния путем изменения формы границы сред. Так, в эффективно двумерных системах вытесняющая граница может иметь форму плоскости, двух параллельных плоскостей, кругового цилиндра и т. д. Решение подобных задач усложняется по сравнению с одномерными, поскольку непригодны, вообще говоря, δ -образные модели и необходимо применять более сложные функции Грина. Аналогия с одномерными проблемами состоит в том, что связанное состояние в локальном поле притяжения существует всегда, так что речь идет также о вытеснении его за счет дополнительных нелокальных полей (правда, энергия связи в двумерном случае экспоненциально мала, так что приходится иметь дело с весьма тонкими эффектами).

Наконец, в случае трехмерной локализации формы границ еще более разнообразны (одна или две плоскости, цилиндр, сфера и пр.).

Еще раз подчеркнем, что в случае квадратичного закона дисперсии одно- и двумерные локализации ставят перед нами вопрос о критических условиях «вытеснения», а трехмерные (и другие многомерные) — «возникновения» локальных связанных состояний. При этом мы имеем дело, образно говоря, с тремя категориями понятий: первая отвечает наличию связанного состояния (захват, удержание, существование, есть и т. д.); вторая — отсутствию (недержание, вытеснение, неспособность к захвату, нет и пр.); третья связана с переходом от одного качества к другому, отражает диалектику взаимоотношений реально-виртуальных состояний, пороговую, критическую ситуацию, пограничную между «есть» и «нет» (становление, формирование, наклеивание, возникновение, появление, чреватость и т. п.).

Условно можно сказать, что имеются среда-носитель и среда-вытеснитель. В случае плоскостных структур обе считаются полуграниченными (полупространства). Однако вытеснитель может быть прослойкой внутри носителя, т. е. картина отвечает локализованной области отталкивания. Этот вопрос уже затрагивался в предыдущем параграфе. Здесь мы вновь вернемся к нему с несколько иных позиций, в качестве частного случая, с которого начнем исследование влияния одной среды на связанные состояния в другой.

Заметим, что представляет интерес и обратная задача о влиянии локальной области притяжения на свойства движения

частицы в другой среде, когда среда-носитель служит отражателем (в частности, появление квазиуровней, соответствующих резонансному отражению частиц на границе двух сред). Здесь мы встречаемся с новой ситуацией, поскольку соответствующая одномерная ветвь относится к состояниям полуфинитного движения (полного отражения) с непрерывным невырожденным спектром энергии, а до сих пор мы рассматривали только связанные состояния.

Во всех случаях самым удобным инструментом исследования по-прежнему остается метод функций Грина и интегральных уравнений (преимущественно в координатном представлении).

Влияние области отталкивания на формирование связанного состояния. Исследование этого вопроса начнем с заведомо упрощенной модели потенциального поля, создаваемого δ -образной ямой и добавочным противодействующим δ -барьером. На этом примере иллюстрируются все основные качественные закономерности возникающих эффектов.

Итак, пусть движение частицы происходит в поле $U(x) = -u_1\delta(x) + u_2\delta(x - L)$. Расчетную часть задачи можно выполнить либо методом явного сшивания волновых функций свободного движения в местах сосредоточения поля (непосредственное решение дифференциального уравнения — типичный «функциональный» подход), либо пользуясь готовым выражением для оператора перехода через δ -образную особенность поля, дважды итерируя (пример «нефункционального» решения, если ограничиться получением энергии связи), либо воспользоваться наиболее эффективным для подобного типа задач интегральным методом — методом интегрального уравнения для связанных стационарных состояний.

Опуская детали выкладок, выпишем точное уравнение для энергии связи $|E|$:

$$x^2 - (x_1 - x_2)x - x_1x_2[1 - \exp(-2xL)] = 0. \quad (9.1)$$

Величины, снабженные соответствующими индексами, означают: $x_1 = mu_1/\hbar^2$ — энергию связи в отдельной δ -яме, $x_2 = mu_2/\hbar^2$ — аналогичный характерный параметр δ -барьера, а $\hbar x = \sqrt{2m|E|}$. Иначе это уравнение можно переписать в виде

$$x = x_1 \left(1 - \frac{x_2}{x + x_2} e^{-2xL} \right).$$

Если барьер удален от ямы на значительное расстояние $L \gg x_1^{-1}$ (физический смысл этого условия заключается в том, что барьер находится за пределами радиуса действия состояния в изолиро-

ванной яме), то его влияние на энергию связи частицы экспоненциально мало:

$$|E| = |E_0| [1 - \exp(-2\kappa_1 L) 2u_2/(u_1 + u_2)].$$

В частности, при $u_2 \ll u_1$ это соответствует первой поправке обычной стационарной теории возмущений: $\Delta E = u_2 |\psi_0(L)|^2 = u_2 \kappa_1 \exp(-2\kappa_1 L)$. Если сместить область отталкивания на столь близкое расстояние, что $L \ll \kappa_1^{-1}$, то барьеру малой интенсивности $u_2 \ll u_1$ не удастся сколько-нибудь значительно исказить связанное состояние в яме: $|E| = |E_0| (1 - 2u_2/u_1)$ (также в соответствии с теорией возмущений). Ощутимое же влияние область отталкивания может оказать при этом тогда, когда интенсивность одного порядка, в частности при $u_2 = u_1$ получаем $|E| = |E_0| (2\kappa_1 L)^2$. На этот раз энергия связи оказывается очень малой, и достаточно едва заметного превышения интенсивности барьера над интенсивностью ямы, как уровень энергии связанного состояния оказывается оттесненным к границе сплошного спектра: в общем случае критические параметры удовлетворяют уравнению

$$u_2 = u_1 / (1 - 2\kappa_1 L), \quad (9.2)$$

вытекающему из точной формулы (9.1) при $\kappa \rightarrow 0$.

Напрашиваются следующие выводы.

1. Влияние поля отталкивания зависит от его расположения. Если область отталкивания находится за пределами радиуса локализации частицы в яме, то она экспоненциально слабо влияет на энергию связи. Если же реализуется противоположный случай тесного расположения неоднородностей поля, то определяющей является интенсивность потенциала.

2. При скомпенсированном поле (интенсивности ямы и барьера равны) связанное состояние еще образуется в случае тесного расположения неоднородностей поля, хотя энергия связи мала.

3. Наконец, при несколько большей интенсивности поля отталкивания (в соседстве с ямой) связанное состояние исчезает. Соответствующее критическое условие для произвольного расположения имеет вид (9.2).

4. Особый случай скомпенсированного поля ($u_1 = u_2$) приводит к уравнению для энергии связи при всех L , которое выпишем отдельно: $|E| = |E_0| [1 - \exp(-2\kappa L)]$.

5. Если яму и барьер совместить (предельный переход при $L \rightarrow 0$), в уравнении (9.1) остается решение $\kappa = \kappa_1 - \kappa_2$, как и должно быть для отдельной ямы интенсивностью $u_1 - u_2 > 0$. Другой предел при $u_2 \rightarrow \infty$ приводит к картине движения с непроницаемой границей.

Наметим еще несколько задач, связанных с данной. Во-первых, замена $\kappa_2 \rightarrow -\kappa_2$ дает картину движения частицы в поле, состоящем из двух предельно короткодействующих ям,

Здесь интересен эффект расщепления уровней энергии при достаточном удалении одинаковых ям и явление вытеснения одного из уровней при сближении ям. Во-вторых, увеличение числа областей притяжения-отталкивания сопровождается, вообще говоря, новым явлением образования зонного спектра энергии. В-третьих, переход к положительным значениям энергии и исследование особенностей рассеяния. Дело в том, что в одномерном случае рассеяние на связанном состоянии не имеет столь ярко выраженного резонансного характера, как в трехмерном, когда энергия связи может быть как угодно малой. Однако при наличии поля отталкивания, как видим, резонирующее связанное состояние и в одномерном движении может иметь уровень энергии как угодно «мелкого залегания». Это должно приводить к усилению резонансных свойств рассеяния частиц в плоскостных структурах. Возникает парадоксальная картина: чтобы усилить действие области притяжения на рассеяние, нужно ослабить ее влияние, добавив поле отталкивания. В-четвертых, переход $x_1 \rightarrow -x_1$ и $i\hbar \rightarrow k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $E > 0$ соответствует картине распада квазистационарного состояния в поле, образованном двумя барьерами (две тонкие пластинки разделены свободным промежутком). Кстати, квазиуровни образуются и в комбинации δ -образных полей яма-барьер и даже яма-яма. Добавим еще вопросы о величине координатно-импульсных неопределенностей, являющихся своеобразным индикатором связи частицы полем притяжения, о варьировании энергии связи по параметрам задачи, о роли закона дисперсии. Решение некоторых из них будет рассмотрено в соответствующих разделах книги.

Разобранный модельный пример в первом приближении описывает общий случай локализованных полей (ямы и барьера) произвольного профиля. Действительно, пусть их средние положения находятся на расстоянии L порядка или больше размеров каждой неоднородности a . Тогда интегральное уравнение (8.1) записывается в виде

$$\begin{aligned} \hbar^2 x \Psi(x) = & -m \int_1 dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|) - \\ & -m \int_2 dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|), \end{aligned}$$

где индексом 1 сопровождаются величины, относящиеся к яме, а 2 — к барьеру. Учитывая, что для основного слабосвязанного состояния волновая функция незначительно изменяется в пределах как ямы, так и барьера, можно вынести в интегралах ее

значения в средних точках (более точно — по теореме о средних для интегралов):

$$\begin{aligned} \hbar^2 \kappa \Psi(x) = & -m\Psi(x_1) \int_1 dx' U(x') \exp(-\kappa |x - x'|) - \\ & -m\Psi(x_2) \int_2 dx' U(x') \exp(-\kappa |x - x'|). \end{aligned}$$

Полагая $x = x_1$, а затем $x = x_2$, получаем систему двух линейных уравнений для значений волновой функции в области ямы и барьера:

$$\begin{aligned} \Psi(x_1) \left[\hbar^2 \kappa + m \int_1 dx' U(x') \exp(-\kappa |x_1 - x'|) \right] + \\ + m\Psi(x_2) \int_2 dx' U(x') \exp(-\kappa |x_1 - x'|) = 0; \\ m\Psi(x_1) \int_1 dx' U(x') \exp(-\kappa |x_2 - x'|) + \\ + \Psi(x_2) \left[\hbar^2 \kappa + m \int_2 dx' U(x') \exp(-\kappa |x_2 - x'|) \right] = 0. \end{aligned}$$

Учитывая, что ожидаемое связанное состояние обладает малой энергией связи, так что $\kappa a \ll 1$, записываем условие существования нетривиального решения системы уравнений в виде

$$\begin{vmatrix} \kappa - \kappa_1 & \kappa_2 \exp(-\kappa L) \\ -\kappa_1 \exp(-\kappa L) & \kappa + \kappa_2 \end{vmatrix} = 0,$$

где введены обозначения

$$\kappa_1 = -(m/\hbar^2) \int_1 dx U(x); \quad \kappa_2 = (m/\hbar^2) \int_2 dx U(x).$$

Таким образом, дисперсионное уравнение

$$\kappa^2 - (\kappa_1 - \kappa_2) \kappa - \kappa_1 \kappa_2 [1 - \exp(-2\kappa L)] = 0$$

совпадает с полученным для предельно короткодействующих моделей (9.1) с соответствующими интенсивностями $u_{1,2} = \left| \int_{1,2} dx U(x) \right|$.

Влияние граничного условия непроницаемости на локальное связанное состояние. Вновь начнем с модели предельно короткодействующего поля притяжения для одномерного полуограниченного движения частицы, что соответствует физической картине двух сред с плоской границей раздела и очень большим перепадом среднего поля. При этом в среде с меньшим значением потенциала находится слой эффективного притяжения. Таким образом, физические условия движения моделируются потенциальным полем $U(x) = -u\delta(x - L)$, $x > 0$; $U(x) = \infty$, $x < 0$. Функция Грина $R(x, x'; E)$ для полупространства $x > 0$ может

быть построена на основе ФГ неограниченного движения $R^0(x - x'; E)$ способом зеркального отражения: $R(x, x') = R^0(x - x') - R^0(x + x')$. Используя явный вид функции R^0 (7.11), имеем

$$R(x, x'; E < 0) = (m/\hbar^2 \kappa) \{ \exp(-\kappa |x - x'|) - \exp[-\kappa(x + x')] \}, \quad (9.3)$$

где $\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}$. Соответствующее интегральное уравнение

$$\Psi(x) = -(m/\hbar^2 \kappa) \int_0^\infty dx' U(x') \Psi(x') \{ \exp(-\kappa |x - x'|) - \exp[-\kappa(x + x')] \} \quad (9.4)$$

в рассматриваемом δ -поле дает готовое выражение для волновой функции возможного связанного состояния:

$$\Psi(x) = (\kappa_0/\kappa) \Psi(L) \{ \exp(-\kappa |x - L|) - \exp[-\kappa(x + L)] \}; \quad \kappa_0 = mu/\hbar^2. \quad (9.5)$$

При $x = L$ из этой формулы вытекает уравнение для энергии связи

$$\kappa = \kappa_0 [1 - \exp(-2\kappa L)]. \quad (9.6)$$

Если область притяжения удалена от границы (отражателя) на расстояние, превышающее зону чувствительности связанного состояния в изолированной яме, т. е. $L \gg \kappa_0^{-1}$, влияние отражателя незначительно и сводится к экспоненциально малому сдвигу единственного уровня энергии связанного состояния в яме: $\kappa = \kappa_0 [1 - \exp(-2\kappa_0 L)]$. По мере приближения ямы к границе энергия связи уменьшается, пока при некотором критическом расстоянии $L_{кр}$ связанное состояние не прекратит своего существования. Переходя в дисперсионном уравнении (9.6) к пределу при $\kappa \rightarrow 0$, получаем $L_{кр} = \kappa_0^{-1}/2$ (9.7). Физический смысл этого критического условия ясен, если учесть, что уединенная δ -яма приводит к связанному состоянию, волновая функция которого убывает по закону $\Psi(x) \sim \exp(-\kappa_0 |x - L|)$, так что размер области движения оказывается порядка κ_0^{-1} . Эта величина характеризует восприимчивость связанного состояния частицы по отношению к внешним влияниям. В данном случае граница — непроницаемая стенка — настолько «проникла» внутрь этой области, что вызвала существенную деформацию связанного состояния, добившись его вытеснения. Чтобы выяснить, как изменяется энергия связи по мере удаления границы от критического расположения, в дисперсионном уравнении (9.6) полагаем $\kappa L \ll 1$. Это позволяет разложить экспоненту в ряд и приводит с учетом

найденного выражения (9.7) к соотношению $\kappa = 2\kappa_0^2 (L - L_{кр})$, так что энергия связи $|E| = |E_0| [(L - L_{кр})/L_{кр}]^2$ в «послекритический период» увеличивается достаточно медленно. Как вытекает из точной формулы (9.6), уровень энергии достигает половины глубины залегания в изолированной яме лишь при удалении ее от границы, почти вдвое превышающем критическое.

В случае локальной области притяжения произвольного профиля анализ интегрального уравнения (9.4) приводит к выводу, что полученные результаты в первом приближении остаются в силе, если считать, что интенсивность δ -ямы заменяется величиной $|\int dx U(x)|$ для фактического поля. При этом малым параметром теории служит величина $\kappa a \ll 1$, где a — размер области притяжения.

Если требуется определить энергию связи с большей точностью, то можно использовать те же методы приближенного решения интегрального уравнения в слабом поле, что применялись в предыдущем параграфе (ряд Фредгольма, метод последовательных приближений, вариационные оценки, метод следов).

Заметим, что рассматриваемая задача эквивалентна нахождению первого возбужденного состояния в системе двух зеркально-симметричных ям, расстояние между которыми равно $2L$.

Выясним смысл величин, появляющихся при параметрическом варьировании энергии связи. В данной задаче имеются четыре параметра: u , m , L и $\hbar$, поскольку поля притяжения в первом приближении характеризуются только интенсивностью $u = |\int dx U(x)|$. В соответствии с правилом параметрического варьирования уровней энергии $\partial E / \partial \lambda = \langle \partial H / \partial \lambda \rangle$ проследим, к чему приводит изменение интенсивности поля. Из общего дисперсионного уравнения (9.6) вытекает, что $u d\kappa / du = \kappa / [1 - 2L(\kappa_0 - \kappa)]$, а с другой стороны, $u \langle \partial \hat{H} / \partial u \rangle = \langle U \rangle$. Таким образом, варьирование энергии по интенсивности локализованного поля позволяет найти среднее значение потенциальной энергии:

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= u \partial E / \partial u = -(\hbar^2 / m) \kappa u d\kappa / du = \\ &= -2 |E| / [1 - 2\kappa_0 L \exp(-2\kappa L)]. \end{aligned}$$

При $L \rightarrow \infty$ получаем $\langle U \rangle = -2 |E_0|$ в соответствии с теоремой вириала для изолированного δ -образного поля притяжения. В критической ситуации ($L \rightarrow L_{кр} = \kappa_0^{-1}/2$) имеем $\langle U \rangle = -4 |E_0| \kappa / \kappa_0$. Смысл этого результата нетрудно понять, связав $\langle U \rangle$ с плотностью вероятности координат: $\langle U \rangle = -u |\Psi(L)|^2$. Отсюда, кстати, без специальных расчетов опреде-

ляем нормировочный коэффициент волновой функции (9.5). Так, $|\Psi(L)|^2 = \kappa_0$ при $L \rightarrow \infty$ и $|\Psi(L)|^2 = 2\kappa$ при $L \rightarrow L_{кр}$, т. е. степень локализации частицы вблизи ямы в критической ситуации существенно убывает. Это проявляется и в значительном увеличении неопределенности координат ($\Delta x \sim \kappa^{-1}$). Далее, переходя к варьированию по массе, вычисляем среднее значение кинетической энергии: $m \partial E / \partial m = -\langle T \rangle$. Отсюда (или непосредственно из соотношения

$$\langle T \rangle = E - \langle U \rangle \quad \langle T \rangle = E + 2|E|/[1 - 2\kappa_0 L \exp(-2\kappa L)].$$

Таким образом, $\langle T \rangle = |E_0|$ при $L \rightarrow \infty$, тогда как в критических условиях кинетическая энергия, как и потенциальная, $\langle T \rangle \approx -\langle U \rangle = 4|E_0|\kappa/\kappa_0$ в среднем значительно уменьшаются по абсолютной величине. Наконец, варьирование энергии по параметру L позволяет определить силовые характеристики:

$$\partial E / \partial L = \langle \partial U / \partial L \rangle = \kappa \langle \delta'(x - L) \rangle = \langle F(L) \rangle.$$

Вычисляя производную $\partial \kappa / \partial L$, приходим к следующему выражению для средней силы, действующей в окрестности поля притяжения:

$$\langle F(L) \rangle = -4|E|\kappa_0 \exp(-2\kappa L)/[1 - 2\kappa_0 L \exp(-2\kappa L)].$$

Отрицательный знак этой величины соответствует тому, что вблизи границы действует сила отталкивания $F(0)$ (по теореме Эренфеста полная средняя сила равна нулю в рассматриваемом состоянии, так что $\langle F(0) \rangle = -\langle F(L) \rangle$). Величину $\langle F(0) \rangle$ можно было бы и независимо найти, например, путем сдвига начала координат в точку $x = L$ с последующим варьированием по L . Как и должно быть для уединенной области притяжения, при $L \rightarrow \infty$ средняя сила стремится к нулю (уравновешивающая ее сила у границы быстро ослабевает). В критической ситуации сила также убывает из-за нарастающей делокализации частицы:

$$\langle F(L) \rangle = -8|E_0|\kappa \text{ при } L \rightarrow L_{кр}.$$

Варьирование по постоянной Планка не дает новых соотношений.

Подчеркнем, что возможность критической ситуации, т. е. эффект вытеснения связанного состояния в рассматриваемых условиях, находится в полном соответствии с полученным в предыдущем параграфе признаком существования связанных состояний: функция Грина R (9.3) остается конечной при $E \rightarrow -0$, в отличие от R^0 . Критерий же существования связанных состояний в слабых n -мерных полях (8.12) при некотором законе дисперсии $T(p)$ должен быть пересмотрен. Учитывая, что ФГ

для полупространства $x_1 > 0$ может быть получена на основе свободной ФГ R^0 :

$$R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = R^0(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, \dots, x_n - x'_n) - \\ - R^0(x_1 + x'_1, x_2 - x'_2, \dots, x_n - x'_n),$$

можно показать, что аналогично движению во всем пространстве, существование предела $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E \rightarrow -0)$ зависит от сходимости некоторого интеграла по импульсам

$$\int_{(0)} d\mathbf{p} p^2 / T(\mathbf{p}); \quad p \equiv |\mathbf{p}|.$$

Для изотропных законов дисперсии $T(p)$ этот интеграл пропорционален $\int_{(0)} d\varepsilon \nu(\varepsilon) p^2(\varepsilon) / \varepsilon$. В случае l -степенного закона дисперсии $T \sim p^l$ плотность состояний $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{n/l-1}$, так что устанавливаем критерий существования связанного состояния в слабом поле притяжения для полупространства n измерений следующего вида: $n \leq l - 2$ (9.8). В частности, для квадратичного закона дисперсии вытекающее отсюда неравенство $n \leq 0$ означает, что уже в одномерном слабом поле связанное состояние может отсутствовать, в чем мы уже имели возможность убедиться при анализе решения соответствующей задачи. С ростом же размерности оно вытесняется еще легче. Напротив, четверной закон дисперсии $T \sim p^4$ привел бы к условию $n \leq 2$, другими словами, позволил бы сохранить связанное состояние и в одномерном, и в двумерном случаях, несмотря на вытесняющее действие границы движения.

В связи с этим добавим, что картина невозмущенной плотности состояний (см. конец предыдущего параграфа) здесь неприемлема: плотность состояний в полупространстве, конечно, не зависит от расположения локальной области притяжения, тогда как условия локализации различны вдали от границы движения и в непосредственной близости от нее.

Область притяжения на границе двух сред. Рассмотрим еще один пример возникновения критической ситуации в одномерном нелокальном поле с минимумом (ямой) и перепадом предельных значений при стремлении координаты к бесконечности: $\Delta U = U(-\infty) - U(\infty) > 0$. Здесь интересно выяснить, какой критический скачок асимптотик поля необходим для вытеснения связанного состояния частицы в слабой потенциальной яме. Качественно можно объяснить явление «неудержания» связанного состояния в таком нелокальном поле следующим образом. Добавляя к локальной яме вначале небольшой барьер («насыпь», «бру-

ствер»), а затем все увеличивая его вплоть до образования одного из «высоких берегов», получаем настолько сильное эффективное действие поля отталкивания за счет проникновения частицы в классически недоступную подбарьерную область, что соответствующее возмущение пересиливает тенденцию ямы удерживать связанное состояние. Физическая причина вытеснения связанного состояния заключается в наличии нелокального поля отталкивания, интенсивность которого значительно превышает соответствующую площадь ямы (см. критическое условие для локального поля отталкивания) даже при незначительном перепаде за счет бесконечной протяженности в одном из направлений. При этом картина аналогична случаю локального поля отталкивания, если учесть, что эффективным является не весь бесконечный «язык» («высокий берег»), а лишь некоторая его часть, простирающаяся на расстояние порядка радиуса связанного состояния.

Оценим критический скачок предельных значений потенциала с помощью указанных выше представлений об эффективном отталкивании. Чтобы вытеснить связанное состояние, нужно иметь отталкиватель, компенсирующий яму, т. е. $\int dx U_s(x) = |\int dx U^{(0)}(x)|$. Фактически значения эффективного потенциала, совпадающие с величиной $\Delta U_{кр}$, распространяются только на расстояние «чувствительности» ямы порядка x_0^{-1} , где $x_0 = (m/\hbar^2) |\int dx U^{(0)}(x)|$. Если положить это расстояние равным критическому для отражателя в виде непроницаемой границы ($L_{кр} = x_0^{-1}/2$), то получаем соотношение

$$\int dx U_s(x) = \Delta U_{кр}/2x_0 = |\int dx U^{(0)}(x)|,$$

которое дает значение перепада $\Delta U_{кр} = 4|E_0|$, совпадающее с результатом строгого расчета (в первом приближении). Как видим, для вытеснения связанного состояния частицы в локальной области притяжения достаточно перепада предельных значений поля, лишь в четыре раза превышающего энергию связи в локальной яме, т. е. незначительного в сравнении с характерной глубиной ямы.

Теория возмущений также приводит, как нетрудно убедиться, к оценке по порядку величины, хотя и не может дать правильного численного множителя, поскольку сдвиг уровня энергии не мал — он равен энергии связи.

Обратимся теперь к решению поставленной задачи с помощью интегрального уравнения, рассматривая в качестве возмущения все нелокальное поле, состоящее из ямы $U(x) = U^{(0)}(x)$, $|x| \leq a$ и ступенчатого барьера бесконечной протяженности $U(x) =$

$= U(-\infty) = \Delta U$, $x < -a$ (энергия отсчитывается от меньшего предельного значения поля: $U(\infty) = 0$). Соответствующее интегральное уравнение

$$\hbar^2 \kappa \Psi(x) = -m \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa |x - x'|); \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}$$

(в критических условиях $E \rightarrow -0$ приводит к соотношению

$$\int dx U(x) \Psi(x) = 0,$$

в данном случае $\Psi(x)$ не имеет узлов, но потенциал имеет разный знак). Внутри ямы волновую функцию можно считать постоянной $\Psi = \Psi(0)$, а внутри барьера она экспоненциально убывает:

$$\Psi(x) = \Psi(0) \exp(q_0 x); \quad \hbar q_0 = \sqrt{2m\Delta U_{\text{кр}}}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \int dx U(x) \Psi(x) &= \Psi(0) \left[\int_{(0)} dx U(x) + \Delta U_{\text{кр}} \int_{-\infty}^{(0)} dx \exp(q_0 x) \right] = \\ &= \Psi(0) \left[\int dx U^{(0)}(x) + \Delta U_{\text{кр}}/q_0 \right] = 0. \end{aligned}$$

Отсюда критическое значение перепада поля на границе двух сред равно

$$\Delta U_{\text{кр}} = 4|E_0|. \quad (9.9)$$

Наконец, в качестве возмущения выбираем только локальное поле притяжения на границе двух сред на фоне невозмущенного ступенчатого потенциала. Интегральное уравнение будет иметь вид

$$\Psi(x) = - \int dx' R(x, x'; E < 0) U^{(0)}(x') \Psi(x'),$$

где $R(x, x'; E)$ — функция Грина для движения частицы в ступенчатом поле. Как обычно, в первом приближении полагаем $\Psi = \text{const} = \Psi(0)$ в области ямы и, переходя к пределу при $E \rightarrow -0$, получаем уравнение для критических параметров $1 = - \int dx' R(0, x'; 0) U^{(0)}(x')$. Подставляя соответствующую ФГ (прил. 1)

$$R(0, x'; 0) = (2m/\hbar^2 q_0) [\theta(x') + \theta(-x') \exp(q_0 x')]$$

и учитывая, что $q_0 a \sim \kappa_0 a \ll 1$, приходим к соотношению

$$1 = R(0, 0; 0) \left| \int dx U^{(0)}(x) \right|,$$

или $q_0 = 2\kappa_0$, из которого вытекает искомое значение критического скачка потенциала (9.9).

Рассмотренные примеры нелокальных полей (граничное условие непроницаемости и перепад значений потенциала) можно считать предельными случаями для общей задачи о влиянии ступенчатого характера поля на связанное состояние в локальной яме. В первом случае скачок потенциала считается бесконечно большим, тогда как во втором — расстояние до границы устремляется к нулю.

Еще раз подчеркнем, что изучаемые свойства эффективно одномерного движения частиц относятся, например, к следующей трехмерной физической картине для плоскостойких структур. Имеются две различные однородные среды с плоской границей раздела. В среде с меньшим значением потенциала есть область притяжения (слой). Если перепад потенциала в средах очень велик, то существует некоторое критическое расстояние между этой областью и границей, при котором связанное состояние отсутствует. Если же область притяжения находится в пограничной зоне, то требуется незначительная величина скачка, чтобы вытеснить связанное состояние.

Общий случай двух однородных сред с плоской границей раздела. Вначале заготовим функцию Грина для одномерной ветви движения частиц в перпендикулярном к границе направлении, используя метод частных решений ($\chi\varphi$ -решений). В рассматриваемом потенциальном поле $U(x) = \Delta U$, $x < 0$; $U(x) = 0$, $x > 0$ они имеют следующий вид;

$$\chi(x > 0) = \exp(-\kappa x); \quad \chi(x < 0) = \operatorname{ch} qx - (\kappa/q) \operatorname{sh} qx;$$

$$\varphi(x > 0) = \operatorname{ch} \kappa x + (q/\kappa) \operatorname{sh} \kappa x; \quad \varphi(x < 0) = \exp(qx),$$

где $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}$ и $\hbar q = \sqrt{2m(\Delta U + |E|)}$. Вронскиан равен

$$W(\chi, \varphi) = \chi\varphi' - \varphi\chi' = q + \kappa.$$

Следовательно,

$$R(x, x'; E < 0) = [2m/\hbar^2(q + \kappa)] [\theta(x - x')\chi(x)\varphi(x') + \\ + \theta(x' - x)\varphi(x)\chi(x')].$$

В частности,

$$R(0, x'; 0) = (2m/\hbar^2 q_0) [\theta(x') + \theta(-x') \exp(q_0 x')]. \quad (9.10)$$

При описании локальных связанных состояний прибегнем к δ -аппроксимации поля притяжения: $U^{(0)}(x) = -u\delta(x - x_0)$. Тогда интегральное уравнение для связанных состояний

$$\Psi(x) = - \int dx' R(x, x'; E < 0) U^{(0)}(x') \Psi(x')$$

сразу же приводит к явному выражению для волновой функции $\Psi(x) = uR(x, x_0; E)\Psi(x_0)$, из которого при $x = x_0$ получаем дисперсионное уравнение

$$q + x = 2x_0 \chi(x_0) \varphi(x_0). \quad (9.11)$$

Далее все зависит от того, в какой из сред находится область притяжения. Если в среде с меньшим значением поля, т. е. $x_0 \equiv L > 0$, то

$$q + x = 2x_0 \exp(-xL) [\operatorname{ch} xL + (q/x) \operatorname{sh} xL],$$

или

$$x = x_0 \{1 - [(q - x)/(q + x)] \exp(-2xL)\}.$$

Отсюда при $x \rightarrow 0$ вытекает критическое условие

$$L_{\text{кр}} = x_0^{-1}/2 - q_0^{-1}. \quad (9.12)$$

В частности, оно охватывает оба рассмотренных ранее примера (при $\Delta U \rightarrow \infty$ и $L \rightarrow 0$). В общем случае при достаточно большом скачке на границе ($q_0 > 2x_0$) критическое условие (9.12) означает, что необходимо приблизить область притяжения к границе по сравнению с бесконечным скачком. При $q_0 = 2x_0$, чтобы устранить связанное состояние, надлежит поместить область притяжения на границе, а при $q_0 < 2x_0$ его нельзя вытеснить таким способом (смысл отрицательного знака у $L_{\text{кр}}$ в формуле (9.12) станет ясен ниже).

Если же область притяжения будет расположена в среде с большим значением поля, т. е. $x_0 \equiv -L < 0$, то дисперсионное уравнение

$$q = x_0 \{1 + [(q - x)/(q + x)] \exp(-2qL)\}$$

приводит к критическому условию $q_0 = x_0 [1 + \exp(-2q_0 L_{\text{кр}})]$. Если яма находится вблизи границы

$$(L_{\text{кр}} \ll x_0^{-1}), \text{ то } L_{\text{кр}} = q_0^{-1} - x_0^{-1}/2,$$

т. е. разъясняется упомянутый выше случай $q_0 < 2x_0$. Если же она удалена от границы ($L_{\text{кр}} \gg x_0^{-1}$), то $q_0 \approx x_0$, т. е. для ликвидации связи достаточно скачка $\Delta U \approx |E_0|$.

Физический смысл результата ясен. В данном случае вторая среда ($x > 0$) действует не как отражатель, а наоборот, стремится расширить область движения, однако тем самым она может, «переусердствовав», превратить финитное движение в инфинитное. А именно: для удаленной от границы ямы финитное движение сохраняется и энергия связи практически не из-

меняется, если перепад не превышает энергии связи изолированной ямы. В противном случае энергетический уровень попадает в область непрерывного спектра, образуется квазиуровень, возникают резонансные явления при рассеянии частиц на границе двух сред. При этом нужно уже говорить не столько о влиянии второй среды на связанное состояние, сколько об обратном воздействии связанного состояния на движение во второй среде (см. следующий параграф). Для области притяжения вблизи границы наличие второй среды еще «опаснее». С увеличением перепада энергия связи также возрастает, однако при $\Delta U = 4|E_0|$ граница непрерывного спектра энергии понижается быстрее и «догоняет» уровень энергии связанного состояния, т. е. он попадает в область инфинитного движения, а связанное состояние разрушается.

В заключение отметим, что с помощью интегральных уравнений (на основе резольвенты гамильтониана и функций Грина) весьма удобно анализировать роль различных факторов в проблеме существования связанных состояний. Из них нами были рассмотрены: размерность пространства, вид закона дисперсии, наличие областей отталкивания, граничных условий и других нелокальных полей, соответствующих влиянию одной среды на связанные состояния в другой. При этом для слабых полей хорошее приближение обеспечивают ряды Фредгольма, а в случае умеренных полей для трехмерных и нелокальных одномерных образований — вариационные методы.

Нужно подчеркнуть, что в книгах по квантовой механике метод интегральных уравнений при изучении связанных состояний не излагается (он фигурирует лишь в теории рассеяния [2, 35, 40]), хотя является, видимо, наиболее подходящим, особенно при исследовании чисто квантового явления зарождения локальных состояний. Из литературы математического плана наиболее обстоятельное и полное изложение традиционных вопросов (теорий Фредгольма и Гильберта — Шмидта), специальных случаев (сингулярные и нелинейные уравнения, приложения в математической физике) и современных обобщений содержится в справочном руководстве [29]. Простое и краткое описание основных результатов имеется в пособии Трикоми [28]. Специальные приближенные методы излагаются в справочном издании [31]. Современные направления в связи с функциональным анализом разрабатываются в книге Рисса и Секефальви — Надя [32]. Много внимания уделено интегральным уравнениям в труде Морса и Фешбаха [3]. В книге Мэтьюза и Уокера [30] описаны диаграммы фейнмановского типа для рядов Фредгольма (и Неймана), что служит еще одной

иллюстрацией проникновения квантовополевых методов в различные области теоретической физики и математики.

Из работ физического направления отметим основополагающую Липпмана и Швингера, где, в частности, рассматривается получившее широкую известность интегральное уравнение в теории рассеяния (см. упомянутые книги по квантовой теории рассеяния).

В монографии Шкловского и Эфроса [27] излагаются основные положения теории И. М. Лифшица о локальных связанных состояниях (модель «со структурным беспорядком») в связи с обсуждением проводимости полупроводников с большим содержанием примесей. Из литературы по теории неупорядоченных систем см. работы Лифшица [103], Лифшица, Гредескула и Пастура [107], а также книгу [55]. В работе Косевича и Танатарова [108] исследуется энергетический спектр электронов в магнитном поле в случае линейного возмущения с помощью метода регулярных возмущений Лифшица [104—106]. Вопрос о локальных связанных состояниях рассматривался в работе Чеботарева [116].

Широкое применение метод теории локальных возмущений Лифшица получил в квантовой химии. См., например, обзор Овчинникова и др. [114], в котором раздел «Локальные состояния в полимерах с сопряженными связями» посвящен проблеме влияния дефектов на электронный спектр периодических систем. В работах Квенцеля (например, [112]) исследуются локальные электронные состояния в молекулярных цепочках.

В монографии Стоунхэма интересна глава «Методы функций Грина» (из первого тома [42]), в которой приведены конкретные расчеты для дефектов зонной структуры диэлектриков и полупроводников. Во втором томе рассматриваются различные виды дефектов (всякого рода «центры», вакансии и т. п.). В работе Касаманяна [113] метод ФГ используется для исследования энергетического спектра электронов в полупроводниках при различной степени легирования.

О локализации и рассеянии в магнитном поле см. в книге [56], а о так называемых квазилокальных состояниях — в работе Ермолаева [115].

§ 10. Резонансные явления в плоскостойких структурах

Если темп... колебаний и приходящих толчков один и тот же, ... произойдет накопление действия отдельных толчков, и в результате получается сильное звучание.

Л. И. Мандельштам

При прохождении частиц сквозь среды с плоскостойким строением возникают интересные резонансные квантовые эффекты. К их числу, во-первых, относится резкое увеличение прозрачности среды для медленных частиц в критической ситуации появления связанных состояний (при существующем, реальном уровне энергии или «наклеиваемом», виртуальном). Во-вторых, возникновение квазиуровней при прохождении сквозь слои с несколькими областями эффективного отталкивания (ловушки двустороннего типа) и при отражении частиц на границе двух сред (односторонние ловушки). В-третьих, особые резонансные состояния в средах с локализованными областями поглощения и испускания частиц. Кроме того, заслуживает внимания физическая картина рассеяния в условиях встречных потоков частиц. Другие резонансные явления, связанные с образованием зонного спектра энергии, будут рассмотрены в третьей части книги.

В этом параграфе по-прежнему будет использоваться метод интегральных уравнений, которые в задачах рассеяния, в отличие от проблемы связанных состояний, являются неоднородными.

Резонансная прозрачность для медленных частиц. Пусть в плоскостойкой среде имеется локализованная неоднородность (слой), описываемая потенциалом $U(x)$, играющим роль возмущения. Как всегда при решении подобного типа задач, считаем, что ветви движения вдоль слоев уже отделены, и рассматриваем только эффективно одномерное движение частиц сквозь слои. Предполагаем, что поле притяжения достаточно мало и существует слабосвязанное состояние (в частности, связь ослаблена за счет дополнительного поля отталкивания). При $E > 0$ движение инфинитно. Решение уравнения для стационарных состояний $(\hat{H}_0 - E)\Psi = -\hat{U}\Psi$ можно записать в виде суммы общего решения соответствующего однородного уравнения и частного решения неоднородного: $\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - R^0 \hat{U}\Psi$, где нужно выбрать $\Psi_{\text{общ}}^0$ и R^0 в зависимости от конкретных физических условий движения. Рассмотрим случай падающих слева частиц, тогда невозмущенное движение отвечает плоским волнам (нормировка

несущественна) $\Psi_{\text{общ}}^0(x) = \exp(ikx)$, $\hbar k = \sqrt{2mE}$, а в качестве ФГ можно выбрать предельное значение $R_+^0(E)$. Действительно, используя явный вид этой функции (7.10)

$$R_+^0(x, x'; E) = (im/\hbar^2 k) \exp(ik|x - x'|)$$

и соответствующего интегрального уравнения

$$\Psi_+(x) = \exp(ikx) - (im/\hbar^2 k) \int dx' U(x') \Psi_+(x') \exp(ik|x - x'|),$$

получаем при $x \rightarrow -\infty$ решение в виде суперпозиции падающих и отраженных волн: $\Psi_+(x) = \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$. Амплитуда эха равна

$$B = -(im/\hbar^2 k) \int dx U(x) \Psi_+(x) \exp(ikx),$$

а коэффициент отражения

$$R = |B|^2 = (m/\hbar^2 k)^2 \left| \int dx U(x) \Psi_+(x) \exp(ikx) \right|^2.$$

При $x \rightarrow \infty$ имеются только прошедшие волны:

$$\Psi_+(x) = C \exp(ikx).$$

Для медленных частиц ($ka \ll 1$, где a — размер неоднородностей поля) внутри области действия потенциала $|x| \leq a$ интегральное уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \Psi_+(x) = 1 - (im/\hbar^2 k) \int dx' U(x') \Psi_+(x') + \\ + (m/\hbar^2) \int dx' U(x') \Psi_+(x') |x - x'|. \end{aligned}$$

Соответствующее интегральное уравнение для связанных состояний

$\Psi(x) = -(m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') \exp(-\kappa|x - x'|)$; $\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}$ в случае слабой связи ($\kappa a \ll 1$) внутри области действия поля также можно представить в аналогичной форме

$$\begin{aligned} \Psi(x) = -(m/\hbar^2 \kappa) \int dx' U(x') \Psi(x') + (m/\hbar^2) \int dx' U(x') \times \\ \times \Psi(x') |x - x'|. \end{aligned}$$

Видим, что волновые функции $\Psi_+(x)$ и $\Psi(x)$ в первом приближении пропорциональны внутри области действия поля:

$$\begin{aligned} \Psi_+(x) = \Psi(x) [1 - (im/\hbar^2 k) \int dx' U(x') \Psi_+(x')] / [- (m/\hbar^2 \kappa) \int \times \\ \times dx' U(x') \Psi(x')]. \end{aligned}$$

Умножая обе части этого равенства на $U(x)$ и интегрируя, приходим к уравнению для амплитуды отражения $B \approx -(im/\hbar^2 k) \times \int dx U(x) \Psi_+(x)$, решение которого имеет вид $B = i\kappa/(k - i\kappa)$.

Напоминаем, что величина κ фиксирована и определяет энергию связи, а k отвечает энергии частиц, проходящих сквозь слой. Таким образом амплитуда эха имеет типичные особенности в комплексной плоскости энергий (или волновых чисел). Реальному уровню энергии ($\kappa > 0$) соответствует полюс $k = i\kappa$ в верхней полуплоскости, а виртуальному ($\kappa < 0$) — в нижней.

Отсюда вытекает резонансная формула для коэффициента отражения медленных частиц, аналогичная формуле Вигнера [1] для рассеяния на трехмерно локализованных неоднородностях: $R = \kappa^2 / (k^2 + \kappa^2)$. Отражение оказывается малым даже для небольших энергий. Лишь для совсем медленных частиц в узкой полосе энергий с $k^2 < \kappa^2$ отражение существенно. Чем меньше κ^2 , т. е. чем мельче залегает уровень энергии связанного состояния, тем больше область прозрачности. Для отдельной слабой потенциальной ямы энергия связи уже достаточно мала, и значительное отражение наступает в весьма узкой полосе энергий: не при $k \leq k_0$, а лишь при $k \leq \kappa \ll k_0 = \sqrt{2mU_0}/\hbar$ (U_0 — характерная глубина потенциальной ямы). Однако наличие областей отталкивания (например, барьера, компенсирующего влияние ямы) дает еще более слабую связь, так что отражение наступает при еще меньших значениях энергии. Так возникает парадоксальная с точки зрения классических представлений ситуация, когда барьер не только не увеличивает отражения, но существенно расширяет область прозрачности. Здесь уже в полной мере проявляется резонансный характер рассеяния из-за слабого «залегания» уровня энергии — существенной физической близости связанного состояния и инфинитного движения — потенциальная яма служит эффективным резонатором. При увеличении барьера, когда связанное состояние вытесняется ($\kappa \rightarrow 0$), получаем практически полную прозрачность вплоть до нулевой энергии (фактически, однако, нужно учесть отброшенные члены в интегральных уравнениях, так что очень незначительное отражение сохранится). Здесь мы имеем дело, как и в аналогичном трехмерном случае, с эффектом резонансного рассеяния на реальном уровне энергии. Отличие заключается в том, что для трех измерений резко возрастает сечение рассеяния во всех направлениях (рассеяние изотропно), тогда как в одномерном случае значительно увеличивается прохождение, т. е. существенно уменьшается «рассеяние назад» — отражение. Впрочем, явление резонансной прозрачности наблюдается и в трехмерном рассеянии (эффект Рамзауэра [60]). При дальнейшем увеличении поля отталкивания связанное состояние перестает существовать, однако резонанс не исчезает, физическое действие ямы как резонатора

продолжает сохраняться. Это — эффект резонансного рассеяния на виртуальном уровне.

Для иллюстрации отмеченных особенностей резонансного рассеяния в плоскостных структурах рассмотрим случай двух локализованных полей (ямы и барьера). В первом приближении слабые поля такого типа можно моделировать δ -образными потенциалами, так что будем считать, что движение частицы происходит в поле $U(x) = -u_1\delta(x) + u_2\delta(x-L)$. Подставляя это выражение в интегральное уравнение для рассеяния, получаем волновую функцию стационарного состояния:

$$\Psi(x) = \exp(ikx) + (imu_1/\hbar^2 k) \Psi(0) \exp(ik|x|) - \\ - (imu_2/\hbar^2 k) \Psi(L) \exp(ik|x-L|).$$

Полагая $x=0$ и $x=L$, находим систему линейных уравнений для величин $\Psi(0)$ и $\Psi(L)$:

$$(1 - i\kappa_1/k) \Psi(0) + (i\kappa_2/k) \exp(ikL) \Psi(L) = 1; \\ - (i\kappa_1/k) \exp(ikL) \Psi(0) + (1 + i\kappa_2/k) \Psi(L) = \exp(ikL); \\ \hbar^2 \kappa_{1,2} = mu_{1,2}.$$

Как нетрудно убедиться, они непосредственно связаны с амплитудами отражения и прохождения: $\Psi(0) = B + 1$; $\Psi(L) = C \exp(ikL)$, так что коэффициенты прозрачности T и отражения R имеют вид $T = |\Psi(L)|^2$; $R = |1 - \Psi(0)|^2$. Решая систему уравнений, определяем коэффициент прозрачности:

$$T = |1 - i(\kappa_1 - \kappa_2)/k + \kappa_1 \kappa_2 [1 - \exp(2ikL)]/k^2|^{-2}. \quad (10.1)$$

Рассмотрим рассеяние медленных частиц, когда $kL \ll 1$ (в данном случае область действия поля в целом имеет размер L). Формула (10.1) приводит к выражению

$$T = |1 - i(\kappa_1 - \kappa_2 + 2\kappa_1 \kappa_2 L)/k|^{-2}. \quad (10.2)$$

Для выяснения физического смысла результата обратимся к решению задачи о связанном состоянии в изучаемом поле (тандеме из ямы и барьера). Согласно формуле (9.1) при $\kappa L \ll 1$ энергия связи равна $\kappa = \kappa_1 - \kappa_2 + 2\kappa_1 \kappa_2 L$. Следовательно, выражение (10.2) описывает резонансное рассеяние на связанном состоянии: $T = |1 - i\kappa/k|^{-2}$ (10.3). В частности, если интенсивности ямы и барьера равны, т. е. $\kappa_1 = \kappa_2$, получаем существенное усиление резонансных свойств по сравнению со случаем отдельной ямы, поскольку $\kappa = 2\kappa_1^2 L \ll \kappa_1$. В критической ситуации, когда интенсивность барьера несколько превышает интенсивность ямы и $\kappa_1 - \kappa_2 + 2\kappa_1 \kappa_2 L = 0$, имеем с учетом точного выражения для коэффициента прозрачности (10.1) практически полную прозрачность

даже при самых малых энергиях: $T \simeq 1 - 4(x_1 L)^2$. Наконец, если интенсивность барьера несколько больше критической, выражение $x_1 - x_2 + 2x_1 x_2 L$ становится отрицательным, связанное состояние отсутствует, но все еще сохраняется резонансный характер рассеяния. Происходит рассеяние на виртуальном уровне согласно формуле (10.3) с $x < 0$. Таким образом, на примере системы яма — барьер подтверждается справедливость общих соотношений, полученных на основе сравнения интегральных уравнений для рассеяния и связанных состояний.

Обсудим еще одно любопытное проявление резонансных эффектов другой природы, связанных с размерным квантованием. Пусть яма и барьер имеют одинаковые интенсивности и удалены друг от друга на расстояние, превышающее их «радиусы действия», т. е. $x_1 L \gg 1$. Тогда формула для коэффициента прозрачности (10.1) приобретает характерную форму в резонансных пиках полной прозрачности

$$T = \{1 + 4(x_1/k)^2 [(x_1/k)^2 + 1] \sin^2 kL\}^{-1} \quad (10.4)$$

при значениях волнового числа $kL = \pi n$, $n = 1, 2, \dots, N < x_1 L/\pi$ и шириной $\delta(kL) \sim (x_1/k)^2$ (с ростом энергии резонансные всплески размываются) на фоне очень слабой прозрачности $T \simeq k^4/4x_1^4 \ll 1$. Это — типичное явление резонанса на квазиуровнях, а необычным является то, что оно возникает не в системе барьеров, а в системе яма — барьер. Для двух же одинаковых барьеров имеем из общей формулы (10.1) при $x_1 \rightarrow -x_2$ аналогичную (10.4) систему резонансов:

$$T = \{1 + 4(x_2/k)^2 [(x_2/k)^2 + 1] \sin^2 [kL + \arctg(k/x_2)]\}^{-1},$$

с достижением полной прозрачности. Такой же эффект наблюдается и в системе двух одинаковых ям ($x_2 \rightarrow -x_1$):

$$T = \{1 + 4(x_1/k)^2 [(x_1/k)^2 + 1] \sin^2 [kL - \arctg(k/x_1)]\}^{-1}. \quad (10.5)$$

В последнем случае возможен резонанс и в критической ситуации появления второго связанного состояния, когда $x_1 L = 1$. Из формулы (10.5) получаем $T \simeq 1 - 4k^2/9x_1^2$, т. е. практически полную прозрачность для медленных частиц $k \ll x_1$ вплоть до нулевой энергии.

Во всех отмеченных случаях квазиуровней резонансная прозрачность среды сопровождается резким относительным возрастанием волновой функции внутри ловушки (т. е. в интервале $0 < x < L$). Количественной характеристикой явления может служить величина I , равная отношению квадратов модулей амплитуд волновой функции внутри ловушки и вне ее. Нетрудно убедиться, что $I \sim (x/k)^2 T$ (соответствующие величины x отно-

сятся к любому из трех случаев — яма-барьер, два барьера, две ямы). Таким образом, в условиях резонанса $I \sim (\kappa/k)^2 \gg 1$, тогда как вне резонанса $I \sim (k/\kappa)^2 \ll 1$.

Рассмотренная стационарная картина отвечает нестационарным состояниям, при которых прохождение пакетов стационарных состояний в условиях резонансной прозрачности происходит с задержкой [50, 21]. Время задержки τ связано с шириной резонанса δE известным соотношением $\tau \sim \hbar/\delta E$. Есть и другая точка зрения. Пусть вначале состояние отвечало локализации частицы в ловушке, так что частица была «заперта» в интервале $0 < x < L$ благодаря бесконечной интенсивности барьеров и находилась в стационарном состоянии. Затем барьеры стали «полупрозрачными». С точки зрения новых условий состояние уже не является стационарным, однако при малой прозрачности барьеров локализация будет достаточно долгоживущей. Время распада исходного состояния τ определяется шириной резонанса ловушки. Формально можно искать комплексные значения энергии в стационарных решениях, которым отвечают расходящиеся волны (условие «излучения»). Более подробно эти вопросы рассмотрены в работах [102, 148, 149] для барьеров произвольной формы.

Влияние связанного состояния на резонансное отражение на границе двух сред. Если в конце предыдущего пункта были затронуты явления резонансной прозрачности на квазиуровнях при прохождении частиц сквозь среду (двусторонние ловушки инфинитного движения), то сейчас мы рассмотрим свойства ловушек одностороннего типа. При этом движение носит характер отражения от границы двух сред, занимающих полупространства, соответственно, первая при $x < 0$ в $U(x) = 0$, вторая при $x > 0$ с $U(x) = -\Delta U < 0$ (в данной задаче энергию удобно отсчитывать от значения поля в первой среде). Область притяжения находится в первой среде, на расстоянии L от границы. Случай $E < -\Delta U$, когда имеется связанное состояние, уже был рассмотрен в предыдущем параграфе (мы проследили за уровнем энергии связанного состояния до перехода в область непрерывного спектра, теперь нужно выяснить его дальнейшую «судьбу»). Нам интересуют диапазон энергий $-\Delta U < E < 0$, в котором происходит полное отражение частиц, падающих из второй среды на границу раздела. Вырождения нет — имеются стоячие волны полуфинитного движения в стационарных состояниях. В отсутствие области притяжения частицы проникают в первую среду на небольшое расстояние порядка $\hbar/\sqrt{2m\Delta U}$. Однако стоит создать хотя бы незначительную область притяжения, как ситуа-

ция резко меняется. В закритических условиях при достаточной изоляции ямы ($L\kappa_0 \gg 1$) «общение» ямы со второй средой осуществляется путем глубокого туннелирования, так что глубина проникновения частиц в первую среду становится порядка $L \gg \hbar / \sqrt{2m\Delta U}$.

Область притяжения моделируем потенциалом предельного короткодействия $U^{(0)}(x) = -u\delta(x+L)$ (это позволяет сразу же получить результаты первого приближения для слабого поля произвольного профиля). Опуская расчетные детали, запишем ответ для волновой функции в наиболее интересных областях пространства: во второй среде $\Psi(x > 0) = A \exp(iqx) + B \exp \times (-iqx)$, а в окрестности области притяжения и левее

$$\Psi(x < -L) = C \exp[\kappa(x+L)],$$

где

$$\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|} \text{ и } \hbar q = \sqrt{2m(\Delta U - |E|)}.$$

При этом коэффициенты связаны соотношением

$$2B = 2A^* = C [(1 - \kappa_0/\kappa)(1 + i\kappa/q) \exp(\kappa L) + (\kappa_0/\kappa)(1 - i\kappa/q) \exp(-\kappa L)].$$

Таким образом, отношение интенсивностей волнового поля внутри ловушки и во второй среде описывается величиной

$$I = |C|^2/4 |A|^2 = |(1 - \kappa_0/\kappa)(1 - i\kappa/q) \exp(\kappa L) + (\kappa_0/\kappa)(1 + i\kappa/q) \exp(-\kappa L)|^{-2}.$$

Поведение I в зависимости от энергии носит резко выраженный резонансный характер (при $\kappa_0 L \gg 1$). Положение максимума и его полуширина характеризуют в первом приближении энергию и ширину квазиуровня. Другой подход к определению квазиуровня — рассмотрение условия «излучения», т. е. условия, при котором решение имеет вид уходящих волн: $B = 0$ (что формально соответствует распаду квазистационарного состояния в нестационарном описании). Разумеется, среди вещественных значений энергии это уравнение не имеет решений, но комплексные корни как раз и дают квазиуровни. Анализ показывает, что $I_{\max} = (\Delta U/4 |E_0|) \exp(2\kappa_0 L)$ при

$$|E| = |E_0| [1 + 2(2|E_0|/\Delta U - 1) \exp(-2\kappa_0 L)] \quad (10.6)$$

(отброшенные члены имеют порядок $\exp(-4\kappa_0 L)$). Как видим, квазиуровень весьма незначительно отличается от уровня энергии изолированной ямы (сдвиг экспоненциально мал). Ширину

резонанса определяем из уравнения $I = I_{\max}/2$. Вычисления дают

$$\delta E = 4 |E_0| [(|E_0|/\Delta U)(1 - |E_0|/\Delta U)]^{1/2} \exp(-2x_0 L).$$

Вне резонанса $I \sim \exp(-2xL)$.

Теперь используем другой способ нахождения квазиуровней. Нетрудно убедиться, что решение уравнения $B = 0$ имеет вид

$$x = x_0 \{1 - [(q^2 - x_0^2 - 2iqx_0)/q_0^2] \exp(-2x_0 L)\}; \quad \hbar q_0 = \sqrt{2m\Delta U}.$$

Отделяя вещественную и мнимую части $x = x' + ix''$, получаем

$$x' = x_0 \{1 - [(q^2 - x_0^2)/q_0^2] \exp(-2x_0 L)\}$$

и

$$x'' = 2(qx_0^2/q_0^2) \exp(-2x_0 L).$$

Оба выражения полностью согласуются с найденными резонансными величинами, будучи характеристиками «распадного» описания. Значение x' отвечает средней энергии пакета стационарных состояний, ширина которого x'' определяет время распада. Заметим, что положительность x'' соответствует отрицательной мнимой части энергии квазиуровня $E - i\Gamma$, поскольку $E = -\hbar^2 x^2/2m$. Если бы рассматривалось явление захвата, то нужно было бы решить уравнение $A = 0$, т. е. считать, что имеются только приходящие волны. Тогда мнимые величины имели бы противоположный знак.

Таким образом, тесно связанные между собой резонанс и распад в рассматриваемых односторонних ловушках объединяются с помощью основной характеристики явления отражения — величины I , экстремальные свойства которой описывают резонанс, а аналитические — распад и захват, поскольку $I \sim 1/AB$ и полюсы расположены попарно ($E \mp i\Gamma$).

В рассмотренной задаче мы встречаемся с одним любопытным явлением при описании с помощью интегрального уравнения.

Общее решение уравнения $(\hat{H}_0 - E)\Psi = -\hat{U}\Psi$ можно выразить в виде $\Psi = \Psi_{\text{обш}}^0 - \hat{R}^0 \hat{U}\Psi$, где $\Psi_{\text{обш}}^0$ удовлетворяет одно-

родному уравнению $(\hat{H}_0 - E)\Psi_{\text{обш}}^0 = 0$, а возмущением является локальная область притяжения, так что изучаемые состояния относятся к диапазону энергий, при которых и невозмущенная задача имеет решение. При этом в качестве функции Грина можно взять предельное значение R_+ , а можно выбрать и R_- (а также другие аналогичные функции), т. е. можно получить решения вида $\Psi_+ = \Psi_{\text{обш}}^0 - \hat{R}_+ \hat{U}\Psi_+$, или $\Psi_- = \Psi_{\text{обш}}^0 - \hat{R}_- \hat{U}\Psi_-$.

и т. д. В таком случае в локальном поле получаем, что асимптотическое поведение $\Psi_+(x)$ при $x \rightarrow \infty$ определяет наложение стоячих волн $\Psi_{\text{общ}}^0$ и уходящих волн в члене с R_+ , тогда как Ψ_- в том же предельном случае состоит из стоячих и приходящих волн. На первый взгляд, возникает возможность различных решений Ψ_+ , Ψ_- и т. д. Однако в рассматриваемом диапазоне энергий вырождение отсутствует, так что в действительности все получаемые таким образом решения оказываются, во-первых, линейно-зависимыми, а во-вторых, представляют собой стоячие волны. При сложении стоячих волн невозмущенного движения вида $\cos(kx - \alpha)$ с бегущими в каком-либо направлении ($\exp(\pm \pm ikx)$) происходит трансформация фазы α , поскольку изменяются условия полного отражения. Если появляется в первой среде область притяжения, то в силу квантового эффекта туннелирования происходит взаимодействие отражения и притяжения. При определенных значениях энергии частиц и разности потенциала в средах эта область может «завучать» — образуется полукрытый резонатор.

Единственная возможность получить чисто уходящие волны — положить $\Psi_{\text{общ}}^0 \equiv 0$, т. е. искать решение однородного уравнения $\Psi_+ = -\hat{R}_+^0 \hat{U} \Psi_+$, или для приходящих волн: $\Psi_- = -\hat{R}_-^0 \hat{U} \Psi_-$. Формально это соответствует комплексным значениям энергии, для которых, конечно, невозмущенное уравнение не имеет решений. Такие уравнения аналогичны уравнению для связанных состояний. Метод Фредгольма дает для квазиуровней распада уравнение $D_+(E) = 0$ (10.7), а для квазиуровней захвата имеем уравнение $D_-(E) = 0$. Например, для рассмотренной односторонней ловушки определитель Фредгольма равен $D_+(E) = 1 - uR_+^0(-L, -L; E)$. Вычисляя значение $\Phi\Gamma$ в окрестности ловушки $R_+^0(-L, -L) = [2m/\hbar^2(x - iq)] \chi(-L) \varphi(-L)$, получаем дисперсионное уравнение

$$x = x_0 \{1 - [(q - ix)/(q + ix)] \exp(-2xL)\},$$

совпадающее с найденным с помощью условия излучения. Правда, такой способ решения обедняет общую картину, поскольку рассматриваются только резонансные состояния, а не весь энергетический диапазон состояний отражения.

Другие примеры односторонних ловушек произвольного вида изучены в работах [102, 148] (а помощью квазиклассических методов).

Попытаемся сформулировать некоторые общие положения в связи с применением метода интегральных уравнений для

описания движения частиц в плоскостных средах (для одномерной ветви движения, остающейся после отделения движения вдоль слоев). Прежде всего, выделяем три вида движения: финитное (связанные состояния, дискретный невырожденный спектр энергии), полуфинитное (состояния полного отражения, невырожденный сплошной энергетический спектр) и инфинитное (состояния рассеяния, непрерывный спектр энергии с двукратным вырождением). В случае связанных состояний уравнение для

стационарных состояний можно записать в виде $\Psi = -\hat{R}^0 \hat{U} \Psi$, где $\Phi\Gamma$ не нужно выбирать, нет необходимости уточнять правила обхода энергетических особенностей, поскольку их нет. Решение такого однородного уравнения (для локализованных полей — Фредгольма) существует лишь при определенных значениях входящих в него параметров, определяемых из уравнения $D = 0$, где D — определитель Фредгольма. Правда, на практике вычислить этот определитель оказывается сложно, если только не приходят на выручку быстрая сходимость соответствующего ряда Фредгольма за счет малых параметров (например, в одномерном слабом поле) или применение сепарабельной аппроксимации (в частности, δ -образных моделей поля в одномерном случае). Хотя в такой постановке задачи и нет нужды обращаться к полной (возмущенной) функции Грина R , однако отметим, что для нее соответствующее интегральное уравнение является неоднородным: $\hat{R} = \hat{R}_0 - \hat{R}^0 \hat{U} \hat{R}$.

Решение можно записать в форме Фредгольма $\hat{R} = \hat{R}^0 - \hat{D} \hat{R}^0 / D$, где $\hat{D}$ — минор Фредгольма, записываемый, как и другие величины аналогичного типа, в символической операторной форме. Связанным состоянием отвечают полюсы полной функции Грина.

Далее переходим к случаю полуфинитного движения, предполагая, что возмущение не изменяет энергетического диапазона, а лишь изменяет состояние с данной энергией. Впрочем, это изменение может быть настолько радикальным, что появляются квазидискретные элементы на фоне сплошного энергетического спектра — квазиуровни. В этом диапазоне энергий интегральное уравнение для стационарных состояний является неоднородным:

$$\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - \hat{R}^0 \hat{U} \Psi, \quad (10.8)$$

а в качестве функции Грина можно выбрать любое из предельных значений $R_{\pm}$ или другие аналогичные функции (например, построенные с помощью метода частных решений). «Мясорубка»

интегрального уравнения «прокручивает» решение таким образом, что все равно получается требуемое поведение волновых функций — стоячие волны. Решение Фредгольма имеет вид

$$\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - \hat{D} \Psi_{\text{общ}}^0 / D. \quad (10.9)$$

В стационарных состояниях вектор плотности потока вероятности имеет проекцию на перпендикулярное к слоям направление j , не зависящую от x , а в подбарьерной области $j = 0$, так что стационарные состояния не могут приводить к бегущим волнам. Однако в «полустационарном» подходе к квазиуровням можно искать решение в форме бегущих волн для комплексных значений энергии. Если выбрана ФГ R_+ , то вторые члены в правых частях уравнений (10.8) и (10.9), отвечающие уходящим волнам, при $D_+ \rightarrow 0$ «подавляют» вклад первых членов в виде стоячих волн. Другими словами, условие «излучения» для квазиуровней распада имеет вид $D_+ = 0$. Аналогично для ФГ R_- решение в форме приходящих волн остается при условии $D_- = 0$.

Переходя к задачам инфинитного движения, получаем интегральное уравнение $\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - \hat{R}^0 \hat{U} \Psi$, в котором двукратное вырождение уровней энергии оставляет некоторый простор для выбора $\Psi_{\text{общ}}^0$ и R . Все зависит от конкретной постановки физической задачи. Обычно рассматривается рассеяние частиц с первоначальным потоком в одном из направлений (например, в отсутствие возмущения волновая функция равна $\Psi_{\text{общ}}^0 = \exp(ikx)$, что отвечает потоку слева направо). В этом случае в качестве ФГ выбираем R_+ . Тогда полное решение описывает отраженные волны и искаженные прошедшие.

Возможны и другие комбинации: $\Psi_{\text{общ}}^0 = \exp(-ikx)$ и R_+ дает первоначальный поток противоположного направления (справа налево), а $\Psi_{\text{общ}}^0 = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ и R_+ (или R_-) отвечает встречным потокам. Фредгольмово решение $\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - \hat{D}_+ \Psi_{\text{общ}}^0 / D_+$ позволяет поставить вопрос о состоянии с расходящимися волнами при $D_+ \rightarrow 0$. Конечно, уравнение $D_+ = 0$ может иметь только комплексные энергетические корни, поскольку для истинных стационарных состояний, т. е. вещественных значений энергии, в силу уже упоминавшегося пространственного сохранения j не может возникнуть истечения волн от места рассеяния. Невозможно, чтобы $j(\infty) > 0$ и $j(-\infty) < 0$. Эти значения энергии описывают квазистационарные состояния распада. Аналогично для квазиуровней захвата условие $D_- = 0$

отбирает решение в виде сходящихся волн, выходящее за рамки стационарного состояния, но отвечающее нестационарной картине.

Особого внимания заслуживает проблема стационарных состояний в случае эффективного комплексного поля $U(x) = U' + iU''$, мнимая часть которого описывает процессы поглощения ($U'' < 0$) или испускания ($U'' > 0$). Оказывается, что возможны состояния чистого поглощения или испускания в рамках стационарной постановки задачи. Мы их изучим вместе с вопросом о встречных потоках частиц.

Встречные потоки частиц. Рассмотрим рассеяние частиц при прохождении ими плоскостойких сред в случае встречных потоков. Как уже отмечалось в конце предыдущего пункта, интегральное уравнение такой задачи может быть записано в виде

$\Psi = \Psi_{\text{общ}}^0 - \hat{R}_+^0 \hat{U} \Psi$, где в координатном представлении $\Psi_{\text{общ}}^0(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$. ФГ свободного движения равна $R_+^0(x, x'; E > 0) = (im/\hbar^2 k) \exp(ik|x - x'|)$. Локальную неоднородность среды (рассеиватель) будем моделировать δ -образным потенциальным полем $U(x) = u\delta(x)$, поскольку нас будут интересовать основные общие свойства движения, а не детали структуры неоднородности. Тогда решение интегрального уравнения можно записать в виде

$$\Psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) - (ix_0/k)(1 + ix_0/k)^{-1} (A + B \exp(ik|x|)); \quad \hbar^2 x_0 = mu. \quad (10.10)$$

Падающие и рассеянные волны с каждой стороны от рассеивателя разделяются в векторе плотности потока вероятности. Его проекция на рассматриваемое направление x состоит слева от рассеивателя из двух вкладов, описывающих соответственно падающие волны $j_{\text{пад}}^{\rightarrow}$ и рассеянные $j_{\text{рас}}^{\rightarrow}$, а справа — также из $j_{\text{пад}}^{\rightarrow}$ и $j_{\text{рас}}^{\rightarrow}$. Стрелки указывают направление движения. При этом независимо от вида поля

$$j_{\text{пад}}^{\rightarrow} = (\hbar k/m) |A|^2 \quad \text{и} \quad j_{\text{пад}}^{\leftarrow} = -(\hbar k/m) |B|^2,$$

а в данном конкретном поле

$$j_{\text{рас}}^{\rightarrow} = -(\hbar k/m) |B - iA x_0/k|^2 / |1 + ix_0/k|^2;$$

$$j_{\text{рас}}^{\leftarrow} = (\hbar k/m) |A - iB x_0/k|^2 / |1 + ix_0/k|^2.$$

Таким образом, два первых соотношения устанавливают смысл модулей коэффициентов A и B (с учетом нормировки волновой функции — смысл отношения модулей). Одна из особенностей рассматриваемой задачи со встречными потоками

состоит в том, что прошедшие и отраженные волны для разных исходных потоков интерферируют. Это не позволяет выделить в рассеянных потоках прошедшие и отраженные и ввести обычные коэффициенты отражения и прохождения. Вместо них введем два новых коэффициента рассеяния, характеризующих относительное среднее число рассеянных в соответствующем направлении частиц (по отношению ко всем падающим):

$$T_{-} = j_{\text{рас}} / (j_{\text{пад}} + |j_{\text{пад}}|);$$

$$T_{+} = |j_{\text{рас}}| / (j_{\text{пад}} + |j_{\text{пад}}|).$$

Закон сохранения числа частиц (уравнение непрерывности) обеспечивает выполнение равенства $T_{-} + T_{+} = 1$ (10.11), в чем нетрудно убедиться, подставив явное выражение потоковых величин через коэффициенты A и B для данного поля.

Если $B \equiv 0$, то получаем стандартную задачу рассеяния с падением частиц слева и соответствующим смыслом коэффициентов рассеяния: $T_{-} \equiv T$ описывает прохождение, а $T_{+} \equiv R$ отражение частиц. Аналогично при $A \equiv 0$ имеем картину рассеяния с исходным потоком справа. Если $A = B$, то задача симметрична, а $T_{-} = T_{+} = 1/2$. Если же $A \neq B$, то коэффициенты рассеяния зависят от A/B . Особенность рассматриваемого δ -поля в том, что при $A = -B$ оно вообще не вызывает рассеяния.

Если учесть возможность поглощения или испускания частиц (эффективный комплексный потенциал), то указанное соотношение между коэффициентами рассеяния (10.11) не выполняется. Возникающие при этом новые явления можно описывать с помощью дополнительных коэффициентов: поглощения $A = 1 - T_{-} - T_{+}$, когда мнимая часть потенциала отрицательна, и испускания $S = T_{-} + T_{+} - 1$, когда мнимая часть потенциала положительна. Связь трех коэффициентов в каждом случае отражает закон сохранения числа частиц с учетом поглотителя (absorber) или источника (source).

В связи с этим, а также имея в виду проиллюстрировать непосредственный физический смысл функций Грина типа $R_{\pm}$, рассмотрим пример чисто мнимого поля. Пусть мнимая часть потенциала положительна, т. е. $\kappa_0 = i|\kappa_0|$. Тогда коэффициент испускания равен

$$S = 2(|\kappa_0|/k)(1 - |\kappa_0|/k)^{-2}|A + B|^2/(|A|^2 + |B|^2).$$

При $k \rightarrow 0$ он убывает: $S \sim k/|\kappa_0|$, то же при $k \rightarrow \infty$, когда $S \sim |\kappa_0|/k$, т. е. при малой и при большой энергиях падающих частиц испускание оказывается слабым эффектом, но зато есть особое значение энергии $E = |E_0| = \hbar^2|\kappa_0|^2/2m$, при котором происходит резкое усиление эффективной роли источника частиц — ре-

зонанс испускания частиц. Волновая функция состояния резонансного испускания частиц пропорциональна функции Грина $R_+^0(x, 0; |E_0|)$ (подробнее о роли ФГ см. в следующем параграфе).

Если же мнимая часть потенциала отрицательна ($x_0 = -i|x_0|$), то коэффициент поглощения

$$A = 2(|x_0|/k)(1 + |x_0|/k)^{-2}|A + B|^2/(|A|^2 + |B|^2)$$

остается малой величиной при малых и больших энергиях. Максимального значения $A_{\max} = |A + B|^2/2(|A|^2 + |B|^2)$ он достигает при $E = |E_0|$. Если же $A = B$, то имеем состояние чистого поглощения с $A_{\max} = 1$, волновая функция которого согласно формуле (10.10) описывает сходящиеся волны: $\Psi(x) = A \exp(-ik|x|)$. Это соответствует функции Грина $R_-^0(x, 0; |E_0|)$.

Теперь рассмотрим, каким образом та же задача решается на основании ФГ $R_-^0(x, x'; E) = -(im/\hbar^2 k) \exp(-ik|x - x'|)$. Общее решение невозмущенной задачи запишем в виде

$$\Psi_{\text{общ}}^0(x) = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx).$$

Тогда интегральное уравнение сразу же дает решение для волновой функции

$$\Psi(x) = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx) + (ix_0/k)(1 - ix_0/k)^{-1}(C + D) \exp(-ik|x|),$$

с помощью которого находим соответствующие потоковые величины:

$$j_{\text{пад}}^{\rightarrow} = (\hbar k/m) |C + iDx_0/k|^2 / |1 - ix_0/k|^2; \quad j_{\text{рас}}^{\leftarrow} = -(\hbar k/m) |D|^2;$$

$$j_{\text{пад}}^{\leftarrow} = -(\hbar k/m) |D + iCx_0/k|^2 / |1 - ix_0/k|^2; \quad j_{\text{рас}}^{\rightarrow} = (\hbar k/m) |C|^2.$$

Как видим, теперь коэффициенты невозмущенного движения имеют смысл амплитуд рассеянных в соответствующем направлении волн. Пусть поле обладает поглощательной способностью ($x_0 = -i|x_0|$). Тогда при произвольных C и D в случае $E = |E_0|$ наблюдается полное поглощение $A = 1$ и волновая функция сводится к сходящимся волнам. Если же имеем поле испускания ($x_0 = i|x_0|$), то в случае $E = |E_0|$ при $C = D$ получаем $\Psi(x) = C \exp(i|x_0|x)$, т. е. чисто расходящиеся волны, соответствующие функции Грина $R_+^0(x, 0; |E_0|)$.

Разумеется, оба способа эквивалентны, в чем нетрудно убедиться, сравнивая выражения для волновой функции: переход от одной формы записи решения к другой осуществляется с помощью линейного преобразования коэффициентов:

$$A = (C + iDx_0/k)/(1 - ix_0/k);$$

$$B = (D + iC\kappa_0/k)/(1 - i\kappa_0/k).$$

Однако использование функции Грина типа R_+ позволяет непосредственно выявить резонанс испускания частиц (тогда как резонанс поглощения проявляется при наложении дополнительного условия на амплитуды падающих волн). Применение же функции Грина R_- дает резонанс поглощения при произвольных соотношениях коэффициентов, а резонанс испускания иллюстрируется лишь при добавочных требованиях. Таким образом, обе картины дополняют друг друга, хотя предпочтение следует оказать описанию с ФГ типа R_+ , поскольку фигурирующие при этом коэффициенты A и B имеют непосредственный физический смысл амплитуд встречных потоков при их создании, а явные выражения для коэффициентов рассеяния при этом также проще. Тем не менее использование функции Грина R_- любопытно тем, что показывает на примере задачи о встречных потоках возможность непосредственного описания физической ситуации на основе такой функции. В традиционной постановке задачи рассеяния с односторонним исходным потоком частиц применение R_- не может обеспечить нужных асимптотических свойств волновых функций. К тому же задача о встречных потоках позволяет выявить состояния чистого резонансного поглощения или испускания частиц.

Подытоживая, отметим те моменты, которые кажутся существенными в рассмотренной картине встречных потоков. Во-первых, обычно рассматривается только вопрос о прохождении частиц с односторонним первоначальным испусканием. Так ставится трехмерная задача рассеяния (чаще всего описывающая относительное движение в задаче двух тел), так традиционно трактуют и одномерное рассеяние, когда используется лишь одно из двух линейно независимых решений уравнения Шредингера. Если же привлечь оба решения, то появляется возможность ввести новые физические условия движения — встречные пучки частиц. Во-вторых, особенно удобно представлять себе объемную плоскостную картину, когда потоки падающих и рассеянных частиц пространственно разделены (детекторы и эмиттеры расположены не на одной прямой, если частицы падают под острым углом к плоскости слоев). В-третьих, имеется в виду, конечно, не взаимодействие встречных потоков, а результат их рассеяния на неоднородностях среды. В-четвертых, реализуется возможность использования ФГ типа R_- , обычно не находящих непосредственного применения в задачах рассеяния. В-пятых, такая постановка задачи соответствует наблюдению состояний резонансного поглощения частиц, ког-

да волновая функция сводится к R_- (формально резонанс испускания можно получить и в одностороннем потоке). В-шестых, теряют смысл традиционные коэффициенты прозрачности и отражения. Вводятся два новых коэффициента рассеяния, а в случае поглощательной (испускательной) способности поля к ним следует добавить еще один — коэффициент поглощения (испускания). В-седьмых, все основные закономерности удастся выявить в случае модели δ -поля, когда решение имеет простой вид. В-восьмых, энергии состояний чистого поглощения (испускания) можно найти, как и в случае квазиуровней, из уравнения $D_- = 0$ (соответственно $D_+ = 0$), а волновые функции этих состояний описывают сходящиеся волны (расходящиеся), в частности, для δ -поля это $R_-(R_+)$.

В качестве дополнения рассмотрим некоторые общие особенности закона изменения числа частиц в комплексном поле $U(x) = U' + iU''$ (уравнение непрерывности, потоковые величины, характеристики рассеяния). Уравнение непрерывности в таком поле имеет вид $\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = (2/\hbar) \rho U''$, или для одномерного движения $\partial \rho / \partial t + \partial j / \partial x = (2/\hbar) \rho U''$, где j — проекция вектора плотности потока вероятности (среднего числа частиц) на направление x . Для стационарных состояний в вещественном поле $\partial j / \partial x = 0$, т. е. $j = \text{const}$ по отношению к пространственному изменению. Например, нумеруя потоковые величины слева вдали от рассеивателя 1, а справа 2, получаем $j_1 = j_2$. В обычной задаче рассеяния с падением частиц слева $j_1 = j_{\text{пад}} - |j_{\text{отр}}|$; $j_2 = j_{\text{прох}}$, так что сохранение вероятности означает, что $j_{\text{пад}} = j_{\text{прох}} + |j_{\text{отр}}|$. Для коэффициентов прозрачности T и отражения R это дает соотношение $T + R = 1$.

В случае комплексного потенциала $\partial j / \partial x = (2/\hbar) \rho U''$. Поэтому в локальном поле $j_1 = j_2 - (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U''$. Величина $(2/\hbar) \int_{x_1}^{x_2} dx \rho U''$ определяет среднее число частиц, появляющихся на участке между x_1 и x_2 в единицу времени за счет действия поля. В обычной задаче рассеяния отсюда

$$j_{\text{пад}} - |j_{\text{отр}}| = j_{\text{прох}} - (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U''.$$

Следовательно, $T + R - (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' / j_{\text{пад}} = 1$.

Интегральную способность поля поглощать или испускать частицы характеризует величина $(2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' / j_{\text{пад}}$. Можно ввести

единый коэффициент, но удобнее говорить отдельно о мерах поглощения и испускания. Если $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' > 0$, то в целом имеется испускание частиц. Вводим коэффициент испускания

$$S = (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' / j_{\text{пад}},$$

так что $T + R - S = 1$. Если же $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' < 0$, то интегральный эффект заключается в поглощении частиц. Можно ввести коэффициент поглощения $A = (2/\hbar) \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' \right| / j_{\text{пад}}$. Тогда уравнение баланса числа частиц имеет вид $T + R + A = 1$.

Наконец, если наблюдается падение частиц с двух сторон (задача о встречных потоках), то $j_1 = j_{\text{пад}} - |j_{\text{рас}}|$; $j_2 = j_{\text{рас}} - |j_{\text{пад}}|$, так что

$$j_{\text{пад}} + |j_{\text{пад}}| = j_{\text{рас}} + |j_{\text{рас}}| - (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U''.$$

Введение соответствующих коэффициентов рассеяния, испускания и поглощения дает уравнение баланса

$$T_+ + T_- - S = 1 \text{ или } T_+ + T_- + A = 1. \quad (10.12)$$

В частном случае предельно короткодействующего чисто мнимого поля $U(x) = iU'' = -(i\hbar^2 |x_0|/m) \delta(x)$ характерный интеграл равен

$$(2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' = -2(\hbar |x_0|/m) |\Psi(0)|^2.$$

Из явного выражения для волновой функции (10.10) получаем $\Psi(0) = (A + B)/(1 + |x_0|/k)$, а $j_{\text{пад}} + |j_{\text{пад}}| = (\hbar k/m)(|A|^2 + |B|^2)$. Таким образом, коэффициент поглощения равен

$$A = (2/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho U'' / (j_{\text{пад}} + |j_{\text{пад}}|) = 2(|x_0|/k)(1 + |x_0|/k)^{-2} |A + B|^2 / (|A|^2 + |B|^2).$$

Если же поле способно испускать частицы $U(x) = iU'' = (i\hbar^2 |x_0|/m) \delta(x)$, то $\Psi(0) = (A + B)/(1 - |x_0|/k)$, а эффект характеризуется коэффициентом

$$S = 2(|x_0|/k)(1 - |x_0|/k)^{-2} |A + B|^2 / (|A|^2 + |B|^2).$$

Обе формулы для коэффициентов поглощения и испускания, вычисленные из общих выражений для этих величин, совпадают с найденными при решении задачи о встречных потоках из уравнений баланса среднего числа частиц (10.12).

О комплексном потенциальном поле см. в третьей главе книги, где обсуждается интегральный метод эффективного поля в квантовой механике.

§ 11. Что могут функции Грина?

*Не поиграть ли нам в зорелки или камешки?
Не хочешь ли рыбку накормить или на качелях
покачаться? Или уж не спеть ли тебе чего?*

А. К. Толстой

Попытаемся кратко резюмировать круг «обязанностей» ФГ.

1. Интегральные уравнения для рассеяния, связанных состояний, квазиуровней и состояний отражения строятся на основе соответствующих функций Грина невозмущенной задачи. Здесь ФГ выполняют свое прямое математическое назначение — позволяют находить частные решения неоднородных дифференциальных уравнений. При этом ФГ входят множителем в ядро интегрального уравнения (другим множителем является возмущающее поле).

2. На основе предельных значений резольвенты $R_{\pm}(E) \equiv R(E \pm i0)$ можно получить энергетическую плотность состояний системы:

$$\nu(E) = \pm \pi^{-1} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} \hat{R}_{\pm}(E) = (2\pi i)^{-1} \operatorname{Sp} [\hat{R}_{+}(E) - \hat{R}_{-}(E)]. \quad (11.1)$$

3. Энергетические особенности функции Грина в дискретном спектре (полюсы) дают возможность найти волновые функции связанных стационарных состояний.

4. С помощью определителя Фредгольма D можно найти изменение энергетической плотности состояний по формуле следов для резольвенты:

$$\Delta \nu(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} [\hat{R}_{+}(E) - \hat{R}_{+}^0(E)] = -\pi^{-1} \operatorname{Im} (D_{+}^{-1} dD_{+}/dE).$$

5. Уравнение дайсоновского типа позволяет вычислять функции Грина $\hat{R}$ более сложных систем, зная ФГ R^0 более простых: $\hat{R} = \hat{R}^0 - \hat{R}^0 \hat{H}_1 \hat{R}$. В случае фредгольмовских ядер символическое решение такого уравнения можно представить с помощью опре-

делителя и минора $\hat{D}$ Фредгольма $\hat{R} = \hat{R}^0 - \hat{D}\hat{R}^0/D$. Наиболее простой явный вид такого решения получается в случае предельно короткодействующего поля $\hat{H}_1 = u\delta(\hat{x} - x_0)$:

$$R(x, x') = R^0(x, x') - uR^0(x, x_0)R^0(x_0, x')/[1 + uR^0(x_0, x_0)]$$

(или для аналогичной модели с сепарабельным мультипликативным ядром, а также приближенно для слабого локального поля).

Другим примером может служить построение ФГ для плоскостных сред по найденным ФГ для одномерной ветви движения сквозь слои согласно формуле (7.8). В прил. 1 сведены образцы некоторых простых («затравочных») функций Грина. Это позволяет непосредственно проиллюстрировать их применение и физический смысл на конкретных простых примерах движения частиц и записать справочными данными для дальнейшего продвижения в изучении более сложных систем, имея под рукой готовые элементарные функции Грина.

6. Даже такого краткого перечня применений достаточно, чтобы убедиться в весьма широком диапазоне задач, решаемых с помощью функций Грина, являющихся, с одной стороны, вспомогательными математическими величинами, а с другой стороны, кладовыми различных физических сведений о системе и ее взаимодействиях.

Добавим, что часто проще непосредственно решить какой-либо отдельный вопрос о свойствах системы, чем вычислять ФГ и с ее помощью затем уже («выжимая каплю» информации из того моря, которое таит в себе ФГ) получать интересующий ответ. Например, проще прямо найти плотность состояний, зная структуру уровней энергии, чем искать соответствующую ФГ на основе полного решения задачи о стационарных состояниях, т. е. дополнительно привлекая волновые функции стационарных состояний (или находя ФГ с помощью каких-то других методов), а затем уже вычислять плотность состояний, скажем, по формуле (11.1). Однако, когда речь заходит о совокупности свойств системы как самой по себе, так и особенно в процессах взаимодействия с окружением, роль ФГ, кажется, нельзя переоценить.

Как губка, ФГ впитывает в себя обилие данных о системе и ее разнообразных проявлениях, и нужно только суметь извлечь необходимые физические сведения из этого первоначально кажущегося чисто математическим объектом.

7. Говоря об обобщениях ФГ, отметим прежде всего полевые функции Грина [82, 74, 75], получаемые на основе метода вторичного квантования (так называемые одно-, двухчастичные и т. д.), а также ФГ квантовой кинетики (двухвременные и пр. [53, 94]). Методы квантовой теории поля как специфические, так и развившиеся из квантовомеханических, оказавшиеся весьма эффективными в квантовой статистике и кинетике, в последнее время «возвращаются» и широко проникают в традиционные разделы собственно квантовой механики.

8. Любопытно, что сама по себе функция Грина удовлетворяет уравнению, которое можно трактовать как уравнение Шредингера некоторой расширенной за счет введения специального δ -поля системы. Этот вопрос, видимо, заслуживает более пристального внимания, так что рассмотрим его подробнее.

Непосредственный физический смысл функций Грина. Начнем с одномерного движения частицы. ФГ $R(x, x'; E)$ как функция аргумента x удовлетворяет неоднородному уравнению

$$(\hat{H} - E) R(x, x'; E) = \delta(x - x').$$

Главным для дальнейшего является следующий прием: записывая это уравнение в форме однородного

$$\{\hat{H} - [R(x', x'; E)]^{-1} \delta(x - x') - E\} R(x, x'; E) = 0,$$

замечаем, что $R(x, x'; E)$ играет роль волновой функции $\Psi(x)$ стационарного состояния системы в дополнительном поле $U_3(x) = -R^{-1}(x', x'; E) \delta(x - x')$, сосредоточенном вблизи точки x' . Интересные следствия такой постановки вопроса рассмотрим на конкретных примерах свободного движения частицы с обычным законом дисперсии. В области положительных значений энергии $E > 0$, учитывая, что в соответствии с формулой (7.10) $R_+(x, x; E) = im/\hbar^2 k$, приходим к следующему выводу: эффективное дополнительное поле нулевого радиуса действия $U_3(x) = u \delta(x - x')$ имеет чисто мнимую интенсивность $u = i\hbar^2 k/m$ с положительной мнимой частью, что соответствует источнику частиц. Далее, интенсивность сама зависит от энергии, увеличиваясь с ее ростом, — «подстраивается» под энергию. Таким образом, эффективный потенциал зависит от полной энергии системы. Волновая функция, роль которой играет ФГ, описывает чисто расходящиеся волны, что вытекает из явного выражения $R_+(x, x') = (im/\hbar^2 k) \exp(ik|x - x'|)$. На первый взгляд, это странное стационарное состояние, однако происхождение его выясняется, если рассмотреть задачу рассеяния частиц полем испускания (см. § 10, в котором обсуждается вопрос о встречных потоках

и резонансных явлениях), т. е. узнать, что происходит при стремлении энергии к значению $E = m|u|^2/2\hbar^2$.

Таким образом, мы имеем дело с двумя ситуациями. Прямая задача: задано поле с чисто мнимой интенсивностью $U_\delta(x) = i|u|\delta(x-x')$. Искажение падающих волн описывается величиной $R_+(x, x'; E)$, а вблизи энергий $E = m|u|^2/2\hbar^2$ наступает резонанс — при приближении энергии частиц к этому значению источник частиц начинает «перекрывать» внешний эмиттер и основной эффект сводится к испусканию частиц этим точечным источн. ком. Интенсивность поля фиксируется, а изменяется энергия налетающих частиц.

Обратная задача: фиксируем энергию частиц, подбирая соответствующую резонансную интенсивность точечного поля испускания, — эта автоматическая «настройка» выполняется самим уравнением для ФГ, описывающим резонансное явление чистого испускания частиц.

Аналогичная картина возникает и в случае функции Грина типа $R_-(x, x'; E)$, когда появляются резонансные состояния чистого поглощения (см. § 10 о встречных потоках). Кроме ФГ типа $R_\pm$, есть и другие функции Грина в области положительных энергий для свободного движения частицы (в частности, описывающие стоячие волны), которые представляют меньший интерес.

Наконец, обратимся к области отрицательных энергий $E \equiv -\hbar^2\kappa^2/2m$, где в соответствии с $R(x, x; E) = m/\hbar^2\kappa$ эффективное поле имеет вид δ -образной ямы: $U_\delta(x) = -(\hbar^2\kappa/m)\delta(x-x')$. Функция Грина сводится в таком случае к волновой функции единственного связанного состояния (с точностью до множителя, определяемого нормировкой), а энергия связи и интенсивность поля связаны соотношением $E = -m u^2/2\hbar^2$, как и должно быть в этом поле (см. § 7). Кстати, тем самым получаем еще один способ решения задачи о связанных состояниях в δ -образной яме на основании ФГ для свободного движения.

Вновь можно подойти к вопросу с двух сторон. Если задать поле $U(x) = -i u \delta(x-x')$; $u > 0$, то среди отрицательных значений энергии есть только одно, отвечающее связанному стационарному состоянию: $E = -m u^2/2\hbar^2$, а волновая функция пропорциональна $R(x, x'; E)$. С другой стороны, для каждого значения $E < 0$ можно указать такое эффективное поле (δ -яму), для которого данной энергии соответствует как раз дискретный уровень. Это поле имеет интенсивность $u = \hbar^2\kappa/m$. Именно такой «подбор» и осуществляет уравнение для функции Грина в диапазоне отрицательных значений энергии.

Рассмотренных примеров, по-видимому, достаточно для иллюстрации того, какие физические явления непосредственно описы-

ваются функциями Грина в роли волновых функций стационарных состояний. Во всех случаях это есть некоторое особое движение при добавочном δ -образном поле с интенсивностью, явно зависящей от энергии и, вообще говоря, комплексной. Так, в случае свободного движения частицы в полупространстве для $E > 0$ имеем в соответствии с выражением (7.10):

$$R_+(x', x'; E) = (im/\hbar^2 k) [1 - \exp(2ikx')];$$

$$U_s(x) = i\hbar^2 km^{-1} [1 - \exp(2ikx')]^{-1} \delta(x - x').$$

Еще раз хотелось бы подчеркнуть, что постановка вопроса о непосредственном физическом смысле функций Грина наталкивает на ряд интересных следствий.

Во-первых, удается указать такие физические условия, для которых ФГ является волновой функцией стационарной задачи (не помогает в качестве вспомогательной величины получить решение, как обычно, а сама выступает в роли волновой функции): $\Psi_E(x) \sim R(x, x'; E)$.

Во-вторых, возникающие физические ситуации оказываются весьма любопытными, часто необычными для стационарных состояний. Особенно это относится к инфинитным и полуфинитным движениям.

В-третьих, всегда имеем дело с точечным добавочным потенциальным полем — предельно короткодействующим и сосредоточенным вблизи x' . Несколько неожиданное появление такой, казалось бы, искусственной математической модели при стремлении придать физический смысл функциям Грина.

В-четвертых, дополнительное δ -поле оказывается, вообще говоря, комплексным, что само по себе не менее интересно, чем его δ -образный характер. Например, свободные $\text{ФГ } R_{\pm}(x, x'; E)$ при $E > 0$ описывают движение в чисто мнимом поле. Величины $R_{\pm}$, являясь «функциями источника», как иногда называют ФГ, действительно оказываются таковыми не только формально из-за сосредоточения поля, но и в чисто физическом смысле — по отношению к испусканию и поглощению частиц. Как видим, комплексные поля (и с ними неэрмитовы операторы) появляются сами по себе, а не вводятся феноменологически. Они органично присущи функциям Грина, явно вводя «внутренние» источники и поглотители частиц в квантовомеханическое описание явлений распространения частиц.

В-пятых, привлекает внимание самосогласованный характер эффективного поля, интенсивность которого сама зависит

от энергии того состояния, которое описывается ФГ. Это тоже интересная неожиданная реализация подобной модели самосогласованного поля (в данном случае в одночастичной постановке задачи).

В-шестых, отмеченные особенности непосредственного смысла ФГ касаются только тех случаев, когда диагональные элементы резольвенты $R(r, r; E)$ оказываются конечными. Этот негативный результат, однако, с новой стороны освещает ту особенность δ -поля, что оно далеко не всегда применимо: например, невозможность указанной трактовки ФГ в трехмерном случае (с обычным законом дисперсии) из-за расходимости $R(r, r; E)$ свидетельствует о невозможности δ -модели в таком случае. Модель поля в виде δ -функции применима тогда, когда ФГ при совпадающих аргументах оказывается конечной величиной. Это также поучительный побочный результат обсуждаемой постановки вопроса.

В-седьмых, даже самая простая иллюстрация для ФГ свободного движения частицы с обычным законом дисперсии дает, как мы уже убедились, богатую своеобразными результатами картину. В более сложных системах основные черты сохраняются и возникают новые (например, при наличии области энергий с полуфинитным движением).

В-восьмых, рассмотренный вопрос о непосредственном физическом смысле ФГ как волновых функций стационарных состояний касается, так сказать, «внутренних» свойств ФГ. Другие черты этих величин вскрываются в тех задачах, где ФГ играют вспомогательную роль в качестве инструмента решения задач в духе теории возмущений (однако не малых, существенно перестраивающих картину движения), т. е. собственно в методе ФГ. Как видим, побочные вопросы могут оказаться не менее полезными, чем главные. К числу других внутренних свойств ФГ можно отнести также возможность получения плотности состояний и пр.

Таким образом, обсуждаемый вопрос содержит многообразие тесно переплетающихся явлений и свойств, уходящих далеко за пределы самого метода ФГ и интегральных уравнений, еще раз подтверждая, что незначительное «углубление» проблемы даже в побочном направлении может открыть много нового и неожиданного. Возникает разветвленная сеть представлений, получающих живительные «соки» от различных слоев физического описания. Напрашивается образ ФГ как некоего дерева, используемого обычно в прямом назначении как древесина, но содержащего более глубокие образования и связи — корни, крону, эстетическую притягательность и пр., —

охватывающие куда более широкую область. Они не видны непосредственно в явной аналитической записи ФГ, но их можно разглядеть, вскрывая смысловые пласты глубокого залегания.

§ 12. Заключительные замечания о критических и резонансных явлениях

Метод, которым мы будем пользоваться при решении этой... задачи, применим и для других проблем подобного же вида.

Р. Фейнман

1. Основное внимание уделено физическому смыслу рассматриваемых явлений и приложениям обсуждаемых интегральных методов (резольвента — функции Грина — интегральные уравнения для связанных стационарных состояний — интегральные преобразования). В связи с этим расчетная часть изложения сокращена в некоторых случаях до иллюстраций на простых примерах моделей поля δ -образных потенциалов, скачков и т. п. Обобщение на более сложные профили полей обычно не составляет труда и за неимением места часто опускается, хотя и выполняется именно с помощью центрального для данного раздела книги метода интегральных уравнений. Упомянутая цепочка методов, используемых в данном разделе, ярко демонстрирует тесную связь рассматриваемых в книге вопросов (ту сторону понятия «интегрального», которая отвечает объединению).

2. Рассмотрена операторная формулировка задачи о локальных связанных состояниях (в системах, где есть непрерывная часть энергетического спектра) — метод резольвенты гамильтониана и ее матричные элементы, являющиеся функциями Грина соответствующих уравнений. Имеются конкретные примеры этих функций для частиц с различными законами дисперсии в случае разных граничных условий, для некоторых локальных и нелокальных полей, в пространствах с разным числом измерений (некоторые примеры таких функций собраны в прил. 1).

3. На основе резольвентно-гриновского подхода строятся интегральные уравнения, соответствующие дифференциальному уравнению Шредингера для связанных стационарных состояний в координатном представлении. Обсуждаются некоторые основные сведения из теории интегральных уравнений и намечаются пути решения встречающихся уравнений. Отмечается связь физической стороны задачи об отыскании собственных значений энергии и собственных волновых функций связанных стационарных состояний и математической стороны — получения собственных значений и собственных функций интегрального уравнения.

4. Обсуждается проблема существования локальных связанных состояний в самой общей постановке и намечаются пути ее решения, конкретные приложения получаемых результатов.

5. Сформулирован критерий существования локальных связанных состояний в терминах энергетической плотности состояний, в частности на языке степенных законов дисперсии для различных размерностей пространства.

6. Исследуются критические параметры локальных связанных состояний, особенно в полях типа «полостей» в трехмерном движении.

7. Изучено влияние одной среды на связанные состояния в другой на

некоторых конкретных примерах и моделях и сформулированы способы решения аналогичных более общих задач.

8. Особое внимание уделено слабосвязанным состояниям, зависимости энергии связи от параметров поля и внешних условий.

9. Проанализирована взаимозависимость явлений формирования локальных состояний с малой энергией связи и прохождения частиц сквозь плоскостные среды (реальные и виртуальные резонансы, квазиуровни и т. п.), для чего также использована интегральная форма уравнений движения в стационарных состояниях для непрерывного спектра энергий.

10. Можно отметить следующие связи вопросов, рассмотренных в данной части, с другими методами, обсуждаемыми в книге.

Использование резольвенты, а также полной функции Грина и сепарабельное приближение характерны и для нефункционального подхода в первой части книги. Аномалии координатно-импульсных неопределенностей в локальных слабосвязанных состояниях непосредственно затрагивают вопросы соотношения неопределенностей. Сравнение метода интегральных уравнений в проблеме связанных состояний с другими способами получения искомых результатов касается прежде всего метода матрицы связи локальных решений. Применение δ -аппроксимации, связь вопроса о локальных связанных состояниях с зонными проблемами — сочетание метода интегральных уравнений и метода эффективного поля (модели локальных и нелокальных полей, граничные условия и т. д.). Резольвента, формула следов, поведение плотности состояний для локальных полей — все эти вопросы непосредственно относятся к методу плотности состояний.

Таким образом, еще раз подтверждается многообразие сторон метода интегральных уравнений, его центральное положение в книге, обоснованность ее названия, содержащего как прямой смысл (интегральные уравнения), так и обобщенный, переносный (взаимосвязанные методы). Другие черты названия, как уже подчеркивалось, воплощаются в других методах, рассматриваемых в книге.

Заметим, что рассмотренные интегральные методы относятся как к формулировке интегрального уравнения для волновых функций связанных стационарных состояний, так и к построению аналогичных уравнений (часто чисто символически записываемых, операторных, относящихся к нефункциональному подходу) для полной функции Грина рассматриваемых систем, с помощью которых затем можно получать и детальные сведения о состоянии квантовой системы (волновые функции и уровни энергии), и интегральные характеристики движения типа энергетической плотности состояний. В этом втором подходе получаем фактически пересечение с нефункциональными методами в первой главе, используемыми там главным образом для исследования движения в квазиклассических условиях. Подобное же пересечение (хотя и в менее существенных вопросах) представляют собой те взаимосвязи, которые отмечены выше по отношению к другим интегральным методам.

СПЕЦИАЛЬНЫЕ НЕЛОКАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Идея, примененная однажды, порождает искусственный прием, примененная дважды, она становится методом.

Г. Поля, Г. Сеге

§ 13. Соотношение неопределенностей и его обобщения

Недостаток определенности, обычно описываемый с помощью соотношения неопределенностей, с лихвой перекрывается более глубоким описанием мира атомов и протекающих в нем явлений, которое дает нам квантовая механика.

В. Вайскопф

К числу типичных интегральных методов «нефункционального» вида можно отнести способ описания общих закономерностей движения на основе соотношения неопределенностей. Дело в том, что оно имеет универсальную форму и характеризует движение в целом, а в наиболее важных случаях канонически сопряженных величин вообще не связано с конкретной волновой функцией, с конкретным видом состояния. Не останавливаясь на известных свойствах этого соотношения, рассмотрим прежде всего некоторые обобщения.

Обобщенное соотношение неопределенностей. В обычном соотношении неопределенностей квантовой механики (см., например, [1, 2]) содержатся величины с некоммутирующими операторами в некотором чистом состоянии и в один и тот же момент времени. Можно получить более полную информацию о неопределенностях двух величин, относя их к различным моментам времени и учитывая корреляцию этих величин в смешанных состояниях.

Введем скалярное произведение операторов по правилу

$$(\hat{F}, \hat{G}) \equiv \text{Sp}(\hat{\rho}\hat{F}^+\hat{G}) = \langle \hat{F}^+\hat{G} \rangle.$$

Тогда на основании неравенства Шварца $(\hat{F}, \hat{F})(\hat{G}, \hat{G}) \geq |(\hat{F}, \hat{G})|^2$, полагая $\hat{F} = \hat{f}(t_1) - \langle f(t_1) \rangle$ и $\hat{G} = \hat{g}(t_2) - \langle g(t_2) \rangle$, где операторы физических величин $\hat{f}(t_1)$, $\hat{g}(t_2)$ и статистический оператор $\hat{\rho}$ относятся к гейзенберговскому представлению, по-

лучаем после разделения ($\hat{F}$, $\hat{G}$) на вещественную (антикоммутирующую) и мнимую (коммутирующую) части:

$$D_{ff}(t_1, t_1) D_{gg}(t_2, t_2) \geq D_{fg}^2(t_1, t_2) + (\hbar^2/4) \varphi_{fg}^2(t_1, t_2). \quad (13.1)$$

В левой части этого неравенства находится произведение дисперсий рассматриваемых величин. Стоящие в правой части неравенства величины также имеют простой смысл: функция корреляции флуктуаций $D_{fg}(t_1, t_2) = \langle \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} \rangle / 2$ является центральным корреляционным моментом второго порядка для величин f и g , а функция $\varphi_{fg}(t_1, t_2) = \langle \{f(t_1), g(t_2)\} \rangle$ определяет в квантовой теории необратимых процессов [53] линейную реакцию величины f в момент времени t_1 под действием единичного импульса обобщенной силы в момент t_2 при обобщенной координате g (ее называют функцией последствия). Напоминаем, что для квантовых скобок Пуассона используется обозначение

$$\{f, g\} \equiv i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})/\hbar.$$

Из неравенства (13.1) вытекает искомое соотношение для среднеквадратичных отклонений (неопределенностей) рассматриваемых величин

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq \sqrt{D_{fg}^2(t_1, t_2) + \hbar^2 \varphi_{fg}^2(t_1, t_2)/4}, \quad (13.2)$$

которое будем называть обобщенным соотношением неопределенностей.

Приведем некоторые примеры и рассмотрим частные случаи обобщенного СН.

а) Для совпадающих моментов времени $t_1 = t_2 \equiv t$ имеем

$$\Delta f \Delta g \geq \sqrt{D_{fg}^2 + \hbar^2 \langle \{f, g\} \rangle^2 / 4}, \quad (13.3)$$

где общий для величин временной аргумент t явно не выписан. Произведение неопределенностей определяется не только некоммутируемостью величин, отражающей их физическую несовместимость (что характерно для обычных СН), но и их корреляцией, статистической взаимосвязью.

В частности, для импульса p и соответствующей ему координаты x (вообще для двух канонически сопряженных величин)

$$\Delta p \Delta x \geq \sqrt{D_{px}^2 + \hbar^2/4}.$$

Для коммутирующих величин (например, для энергии и интеграла движения) или для величин в состояниях с $\langle \{f, g\} \rangle = 0$

(скажем, для проекций момента M_x и M_y в состояниях с $\langle M_z \rangle = 0$) соотношение неопределенностей содержит только корреляцию:

$$\Delta f \Delta g \geq |D_{fg}|. \quad (13.4)$$

Для спиновых величин, пропорциональных матрицам Паули σ , обобщенное соотношение неопределенностей имеет вид

$$\Delta \sigma_x \Delta \sigma_y \geq \sqrt{\langle \sigma_x \rangle^2 \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2}.$$

Отметим также, что знак равенства в формуле (13.3) соответствует чистому состоянию с вектором ψ , удовлетворяющим уравнению $D_{gg}(\hat{f} - \langle f \rangle)\psi = (D_{fg} + i\hbar\varphi_{fg}/2)(\hat{g} - \langle g \rangle)\psi$. В частности, для импульса и координаты это есть состояние в виде гауссова пакета в координатном шредингеровском представлении с перемещением средней точки $\langle x \rangle$ со скоростью $\langle p \rangle/m$ и корреляцией $D_{px} = (m/2)dD_{xx}/dt$:

$$\psi(x, t) = (2\pi D_{xx})^{-1/4} \exp \left[\frac{i}{\hbar} x \langle p \rangle + \left(\frac{iD_{px}}{2\hbar D_{xx}} - \frac{1}{4D_{xx}} \right) (x - \langle x \rangle)^2 \right].$$

При $D_{px} = 0$ получаем хорошо известный минимизирующий произведение неопределенностей $\Delta p \Delta x$ пакет, отвечающий, например, когерентным состояниям осциллятора.

б) Если в правой части неравенства (13.2) отбросить неотрицательную величину D_{fg}^2 , то приходим к соотношению

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq \hbar |\varphi_{fg}(t_1, t_2)|/2,$$

которое для чистого состояния и при совпадающих временных аргументах $t_1 = t_2$ переходит в обычное соотношение неопределенностей $\Delta f \Delta g \geq \hbar |\langle \{\hat{f}, \hat{g}\} \rangle|/2$, описываемое во всех книгах по квантовой механике.

в) При отбрасывании в (13.2) члена с функцией последствия φ_{fg} , а также в классическом пределе

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq |D_{fg}(t_1, t_2)|. \quad (13.5)$$

г) Неопределенности одной и той же величины в разные моменты времени связаны соотношением, содержащим функцию автокорреляции D_{ff} :

$$\Delta f(t_1) \Delta f(t_2) \geq \sqrt{D_{ff}^2(t_1, t_2) + \hbar^2 \varphi_{ff}^2(t_1, t_2)/4}.$$

д) В стационарных смешанных состояниях функции корреляции и последствия зависят от разности временных аргументов. В частности, в состоянии термодинамического равнове-

сия фурье-образы этих функций по переменной $t_1 - t_2$ непосредственно связаны между собой: $D_{fg}(\omega) = (\hbar/2i) \varphi_{fg}(\omega) \operatorname{cth}(\hbar\omega/2T)$, что является одной из форм флуктуационно-диссипационной теоремы в квантовой кинетике [53].

Подчеркнем некоторые особенности полученных результатов.

Во-первых, новым является учет корреляции в соотношении неопределенностей, а также тот факт, что величины берутся в разные моменты времени.

Во-вторых, вывод обобщенного СН является чисто «нефункциональным»: используются самые общие свойства операторных инвариантов, через которые выражены интересующие нас физические величины.

В-третьих, наличие корреляции в СН само по себе представляет принципиальный интерес, так как вскрывает причины возникновения взаимной связи неопределенностей: наряду с обычно подчеркиваемой чисто квантовой причиной — физической несовместимостью, существует и другой источник — корреляция.

В-четвертых, учет корреляции позволяет сформулировать соотношение неопределенностей даже для коммутирующих величин (13.4).

В-пятых, мы подчеркиваем, что это есть соотношение для Δf и Δg , однако для практических целей может оказаться полезной оценка не для неопределенностей, а для корреляции.

В-шестых, принятие во внимание корреляции и разновременного характера величин в смешанных состояниях позволяет выйти за рамки механики: получаем соотношение, которое в корреляционном анализе позволяет оценивать матрицу корреляции $D_{fg}(t_1, t_2)$. В этом случае появляется дополнительно к известной оценке корреляции по автокорреляциям отдельных величин (дисперсиям) чисто квантовый член с функцией последействия: из (13.1) вытекает неравенство

$$D_{fg}^2(t_1, t_2) \leq D_{ff}(t_1, t_1) D_{gg}(t_2, t_2) - \hbar^2 \varphi_{fg}^2(t_1, t_2)/4.$$

В кинетических задачах мы имеем возможность получить аналогичную оценку для функции последействия $\varphi_{fg}(t_1, t_2)$.

В-седьмых, установить СН для разновременных величин удалось благодаря использованию представления Гейзенберга: хотя принципиально все представления эквивалентны, однако на практике есть много случаев, когда в рамках шредингеровской картины временного описания невозможно непосредственно построить характеристику движения, например типа

$\langle A(t_1)B(t_2) \rangle$. Так, функции Грина в статистической физике построены из полевых операторов, отнесенных к разным моментам времени. Аналогично в кинетике рассматриваются ФГ, построенные на основе произведений операторов физических величин, взятых в разные моменты времени.

В-осьмых, нельзя не отметить и такого принципиального момента: всегда полезно увидеть интересующее нас соотношение в качестве частного случая более общих закономерностей, чтобы лучше понять его место, смысл, происхождение.

Рассматриваемому обобщению СН посвящена работа [139]. См. также [21].

О первых работах по СН пишет Ельяшевич в статье о становлении квантовой механики [142] (в том же номере УФН есть перевод работы Гейзенберга, в которой были впервые установлены СН для координаты и импульса). О первых шагах разработки теории СН см. также [88, 90].

История развития квантовой механики знает периоды резкого подъема интереса к соотношению неопределенностей. Так, после работ Мандельштама и Тамма [89, т. 1] и Крылова и Фока [141] возникло новое направление — вскрыта специфика СН для энергии и времени (с ним связана общая теория распада квазистационарных состояний). Современное состояние проблемы обсуждается в монографии Малкина и Манько [38]. Недавно вскрыта особенность СН для момента и угла [2, 4].

Аномалии координатно-импульсных неопределенностей. Соотношение неопределенностей Гейзенберга для импульса и координаты $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ является неравенством и служит (не говоря о фундаментальной теоретической роли [1, 2, 44, 60]) для оценок квантостатистических флуктуаций координат и импульсов, а также входит в более общие расчетные неравенства, например при нахождении энергии нелинейных нулевых колебаний [21]. Оно устанавливает нижнюю границу произведения неопределенностей, наименьшее принципиально возможное значение этой величины, но не дает представления о ее фактических значениях для данной конкретной системы в заданном состоянии.

Часто соотношение неопределенностей используют для оценок по порядку величины, полагая $\Delta p \Delta x \sim \hbar$ (13.6). Однако существуют состояния, в которых такая оценка оказывается неверной (существенно заниженной). При этом аномально большие значения произведения неопределенностей могут соответствовать как чисто квантовому случаю (будем говорить о квантовых аномалиях), так и классическому (классические аномалии).

Чисто квантовое явление аномального возрастания произведения неопределенностей $\Delta p \Delta x$ возникает в случае движения частицы в стационарных состояниях с малой энергией связи $|E|$. В одномерном поле притяжения это относится только к возбужденным состояниям (об основном состоянии см. далее), однако при наличии области отталкивания или в других случаях нелокальных полей, как уже отмечалось, энергия связи может быть как угодно малой в критической ситуации. Волновая функция при этом слабо убывает за пределами поля: $\Psi(x) \sim \exp(-\kappa|x|)$, что приводит к большому значению неопределенности координаты $\Delta x \sim \kappa^{-1}$, $\hbar\kappa = \sqrt{2m|E|}$ (13.7) (по сравнению с размерами поля $a \ll \Delta x$ при $\kappa a \ll 1$).

Неопределенность импульса непосредственно связана со средним значением кинетической энергии: $(\Delta p)^2 = 2m\langle T \rangle$, поскольку в связанных стационарных состояниях $\langle p \rangle = 0$. В свою очередь, согласно параметрическому варьированию энергии $\langle T \rangle = -m dE/dm$. Таким образом, $(\Delta p)^2 = 2mE + 2\hbar^2 m \kappa d\kappa/dm$. В одномерном слабом поле притяжения, когда существует единственное связанное состояние с $\kappa = -(m/\hbar^2) \int dx U(x)$, получаем $\Delta p \sim \kappa$, а произведение неопределенностей (вычислительные детали опускаем) $\Delta p \Delta x = \sqrt{2}\hbar/2$ укладывается в рамки привычной оценки (13.6). Значительное увеличение неопределенности координат по сравнению с размерами поля (13.7) полностью компенсируется уменьшением неопределенности импульса. Хотя энергия связи достаточно мала (квадратична по U), но она не может стать сколь угодно малой. Аналогично для случая скомпенсированного локализованного поля с $\int dx U(x) = 0$, как можно показать, $\Delta p \Delta x = \sqrt{6}\hbar/2$. Однако в критических условиях вытеснения связанного состояния (см. § 9) $\Delta p \sim \kappa^{1/2}$ при $\kappa \rightarrow 0$, так что $\Delta p \Delta x \sim \kappa^{-1/2} \rightarrow \infty$. Такое аномальное возрастание произведения неопределенностей характерно и для появления возбужденных состояний. Анализ дает следующий порядок роста произведения неопределенностей в зависимости от энергии связи для всех критических ситуаций: $\Delta p \Delta x = A \cdot (U_0/|E|)^{1/4} \hbar/2$, где U_0 — характерная глубина потенциала, а коэффициент $A \geq 1$.

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

по сравнению с уменьшением Δp , поскольку $(\Delta x)^2 \sim 1/|E|$, а $(\Delta p)^2 \sim \langle T \rangle \sim |\langle U \rangle| \sim \sqrt{|E|}$.

Возможность классических аномалий проиллюстрируем на примере одномерных ветвей движения в стационарных состояниях с большим возбуждением. Здесь большая величина произведения неопределенностей вызывается увеличением каждой из них в соответствии с классическим законом: средние значения для стационарных состояний в классическом пределе, т. е. для достаточно больших энергий, переходят в средние по классическому периоду колебаний (см. § 3), так что $\Delta p \Delta x \approx \Delta p_{\text{кл}} \Delta x_{\text{кл}} \gg \hbar$. При этом неопределенности по порядку величины совпадают с классическими амплитудами колебаний (по координате и по импульсу). Для однопараметрических потенциальных моделей из соображений размерности и с учетом того обстоятельства, что в квазиклассические правила квантования (2.1) входит величина $\hbar n$, заключаем, что для $n \gg 1$ это произведение становится аномально большим: $\Delta p \Delta x \sim n \hbar \gg \hbar$. Например, при всех значениях энергии для гармонического осциллятора имеем точное выражение: $\Delta p \Delta x = (n + 1/2) \hbar$.

Помимо рассмотренных аномальных случаев в стационарных состояниях отметим увеличение произведения неопределенностей при расплывании пакетов стационарных состояний в свободном движении частицы. При этом неопределенность координаты для больших t растет линейно [44]: $\Delta x_t = \Delta p_0 t / m$; $\Delta p_t = \Delta p_0$, так что в случае $\Delta p_0 \Delta x_0 \sim \hbar$ получаем $\Delta p_t \Delta x_t = \hbar t / \tau$, где $\tau \sim m (\Delta x_0)^2 \hbar$ характеризует время расплывания пакета. Та же закономерность относится и к движению в однородном переменном силовом поле.

Другие примеры и более подробное обсуждение вопроса об аномалиях координатно-импульсных неопределенностей см. в [21, 140].

§ 14. Метод энергетической плотности состояний

Первый вопрос, который возникает при попытке построить квантовую теорию конденсированной системы, — это вопрос о структуре энергетического спектра такой системы.

И. М. Лифшиц

Энергетическая плотность состояний описывает структуру спектра энергии в целом, учитывая как густоту уровней, так и кратность вырождения каждого. Принадлежит к числу интегральных характеристик движения. Для ее получения нет нуж-

ды решать уравнение Шредингера, т. е. можно обойтись без волновой функции. Другими словами, этот метод лежит в русле «нефункционального» подхода. Частично с ним мы уже познакомились в первой главе книги, когда речь шла об обратной задаче — найти уровни энергии системы, если известно выражение для числа состояний. Сейчас мы рассмотрим некоторые особенности этой величины (плотности состояний $\nu(E)$) в ее прямом назначении.

Прежде всего отметим связь плотности состояний с резольвентой гамильтониана (функциями Грина и определителем Фредгольма). Хорошо известна формула, выражающая плотность состояний через резольвенту:

$$\nu(E) = \pi^{-1} \text{Im Sp } \hat{R}_+(E) = (2\pi i)^{-1} \text{Sp} [\hat{R}_+(E) - \hat{R}_-(E)]. \quad (14.1)$$

Эти соотношения вытекают из записи матрицы резольвенты в энергетическом представлении, где она диагональна (полный набор квантовых чисел n), и формулы Дирака: $\langle n | \hat{R}_+(E) | n \rangle = 1/(E_n - E - i0) = P[1/(E_n - E)] + i\pi\delta(E_n - E)$, или в символической форме:

$$(\hat{H} - E - i0)^{-1} - (\hat{H} - E + i0)^{-1} = 2\pi i\delta(\hat{H} - E).$$

Другое важное соотношение — так называемая формула следов для резольвенты [106], которой можно придать вид

$$\text{Sp}(\hat{R} - \hat{R}^0) = -D^{-1}\partial D/\partial E, \quad (14.2)$$

выразив непосредственно через определитель Фредгольма D . Это есть не что иное как результат теории возмущений для следа резольвенты ($\hat{R}^0$ — невозмущенная резольвента). Формула следов получается, если решение уравнения Дайсона $\hat{R} = \hat{R}^0 - R^0 H_1 \hat{R}$ записать с помощью минора Фредгольма $\hat{D}$: $\hat{R} = \hat{R}^0 - D^{-1}\hat{D}\hat{R}^0$. Можно показать, что $\text{Sp}(\hat{D}\hat{R}^0) = \partial D/\partial E$. Это и дает соотношение (14.2). Для плотности состояний согласно (14.1) и (14.2) имеем

$$\Delta\nu(E) \equiv \nu(E) - \nu^0(E) = -\pi^{-1} \text{Im}(D_+^{-1}\partial D_+/\partial E). \quad (14.3)$$

Далее отметим, что объемная плотность состояний $\nu_3(E)$ для частицы, движущейся в плоскостной среде, пропорциональна числу состояний $\Gamma_1(E)$ для чисто одномерной ветви движения сквозь слои:

$$\nu_3(E) = (mS/2\pi\hbar^2)\Gamma_1(E), \quad (14.4)$$

где S — площадь слоев. В справедливости этого полезного соотношения нетрудно убедиться, обратившись к аналогичной связи функций Грина (7.8) и пользуясь формулой (14.1). В частности,

одночастичную плотность состояний для одномерного свободного движения получаем на основе ФГ (7.10): $R_+^0(x, x; E) = im/\hbar^2 k$; $\hbar k = \sqrt{2mE}$, $E > 0$, так что согласно формуле (14.1) без учета внутренних степеней свободы (спина) $\nu_1^0(E) = mL/\pi\hbar^2 k$; $E > 0$ (14.5), где L — нормировочная длина. Тогда $\Gamma_1^0(E) = Lk/\pi$; $E > 0$, а в соответствии с (14.4) $\nu_3^0(E) = (mV/2\pi^2\hbar^2)k$; $E > 0$ (14.6).

Смысл множителя в формуле (14.4) можно установить, рассмотрев двумерное движение, для которого соответствующая энергетическая плотность состояний постоянна: $\nu_2^0(E) = mS/2\pi\hbar^2$; $E > 0$ (14.7). Равенство (14.4) означает, что особенности одномерной плотности состояний будут сглажены за счет двумерной ветви движения вдоль слоев, т. е. войдут проинтегрированными, в виде числа состояний, в объемную плотность. Разумеется, элементарные формулы (14.5)–(14.7) проще получаются при прямом вычислении и здесь лишь служат иллюстрацией ν и ФГ.

Далее рассмотрим случай полуограниченного движения. Соответствующая одномерная ФГ (7.9) позволяет сразу же найти граничный вклад в плотность состояний: $R(x, x; z) - R^0(x, x; z) = -(im/\hbar^2 k) \exp(2ikx)$; $\hbar k = \sqrt{2mz}$, $\text{Im } k > 0$. Отсюда изменение плотности состояний по сравнению с неограниченным движением равно $\Delta\nu_1(E) = (4\pi)^{-1} \text{Im}(E + i0)^{-1} = -\delta(E)/4$.

Физический смысл такой добавки, описывающей «дефицит 1/4 состояния» при $E = 0$, указывает соотношение (14.4). Поскольку приращение числа состояний равно $\Delta\Gamma_1(E) = -1/4$, $E > 0$ (14.8), получаем поверхностный вклад в трехмерную плотность состояний $\Delta\nu_3(E) = -mS/8\pi\hbar^2$, т. е. $\nu_3(E) = \nu_3^0(E) [1 - \pi\hbar/4\sqrt{2mEL}]$. Этот результат согласуется с расчетами на основании других методов (см., например, [131], где учитывается также и размытие границы). Имеем чисто квантовый поверхностный эффект. Еще раз подчеркнем, что при его получении использован лишь явный вид свободной функции Грина и общие соотношения типа формулы (14.1). В связи с этим еще раз выведем формулу (14.8), на сей раз с помощью трехмерной ФГ (полупространство) $x > 0$: так как $R_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) - R_+^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = -(m/4\pi\hbar^2 x) \exp(2ikx)$, искомая добавка равна

$$\Delta\nu_3(E) = -(mS/4\pi^2\hbar^2) \int_0^\infty \sin(2kx) dx/x = -mS/8\pi\hbar^2.$$

Теперь перейдем к случаю локализованных полей (плоско-слоистые среды). Если имеется слабая область притяжения, то, рассматривая ее в качестве возмущения, приходим к простому

выражению для определителя Фредгольма (§ 8) в первом приближении:

$$D = 1 + \text{Sp}(\hat{R}^0 \hat{U}) = 1 - i\kappa_0/k; \quad n^2 \kappa_0 = -m \int dx U(x).$$

Отсюда после несложных преобразований на основе формулы следов в виде (14.3) находим изменение плотности состояний по сравнению со случаем свободного движения:

$$\Delta_\nu(E) = \delta(E + |E_0|) - \delta(E)/2 - \theta(E) \sqrt{|E_0|/E} / 2\pi (E + |E_0|).$$

Первое слагаемое появилось за счет всегда существующего связанного состояния (уровень энергии $E_0 = -|E_0|$). Второе слагаемое соответствует «потере» плотности состояний благодаря «затягиванию» одного состояния в область отрицательных энергий. Остальной дефицит состояний (третье слагаемое) приходится на область положительных значений энергии. Соответствующее выражение для добавки к числу состояний имеет вид

$$\Delta\Gamma(E) = 1, \quad -|E_0| < E < 0; \quad \Delta\Gamma(E) = \pi^{-1} \arctg \sqrt{|E_0|/E}, \quad E > 0.$$

Как видим, добавочные члены в числе и плотности состояний убывают с ростом энергии: вдали от полосы эффективного действия возмущения по энергиям порядка $|E_0|$ влияние «воронки» поля сглаживается, верхние слои энергии не деформируются, основная часть энергетического континуума остается в покое. В плоскостой среде согласно формуле (14.4) найденное изменение числа состояний дает вклады поверхностного типа.

Аналогичным образом можно найти изменение плотности состояний для области отталкивания в виде δ -барьера:

$$\Delta_\nu(E) = -\delta(E)/2 + \theta(E) \sqrt{|E_0|/E} / 2\pi (E + |E_0|).$$

Оно содержит «ущерб полусостояния» на границе континуума из-за вытесняющего действия барьера и плавную часть, описывающую некоторое уплотнение с $E > 0$. Для интегрального эффекта — изменения числа состояний — получаем формулу

$$\Delta\Gamma(E) = -1/2 + \pi^{-1} \arctg \sqrt{E/|E_0|}, \quad E > 0.$$

Это же выражение войдет и в плотность состояний плоскостойкой системы. При этом для $|E_0| \rightarrow \infty$ получаем поверхностный вклад $\Delta\Gamma(E) = -1/2$, $E > 0$, вдвое превышающий граничный результат (14.8). Дело в том, что непроницаемый δ -барьер фактически приводит к появлению двух границ (образуется «двусторонняя» поверхность). Так мы сталкиваемся с еще одним способом выявления поверхностного эффекта для непроницаемой границы.

Наконец, рассмотрим еще один пример особенностей энергетической плотности состояний — появление излома $\nu(E)$ в случае двух сред с плоской границей раздела.

Пусть движение частицы происходит в двух однородных средах. Первая среда характеризуется повышенным потенциалом $U(x < 0) = \Delta U$, а во второй среде он меньше: $U(x > 0) = 0$ (отсчет энергии ведется от значения поля во второй среде). Согласно

формуле (14.1) $\nu(E) = \pi^{-1} \text{Im} \int_{-L_1}^{L_2} dx R_+(x, x; E)$, так что, используя явный вид ФГ (П1.10), получаем в диапазоне энергий $0 < E < \Delta U$ плотность состояний $\nu(E) = mL_2/\pi\hbar^2 k$, $\hbar k = \sqrt{2mE}$ (14.9). Для энергий, превышающих скачок потенциала, имеем

$$\nu(E) = (m/\pi\hbar^2)(L_1/\xi + L_2/k), \quad \hbar\xi = \sqrt{2m(E - \Delta U)}, \quad (14.10)$$

где L_1 и L_2 — соответствующие нормировочные длины. Возникающей на стыке этих двух выражений особенности $\nu(E)$ можно дать следующую трактовку. Рассмотрим движение классической частицы в интервале шириной $L_1 + L_2$ и границами зеркального отражения в том же поле с уступом. При $0 < E < \Delta U$ время движения между правой стенкой и левой точкой поворота, т. е. период классических колебаний, равно $\tau_2 = 2L_2/v_2 = 2mL_2/\hbar k$. В соответствии с общим соотношением между плотностью состояний и периодом колебаний в одномерном движении получаем выражение (14.9): $\nu = \tau_2/h = mL_2/\pi\hbar^2 k$ (существующая квантовая поправка к классическому периоду колебаний приведет к поверхностным членам, которые нас в данном случае не интересуют). Если же энергия превышает скачок потенциала на границе двух сред, то появляются два участка движения, а период колебаний складывается из двух величин:

$$\tau = \tau_1 + \tau_2 = 2L_1/v_1 + 2L_2/v_2 = (2m/\hbar)(L_1/\xi + L_2/k),$$

что соответствует выражению (14.10).

Предельный переход $\Delta U \rightarrow 0$ приводит к плотности состояний неограниченного движения (единая среда размерами $L_1 + L_2$) $\nu(E) = m(L_1 + L_2)/\pi\hbar^2 k$. Если же скачок очень большой ($\Delta U \rightarrow \infty$), получаем плотность состояний для полупространства (14.9).

Чтобы найти объемные трехмерные величины, необходимо вычислить число состояний в одномерной картине. Из выражений (14.9) и (14.10) вытекает, что

$$\Delta\Gamma(E) = (\sqrt{2m}/\pi\hbar) L_2 \sqrt{E}, \quad 0 < E < \Delta U; \quad \Delta\Gamma(E) = \sqrt{2m}/\pi\hbar \times \\ \times (L_1 \sqrt{E - \Delta U} + L_2 \sqrt{E}), \quad E > \Delta U,$$

откуда трехмерная плотность состояний определяется согласно формуле (14.4). Таким образом, плотность состояний для частиц, движущихся в двух однородных средах с плоской границей раздела, обладает характерной особенностью — изломом, природа которого была установлена выше. Эта особенность должна сохраниться и в том случае, когда граница будет размытой.

Подчеркнем, что в отличие от предыдущих примеров, здесь речь идет не о поправках к трехмерной плотности состояний, а о самой объемной величине.

Посмотрим, каким образом ведет себя плотность состояний вблизи квазиуровней. Предварительно заметим, что для связанных состояний уровни энергии отвечают корням определителя Фредгольма. Это значит, что в окрестности собственного значения энергии E_0 можно записать для этого определителя разложение $D(E) \approx (E - E_0)D'(E_0)$. Тогда входящая в формулу следов (14.2) величина $-D'/D$ вблизи уровня энергии имеет вид $-1/(E - E_0)$, что приводит к добавке в энергетической плотности состояний

$$\Delta \nu(E) = -\pi^{-1} \operatorname{Im}(D'_+/D_+) = -\pi^{-1} \operatorname{Im}(E + i0 - E_0)^{-1} = \\ = \delta(E - E_0),$$

как и следовало ожидать (аналогично для кратного корня). В свою очередь для квазиуровня распада $E_0 - i\Gamma$, также служащего корнем определителя Фредгольма D_+ (см. § 10), имеем то же разложение, а конечная ширина уровня дает характерное распределение Коши — Лоренца: в окрестности квазиуровня $\nu(E) = -\pi^{-1} \operatorname{Im}(E - E_0 + i\Gamma)^{-1} = \pi^{-1} \Gamma / [(E - E_0)^2 + \Gamma^2]$.

Еще один пример явной зависимости плотности состояний от энергии связан с возможностью различных законов дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$ в пространствах разной размерности n . Плотность состояний при свободном движении в таких условиях можно записать в виде многомерного импульсного интеграла:

$$\nu(E) = V h^{-n} \int d\mathbf{p} \delta(E - \epsilon(\mathbf{p})).$$

Если $\epsilon(\mathbf{p})$ является однородной функцией импульсов порядка l (например, l -степенной изотропный закон дисперсии $\epsilon(\mathbf{p}) \sim |\mathbf{p}|^l$), то замена переменных интегрирования $\mathbf{p} = E^{1/l} \mathbf{q}$ приводит к выделению зависимости плотности состояний от энергии: $\nu(E) = E^{n/l-1} V h^{-n} \int d\mathbf{q} \delta[1 - \epsilon(\mathbf{q})]$. Таким образом, приходим к следующей формуле $\nu(E) = B E^{n/l-1}$ (14.11), где коэффициент B зависит от параметров движения, постоянной Планка и пропорционален объему V . Частные случаи для квадратичного закона дисперсии уже упоминались выше: в одномерном движении $\nu(E) \sim E^{-1/2}$,

для двух измерений $\nu(E) = \text{const}$, а три измерения характеризуются плотностью состояний $\nu(E) \sim E^{1/2}$.

До сих пор рассматривался вопрос о явном виде энергетической плотности состояний для конкретных примеров движения квазичастиц. Такой подход можно назвать «микроскопическим». При этом плотность состояний служит чувствительным индикатором квантовомеханических эффектов, в чем мы имели возможность убедиться неоднократно в этой книге. В последние годы «язык» плотности состояний, описание свойств систем в терминах плотности состояний получили широкое распространение. В частности, в этом отношении показателен пример теории неупорядоченных систем: отпала блоховская систематика состояний, но сохранилась характерная картина энергетической плотности состояний (см., например, [55]).

Существует и другая возможность — «полуфеноменологический» подход, когда рассматриваются свойства систем, зависящие только от плотности состояний, и она используется уже в качестве «входной» величины. Так, при изучении термодинамических свойств статистическая сумма непосредственно связана с энергетической плотностью состояний (всей системы), о чем уже упоминалось в первой части книги, а квантовая статистика идеальных газов целиком опирается на одночастичную плотность и число состояний. При этом появляется возможность изучать термодинамику квантовых идеальных газов в общей форме, для произвольного вида плотности состояний (или некоторого определенного класса, скажем степенного). Такой способ исследования позволяет единым образом охватить системы с различными законами дисперсии и внешними условиями, разной размерностью пространства. При этом могут обнаружиться весьма любопытные закономерности, ускользающие от внимания, когда рассматриваются свойства каждого конкретного случая в отдельности. Сравнительный анализ поведения разнообразных газов Ферми и Бозе может выявить новые черты. Еще большие возможности в этом отношении предоставляет парастатистика, позволяющая объединить газы фермионов и бозонов и рассматривать их как частные случаи парагаза [21, 73 126—128].

В связи с этим рассмотрим некоторые свойства бозе-газов со степенной энергетической плотностью состояний, аномальное поведение определенного класса ферми-газов (включающего обычный одномерный газ), а также некоторые специфические черты двумерных газов и объединительные возможности единого подхода к квантовым газам на базе парастатистики.

Фазовые переходы в бозе-газе при анизотропных законах дис-

персии. Изучение экситонных возбуждений в кристаллах привело к установлению любопытной особенности их энергетического спектра — разного рода объемных и поверхностных анизотропных законов дисперсии [79]. Например, при малых значениях импульса $\epsilon(\mathbf{p}) = \beta_1 p_1^2 + \beta_2 \sqrt{p_2^2 + p_3^2}$, что вызывает появление в объемном газе таких возбуждений фазового перехода второго рода со скачком теплоемкости. В связи с этим представляет интерес рассмотреть поведение бозе-газа разной размерности с различного вида анизотропными (и изотропными) законами дисперсии, обладающими хотя бы при малой энергии степенной зависимостью плотности состояний от энергии: $\nu(\epsilon) = B\epsilon^{\alpha-1}$ (14.12).

К такой зависимости приводит n -мерный анизотропный закон дисперсии

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sum_{k=1}^n \beta_k p_k^{\delta_k} \text{ с } \alpha = \sum_{k=1}^n \delta_k^{-1} \text{ и } B^{-1} \sim \prod_{k=1}^n (\beta_k)^{\delta_k^{-1}}.$$

Упомянутый закон дисперсии экситонов дает $\alpha = 5/2$ и $B^{-1} \sim \beta_1^{1/2} \beta_2^2$. Сюда же относятся и все изотропные n -мерные l -степенные законы $\epsilon(\mathbf{p}) = \beta p^l$ с $\alpha = n/l$. В других случаях, например для релятивистского закона дисперсии, такая степенная плотность состояний возникает, в частности, при малых энергиях (в нерелятивистском пределе), что существенно для качественного анализа фазовых переходов в бозе-газе.

Рассмотрим термодинамические свойства идеального бозе-газа со степенной плотностью состояний (14.12). Характер фазовых переходов в таком газе можно установить на основе исследования

при $\xi \ll 1$ интегралов типа $\int_0^\infty dz z^{s-1} / [\exp(z + \xi) - 1]$, определяющих согласно обычным методам квантовой статистики [16] термодинамические величины бозе-газа вблизи точки возможного фазового перехода. Результаты сводятся к следующему. В случае $\alpha > 1$ при $T < T_0$ имеется конденсат с относительным числом частиц $N_0/N = 1 - (T/T_0)^\alpha$, где температура бозе-эйнштейновской конденсации T_0 находится из соотношения $N = B\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)T^\alpha$ (Γ — гамма-функция, ζ — дзета-функция Римана). В области значений $1 < \alpha < 3/2$ теплоемкость и ее первая производная по T не имеют скачков при T_0 (вообще говоря, при $(s-1)^{-1} < \alpha - 1 \leq (s-2)^{-1}$ существуют менее интересные фазовые переходы s -го рода с $s > 3$).

В случае $\alpha = 3/2$ (например, в обычном трехмерном бозе-газе при квадратичном изотропном законе дисперсии [16]) возникает фазовый переход 3-го рода с изломом теплоемкости и скачком ее

производной $\Delta C'(T_0) = -3,66N/T_0$. В области значений $3/2 < \alpha \leq 2$ фазовый переход 3-го рода характеризуется бесконечным скачком производной теплоемкости (она степенным образом растет при $T \rightarrow +T_0$ для $\alpha \neq 2$ и логарифмически для $\alpha = 2$).

При этом для всех $1 < \alpha \leq 2$ $C(T_0) = N\alpha(\alpha+1)\zeta(\alpha+1)\zeta^{-1}(\alpha)$. В случае же $\alpha > 2$ появляется скачок самой теплоемкости

$$\Delta C(T_0) = -N\alpha^2\zeta(\alpha)\zeta^{-1}(\alpha-1),$$

сопровождаемый для $2 < \alpha \leq 3$ растущей при $T \rightarrow +T_0$ производной, а для $\alpha > 3$ — конечной. Итак, при $0 < \alpha \leq 1$ особенностей нет, а при $(s-1)^{-1} < \alpha-1 \leq (s-2)^{-1}$, $s=2, 3, \dots$ возникает конденсация с фазовым переходом s -го рода.

Еще раз следует подчеркнуть, что качественные особенности фазового перехода зависят от поведения плотности состояний при $\epsilon \rightarrow 0$, в частности от показателя степени α в (14.12), а количественные характеристики определяются плотностью состояний в интервале энергий $0 < \epsilon \leq T$.

Случаю упомянутого вначале закона дисперсии экситонов с $\alpha=5/2$ соответствует исследованный в работе [79] фазовый переход второго рода.

Если сравнить метод произвольной плотности состояний в теории ферми- и бозе-газов, то для вырожденного ферми-газа основные свойства не зависят, вообще говоря, от конкретного вида плотности состояний и термодинамика строится [76] при произвольном $v(\epsilon)$ (то же для всех парагазов [126] при низких температурах). Так, теплоемкость линейна по T и пропорциональна плотности состояний на поверхности Ферми. Конкретный вид $v(\epsilon)$ существен для промежуточных и высоких температур. Общие же черты поведения бозе-газа весьма чувствительны к виду $v(\epsilon)$ при малых энергиях.

Любопытно, что даже в таком традиционном разделе квантовой статистики, каким является теория идеальных газов, время от времени обнаруживаются новые черты. Так, недавно удалось обратить уравнение для химического потенциала обычных ферми- и бозе-газов и записать тем самым в явном виде уравнение состояния для этих газов (см. книгу Балеску [78]).

Более общий подход к исследованию свойств квантовых газов на основе метода плотности состояний, навеянный изучением ферми-систем с произвольным законом дисперсии [76], дает возможность подметить некоторые особенности поведения этих газов. Представляет интерес также попытка объединенного рассмотрения газов Ферми и Бозе на основе парастатистики [73, 126—128].

Благодаря успешному развитию квантовополевых методов в квантовой статистической физике [10, 74, 75, 82] и квантовой кинетике [53] ныне основное внимание сосредоточено на учете взаимодействия элементарных возбуждений на основе новой теории возмущений. При этом исходные идеализированные системы существенно перестраиваются (квантовые жидкости, сверхпроводимость и т. п.). Тем не менее и в «тылах» все еще скрыты интересные закономерности. Особого внимания заслуживают низкоразмерные квантовые газы в связи с разнообразными явлениями, происходящими в приповерхностных слоях конденсированных сред, в тонких каналах и т. п.

Особенности термодинамики одномерного ферми-газа. Теплоемкость обычного идеального ферми-газа [16] монотонно изменяется с увеличением температуры T от линейного закона при $T \ll \varepsilon_F$ до постоянного классического значения $C_{кл}$ при $T \gg \varepsilon_F$. Однако в особых случаях возможно аномальное поведение теплоемкости ферми-газа, несколько напоминающее ход теплоемкости обычного бозе-газа: на кривой $C(T)$ имеется максимум в области промежуточных температур $T \sim \varepsilon_F$, начиная с которых $C > C_{кл}$. Это характерно, в частности, для одномерного ферми-газа. Кроме того, необычным является немонотонное поведение химического потенциала, также обладающего максимумом.

Рассмотрим вначале особенности температурной зависимости химического потенциала. Как известно, при $T \rightarrow 0$ он совпадает с граничной энергией Ферми ε_F , а при $T \rightarrow \infty$ переходит в соответствующую классическую величину ($\zeta \rightarrow -\infty$). При этом существует некоторая промежуточная температура $T_0 \sim \varepsilon_F$, при которой $\zeta = 0$. Детали же изменения ζ в области низких и промежуточных T весьма чувствительны к зависимости плотности состояний от энергии $\nu(\varepsilon)$ вблизи ε_F (будем считать эту зависимость плавной). При $T \ll \varepsilon_F$ обычное зоммерфельдовское разложение для типичных фермиевских интегралов [16] приводит к выражению для химического потенциала [76]

$$\zeta = \varepsilon_F - \pi^2 T^2 \nu'(\varepsilon_F) / 6 \nu(\varepsilon_F) + O[T^4; \exp(-\varepsilon_F/T)], \quad (14.13)$$

из которого видно, что в случае $\nu'(\varepsilon_F) < 0$ химический потенциал ведет себя аномально — при малых T возрастает с температурой, имея максимум в области промежуточных T . Для наиболее интересной степенной зависимости числа $\Gamma(\varepsilon) = A\varepsilon^\alpha$ и плотности $\nu(\varepsilon) = \alpha A \varepsilon^{\alpha-1}$ (14.14) состояний от энергии (например, $\alpha = n/l$ для n -мерного изотропного l -степенного закона дисперсии) этому случаю отвечают $\alpha < 1$. Так, для $\alpha = 1/2$ (в частности, для одно-

мерного газа с квадратичным законом дисперсии) при $T \ll \varepsilon_F$ находим, что

$$\zeta = \varepsilon_F + \pi^2 T^2 / 12 \varepsilon_F + \pi^4 T^4 / 36 \varepsilon_F^3 + O[T^6; \exp(-\varepsilon_F/T)]. \quad (14.15)$$

В общем случае зависимость ζ от T и внешних параметров определяется для степенной плотности состояний (14.14) из стандартного [16] уравнения для числа частиц $N: N = \alpha! AT^\alpha F_{\alpha-1} \times (\zeta/T)$, где интеграл Ферми — Дирака [77]

$$F_\beta(\eta) \equiv (\beta!)^{-1} \int_0^\infty dz z^\beta / [1 + \exp(z - \eta)]$$

определен для $\beta > -1$ и обладает удобным свойством $F'_\beta(\eta) = F_{\beta-1}(\eta)$, позволяющим рассматривать соответствующие функции и с $\beta \leq -1$. Вводя фермиевскую энергию из уравнения $N = \Gamma(\varepsilon_F) = A \varepsilon_F^\alpha$, приходим к неявному выражению $\zeta(T): \alpha! (T/\varepsilon_F)^\alpha \times F_{\alpha-1}(\zeta/T) = 1$. В интересующем нас случае $\alpha = 1/2$ это соотношение принимает вид

$$T = (4/\pi) \varepsilon_F F_{-1/2}^{-2}(\zeta/T). \quad (14.16)$$

Аномальная точка с $\zeta' = 0$ отвечает корню уравнения $F_{-1/2}(\eta) = 2\eta F_{-3/2}(\eta)$; $\eta = \zeta/T$. Она лежит за пределами простых аппроксимаций, например температурного разложения (14.15), и вычисляется на основе табличных данных [77]:

$$\zeta_{\max} = 1,23 \varepsilon_F; T_{\max} = 0,94 \varepsilon_F. \quad (14.17)$$

Переходя к теплоемкости при постоянных внешних параметрах (специальный значок у C опускаем), заметим, что при низких температурах линейная зависимость C от T сопровождается дополнительным кубическим членом, который может иметь различный знак. Это дает основание предполагать, что при некоторых благоприятных условиях положительность такой добавки означает столь сильное возрастание C , что она может превысить предельное классическое значение уже в области достаточно низких температур. В частности, для степенной плотности состояний (14.14), как нетрудно убедиться, кубическая поправка при $\alpha < 1$ положительна. Например, при $\alpha = 1/2$ расчет дает

$$C/C_{\text{кл}} = \pi^2 T / 3 \varepsilon_F + 2\pi^4 T^3 / 15 \varepsilon_F^3 + O[T^5; \exp(-\varepsilon_F/T)]. \quad (14.18)$$

Однако, если при низких T ситуация лишь наталкивает на мысль о возможном максимуме, то высокотемпературное разложение $C/C_{\text{кл}} = 1 - 2^{-1}(\alpha - 1)(T'/T)^\alpha$ (см. [127]) показывает со всей определенностью, что при $\alpha < 1$ теплоемкость подходит к своему пределу $C_{\text{кл}}$, превосходя его, т. е. в области промежуточных температур

обязательно должен находиться максимум. В частности, при $\alpha = 1/2$ имеем [127]: $C/C_{\text{кл}} = 1 + \sqrt{\varepsilon_F/8\pi T}$.

Физический смысл явления заключается в следующем. Если с ростом энергии плотность состояний уменьшается, то с увеличением T частицы теснее оседают на более редких состояниях и сильнее проявляют свое эффективное обменное взаимодействие (отталкивание), т. е. изменение квантовой поправки к энергии будет положительным. Изменение C и ζ с температурой при $\alpha = 1/2$ представлено на рис. 2 (графики построены с помощью таблиц [77]). Аномальная точка T_{max} для C очень близка к точке максимума химического потенциала (14.17):

$$C_{\text{max}} = 1,16C_{\text{кл}}; T_{\text{max}} = 0,88\varepsilon_F. \quad (14.19)$$

Взаимосвязь аномалий ζ и C объясняется тем, что теплоемкость ферми-газа со степенной плотностью состояний (14.14) содержит слагаемое $\alpha N\zeta'(T)$, способствующее увеличению C при $\zeta' > 0$.

Еще раз подчеркнем, что указанные особенности термодинамики, проиллюстрированными на примере ζ и C , обладают не только одномерные, но и все ферми-газы со степенной плотностью состояний (14.14) при $\alpha < 1$ (разумеется, возможны и более сложные зависимости [76] $\nu(\varepsilon)$, например в зонном спектре, в пластине и т. д.). В соответствии с известным положением о том, что термодинамические величины системы целиком определяются одной интегральной характеристикой структуры энергетического спектра — энергетической плотностью состояний $\nu(\varepsilon)$, — поведение ζ и C в области промежуточных T (наличие максимумов и пр.) зависит от $\nu(\varepsilon)$ для $\varepsilon \sim \varepsilon_F$, а поведение C при высоких T зависит от $\nu(\varepsilon)$ для больших энергий $\varepsilon \sim T$.

Любопытно сопоставить теплоемкости ферми- и бозе-газов со степенной плотностью состояний (14.14). При $\alpha > 1$ у бозонов $C > C_{\text{кл}}$ в области промежуточных и больших T (отвлекаемся от деталей вблизи точки конденсации [130]), а у фермионов C изменяется монотонно ($C < C_{\text{кл}}$). При $\alpha = 1$ возникает своеобразное «выравнивание» — одинаковая зависимость $C(T)$ для всех газов [129]. При $\alpha < 1$ происходит «инверсия свойств» — бозоны имеют монотонно растущую C , а фермионы обладают достаточно большой C с максимумом (есть участки T , где $C > C_{\text{кл}}$).

В заключение отметим, что одномерный ферми-газ реализуется, например, в системе электронов, находящихся в очень сильном

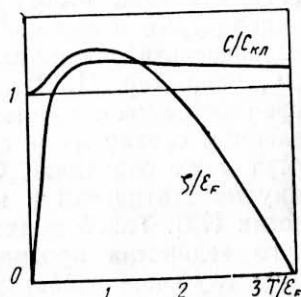


Рис. 2

магнитном поле [43] (ультраквантовый случай), а также в условиях размерного квантования [91, 92] для проволочной (нитяной [143]) конфигурации.

При изложении теории квантовых газов очень любят подчеркивать различия статистик Ферми — Дирака и Бозе — Эйнштейна, приводящие к соответствующему отличию в поведении газов фермионов и бозонов. Как сказано, например, в [78]: «ферми- и бозе-газы ведут себя совершенно различно, и поэтому их следует изучать по отдельности». В действительности, эти газы имеют много общего (не только при высоких температурах в виде обменных поправок на фоне главного классического больцмановского поведения). Так, оказалось (см., например, [129]), что теплоемкости двумерных ферми- и бозе-газов имеют одинаковый температурный ход, а при определенном соотношении параметров (спинов, масс и плотностей) могут даже совпадать. Особенно поучительно рассмотреть упомянутые статистики в качестве предельных случаев парастатистик [73]. Такой подход важен как для достижения фактического «единства противоположностей», обнаруживающего их более глубокие свойства, так и для вскрытия специфических особенностей отдельных газов (особенно в сочетании с методом полупериферического плотности состояний [126—128]).

§ 15. Метод эффективных полей

Модель есть не что иное, как способ особенно выделить некоторые свойства, ответственные за рассматриваемое явление.

В. Вайскопф

В квантовой механике широко используются различные модели эффективных полей. Последовательное проведение разделения переменных приводит к выделению одночастичных движений в сложной системе — возникает задача о движении одной частицы в потенциальном (псевдопотенциальном) поле. Однородные в среднем среды описываются некоторым постоянным потенциалом, а на границе раздела сред возникает скачок потенциала. Неоднородности среды моделируются сглаженными локализованными полями в форме потенциальных ям и барьеров (особое место среди них занимают модель предельно короткодействующего поля — дельта-потенциал — и ее многочисленные обобщения [4, 56]). Периодический потенциал оказался

подходящей статической моделью для описания движения возбуждений в кристаллических телах (структурах с естественной периодичностью). В плоскостных средах (в частности, тонкопленочных образованиях [70, 85]) разделение переменных позволяет перейти к эффективно одномерному движению вдоль слоев [58, 71, 72]. Физические условия движения на границе сред (поверхностные явления) описываются двумерными моделями [81, 86]. Одномерный характер приобретает движение частиц в случае «замораживания» поперечных степеней свободы за счет квантового размерного эффекта в тонких каналах [92, 143] (нитех, проволоках, «квантовых»). В квантовой химии молекул с сопряженными связями также применяется одномерная модель движения электронов — разветвленные цепи [67, 114]. Отметим и метод комплексного потенциала — феноменологическое описание в усредненном виде объемного и поверхностного поглощения [39] и испускания частиц (в частности, так называемая оптическая модель в теории ядра [60, 63, 145]).

Кратко: эффективные поля — потенциальные, одночастичные, однородные, локальные, периодические, одномерные, комплексные и пр.

Все большее внимание привлекают системы с искусственно созданными периодическими свойствами [59, 80, 135—138], также моделируемые периодическими полями. Сюда же при- мыкают синусоидальные модели потенциала в теории затормо- женного внутреннего вращения некоторых молекул [42, 84] и систем типа квантового маятника [21]. Интересен также вре- менной аналог подобных систем — квантовые периодические процессы и концепция квазиэнергии [38].

В общем случае речь идет об эффективном гамильтониане, в частности о методе произвольного закона дисперсии [76] и методе квазичастиц — эффективных возбуждений в различного рода средах [64, 93]. Можно сказать, что метод эффективных полей является частным случаем метода эталонного уравнения (более общо — эталонной задачи [12]).

Разумеется, в нашу задачу не входит обсуждение всех аспектов метода эффективного поля. Внимание сосредоточим лишь на некоторых использованных в книге эффективных полях (δ -аппроксимация локализованных неоднородностей, сепарабельное приближение, одномерные периодические структуры).

Что же позволяет отнести метод эффективных полей к числу интегральных? Главным, по-видимому, можно считать сгла- живание микроструктуры моделируемых сред.

О роли δ -образной модели потенциальных полей. Имеется в виду дельта-функция Дирака — одна из простейших обобщенных функций. Эта модель соответствует предельному короткодействию, описывает исключительно локализованное поле. Она передает многие черты сосредоточенных в пространстве областей отталкивания (дельта-барьер) и притяжения (дельта-яма).

Простая по форме, модель обладает интересным и емким содержанием, широким диапазоном применений.

На обобщенные функции, в частности δ -функцию Дирака, можно смотреть двояко: как на предел последовательности все более локализованных образований и как на функционал, т. е. в некотором смысле имеем противоположные точки зрения — локальную и интегральную (это как раз тот случай, когда интегральное фактически совпадает с локальным).

Модель имеет неоспоримые преимущества в математическом плане, предоставляя возможность производить точные вычисления, и особенно подходит к интегральным формулировкам основных закономерностей (интегральной форме стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении). Интегральные уравнения при этом сводятся к конечной системе линейных алгебраических уравнений. Это дает возможность сосредоточить внимание на физической стороне вопроса, обращая меньше внимания на преодоление математических трудностей, возникающих при решении даже простейших квантово-механических задач, что служит еще одним веским доводом в пользу такого рода моделей. Говоря словами М. Лауэ, мы получаем возможность «наиболее чистого и непосредственного переживания истины».

Подробное описание различных конкретных применений вариантов короткодействующих моделей (потенциалов нулевого радиуса), обобщений на многомерные случаи и т. п. содержатся в монографии [56].

А разве нельзя отнести к богатейшему содержанию возможность аппроксимации широкого класса одномерных слабых полей притяжения произвольного (!) профиля?

Любопытный механизм взаимодействия локальных полей в основных чертах также удастся передать с помощью тандемов δ -моделей (вплоть до систем со случайными параметрами).

Удивительно, насколько богата содержанием столь скромная, простая по форме модель: одноуровневый осциллятор (нулевые колебания, нелинейные колебания; хотя и беднее популярной модели двухуровневых систем, но содержит непрерывную часть энергетического спектра; впрочем, уже две δ -ямы

дают, вообще говоря, два уровня энергии), модель атомной системы (одноэлектронной, но с наличием как связанного состояния, так и возможности иллюстрировать ионизацию за счет непрерывного спектра энергии). Предоставляется возможность проследить за тонкими нюансами переходов в непрерывный спектр. Демонстрируются критические явления, стационарные и нестационарные влияния. А какие широкие возможности открывает модель в комбинации с подобными же (резонансы, зоны, дефекты, квазиуровни)!

По сравнению с моделированием локальной области притяжения в случае эффектов рассеяния дело обстоит несколько сложнее, так как не удастся одним барьером передать сильное поле отталкивания и закономерности глубокого туннелирования. Впрочем, эту миссию с успехом выполняет метод подбарьерной квазиклассики, как и в исследовании свойств не очень слабых полей притяжения — правила квантования Бора — Зоммерфельда.

Ну, хорошо — пусть δ -яма описывает достаточно наглядно многие черты движения частиц в среде с локализованными неоднородностями, но ведь для нее можно получить результаты раз и навсегда, решая задачу о рассеянии или узнав уровень энергии связанного состояния и волновую функцию, — и на этом конец. Что еще можно выжать из нее? Оказывается, открывается много новых вопросов, если учесть свойства среды: в случае разных законов дисперсии получаем разные энергии связи, а граничные условия или перепады (наличие двух сред) потенциала могут в значительной степени изменить наши традиционные представления о свойствах этой модели.

Очень важен вопрос о допустимости такой аппроксимации локализованных полей в пространствах большей размерности. Он не имеет однозначного решения, если учесть возможность различных законов дисперсии. Иногда и в обычном случае используют эту модель в трех измерениях в каких-то приближенных выражениях (борновское приближение для амплитуды рассеяния в теории рассеяния или «четырёххвостка» в квантовополевом описании гамильтониана взаимодействия двух частиц).

А разве не заслуживает внимания методическое значение модели?

Скуден багаж параметров δ -ямы или δ -барьера! Ведь есть только одна величина — интенсивность δ -модели — интегральная координатная характеристика: $U(x) = \pm u\delta(x)$; $u = \pm \int dx U(x)$. Однако точечное поле физически обладает пространственным «ореолом», радиусом состояния $\kappa^{-1} = \hbar^2/mu$,

а характерная величина энергии — конечная щель $mu^2/2\hbar^2$. Казалось бы, для δ -барьера остается только энергетическая физическая величина: в эффекте рассеяния частиц на одиночном δ -барьере нет какого-либо пространственного «ореола». Однако, достаточно добавить второй барьер, и они начинают взаимодействовать — это явление как раз характеризуется расстоянием порядка величины соответствующего радиуса состояния в яме.

Конечно, существуют еще какие-то свойства, не упомянутые выше. Так, любопытен метод моделирования примесей в модели одномерных разветвленных цепей в квантовой химии. Сюда же можно добавить моделирование стационарных состояний с помощью смешанных состояний со статоператором и предельным переходом к дельта-функции (а также в описании микроканонического распределения). Правда, эти модели уже относятся не к координатному описанию, а к энергетическим картинам.

Отметим еще одну связь — метод вырожденных ядер (сепарабельное приближение), успешно использованный И. М. Лифшицем в общем анализе структуры энергетического спектра в рамках метода интегральных уравнений (теория вырожденных регулярных возмущений) и приложениях в теории неупорядоченных конденсированных систем [103].

В моделях δ -образных потенциалов в буквальном смысле слова заостряется действие поля (в отличие, скажем, от постоянного значения потенциала, передающего усредненное действие среды на движущуюся в ней частицу).

Еще одна специфическая особенность δ -поля — возможность точного решения уравнения типа Дайсона для функции Грина, когда возмущением (относительно не малым) является δ -поле.

Добавим некоторые образные выражения, навеянные δ -моделью: всплеск, сосулька, сталактит и сталагмит, маяк, столб, вулкан, воронка, выброс, острье, ущелье.

Много примеров использования δ -образных моделей поля содержит книга [21]. Любопытно, что одним из первых случаев фактического использования подобной модели была работа Кронига и Пенни, в которой рассматривалось одномерное периодическое поле, имеющее в пределе вид «частотола» δ -барьеров, так называемая «ребенка» Дирака (см. также [54]).

К сказанному, видимо, нужно добавить некоторые количественные пояснения. Во-первых, непосредственным предельным переходом продемонстрировать невозможность использования δ -модели в трехмерном случае на примере сферической потенциальной ямы. Во-вторых, показать противоречивый характер

многомерных δ -образных моделей на основе интегральной формы уравнения Шредингера для стационарных состояний, оговорив при этом роль закона дисперсии. В-третьих, отметить возможность замены δ -аппроксимации другими аналогичными моделями сепарабельного типа для многомерных полей.

Поясним невозможность существования δ -модели для поля притяжения в трехмерном случае на примере предельного перехода в сферической потенциальной яме. Если рассмотреть только s -состояния (а среди них находится и основное, за которым достаточно проследить), то им соответствуют уровни энергии в одномерной конечной прямоугольной яме, примыкающей к непроницаемой границе. Ширина такой ямы равна радиусу R сферической полости, а глубина та же, что и у полости. Это вытекает из соответствующей эффективной картины радиального движения, поскольку для s -состояний нет дополнительного центробежного члена в потенциале. В свою очередь, состояния такой «полуограниченной» ямы отвечают нечетным состояниям для расширенной одномерной ямы (построенной симметрично относительно границы). Таким образом, уровни энергии s -состояний в трехмерной сферической полости такие же, как и для нечетных состояний в расширенной одномерной яме. Далее переходим к устремлению глубины ямы U_0 к бесконечности, а радиуса к нулю при сохранении эффективного объема $\int dr U(r)$, т. е. при $U_0 R^3 = \text{const}$. Для одномерной картины это означает, что глубина ямы стремится к бесконечности быстрее, чем ширина к нулю, т. е. эффективная площадь $2U_0 R$ (интенсивность) неограниченно растет, а с нею растет и число состояний $N \sim \sqrt{U_0 R}$ в такой одномерной яме. Таким образом, и в трехмерной яме в процессе такого предельного перехода, который соответствовал бы δ -образной модели, уровни энергии (достаточно проследить за s -состояниями) «проваливаются» вместе с углублением ямы. Итак, глубина ямы растет слишком быстро (как куб обратных линейных размеров).

Добавим также, что отмеченное соответствие между состояниями трехмерного движения в поле сферической симметрии и одномерного справедливо для всех профилей поля: s -состояния эквивалентны нечетным одномерным.

В частности, для сферически-симметричных локальных полей вопрос о критических параметрах, при которых впервые возникает связанное состояние (это есть s -состояние), сводится к изучению условия появления первого возбужденного уровня энергии в соответствующей чисто одномерной потенциальной яме. В монографии [4] приведены некоторые конкретные

примеры полей сферической симметрии и вычислены критические параметры для них.

Заметим, что подобные рассуждения в случае двух измерений оказываются неверными, так как эффективный радиальный потенциал здесь содержит дополнительный вклад, который остается при всех значениях момента (и при равном нулю магнитном квантовом числе, т. е. для основного состояния). Соответствующее одномерное поле имеет особенность в начале координат.

Вообще, среди всех полей аналогичной (гиперсферической) симметрии трехмерный случай занимает особое место. Дело в том, что, как можно показать, основываясь на записи лапласиана в n -мерных сферических координатах (см., например, [65]), радиальная часть движения эквивалентна полуограниченному одномерному движению в эффективном потенциальном поле $U_{\text{eff}}(r) = (\hbar^2/2m) [l(l+n-2) + (n-1)(n-3)/4]/r^2$. Добавка к потенциальной энергии $U(r)$ содержит два вклада. Первый (центробежный $l(l+n-2)/r^2$) появляется за счет угловой части лапласиана. При этом аналогом орбитального квантового числа служит $l=0, 1, \dots$. Второй же член возникает при преобразовании радиальной части лапласиана. Для основного состояния ($l=0$) остается только этот член. Он обращается в ноль лишь в случае трех измерений. Для $n=2$ он отрицателен, что способствует связи, а для $n>3$ он положителен, т. е. противодействует созданию связанных стационарных состояний (как и центробежный член при $l \neq 0$). Этим еще раз подтверждается тот факт, что с увеличением размерности пространства затрудняется образование связанных состояний.

Рассмотрим вопрос о применимости δ -модели для описания связанных состояний ($E < 0$) в локализованных полях для пространств разной размерности и различных законов дисперсии. Воспользуемся интегральной формой уравнения Шредингера в импульсном представлении. Тогда $\Psi(\mathbf{p}) = - \int d\mathbf{p}' < \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' > \Psi \times \times (\mathbf{p}') / [T(\mathbf{p}) + |E|]$. В случае δ -потенциала $U(\mathbf{r}) = u\delta(\mathbf{r})$ матричные элементы $< \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' > = u/\hbar^n$, так что необходимо, чтобы интеграл $\int d\mathbf{p}' / [T(\mathbf{p}) + |E|]$ оставался конечной величиной, т. е. все определяется сходимостью при больших значениях импульсов (ср. с критерием существования связанных состояний в локальных полях притяжения в § 8). Выражая этот интеграл через энергетическую плотность состояний $\nu(\epsilon)$, приходим к требованию

сходимости при больших энергиях выражения $\int_{\epsilon}^{\infty} d\epsilon' \nu(\epsilon')/\epsilon$. Если плотность состояний степенным образом зависит от энергии $\nu(\epsilon) \sim \epsilon^{\alpha-1}$, то условие применимости δ -модели есть $\alpha < 1$ (15.1). Для

l -степенного изотропного закона дисперсии в n -мерном пространстве $\alpha = n/l$, так что условие сводится к требованию $n < l$. Так, для квадратичного закона дисперсии получаем ограничение $n < 2$, другими словами, δ -модель потенциального поля годится только для описания одномерных движений. Если бы закон дисперсии имел форму $T(\mathbf{p}) \sim |\mathbf{p}|^4$, то можно было бы применять эту модель и в двумерном, и в трехмерном случаях. Если плотность состояний имеет одинаковое степенное поведение как при малых, так и при больших энергиях, то условия применимости этой модели и условие критической ситуации противоречат друг другу, т. е. когда модель «работает», то связанное состояние существует в как угодно слабом поле притяжения. Заметим, что иногда такая модель используется и в некоторых специальных вычислениях для трехмерного случая. Корректные же многомерные модели полей предельного короткодействия описаны в монографии [56].

Сепарабельное приближение. В современной квантовой теории рассеяния [35] сепарабельная аппроксимация используется для различных величин. В частности, локальные (по координатам) операторы потенциальной энергии заменяются нелокальными (в операторном смысле), что приводит и к сепарабельной форме ядра интегрального уравнения.

Вкратце суть дела состоит в том, что матричные элементы потенциала $\langle \mathbf{r}' | U | \mathbf{r}'' \rangle$ аппроксимируются конечной суммой произведений вида $\sum_s a_s(\mathbf{r}') b_s(\mathbf{r}'')$. Если удастся достичь хорошей

точности с помощью одного слагаемого, то имеем мультипликативное (факторизационное) сепарабельное приближение.

В теории интегральных уравнений ядра подобного типа носят название «вырожденных». Такой термин не очень подходит для приложений в квантовой механике, поскольку ассоциируется с понятием вырождения собственных значений физических величин (к тому же и о квантовых газах при низких температурах говорят как о вырожденных). Более удачными, по-видимому, являются слова «разделяющееся» (ядро) и «сепарабельное», хотя последнее и перекликается с соответствующим понятием функционального анализа (см. также статью Примаса в сборнике [68], где имеется в виду разделение переменных в многоэлектронных системах).

Важно, что в случае разделяющегося ядра решение интегрального уравнения сводится к изучению конечной системы линейных алгебраических уравнений. Так, в книге Трикоми [28] теория интегральных уравнений строится с помощью сепара-

бельной аппроксимации ядер интегральных уравнений. Работы И. М. Лифшица по теории регулярных возмущений [104—105] основаны на таком подходе.

Мы не станем вдаваться в подробности метода сепарабельной аппроксимации, а отметим лишь некоторые моменты, важные для вопросов, рассмотренных в предыдущих разделах книги.

Первое. Пусть найдено удачное мультипликативное приближение для возмущения U . Это значит, что в координатном представлении (как и в любом другом, поскольку сепарабельность, как нетрудно убедиться, есть инвариантное относительно выбора представления свойство оператора) $\langle \mathbf{r}' | U | \mathbf{r}'' \rangle = a(\mathbf{r}') b(\mathbf{r}'')$. Тогда определитель Фредгольма сводится к выражению $D = 1 + \text{Sp}(R^0 U) = 1 + \iint \times \times d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' R^0(\mathbf{r}', \mathbf{r}''; E) a(\mathbf{r}') b(\mathbf{r}'')$, а уравнение $D = 0$ для нахождения уровней энергии связанных состояний ($E < 0$) записывается в форме

$$1 = - \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' R^0(\mathbf{r}', \mathbf{r}''; E) a(\mathbf{r}') b(\mathbf{r}''). \quad (15.2)$$

Рассмотрим случай слабосвязанного основного состояния системы. В этом случае, как было установлено на основе вариационного метода с выбором пробной волновой функции $\Psi = \text{const}$ внутри области действия поля, уравнение для связанного состояния (8.9) имеет вид

$$1 = - \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' R^0(\mathbf{r}', \mathbf{r}''; E) U(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}'') / \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}). \quad (15.3)$$

Из сравнения формул (15.2) и (15.3) видим, что такой вариационный подход эквивалентен мультипликативной аппроксимации вида

$$\langle \mathbf{r}' | U | \mathbf{r}'' \rangle = U(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}'') / \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}). \quad (15.4)$$

Пример оценки точности такого простого приближения был дан вслед за этой вариационной оценкой (§ 8) — относительная ошибка при вычислении критической глубины поля для трехмерной сферической полости оказалась достаточно малой (+1,3%).

Физический смысл указанной эквивалентности ясен: если подействовать на волновую функцию оператором потенциала, то, с одной стороны, имеем $U\Psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$, а с другой стороны, мультипликативная сепарабельная аппроксимация (15.4) дает

$$U\Psi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | U | \mathbf{r}' \rangle \Psi(\mathbf{r}') = U(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' U \times \times (\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') / \int d\mathbf{r}'' U(\mathbf{r}'').$$

Если считать, что в области действия поля $\Psi = \text{const}$, то оба выражения дают одинаковый результат.

Второе. Как мы уже имели возможность убедиться во второй главе, хорошим первым приближением для одномерных локализованных полей притяжения служит δ -аппроксимация, когда вместо истинного потенциала $U(x) < 0$ фигурирует модель $-u\delta(x)$ с интенсивностью $u = |\int dx U(x)|$. Так как матричные элементы такого оператора факторизуются: $\langle x' | \delta(x) | x'' \rangle = \delta(x')\delta(x'')$, делаем вывод, что δ -аппроксимация относится к числу мультипликативных сепарабельных, причем совпадает с разновидностью (15.4).

В случае слабого поля разного знака, состоящего из ямы вблизи $x = 0$ и барьера в окрестности $x = L$, можно применять сепарабельное приближение второго ранга: $-u_1\delta(x) + u_2\delta(x-L)$, где $u_1 = |\int_{(0)} dx U(x)|$; $u_2 = |\int_{(L)} dx U(x)|$.

Третье. Распространена также мультипликативная модель следующей конструкции:

$$\lambda |a(x_0)\rangle \langle a(x_0)|, \quad (15.5)$$

где $|a(x_0)\rangle$ — нормированный вектор. В координатном представлении соответствующие функции отличны от нуля в некотором интервале вблизи x_0 : $\langle x | a(x_0) \rangle = L^{-1/2}$, $|x - x_0| < L/2$. Нетрудно убедиться, что существует непосредственная связь такой сепарабельной модели с δ -функцией:

$$\lim_{L \rightarrow 0} L^{-1} |a(x_0)\rangle \langle a(x_0)| = \delta(\hat{x} - x_0).$$

Отсюда, во-первых, вытекает возможность аппроксимировать локализованное поле с помощью модели (15.5) при конечном L . Во-вторых, результат переносится и на многомерный случай, что особенно важно, поскольку δ -модели здесь уже, вообще говоря, неприменимы. Так появляется еще одна простая сепарабельная модель в пространствах любой размерности:

$$\lambda |a(\mathbf{r}_0)\rangle \langle a(\mathbf{r}_0)|, \quad (15.6)$$

где

$$\langle \mathbf{r} | a(\mathbf{r}_0) \rangle = V^{-1/2}, \quad \mathbf{r} \in \Omega; \quad \langle \mathbf{r} | a(\mathbf{r}_0) \rangle = 0, \quad \mathbf{r} \notin \Omega; \quad V = \int_{\Omega} d\mathbf{r}$$

(см., например, [108]). Так, если имеется многомерная потенциальная яма типа полости $U(\mathbf{r}) = -U_0$, $\mathbf{r} \in \Omega$; $U(\mathbf{r}) = 0$, $\mathbf{r} \notin \Omega$, то естественно отождествить область действия поля Ω с соответствующей характеристикой модели (15.6). Нетрудно видеть, что в таком случае оператор совпадает с выражением (15.4).

В-третьих, существует полезная аналогия между рассмотренной координатной картиной и описанием стационарного состояния

дискретного спектра $|n\rangle \equiv |E_n\rangle$ (считаем, что нет вырождения) с помощью статистического оператора: $\hat{\rho}_n = |n\rangle\langle n| = \delta_{E_n - \hat{H}}$, где δ — функция Кронекера. Если в координатной картине речь шла о применении мультипликативной сепарабельной модели (15.6), т. е. о введении элемента дискретности, то здесь, наоборот, удобно перейти от функций дискретного аргумента к функциям непрерывного энергетического аргумента. Вначале вводим ступенчатую функцию

$$\Delta(E - E_{n'}) = (\Delta E)^{-1}, \quad |E - E_{n'}| < \Delta E/2; \quad \Delta(E - E_{n'}) = 0, \\ |E - E_{n'}| > \Delta E/2,$$

где $\Delta E/2$ меньше расстояния до ближайшего к $E_{n'}$ уровня энергии. Тогда статистический оператор можно записать с помощью такой функции следующим образом: $\hat{\rho}_n = \Delta E \Delta(E_n - \hat{H})$. Учитывая, что $\text{Sp } \hat{\rho}_n = 1$, приходим к выражению

$$\hat{\rho}_n = \Delta(E_n - \hat{H}) / \text{Sp } \Delta(E_n - \hat{H}), \quad (15.7)$$

в котором даже можно переходить к пределу при $\Delta E \rightarrow 0$ и формально, когда это допустимо, записывать ρ через δ -функцию Дирака. Подобная формула может быть использована и для описания микростатистического распределения:

$$\hat{\rho}_E = \delta(E - \hat{H}) / \text{Sp } \delta(E - \hat{H}),$$

где δ -функцию можно трактовать как размытую либо сразу переходить к δ -функции Дирака.

Если же говорить о прямой связи с сепарабельными моделями, то формула (15.7) отвечает мультипликативному оператору $\hat{\rho}_n$ па (15.6)

$$\hat{\rho}_n = \lambda |a(n)\rangle\langle a(n)|, \quad \text{где } \lambda = \Delta E, \quad a = \langle E | a(n) \rangle = \\ = (\Delta E)^{-1/2}, \quad |E - E_n| < \Delta E/2; \quad \langle E | a(n) \rangle = 0, \quad |E - E_n| > \Delta E/2.$$

В общем случае такая многомерная модель приводит к уравнению для энергии связи следующего вида:

$$1 = -(\lambda/V) \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E).$$

Если величина $R^0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; E)$, конечна, то можно совершить предельный переход при $V \rightarrow 0, \lambda \rightarrow \infty$ и $\lambda V = \text{const} = -u$. Это дает уравнение $1 = u R^0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; E)$ и эквивалентно δ -аппроксимации $U(\mathbf{r}) = -u \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. Если же функция Грина обладает особенностью при совпадающих значениях координатных аргументов (так, при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ ФГ свободного трехмерного движения $R^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \sim |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$), то интегрирование сглаживает ее.

В-четвертых, все, что касалось координатной картины, может быть перенесено в другое представление. Особенно удобно представление, в котором диагональна резольвента, т. е. собственное представление для невозмущенного гамильтониана. Например, в импульсном пространстве мультипликативная сепарабельная модель типа (15.6) дает простую иллюстрацию явления куперовского спаривания электронов [47].

§ 16. Зоны энергии в одномерных периодических системах

*Меж черных туч приветно засияла
Лазури полоса.*

А. К. Толстой

В работах [147, 149] рассматривалось квазиклассическое описание одномерных энергетических зон в случае достаточно сильных полей. Особое внимание уделялось структуре зон, расположенных в окрестности максимума потенциала, — критическому диапазону энергий. Теперь мы проанализируем зонный энергетический спектр в случае слабых полей. Будет рассматриваться главным образом область низких энергий в приближении слабой связи, физический смысл которого заключается в малости возникающих щелей (полос запрещенных значений энергии) по сравнению с шириной зон. Вычисления основаны на теории возмущений в сочетании с гармоническим анализом профиля поля. Кратко разберем также случай сильной связи. Общие результаты проиллюстрируем на конкретных моделях потенциальных полей, для которых возможно точное решение, что позволит судить об эффективности используемых аппроксимаций.

Обычно основное внимание [57] уделяется структуре зонного спектра в трехмерном периодическом поле (электроны в металле и пр.). Одномерная же задача при этом если и упоминается, то лишь для демонстрации общих квантовых закономерностей формирования зон [46, 82].

В настоящее время, когда интерес к системам низкой размерности, вызванный экспериментальными и техническими достижениями в области исследования и применения тонкопленочных и нитевидных материалов, все больше возрастает, задача о структуре энергетических зон в одномерном случае приобретает самостоятельное значение, выходя за рамки методической проблемы.

Особенности зонного спектра энергии в слабом поле. Закон дисперсии вблизи дна ($|p| \ll \pi\hbar/L$) самой низкоэнергетической

зоны, которую будем в дальнейшем называть нулевой зоной, можно записать в виде

$$E(p) = E(0) + p^2/2M + \alpha p^4 + O(p^6). \quad (16.1)$$

В силу известного свойства $E(-p) = E(p)$ в (16.1) входят только четные степени квазиимпульса p . Величина $E(0)$ определяет положение дна зоны по сравнению со случаем свободного движения, когда $E(0) = 0$, $M = m$ и $\alpha = 0$. Обратная эффективная масса у дна нулевой зоны получает добавку δM^{-1} . Коэффициент α дает вклад члена четвертого порядка в разложении энергии по степеням квазиимпульса.

Для получения отмеченных выше параметров зонной структуры удобно представить потенциальную энергию в виде ряда Фурье:

$$U(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{2\pi i l x/L}; \quad U_l = \frac{1}{L} \int_L dx U(x) e^{-2\pi i l x/L}. \quad (16.2)$$

В первом приближении теории возмущений [1, 16] получается общее смещение спектра энергии на величину среднего по невозмущенному движению значения налагаемого поля

$$E^{(1)} = (1/L) \int_L dx U(x) \equiv \bar{U}.$$

Во втором приближении поправка к энергии с учетом свойств ряда Фурье (16.2) может быть преобразована к выражению

$E^{(2)} = -m \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / [(\pi \hbar l/L)^2 - p^2]$. Его разложение по степеням p приводит к закону дисперсии (16.1) и дает следующие результаты для параметров нулевой зоны с точностью до членов порядка U^2 включительно:

$$E(0) = \bar{U} - m (L/\pi \hbar)^2 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^2; \quad \delta M^{-1} = -2m (L/\pi \hbar)^4 \times \\ \times \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^4; \quad \alpha = -m (L/\pi \hbar)^6 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^6. \quad (16.3)$$

Знак второго слагаемого в выражении для $E(0)$ отрицателен, как и должно быть для квадратичной по возмущению поправки к основному уровню энергии [1], а отрицательный знак величин δM^{-1} и α объясняется тенденцией обратной эффективной массы к уменьшению: внутри нулевой зоны (в слабом поле — вблизи верхнего края этой зоны) она должна обращаться в нуль. Любопытно сравнить закон дисперсии (16.1) с классической квазирелятивистской зависимостью энергии от импульса $E(p) = mc^2 +$

$+p^2/2m - p^4/8m^3c^2 + O(p^6)$. В обоих случаях поправка, включающая p^4 , отрицательна.

Заметим, что структура рядов в формулах (16.3) определяется видом исходного закона дисперсии. В частности, показатель степени множителя l^{-2} в сумме для $E(0)$ обусловлен квадратичностью невозмущенного закона дисперсии.

Запишем известное [46, 82] выражение для щели между $(s-1)$ -й и s -й зонами:

$$\delta E_s = 2|U_s| + O(U^2), \quad s = 1, 2, \dots \quad (16.4)$$

Щели образуются в результате расщепления двукратно вырожденных уровней энергии, удовлетворяющих условию брэггского отражения. В нулевом по величине поля приближении щели расположены при значениях энергии $E_s = \pi^2 \hbar^2 s^2 / 2mL^2$, соответствующих спектру частицы, запертой в отдельной ячейке поля. Вблизи щелей обратная эффективная масса значительно возрастает по абсолютной величине. Так, можно показать, что у верхнего края нулевой зоны

$$M^{-1} = -m^{-2} |U_1|^{-1} (\pi \hbar / L)^2. \quad (16.5)$$

Возникает вопрос, можно ли аппроксимировать суммы в выражениях (16.3) слагаемыми с первой гармоникой? Учитывая быструю сходимость рядов в формулах (16.3) для обычных моделей потенциала, когда $U_l \rightarrow 0$ с ростом l , приходим к выводу, что во всех формулах для оценок (а в большинстве случаев — и для количественных расчетов) можно оставить только первые члены в суммах. Тогда выражения (16.3) упрощаются:

$$E(0) = \bar{U} - m(L/\pi \hbar)^2 |U_1|^2; \quad \delta M^{-1} = -2m(L/\pi \hbar)^4 |U_1|^2; \\ \alpha = -m(L/\pi \hbar)^6 |U_1|^2. \quad (16.6)$$

Исключение составляют сингулярные потенциальные модели. Например, в модели δ -образных ям (см. далее) все гармоники одинаковы, так что в формуле (16.3) для $E(0)$ нужно брать всю сумму, что не составляет, впрочем, труда (см. формулы (16.9)).

Малым параметром теории является отношение щели между нулевой и первой зонами $\delta E_1 = 2|U_1|$ к ширине невозмущенной нулевой зоны $\Delta E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Таким образом, необходимо выполнение неравенства $\delta E_1 / \Delta E_0 \ll 1$. Из формул (16.6) при $\bar{U} = 0$ вытекает оценка $|E(0)| / \Delta E_0 = |\delta M^{-1}| / m^{-1} = (\delta E_1 / \Delta E_0)^2 / 8$, т. е. поправка к массе и сдвиг дна нулевой зоны достаточно малы даже при $\delta E_1 \sim \Delta E_0$. Это дает основание надеяться, что и в случае не очень слабого поля формулы (16.3) будут справедливы. Анализ конкретных моделей периодического поля подтверждает такое предположение.

Обратим внимание на слабую зависимость величин (16.3) от деталей профиля поля, поскольку основную роль обычно играют гармоники невысоких порядков. Наиболее стабильным является коэффициент α , далее — добавка к массе, а затем — наиболее подвижный элемент зонной структуры — положение дна зоны. Для щели между нулевой и первой зонами также существенна только первая гармоника потенциала, а для других щелей важны гармоники более высоких порядков — каждая гармоника формирует соответствующую щель (16.4). Таким образом, незначительное изменение профиля поля (например, сглаживание) слабо сказывается на рассматриваемых параметрах нулевой зоны, а особые точки потенциальной энергии (максимумы, изломы, скачки и пр.) в слабом поле влияют лишь на величину высокоэнергетических щелей и их окрестности (как известно из теории рядов Фурье, если n -я производная потенциала имеет скачок, то $|U_l| \sim 1/l^{n+1}$ при больших l). Особенности поля в рассматриваемом случае оказываются менее существенными, чем в случае сильного поля, где они определяют структуру зон как в критическом диапазоне энергий, так и при больших энергиях (см. [147]).

Очень важным является следующее обстоятельство. Все параметры зонной структуры в рассматриваемом приближении определяются только модулями коэффициентов Фурье $|U_l|$. Фазы гармоник войдут в соответствующие энергетические поправки третьего порядка по величине поля, а также в поправки первого порядка для волновых функций стационарных состояний. Например, у дна нулевой зоны при $p = 0$ в первом приближении

$$\Psi_0(x) = 1 - m(L/\pi\hbar)^2 \sum_{l=1}^{\infty} l^{-2} |U_l| \cos(2\pi lx/L + \arg U_l).$$

В связи с этой особенностью энергетического спектра интересно решить обратную задачу — восстановление слабого поля по данным структуры зон. Рассмотренные параметры нулевой зоны позволяют найти (наряду с периодом) модули нескольких основных гармоник потенциала, если гармоники достаточно быстро убывают. Модули всех гармоник можно восстановить по величине щелей. Однако фазы гармоник также существенны в воссоздании вида поля. Если же важна только одна гармоника, например $U_1 = |U_1| \exp(i\varphi)$, то согласно разложению (16.2) в случае потенциальной энергии $U(x) = 2|U_1| \cos(2\pi x/L + \varphi)$ фаза влияет лишь на отсчет координаты.

Мы рассмотрели более подробно структуру нулевой зоны (16.3) у ее дна, когда вычисления ведутся с помощью теории

возмущений без вырождения, а также некоторые свойства щелей (16.4) и окрестности верхнего края нулевой зоны (16.5), когда применяется теория возмущений с учетом вырождения. То, что мы ограничились главным образом параметрами нулевой зоны, объясняется, с одной стороны, важностью именно этой области энергий (в случае слабой связи зонный характер спектра наиболее ярко выражен при низких энергиях) и, с другой стороны, возможностью проиллюстрировать основные эффекты при простом расчете.

Подчеркнем, что задача о невозмущенном движении не обязательно должна соответствовать задаче о свободном движении: результаты применимы и к случаю, когда невозмущенное движение относится к квазичастицам вблизи дна (или верхнего края) некоторой зоны (с учетом знака затравочной массы m), т. е. касается электронов и дырок, например, в полупроводниках.

В случае многомерных полей число мер структуры нулевой зоны возрастает. Так, уже при двух измерениях возникают тензор обратных эффективных масс и тензор в члене четвертого порядка по компонентам квазимпульса, так что вместо рассмотренных выше одномерных параметров (16.3) появляются с учетом симметрии указанных тензоров десять величин.

Рассмотрим некоторые точно решаемые модели периодических потенциальных полей. Среди них имеются как двухпараметрические (например, параметрами являются амплитуда поля U_0 и его период L — постоянная «решетки»), так и более сложные (дополнительным параметром служит размер ямы).

Для синусоидальной модели $U(x) = (U_0/2) \cos(2\pi x/L)$ с единственной отличной от нуля первой гармоникой $U_1 = U_0/4$ и $\bar{U} = 0$ основные параметры нулевой зоны согласно формулам (16.3), (16.4) равны

$$E(0) = -U_0^2 m L^2 / 16 \pi^2 \hbar^2; \quad \delta M^{-1} = -(m^{-1}/8)(m L^2 U_0 / \pi^2 \hbar^2)^2; \\ \alpha = -m L^2 U_0^2 / 16 \pi^6 \hbar^6; \quad \delta E_1 = U_0/2. \quad (16.7)$$

В этой модели зависимости щелей более высоких порядков от амплитуды поля степенные [61] ($\delta E_s \sim U_0^s$), например,

$$\delta E_2 = m L^2 U_0^2 / 16 \pi^2 \hbar^2.$$

Если к синусоидальному потенциалу будут добавлены небольшие гармоники (обертоны), то это скажется лишь на формировании второй щели и щелей более высоких порядков (да и то при достаточно большой величине обертонов). О точности результатов (16.7) свидетельствуют численные (табличные) значения параметров уравнения Матье [87] и более детальные разложения в ряды по степеням поля (см., например, [61]).

Близка к синусоидальной и разновидность модели Кронига—Пенни с одинаковыми ширинами ям и барьеров. Для этой модели $\bar{U} = U_0/2$ и отличны от нуля (см. формулу (16.10) при $L = 2a$) только нечетные гармоники $U_{2n+1} = (-1)^n U_0 / (2n+1)\pi$, $n = 0, 1, \dots$. Обращение в нуль четных гармоник объясняется, как и в случае модели линейного поля с изломами (см. далее), антипериодичностью потенциала на интервале полупериода (с учетом сдвига отсчета потенциальной энергии).

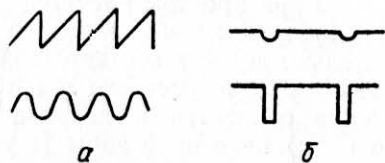


Рис. 3

Далее отметим две модели кусочно-линейного потенциала: с ячейкой $U(x) = 2U_0|x|/L$, $|x| \leq L/2$ («пила» с изломами), где $\bar{U} = U_0/2$ и $U_l = U_0 [(-1)^l - 1] / \pi^2 l^2$, $l \neq 0$, и с ячейкой $U(x) = U_0 x/L$, $|x| \leq L/2$ («пила» с разрывами), где $\bar{U} = 0$ и $U_l = i(-1)^l U_0 / 2\pi l$, $l \neq 0$. Эти модели допускают точное решение с помощью функций Эйри. Для кусочно-квадратичного поля с ячейками $U(x) = \pm \beta x^2$, $|x| \leq L/2$ также возможно точное решение на основе функций параболического цилиндра.

Подчеркнем, что все упомянутые модели построены на основе ям-ячеек, ширины которых одного порядка с ширинами разделяющих их барьеров. Можно назвать эти модели нелокальными, поскольку ямы отделены друг от друга небольшими промежутками (см. рис. 3, на котором приведены примеры потенциальных моделей: *a* — нелокальные; *b* — локальные). Сюда же относится особая двухпараметрическая модель локального типа, в которой ямы разделены расстояниями произвольной величины (в приближении слабой связи, однако, не очень большими), — модель δ -образных ям

$$U(x) = -u \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL). \quad (16.8)$$

Особенность этой модели состоит в том, что все гармоники потенциала одинаковы:

$$\bar{U} = -u/L; \quad U_l = -u/L, \quad l \neq 0.$$

Это значит, что щели между зонами в первом приближении равны, а суммы в формулах (16.3) легко вычисляются и приводят к следующим значениям основных параметров нулевой зоны:

$$\begin{aligned} E(0) &= -u/L - mu^2/6\hbar^2; \quad \delta M^{-1} = -mL^2 u^2/45\hbar^4; \\ \alpha &= -mL^4 u^2/945\hbar^6. \end{aligned} \quad (16.9)$$

При расчетах зон для кусочно-линейных (квадратичных) и δ -образных моделей удобно опираться на метод матрицы связи локальных решений [21, 101] (метод оператора перехода через особые точки поля). В случае двухпараметрических потенциальных моделей формулы для основных мер структуры нулевой зоны, например, (16.7) и (16.9), настолько просты, что возникает соблазн получить их непосредственно из соображений размерности (учитывая квадратичную зависимость от величины поля). Однако численные коэффициенты оказываются все же существенными и чувствительными к профилю поля. Хуже поддается такой оценке величина дополнительного сдвига дна нулевой зоны. Лучше всего подходит размерная оценка для определения поправки к массе.

В качестве примера несколько более сложного потенциала с тремя параметрами приведем хорошо известную модель Кронига — Пенни с ячейкой поля

$$U(x) = U_0, |x| < a/2; U(x) = 0, a/2 < |x| < L/2,$$

где гармоники

$$\bar{U} = U_0 a/L; U_l = (U_0/\pi l) \sin(\pi a l/L), l \neq 0. \quad (16.10)$$

Случай δ -образных ям (16.8) соответствует предельному переходу в модели Кронига — Пенни (с учетом переноса начала отсчета энергии в максимумы барьеров), когда ширина ям уменьшается, а глубина увеличивается при постоянной величине площади ям. Обычно же, как и в работе Кронига и Пенни, рассматривается другой предельный случай с устремлением высот барьеров и их ширин соответственно к бесконечности и нулю — «гребенка» Дирака (модель δ -барьеров) [82].

По отношению к гармоническому анализу двухпараметрические модели являются промежуточными между предельными случаями с одной гармоникой (синусоидальный потенциал) и с равномерным распределением по гармоникам (модель δ -образных ям). Сравнение приближенных формул (16.3) с результатами точного расчета для этих предельных моделей позволяет судить об эффективности аппроксимаций. Из анализа следует, что, даже если первая щель равна половине ширины невозмущенной нулевой зоны, относительные ошибки по модулю невелики: наименьшая возникает при расчете обратной эффективной массы (не более 0,5%), большая — при расчете положения дна нулевой зоны (не более 2%), еще большая — при расчете первой щели (от 0,1% для синусоиды до 7% для δ -модели), самая большая — при расчете коэффициента α (около 10%).

Таким образом, формулы (16.3), (16.4) хорошо аппроксимируют соответствующие меры структуры зонного спектра даже в случае промежуточных (не очень слабых) полей, когда первая щель порядка ширины невозмущенной нулевой зоны.

Модель δ -образных ям (16.8) заслуживает особого внимания. Она описывает основные черты целого класса полей локального типа, образованных слабыми (не только узкими, но и мелкими) потенциальными ямками произвольного профиля. Пусть при этом расстояние между ямками не очень велико:

$$a \ll L \ll \kappa_0^{-1}, \quad \kappa_0 = (m/\hbar^2) \left| \int_a dx U(x) \right|$$

характеризует пространственный «ореол» — расстояния, на которых затухает волновая функция связанного стационарного состояния частицы в отдельной изолированной ямке шириной a . Тогда параметры зонного спектра соответствуют слабой связи и определяются, как нетрудно убедиться, формулами (16.9) для модели δ -образных ям с $u = \left| \int_a dx U(x) \right|$. При очень большом рас-

стоянии между ямками ($L \gg \kappa_0^{-1}$) ситуация соответствует сильной связи: нулевая зона получается за счет экспоненциально малого уширения единственного уровня энергии, существующего в сколь угодно слабой одномерной ямке. С помощью метода функций Грина (переход к интегральной форме уравнения Шредингера с последующим использованием вариационных оценок) можно показать, что в этом случае для нулевой зоны закон дисперсии имеет вид

$$E_0(p) = -|E_0| [1 + 4e^{-\kappa_0 L} \cos(pL/\hbar) + O(e^{-2\kappa_0 L})], \quad (16.11)$$

где $|E_0| = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$ — энергия связи частицы в отдельной изолированной ямке [1]. Так же обстоит дело и в случае скомпенсированного поля с $\int_a dx U(x) = 0$, когда наряду с областями притя-

жения имеются области отталкивания. Частица в изолированной ячейке такого потенциала по-прежнему находится в связанном состоянии, а все сказанное относительно слабого поля притяжения, включая формулу (16.11), остается справедливым, если положить

$$\kappa_0 = -(m^2/\hbar^4) \iint_a dx dx' U(x) U(x') |x - x'|.$$

Для модели δ -образных ям формула (16.11) вытекает непосредственно из точного дисперсионного уравнения

$$\operatorname{ch} \kappa L - (\kappa_0/\kappa) \operatorname{sh} \kappa L = \cos(pL/\hbar); \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}, \quad E < 0, \quad (16.12)$$

если $\kappa L \gg 1$. Сопоставляя результаты приближения сильной связи с точным решением для δ -модели (16.12), убеждаемся, что формула (16.11) с достаточно высокой точностью описывает структуру нулевой зоны вплоть до промежуточных значений $L \sim \kappa_0^{-1}$, когда ширина этой зоны становится порядка энергии связи для изолированной ямы.

Метод функций Грина оказывается весьма эффективным при теоретическом исследовании влияния различных возмущений периодического потенциала (дефектов, примесей, электрических и магнитных полей [36]), а также энергетического спектра неупорядоченных систем [103].

Добавим, что, хотя модель δ -образного потенциала пригодна для описания короткодействующего поля только в одномерном случае, существуют ее обобщения на многомерные случаи. Так, аналог периодической δ -модели в трехмерном случае исследовался в работе [144], а линейные цепочки ям малого радиуса в трехмерном пространстве и другие подобные вопросы рассмотрены в монографии [56].

В заключение еще раз обратим внимание на тот факт, что приближению слабой связи соответствуют поля с малой амплитудой и с не очень большим периодом. Если же период достаточно велик, то реализуется случай сильной связи. В частности, для локализованных полей притяжения это означает, что малые потенциальные ямки будут отделены слабопроницаемыми барьерами (в области $E < 0$ есть лишь одна экспоненциально узкая зона), а поля нелокального типа при этом могут быть только сильными: и барьеры, и ямы велики (применимо квазиклассическое приближение). Таким образом, для нелокальных полей условие слабого поля имеет вид $mL^2U_0 \ll \hbar^2$, а для локальных — $ma^2U_0 \ll \hbar^2$ (если к тому же $maLU_0 \gg \hbar^2$, то возникает сильная связь).

Любопытно сопоставить результаты теории возмущений с квазиклассическими. Например, формула для щелей $\delta E_s = 2|U_s|$ согласуется с соответствующим квазиклассическим [147] выражением $\delta E_s = (2/\pi)\hbar\omega(E_s)\sqrt{R(E_s)}$ при малых коэффициентах отражения R от отдельного барьера. Ширина s -й зоны определяется в нулевом приближении теории возмущений величиной

$$\Delta E_s = (2s + 1)\pi^2\hbar^2/2mL^2,$$

что также при больших энергиях близко к квазиклассическому результату [147] $\Delta E_s = (2/\pi)\hbar\omega(E_s)$, где $\omega(E)$ — частота классических условных колебаний между вершинами соседних барьеров.

Заметим также, что оба подхода — квазиклассический и слабого поля (для слабой и для сильной связи) — позволяют

найти параметры зонной структуры для произвольного профиля поля. Они отличаются достаточной простотой и наглядностью конечных формул и тех переменных, через которые выражены искомые величины.

Исследуемые вопросы относятся к теории энергетических зон частиц, движущихся в плоскостойких структурах, в частности в средах с искусственной периодичностью (пленочных слоях, так называемых сверхрешетках и т. п.), где интересующая нас ветвь движения сквозь слои отделяется от ветвей движения вдоль плоских слоев. Кроме того, областью приложения может служить распространение возбуждений (квазичастиц) внутри каналов (проволок, нитей) с достаточно малыми поперечными размерами и периодическими свойствами. Некоторые конкретные примеры таких систем рассмотрены ниже.

Проблема структуры энергетических зон тесно связана, с одной стороны, с вопросом о локальных связанных состояниях, когда рассматриваются нарушения периодичности (другой аспект — учет динамического характера источника поля, т. е. возможности движения самой «решетки», приводящего, в частности, к явлению так называемых квантовых кристаллов [64]). С другой стороны, исследование конечной периодической цепочки приводит к задаче о влиянии граничных условий [147] (например, появление таммовских состояний [86, 89]) и изучению поверхностных свойств. Здесь интересна также и другая предельная процедура — переход к зонам с точки зрения квазиуровней [149], когда решается внешняя задача резонансного отражения волн периодической системой. Оба подхода в пределе неограниченного поля дают одинаковые результаты, дополняя друг друга и позволяя глубже понять картину происхождения зон.

Системы с искусственно созданными периодическими свойствами. Наряду с предложенными ранее объемными искусственными периодическими средами (сверхрешетки [80, 135, 138], «замороженные» волны [137], ультразвуковое поле [136]) можно рассмотреть некоторые примеры эффективно одномерных и двумерных систем с искусственно созданными периодическими свойствами, основанных на другом принципе. В соответствующих моделях заряженные частицы движутся вдоль пространственных или плоских линий (винтовая линия, плоская цепочка полуокружностей и т. п.) или вдоль гофрированных поверхностей (например, плоскость с круглым гофром — «шифер») в определенным образом направленном постоянном однородном электрическом поле. Такие системы, описываемые синусоидальным

потенциалом, допускают теоретический расчет с помощью хорошо изученных специальных функций (Матье [61]). При этом энергетический спектр частиц имеет зонную структуру (в частности, образуются минизоны), регулируемую путем изменения напряженности электрического поля и существенно влияющую на физические свойства устройства.

Рассмотрим кратко особенности квантового описания для отдельных носителей заряда в винтовой модели (рис. 4). Пусть движение частицы с массой m (квадратичный изотропный закон дисперсии) и зарядом $e = -|e|$ происходит вдоль правой цилиндрической винтовой линии с шагом $2\pi b$ и радиусом R : $x = R \cos \varphi$; $y = R \sin \varphi$; $z = b\varphi$, $-\infty < \varphi < \infty$. В постоянном однородном электрическом поле E , направленном по оси x , потенциальная энергия частицы равна $U(\varphi) = -eEr = |e|ER \cos \varphi$. Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний с энергией ε при выборе в качестве обобщенной координаты длины дуги s , отсчитанной от точки винтовой линии с $\varphi = 0$, имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{ds^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon - |e|ER \cos \frac{s}{\sqrt{b^2 + R^2}} \right) \Psi = 0. \quad (16.13)$$

Таким образом, движение эквивалентно чисто одномерному с эффективной массой m в синусоидальном поле с периодом $L = 2\pi\sqrt{b^2 + R^2}$ и амплитудой $\varepsilon_R = |e|ER$. При другом выборе обобщенной координаты (z или φ) соответствующим образом переопределяются эффективная масса и период. Решение задачи определяется свойствами уравнения Матье [61].

В случае слабых ($\varepsilon_R \ll \varepsilon_L = \pi^2\hbar^2/2mL^2$) или промежуточных ($\varepsilon_R \sim \varepsilon_L$) полей для исследования структуры энергетического спектра можно использовать теорию возмущений [134]. При этом ширина первой щели (между нулевой и первой зонами) $\delta\varepsilon_1 = \varepsilon_R$ значительно превосходит остальные ($\delta\varepsilon_2 = \varepsilon_R^2/8\varepsilon_L$ и т. д.). Ширина невозмущенной нулевой зоны равна $\Delta\varepsilon_0 = \varepsilon_L$. В случае сильного поля ($\varepsilon_R \gg \varepsilon_L$) применимо квазиклассическое приближение в сочетании с точным решением вблизи вершин барьеров [147, 149]. При энергиях, близких к вершинной, в критическом диапазоне шириной $\sim \sqrt{\varepsilon_R \varepsilon_L}$ содержится порядка $\ln \varepsilon_R/\varepsilon_L$ зон. Характерной чертой этого

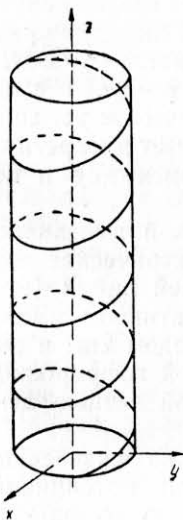


Рис. 4

диапазона энергий в рассматриваемом случае простых максимумов барьеров является то, что ширины зон и щелей одинаковы. При конечном числе витков речь идет о квазистационарных состояниях или о внешней задаче прохождения частиц сквозь цепочку синусоидальных барьеров и ям. Резонансная прозрачность отвечает системе квазиуровней, образующих зоны (полосы пропускания), разделенные областями энергий с большим отражением (полосовой энергетический фильтр). О других деталях зонной структуры см. в [134, 147, 149].

В пределе $R \rightarrow 0$ (растянутая намотка, малая кривизна винтовой линии) получается одномерное движение вдоль оси z . В случае $b \rightarrow 0$ (плотная намотка, малое кручение линии) в уравнении (16.13) удобно перейти к обобщенной координате $\varphi = 2\pi s/L$. При этом можно отметить аналогию с задачей о ротаторе в однородном поле, в которой отбираются лишь периодические решения (φ ограничено одним витком: $0 \leq \varphi \leq 2\pi$), что отвечает дискретным значениям энергии, соответствующим чередующимся дну и потолку зон в задаче с неограниченным φ .

Такое же решение получается и для плоской змеевидной цепочки полуокружностей радиуса R , когда электрическое поле лежит в ее плоскости перпендикулярно к средней линии (прямой): возникает одномерное движение с эффективной массой m в синусоидальном потенциальном поле с периодом $2\pi R$ и амплитудой $|e|ER$. Задача для плоскости с круглой гофрировкой отличается от предыдущей лишь дополнительной ветвью движения в гофрируемой плоскости.

Интересно, что все эти системы дают одну из физических реализаций одномерной синусоидальной модели потенциала. Любопытно, что, несмотря на достаточно сложную конфигурацию, они приводят к одной из немногих задач квантовой механики, решение которых точно выражается через известные специальные функции.

Помимо отмеченных структур с синусоидальным полем, возможны и другие формы линий и поверхностей (иной профиль гофра, другие элементы цепочки, спиралевидные кривые и т. п.). Для них уравнение Шредингера также сводится к одномерному в эффективном периодическом потенциальном поле (более общему уравнению Хилла), и возникают зоны, исследование которых в общем случае возможно на основе приближенных методов.

Важным достоинством рассматриваемых систем проволоочной и пленочной конфигурации является возможность плавного изменения в широких пределах основных параметров эффективного потенциала за счет напряженности электрического поля

(а также регулировки геометрических величин, например шага винтовой линии или радиуса несущего цилиндра).

Для практической реализации подобных сред искусственной периодичности необходимо создать весьма тонкие каналы (например, размерноквантованные проволоки, нити, пленки), в которых не возбуждаются поперечные ветви движения и нет экранировки внешнего электрического поля. Эти трубки или слои движения можно условно назвать «квантоводами». Такие системы с нестатическими, перестраиваемыми в процессе работы параметрами зон могут найти применение, в частности, в новом направлении функциональной электроники — квантовой микроэлектронике [83].

Известно, что многие задачи из различных разделов физики и техники приводят к уравнению Матье [61] (см. также [62, 87]). Синусоидальная модель потенциала получила широкое распространение в квантовой механике. Много внимания ей уделили Морз (начиная от попыток описания движения электронов в кристаллах и кончая двумя томами книги [3]) и Бриллюэн [19, 59].

С помощью синусоидальной модели поля решаются не только зонные задачи. Так, движение квантового маятника тоже изучается на основе этой модели [21] (с другой точки зрения это есть задача о ротаторе в однородном поле [54]). Нужно сказать, что квантовая картина колебаний маятника гораздо богаче явлениями, чем соответствующая классическая. Это и специфика нулевых колебаний, и глубокое туннелирование в условиях колебательного режима движения, и плавный переход от колебания к вращению в некотором критическом диапазоне энергий (в отличие от классического разрыва Пуанкаре [19]), и надбарьерное отражение, приводящее к расщеплению уровней энергии вращательных состояний. Добавим, что к этой же задаче приводит рассмотрение движения частицы по эллипсу.

Кроме того, в квантовой химии модель синусоидального потенциала описывает эффекты так называемого заторможенного внутреннего вращения в молекулах типа этана и этилена [84]. Здесь также существенны несколько витков синусоидального поля с соответствующими граничными условиями периодичности.

Рассмотренные системы с искусственной периодичностью дополняют этот перечень.

*Но, строго между нами — теоретиками:
Что мы будем делать со всеми этими данными?*

Р. Фейнман

1. Рассмотрены следующие интегральные методы нелокального типа: метод обобщенного соотношения неопределенностей, метод энергетической плотности состояний, метод эффективных полей.

В качестве приложения обсуждаемых методов исследованы: некоторые особые свойства квантовых идеальных газов (фазовые переходы в бозе-газах со степенной зависимостью плотности состояний от энергии, аномалии некоторых ферми-газов в области промежуточных температур); зоны энергии в эффективно одномерных периодических системах (структура энергетического спектра в случае слабых полей, среды с искусственно созданными периодическими свойствами).

2. Интересна возможность обобщения соотношения неопределенностей при попытке рассмотреть величины для разных моментов времени, а также более полно использовать неравенство Шварца, учтя корреляцию между изучаемыми величинами. Вопрос о соотношении неопределенностей тесно переплетается с другими интегральными методами. Во-первых, эта закономерность охватывает все случаи квантовомеханического движения, так что является типично интегральной. Во-вторых, неопределенности касаются не только локальных характеристик типа координаты. В-третьих, сам способ получения обобщенного соотношения неопределенностей на основе операторных инвариантов (следов) является типично «нефункциональным».

Изучение координатно-импульсных аномалий для слабо-связанных состояний продолжает тему критических свойств движения частиц из второй части книги.

3. Метод энергетической плотности состояний пронизывает все разделы. В частности, с него начинается изложение первой главы. Он является основой «нефункционального» подхода, он же позволяет диагностировать многие тонкие квантовые эффекты при движении частиц в критических условиях появления связанных состояний и вблизи резонансов. В современных приложениях квантовой механики язык плотности состояний часто используется для описания различных физических явлений.

Плотность состояний — нелокальная величина не только в силу того, что описывает систему в энергетических терминах, но и поскольку объединяет отдельные уровни энергии и их крат-

ности вырождения. Способы ее вычисления (в частности, связь с резольвентой гамильтониана) имеют типично «нефункциональный» характер.

4. Говоря о методе эффективных полей, мы прежде всего отмечаем возможность усредненного учета микроскопических влияний при распространении возбуждений в неоднородных средах. Соответствующие модели полей часто оказываются очень удобными для применения метода интегральных уравнений при исследовании стационарных состояний (кусочно-постоянный одномерный потенциал в плоскостных средах, δ -аппроксимация тонких прослоек, феноменологический учет поглощения и испускания частиц с помощью комплексного поля). Одночастичный и часто одномерный характер ветвей движения позволяет упростить картину в сложных системах, выделяя основные для изучаемого явления степени свободы. Модель периодического потенциала принесла успех при разработке квантовой теории твердого тела и продолжает оставаться интересным объектом исследования и поныне. Сепарабельные модели нелокального взаимодействия получили распространение в различных областях квантовой физики.

Словом, метод эффективных полей — типичный интегральный метод нелокального типа, хотя часто имеет дело с потенциалами в координатном пространстве.

5. Особо следует отметить связь рассмотренных методов с временной картиной. Соотношение неопределенностей охватывает как стационарные, так и нестационарные состояния. Метод плотности состояний описывает структуру энергетического спектра и более тесно связан именно со стационарными состояниями, в частности смешанными (термодинамическое равновесие). В методе эффективных полей нами затронуты только вопросы постоянных внешних влияний, хотя, конечно, переменные эффективные поля также широко используются. Матрица связи локальных решений в квантовой механике относится только к стационарным состояниям (дифференциальные уравнения второго порядка в координатном представлении).

6. Непосредственно к рассмотренным интегральным методам примыкают: параметрическое варьирование, вириальные соотношения, пропагаторы, динамика корреляций.

Интегральный нелокальный характер метода матрицы связи локальных решений [21] отражен в названии метода. Этот удобный расчетный прием охватывает практически все случаи квантовомеханического движения частиц с квадратичным законом дисперсии в стационарных состояниях: финитное (связанные

состояния), полуфинитное (полное отражение), инфинитное (рассеяние), квазиуровни, зоны. Он особенно удобен в тех случаях, когда в системе имеются одинаковые участки поля (описание сводится к итерированию соответствующего оператора «преодоления» особенностей поля), а также в рамках квазиклассического приближения в сочетании с локально точным решением.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как только одна проблема решена, на ее место всплывают бесчисленные новые проблемы.

Д. Гильберт

При выборе наиболее характерных интегральных методов решающими оказались следующие соображения. Чтобы материал еще не освещался в достаточной мере в монографической литературе по квантовой механике. Чтобы не выходить за рамки традиционных тем собственно нерелятивистской квантовой механики. Чтобы отобрать те приложения, которые были бы наглядной иллюстрацией применения обсуждаемых методов и одновременно имели самостоятельный физический интерес. В соответствии с названием книги предметом исследования являются не «методы механики», а «методы в механике».

Отбирались иллюстрации, требующие незначительных расчетов усилий читателя. Если опущены некоторые не очень громоздкие выкладки, то они, как кажется автору, могут быть воспроизведены без обычного раздражения той части читателей, которые не любят оговорок, «как легко видеть», «нетрудно показать» и т. п. С другой стороны, учитывалось требование повторять какие-либо новые утверждения, еще и еще раз пояснять возникающие эффекты. Результаты подвергались настолько подробному обсуждению, насколько позволяет специфика «жанра» монографии (и ограничение объема).

Трудность состоит также и в том, что отчасти приходится иметь дело с исследованием методов как таковых. Обычно решение какой-либо проблемы ведется с использованием различных методов (конкретный вопрос — много методов). В данном случае берется другой «срез» — в поле зрения находится отдельный метод, а иллюстрируются его применения и связи с другими методами (конкретный метод — много вопросов). Примеры изложения методов квантовой теории, в частности квантовой механики, мы находим в книгах Мигдала [5], Хединга [6], Бабинова [26], Демкова и Островского [56], Ахнезера и Пелетмин-

ского [95] (см. также [3, 38, 74, 75, 33, 34, 37]). Поучительный пример возможностей развития одного метода, последовательного применения одной идеи демонстрирует книга Мошинского [37], в которой скромная модель гармонического осциллятора применяется при решении широкого спектра проблем «от атомов до кварков».

Интересно, что наряду с методами, специфическими для квантовой механики, в ней применяются и заимствованные из классической, а также квантовополевые методы. Часть последних зародилась еще в недрах механики, а затем способствовала становлению квантовой теории поля и вновь возвратилась в механику (и в ее приложения в статистике и кинетике), обогащенная новым содержанием. Есть примеры обратного воздействия квантомеханических приложений на развитие современной квантовой теории поля.

Выражение наиболее общих закономерностей движения на языке интегральных подходов (принцип стационарности действия) характерно и для классической механики, где делается шаг к охвату движения в целом, получивший последовательную реализацию в концепциях квантовой механики, в частности в ее интегральных методах.

В центре внимания книги находятся следующие интегральные методы: нелокальная квазиклассика (нефункциональный подход), интегральные уравнения для связанных состояний и резонансов, обобщенное соотношение неопределенностей, энергетическая плотность состояний, эффективные поля. Проблема энергетического спектра является одной из главнейших для квантовой механики и ее приложений. Именно ей посвящены основные разделы монографии.

В обычном ВКБ-методе задача сводится к решению стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении. Это дифференциальное уравнение лишь в небольшом числе случаев допускает строгое решение, так что приходится применять приближенные методы нахождения асимптотик волновой функции и их «сшивания». Рассматриваемый в книге так называемый «нефункциональный» подход фактически основан на идее непосредственного перехода к интересующим нас физическим характеристикам движения в целом. Это соответствует «усреднению» как отдельных колебаний волновой функции внутри классической области движения вдали от поворотных точек, так и особенностей вблизи этих точек и неклассических экспоненциально малых «хвостов» волновых функций. Получаются выражения сразу в виде разложений по степеням постоянной Планка. В традиционном подходе практически трудно полу-

чить поправки второго и более высоких квазиклассических приближений. Кажется также интересным прямой способ получения правил квантования энергии в рамках нефункционального подхода.

В современной физике все большее внимание привлекают проблемы создания новых систем, материалов, структур с заранее заданным строением энергетического спектра. В связи с этим особый интерес вызывают среды с искусственно созданными тонкими локальными свойствами, в частности плоскостолостые. При этом важную роль играют явления образования локальных связанных состояний и резонансного прохождения частиц сквозь подобные среды. Наиболее подходящими теоретическими методами исследования здесь оказались интегральные уравнения. Поучительно, что в проблеме существования локальных связанных состояний важны не только размерность пространства, но и закон дисперсии, наличие областей отталкивания, влияние граничных условий и других нелокальностей поля.

Кажется заслуживающими внимания задача о встречных потоках частиц, а также учет корреляции и одновременной зависимости величин в обобщенном соотношении неопределенностей. Не исчерпали своих возможностей методы энергетической плотности состояний и эффективных полей, затронутые в третьей главе книги.

Разумеется, возникли новые вопросы. Частично они уже были сформулированы при обсуждении результатов в отдельных главах книги. Нуждаются в выяснении вопросы: об оптимизации правил квантования в рамках НФП, об эффективных методах сепарабельной аппроксимации в русле интегральных уравнений, о точности квазиклассического приближения при расчете различных характеристик движения, о расширении сферы приложений НФП, об использовании явления резонансного поглощения и испускания частиц, о реализации предложенных систем с искусственно созданными периодическими свойствами и т. д.

Некоторые функции Грина стационарного уравнения Шредингера для одной частицы

1. Свободное одномерное движение с энергией $E > 0$:

$$R_+(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} \exp(ik|x - x'|).$$

Здесь и далее используется обозначение $\hbar k = \sqrt{2mE}$.

2. Свободное трехмерное движение ($E > 0$):

$$R_+(r, r'; E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot \frac{\exp(ik|r - r'|)}{|r - r'|}.$$

3. Свободное движение в пространстве n измерений ($E < 0$):

$$R(r, r'; E) = \frac{m\pi^{n/2-1}}{2^{n/2-1}\pi^{n/2}\hbar^2} \cdot \frac{K_{n/2-1}(x|r - r'|)}{|r - r'|^{n/2-1}}; \quad \hbar x = \sqrt{2m|E|};$$

$K_n(x)$ — функция Макдональда.

4. Предельно короткодействующее поле ($E > 0$): $U(x) = u\delta(x)$;

$$R_+(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} \left[e^{ik|x-x'|} - \frac{ix_0/k}{1 + ix_0/k} e^{ik(|x|+|x'|)} \right]; \quad x_0 = mu/\hbar^2.$$

5. Свободное одномерное движение в полупространстве ($E > 0$)

$$R_+(x, x'; E) = \frac{im}{\hbar^2 k} [e^{ik|x-x'|} - e^{ik(x+x')}] ; \quad x, x' > 0.$$

6. Свободное движение на интервале $0 < x < L$ (две непроницаемые границы) с энергией $E > 0$:

$$R(x, x'; E) = (2m/\hbar^2 k \sin kL) [\theta(x - x') \sin k(L - x) \sin kx' + \theta(x' - x) \sin kx \sin k(L - x')].$$

7. Предельно короткодействующее поле $\hat{H}_1 = u\delta(\hat{x} - x_0)$ на произвольном фоне:

$$R(x, x'; E) = R^0(x, x'; E) - \frac{uR^0(x, x_0; E)R^0(x_0, x'; E)}{1 + uR^0(x_0, x_0; E)},$$

где R^0 — ФГ для фона.

8. Переход от одномерных функций Грина к трехмерным для плоскостных сред:

$$R(r, r'; E) = (2\pi)^{-1} \int_0^\infty dq q J_0(q|\bar{r} - \bar{r}'|) R(x, x'; E - \hbar^2 q^2/2m).$$

9. Свободное одномерное движение с четверным законом дисперсии $T(p) = Bp^4$:

$$R(x, x'; E < 0) = (\kappa/2 |E|) \exp(-\kappa |x - x'|/\sqrt{2}) \sin(\kappa |x - x'|/\sqrt{2} + \pi/4); \quad \hbar \kappa = \sqrt[4]{|E|/B}.$$

10. Одномерная ветвь движения в случае двух однородных сред с плоской границей раздела и скачком потенциала $U(x) = \Delta U \theta(-x)$;

$$\text{а) } R_+(x, x'; E) = [2m/\hbar^2(q - ik)] \{ \theta(x - x') \chi(x) \varphi(x') + \theta(x' - x) \varphi(x) \chi(x') \}; \quad 0 < E < \Delta U; \quad \chi(x > 0) = \exp(ikx); \quad \chi(x < 0) = \operatorname{ch} qx + (ik/q) \operatorname{sh} qx; \quad \varphi(x > 0) = \cos kx + (q/k) \sin kx; \quad \varphi(x < 0) = \exp(qx); \quad \hbar k = \sqrt{2mE}; \quad \hbar q = \sqrt{2m(\Delta U - E)}.$$

$$\text{б) } R_+(x, x'; E) = [2im/\hbar^2(k + \zeta)] \{ \theta(x - x') \chi(x) \varphi(x') + \theta(x' - x) \varphi(x) \chi(x') \}; \quad E > \Delta U; \quad \hbar \zeta = \sqrt{2m(E - \Delta U)}; \quad \chi(x > 0) = \exp(ikx); \quad \chi(x < 0) = \cos \zeta x + (ik/\zeta) \sin \zeta x; \quad \varphi(x > 0) = \cos kx - (i\zeta/k) \sin kx; \quad \varphi(x < 0) = \exp(-i\zeta x).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Квазиклассическое разложение для функций Грина

Рассматриваем случай системы с гамильтонианом $H(\hat{p}, \hat{r})$ в пространстве n измерений. Функция Грина может быть записана следующим образом: $R(r, r'; z) = \langle r | (H - z)^{-1} | r' \rangle = \int dp \langle r | \hat{R}(z) | p \rangle \langle p | r' \rangle$. Так как $(\hat{H} - z) \hat{R}(z) = 1$, то

$$\langle r | [H(\hat{p}, \hat{r}) - z] \hat{R}(z) | p \rangle = \langle r | p \rangle,$$

или $[H(\hat{p}, r) - z] \langle r | R | p \rangle = \langle r | p \rangle$. Отсюда для величины $B(r, p, z) \equiv \hbar^n \langle r | R | p \rangle \langle p | r \rangle$, определяющей функцию Грина в соответствии с формулой

$$R(r, r'; z) = \hbar^{-n} \int dp B(r, p, z) \exp[ip(r - r')/\hbar], \quad (*)$$

вытекает уравнение $[H(\hat{p} + p, r) - z] B(r, p, z) = 1$, которое удобно переписать в виде $[H(p, r) - z] B = 1 - [H(p + \hat{p}, r) - H(p, r)] B$, где $H(p, r)$ — классическая функция Гамильтона. Разложение по степеням $\hbar$ требует задания правил симметризации гамильтониана, которые в общем случае не могут быть установлены при феноменологическом введении произвольной зависимости гамильтониана от некоммутирующих переменных p и r . По этой причине необходимо привлечь некоторые дополнительные сведения

о структуре гамильтониана. Предположим, что $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{r})$, тогда имеем уравнение $[T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{r}) - z]B = 1 - [T(\mathbf{p} + \hat{\mathbf{p}}) - T(\mathbf{p})]B$, где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Производя разложение $T(\mathbf{p} - i\hbar\nabla)$ по степеням $\hbar$ и записывая $B = \sum_{s=0}^{\infty} (\hbar/i)^s B_s$, получаем для первых членов выражения через производные по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{r}$:

$$B_0 = 1/[T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{r}) - z]; \quad B_1 = B_0 \mathbf{v} \nabla U;$$

$$B_2 = 3B_0^5 (\mathbf{v} \nabla U)^2 - B_0^4 (\mathbf{v} \nabla)(\mathbf{v} \nabla)U - B_0^4 T_{kl}'' U_k' U_l' + B_0^3 T_{kl}'' U_{kl}''/2.$$

Штрихи и индексы означают производные по соответствующим аргументам, а $\mathbf{v} = \partial T / \partial \mathbf{p}$. Имеется в виду суммирование по дважды встречающимся индексам $k, l = 1, 2, \dots, n$. Величину B_2 целесообразно выразить через производные по z :

$$B_2 = \left(\frac{1}{8} T_k' T_l' U_k' U_l' \frac{\partial^4}{\partial z^4} - \frac{1}{6} T_k' T_l' U_{kl}'' \frac{\partial^3}{\partial z^3} - \right. \\ \left. - \frac{1}{6} T_{kl}'' U_k' U_l' \frac{\partial^3}{\partial z^3} + \frac{1}{4} T_{kl}'' U_{kl}'' \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \frac{1}{T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{r}) - z}.$$

Имея в виду применение в § 1, вычислим диагональные матричные элементы оператора $\hat{R}_+(E) - \hat{R}_-(E) = \hat{R}(E + i0) - \hat{R}(E - i0)$. При подстановке полученного разложения для B в формулу (*) интегрирование в импульсном пространстве приведет к исчезновению линейного члена с B_1 и некоторому упрощению квадратичных, так что в результате приходим к выражению

$$\langle \mathbf{r} | \hat{R}_+(E) - \hat{R}_-(E) | \mathbf{r} \rangle = \frac{2\pi i}{h^n} \int d\mathbf{p} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24} \left[2U_{kl}'' \frac{\partial^2}{\partial E^2} - \right. \right. \\ \left. \left. - U_k' U_l' \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] T_{kl}'' \right\} \delta[E - T(\mathbf{p}) - U(\mathbf{r})].$$

В случае квадратичного изотропного закона дисперсии $T(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$ имеем

$$\langle \mathbf{r} | \hat{R}_+(E) - \hat{R}_-(E) | \mathbf{r} \rangle = \\ = \frac{2\pi i}{h^n} \int d\mathbf{p} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{24m} \left[2\Delta U \frac{\partial^2}{\partial E^2} - (\nabla U)^2 \frac{\partial^3}{\partial E^3} \right] \right\} \delta[E - T(\mathbf{p}) - U(\mathbf{r})],$$

а чтобы найти члены более высокого порядка (B_3 и т. д.), при этом можно пользоваться рекуррентным соотношением, вытекающим из уравнения для величины B : $B_0^{-1} B_s = -\mathbf{v} \nabla B_{s-1} - \Delta B_{s-2}/2m$.

Здесь мы сталкиваемся с типичной ситуацией, когда ради вычисления некоторой величины привлекается более сложная, хотя в ней и используется только незначительная часть информации. Именно ФГ имеют более простые разложения, чем искомые величины типа $\langle r | \delta(E - \hat{H}) | r \rangle$. Это же характерно, например, и для современной теории возмущений в квантовой статистике, где применяются методы квантовой теории поля (гриновские функции, диаграммная техника и т. п.).

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Об одной симметризации операторной экспоненты

Покажем, что экспоненту от суммы двух операторов можно симметризовать следующим образом:

$$\exp(A + B) = \exp(B/2) \exp(A) \exp(B/2) \exp\{[B, [B, A]]/24 - [A, [A, B]]/12 + (\text{коммутаторы более высокого порядка})\}. \quad (\text{ПЗ.1})$$

Для этого рассмотрим величины более общего вида — пропагаторы [21] (операторы эволюции) $J_A(t, t_0)$, удовлетворяющие уравнению $\partial J_A / \partial t = A(t) J_A$ с начальным условием $J_A(t_0, t_0) = 1$. Параметрический оператор A (генератор) в общем случае зависит от аргумента t . В дальнейшем удобна краткая запись $J(A) \equiv J_A(t, t_0)$. Основываясь на мультипликативном свойстве [21] пропагаторов $J(A + B) = J(A) J(\tilde{B})$, где $\tilde{B} = J^{-1}(A) B J(A)$, получаем

$$J(A + B) = J(B/2) J(A) J(B/2) J(C), \quad (\text{ПЗ.2})$$

где $C = \bar{\bar{A}} - \bar{\bar{A}} + \bar{\bar{B}}/2 - \bar{\bar{B}}/2$. Черта сверху означает, что $\bar{A} = J^{-1}(B/2) A J(B/2)$. Пусть $\partial A / \partial t = \partial B / \partial t = 0$, тогда $J(A + B) = \exp[(t - t_0)(A + B)]$; $J^{-1}(A) = \exp[(t_0 - t)A]$. При $t_0 = 0$ имеем: $\bar{A} = \exp(-tB/2) A \exp(tB/2) = A - t[B, A]/2 + t^2[B, [B, A]]/8 - \dots$;

$\tilde{B} = \exp(-tA) B \exp(tA) = B - t[A, B] + t^2[A, [A, B]]/2 - \dots$ и т. д., так что $C = t^2[B, [B, A]]/8 - t^2[A, [A, B]]/4 + \dots$. Во всех случаях невыписанные члены являются коммутаторами более

высокого порядка. Следовательно, $J(C) = \text{Texpr} \left[\int_0^t dt' C(t') \right] \simeq \exp(t^3[B, [B, A]]/24 - t^3[A, [A, B]]/12)$. Полагая $t = 1$ (при $t_0 = 0$), приходим согласно (ПЗ.2) к правилу (ПЗ.1). В частности, $\exp[-\beta(T + U)] = \exp(-\beta U/2) \exp(-\beta T) \exp(-\beta U/2) \exp[\hbar^2 \beta^3 \{U, \{U, T\}\}/24 - \hbar^2 \beta^3 \{T, \{T, U\}\}/12 + O(\hbar^3)]$, откуда и вытекает использованное в § 1 квазиклассическое разложение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— 3-е изд., перераб. и доп. при участии Л. П. Питаевского.— М.: Наука, 1974.— 752 с.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика.— 2-е изд., перераб.— М.: Наука, 1973.— 704 с.
3. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики / Пер. с англ. в 2-х т.— М.: Изд-во иностр. лит. Т. 1, 1958.— 930 с.; т. 2, 1960.— 886 с.
4. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. 2-е изд., испр. и доп.— М.: Наука, 1971.— 544 с.
5. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории.— М.: Наука, 1975.— 336 с.
6. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов. (Метод ВКБ) / Пер. с англ. М. В. Федорюка. Под ред. В. П. Маслова.— М.: Мир, 1965.— 238 с.
7. Фреман Н., Фреман П. У. ВКБ-приближение / Пер. с англ. Б. А. Лысова. Под ред. А. А. Соколова.— М.: Мир, 1967.— 168 с.
8. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 1 / Пер. с фр. В. Т. Хозяинова. Под ред. Л. Д. Фаддеева.— М.: Наука, 1978.— 480 с.
9. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 2 / Пер. с фр. П. П. Кулиша. Под ред. Л. Д. Фаддеева.— М.: Наука, 1979.— 584 с.
10. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц.— М.: Госатомиздат, 1963.— 344 с.
11. Олвер Ф. Введение в асимптотические методы и специальные функции / Пер. с англ. Ю. А. Брычкова. Под ред. А. П. Прудникова.— М.: Наука, 1978.— 376 с.
12. Бабиш В. М., Булдырев В. С. Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн.— М.: Наука, 1972.— 456 с.
13. Эрдейи А. Асимптотические разложения / Пер. с англ. Н. Я. Виленикина.— М.: Физматгиз, 1962.— 128 с.
14. Пономарев Л. И. Лекции по квазиклассике.— Киев: Ротапринт ИТФ АН УССР, 1968.— 79 с.
15. Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики.— М.: Наука, 1976.— 292 с.
16. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, ч. I. 3-е изд., доп., Е. М. Лифшицем и Л. П. Питаевским.— М.: Наука, 1976.— 584 с.
17. Хуанг К. Статистическая механика / Пер. с англ. Н. М. Плакиды и В. Т. Хозяинова. Под ред. Ю. А. Церковникова.— М.: Мир, 1966.— 520 с.
18. Хилл Т. Статистическая механика / Пер. с англ. Ю. А. Церковникова и В. В. Толмачева. Под ред. С. В. Тябликова.— М.: Изд-во иностр. лит., 1960.— 486 с.
19. Бриллюэн Л. Научная неопределенность и информация / Пер. с англ. Т. А. Кузнецовой. Под ред. И. В. Кузнецова.— М.: Мир, 1966.— 272 с.

20. *Маслов В. П.* Теория возмущений и асимптотические методы.— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1965.— 553 с.
21. *Ульянов В. В.* Задачи по квантовой механике и квантовой статистике.— Харьков: Вища школа, 1980.— 216 с.
22. *Найфэ А. Х.* Методы возмущений / Пер. с англ. А. А. Меликяна. Под ред. Ф. Л. Черноусько.— М.: Мир, 1976.— 456 с.
23. *Титчмарш Э. Ч.* Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т. 1/Пер. с англ. В. Б. Лидского. Под ред. Б. М. Левитана.— М.: Изд-во иностр. лит., 1960.— 279 с.
24. *Зелевинский В. Г.* Конспект лекций по квантовой механике, ч. 1, 2.— Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1970. Ч. 1.— 289 с. Ч. 2.— 283 с.
25. *Заславский Г. М.* Лекции по применению метода ВКБ в физике.— Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1965.— 52 с.
26. *Бабиков В. В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. 2-е изд., испр. и доп.— М.: Наука, 1976.— 287 с.
27. *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Электронные свойства легированных полупроводников.— М.: Наука, 1979.— 416 с.
28. *Трикоми Ф.* Интегральные уравнения / Пер. с англ. И. Н. Векуа.— М.: Изд-во иностр. лит., 1960.— 299 с.
29. *Интегральные уравнения* / Забрейко П. П., Кошелев А. И., Красносельский М. А., Михлин С. Г., Раковщик Л. С., Стеценко В. Я.— М.: Наука, 1968.— 448 с.
30. *Мэтьюз Дж., Уокер Р.* Математические методы физики / Пер. с англ. В. П. Крайнова.— М.: Атомиздат, 1972.— 398 с.
31. *Цлаф Л. Я.* Вариационное исчисление и интегральные уравнения. Справочное руководство. 2-е изд., перераб.— М.: Наука, 1970.— 191 с.
32. *Рисс Ф., Секефальви-Надь Б.* Лекции по функциональному анализу / Пер. с фр. Д. А. Василькова. Под ред. С. В. Фомина. 2-е изд., перераб. и доп.— М.: Мир, 1979.— 590 с.
33. *Демков Ю. Н.* Вариационные принципы в теории столкновений.— М.: Физматгиз, 1958.— 168 с.
34. *Эпштейн С.* Вариационный метод в квантовой химии / Пер. с англ. А. И. Наумова. Под ред. А. М. Бродского.— М.: Мир, 1977.— 364 с.
35. *Ситенко А. Г.* Теория рассеяния. 2-е изд., перераб. и доп.— Киев: Вища школа, 1975.— 256 с.
36. *Каллуэй Дж.* Теория энергетической зонной структуры / Пер. с англ. В. П. Широковского. Под ред. С. В. Вонсовского.— М.: Мир, 1969.— 360 с.
37. *Мошинский М.* Гармонический осциллятор в современной физике: от атомов до кварков / Пер. с англ. Ю. Ф. Смирнова.— М.: Мир, 1972.— 149 с.
38. *Малкин И. А., Манько В. И.* Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем.— М.: Наука, 1979.— 320 с.
39. *Завадский В. Ю.* Вычисление волновых полей в открытых областях и волноводах.— М.: Наука, 1972.— 558 с.
40. *Сунакава С.* Квантовая теория рассеяния / Пер. с яп. И. И. Иванчика. Под ред. И. М. Дремина.— М.: Мир, 1979.— 270 с.
41. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. 3-е изд.— М.: Наука, 1976.— 527 с.
42. *Стоунхэм А. М.* Теория дефектов в твердых телах. Электронная структура дефектов в диэлектриках и полупроводниках. В 2-х т. / Пер. с англ. Под ред. И. Е. Дзялошинского.— М.: Мир, 1978.— Т. 1.— 275 с.; Т. 2.— 360 с.

43. Брандт Н. Б., Чудинов С. М. Электронная структура металлов.— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1973.— 332 с.
44. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. 5-е изд., перераб.— М.: Наука, 1976.— 664 с.
45. Шифф Л. Квантовая механика / Пер. с англ. Г. А. Зайцева. 2-е изд.— М.: Изд-во иностр. лит., 1959.— 473 с.
46. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика (с задачами) / Под ред. Н. Н. Боголюбова.— М.: Наука, 1976.— 336 с.
47. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. Квантовая механика.— М.: Наука, 1979.— 528 с.
48. Савельев И. В. Основы теоретической физики, т. 2. Квантовая механика.— М.: Наука, 1977.— 352 с.
49. Федорченко А. М. Основы квантовой механики.— Киев: Вища школа, 1979.— 272 с.
50. Бом Д. Квантовая теория / Пер. с англ. Шубиной Л. А. Под ред. С. В. Вонсовского. 2-е изд., испр.— М.: Наука, 1965.— 727 с.
51. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям / Пер. с англ. Э. М. Барлита и Ю. Л. Обухова. Под ред. В. С. Барашенкова.— М.: Мир, 1968.— 382 с.
52. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике.— М.: Гостехиздат, 1957.— 275 с.
53. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика.— М.: Наука, 1971.— 416 с.
54. Флюгге З. Задачи по квантовой механике / Пер. с англ. Б. А. Лысова. Под ред. А. А. Соколова. В 2-х т.— М.: Мир, 1974. Т. 1.— 341 с.; Т. 2.— 315 с.
55. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах / Пер. с англ. Под ред. Б. Т. Коломийца.— М.: Мир, 1974.— 472 с.
56. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике.— Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975.— 472 с.
57. Абрикосов А. А. Введение в теорию нормальных металлов.— М.: Наука, 1972.— 288 с.
58. Бреховских Л. М. Волны в слоистых средах. 2-е изд., перераб. и доп.— М.: Наука, 1973.— 343 с.
59. Бриллюэн Л., Пароди М. Распространение волн в периодических структурах / Пер. с фр. Л. М. Коврижных и А. Н. Лебедева. Под ред. П. А. Рязина.— М.: Изд-во иностр. лит., 1959.— 458 с.
60. Физический энциклопедический словарь. В 5-ти т.— М.: Сов. энцикл., 1960—1966.
61. Meixner J., Schäfer F. W. Mathieu'sche Funktionen und Sphäroidfunktionen.— Berlin: Springer — Verlag, 1954.— 414 S.
62. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. 5-е изд.— М.: Наука, 1971.— 1108 с.
63. Ахиезер А. И., Померанчук И. Я. Некоторые вопросы теории ядра. 2-е изд., перераб.— М.— Л.: Гостехиздат, 1950.— 416 с.
64. Каганов М. И., Лифшиц И. М. Квазичастицы.— М.: Наука, 1976.— 80 с.
65. Виленкин Н. Я. Специальные функции и теория представлений групп.— М.: Наука, 1965.— 588 с.
66. Фок В. А. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн.— М.: Сов. радио, 1970.— 517 с.
67. Современная квантовая химия, т. 1 / Пер. с англ. В. А. Абрамова, М. А. Воротынцева, Ю. Я. Гуревича. Под ред. А. М. Бродского и В. В. Толмачева.— М.: Мир, 1968.— 343 с.

68. *Современная квантовая химия*, т. 2 / Пер. с англ. В. В. Толмачева и Э. Д. Германа. Под ред. А. М. Бродского.— М.: Мир, 1968.— 319 с.
69. *Кумар К.* Теория возмущений и проблема многих тел для атомного ядра / Пер. с англ. А. Г. Миронова. Под ред. С. В. Тябликова.— М.: Мир, 1964.— 294 с.
70. *Розенберг Г. В.* Оптика тонкослойных покрытий.— М.: Физматгиз, 1958.— 570 с.
71. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. 2-е изд., испр. / Пер. с англ. С. Н. Бреуса, А. И. Головашкина, А. А. Шубина. Под ред. Г. П. Мотулевич.— М.: Наука, 1973.— 720 с.
72. *Туннельные явления в твердых телах* / Под ред. Э. Бурштейна и С. Лундквиста / Пер. с англ. И. П. Ипатовой и А. В. Субашиева. Под ред. В. И. Переля.— М.: Мир, 1973.— 421 с.
73. *Исихара А.* Статистическая физика / Пер. с англ. Д. Н. Зубарева и А. Г. Башкирова.— М.: Мир, 1973.— 471 с.
74. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике.— М.: Физматгиз, 1962.— 443 с.
75. *Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В.* Метод функций Грина в статистической механике.— М.: Физматгиз, 1961.— 312 с.
76. *Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.* Электронная теория металлов.— М.: Наука, 1971.— 415 с.
77. *Блекмор Дж.* Статистика электронов в полупроводниках / Пер. с англ. Под ред. Л. Л. Коренблита.— М.: Мир, 1964.— 392 с.
78. *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1 / Пер. с англ. Под ред. Д. Н. Зубарева и Ю. Л. Климонтовича.— М.: Мир, 1978.— 408 с.
79. *Москаленко С. А.* Бозе-эйнштейновская конденсация экситонов и би-экситонов.— Кишинев: Изд-во АН МССР, 1970.— 167 с.
80. *Голубев Л. В., Леонов Е. И.* Сверхрешетки.— М.: Знание, 1977.— 62 с.
81. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости* / Под ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница.— М.: Наука, 1977.— 400 с.
82. *Лифшиц И. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика, ч. 2.— М.: Наука, 1978.— 448 с.
83. *Ефимов И. Е., Горбунов Ю. И., Козырь И. Я.* Микроэлектроника. Проектирование, виды микросхем, новые направления.— М.: Высшая школа, 1978.— 312 с.
84. *Колебания молекул* / М. В. Волькенштейн, Л. А. Грибов, М. А. Ельяшевич, Б. И. Степанов. 2-е изд., перераб.— М.: Наука, 1972.— 700 с.
85. *Бродский А. М., Гуревич Ю. Я.* Теория электронной эмиссии из металлов.— М.: Наука, 1973.— 256 с.
86. *Дэвисон С., Левин Дж.* Поверхностные (таммовские) состояния / Пер. с англ. Под ред. Д. А. Киржница.— М.: Мир, 1973.— 232 с.
87. *Таблицы для вычисления функций Матье.*— М.: Изд-во ВЦ АН СССР, 1967.— 279 с.
88. *Шредингер Э.* Избранные труды по квантовой механике.— М.: Наука, 1976.— 424 с.
89. *Тамм И. Е.* Собрание научных трудов. В 2-х т.— М.: Наука, 1975. Т. 1.— 439 с. Т. 2.— 488 с.
90. *Нейман И.* Математические основы квантовой механики / Пер. с нем. М. К. Поливанова и Б. М. Степанова. Под ред. Н. Н. Боголюбова.— М.: Наука, 1964.— 368 с.
91. *Комник Ю. Ф.* Физика металлических пленок. Размерные и структурные эффекты.— М.: Атомиздат, 1979.— 264 с.

92. *Ларсон Д. К.* Размерные эффекты в электропроводности тонких металлических пленок и проволок. — В кн.: Физика тонких пленок. Современное состояние исследований и технические применения. Т. 6. Под общей ред. М. Х. Франкомба и Р. У. Гофмана / Пер. с англ. Под ред. В. Б. Сандомирского и А. Г. Ждана. — М.: Мир, 1973. — 392 с.
93. *Квантовые кристаллы.* Сб. статей / Пер. с англ. Под ред. С. В. Вонсовского. — М.: Мир, 1975. — 275 с.
94. *Вопросы квантовой теории необратимых процессов.* Сб. статей / Пер. с англ. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. — М.: Изд-во иностр. лит., 1961. — 365 с.
95. *Ахизер А. И., Пелетминский С. В.* Методы статистической физики. — М.: Наука, 1977. — 368 с.
96. *Халатников И. М.* Об одном методе вычисления статистической суммы. — ДАН СССР, 1952, 87, № 4, с. 539—542.
97. *Елютин П. В., Кривченко Д. В.* О применимости квазиклассического приближения. — ТМФ, 1974, 19, № 2, с. 233—236.
98. *Жирнов В. В., Халаян А. И.* О нефункциональном подходе в ВКБ-методе. — Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 11, с. 148—150.
99. *Ульянов В. В., Халаян А. И.* О нефункциональном подходе в ВКБ-методе. II. — Изв. вузов СССР, Физика, 1978, № 1, с. 143—145.
100. *Жирнов В. И.* К вопросу о природе обобщенного ВКБ-метода. — Изв. вузов СССР, Физика, 1966, № 5, с. 41—47.
101. *Ульянов В. В.* О квазиклассическом движении в особых случаях. — УФЖ, 1973, 18, № 11, с. 1848—1859.
102. *Ульянов В. В.* Особенности квантовомеханического движения в резко изменяющихся полях. Кандидатская диссертация. — Харьков: ХГУ, 1974. — 131 с.
103. *Лифшиц И. М.* О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем. — УФН, 1964, 83, № 4, с. 617—663.
104. *Лифшиц И. М.* О вырожденных регулярных возмущениях. I. Дискретный спектр. — ЖЭТФ, 1947, 17, № 11, с. 1017—1025.
105. *Лифшиц И. М.* О вырожденных регулярных возмущениях. II. Квазинепрерывный и непрерывный спектры. — ЖЭТФ, 1947, 17, № 12, с. 1076—1089.
106. *Лифшиц И. М.* Об одной задаче теории возмущений, связанной с квантовой статистикой. — УМН, 1952, 7, № 1, с. 171—180.
107. *Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А.* Флуктуационные уровни в неупорядоченных системах. — ФНТ, 1976, 2, № 9, с. 1093—1129.
108. *Косевич А. М., Танатаров Л. В.* Об энергетическом спектре электрона в магнитном поле при наличии локального линейного возмущения. — ФТТ, 1964, 6, № 11, с. 3423—3434.
109. *Ульянов В. В., Педан А. Г., Довман Ю. С.* О локальных связанных состояниях. — Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 6, с. 148—150.
110. *Ульянов В. В., Брук В. В.* О локальных связанных состояниях. II. — Изв. вузов СССР, Физика, 1979, № 3, с. 123—125.
111. *Ульянов В. В., Брук В. В.* О локальных связанных состояниях. III. — Изв. вузов СССР. Физика, 1980, № 10, с. 97—99.
112. *Квенцель Г. Ф.* Локальные электронные состояния в ограниченных полиеновых цепочках. — ТЭХ, 1968, 4, № 3, с. 291—298.
113. *Касаманян З. А.* К вопросу о влиянии примесей на энергетический спектр электронов в полупроводниках. — ФТП, 1968, 2, № 12, с. 1709—1716.
114. *Овчинников А. А., Украинский И. И., Квенцель Г. Ф.* Теория одномер-

- ных моттовских полупроводников и электронная структура длинных молекул с сопряженными связями. — УФН, 1972, 108, № 1, с. 81—111.
115. Ермолаев А. М. Влияние квазилокальных состояний на эффект де Гааза—ван Альфена в металлах типа висмута. — ЖЭТФ, 1968, 54, № 4, с. 1259—1263.
 116. Чеботарев Л. В. О связанных состояниях в слабых потенциальных полях. — Изв. вузов СССР, физика, 1978, № 4, с. 140—141.
 117. Ульянов В. В. О квазиклассическом разложении решений уравнения Шредингера для степенного потенциала. — Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 3, с. 126—127.
 118. Ульянов В. В., Кичигина Е. В., Перельмутер М. С. О нелинейных нулевых колебаниях. — Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 9, с. 135—137.
 119. Dunham J. L. The Wentzel—Brillouin—Kramers method of solving the wave equation. — Phys. Rev., 1932, 41, № 6, p. 713—720.
 120. Krieger J. B., Lewis M. L., Rosenzweig C. Use of the WKB-method for obtaining energy eigenvalues. — J. Chem. Phys., 1967, 47, № 8, p. 2942—2945.
 121. Argures P. N. The Bohr—Sommerfeld quantization rule and the Weyl correspondence. — Physics, 1965, 2, № 3, p. 131—139.
 122. Miller S. C., Good R. H. A WKB-type approximation to the Schrödinger equation. — Phys. Rev., 1953, 91, № 1, p. 174—179.
 123. Kilpatrick J. E., Kilpatrick M. F. The energy levels and the thermodynamic functions of the fourth power oscillator. — J. Chem. Phys., 1948, 16, № 8, p. 781—787.
 124. Kumar K. Expansion of a function of noncommuting operators. — J. Math. Phys., 1965, 6, № 12, p. 1923—1927.
 125. Ульянов В. В., Бабенко В. Д. О квантовых частотах. — Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 9, с. 152—154.
 126. Ульянов В. В., Снапиро И. Б. О термодинамике парагаза. — Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 10, с. 152—153.
 127. Ульянов В. В., Горенцевейс В. И. О термодинамике парагаза. II. — Изв. вузов СССР, Физика, 1978, № 3, с. 145—147.
 128. Ульянов В. В., Горенцевейс В. И. О термодинамике парагаза. III. — Изв. вузов СССР, Физика, 1979, № 5, с. 107—108.
 129. Ульянов В. В., Соколов С. С. О теплоемкости двумерных квантовых идеальных газов. — Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 1, с. 153—154.
 130. Ульянов В. В., Василева М. И. О фазовых переходах в бозе-газе при анизотропных законах дисперсии. — Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 9, с. 120—122.
 131. Ульянов В. В., Нгуен Дык Тьен. О влиянии размытия границы металла на свойства электронов проводимости. — Изв. вузов СССР, Физика, 1974, № 5, с. 135—136.
 132. Ульянов В. В., Кальной С. Е. К учету влияния размытия границ на электронные свойства металлов. — Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 3, с. 147—149.
 133. Кальной С. Е., Ульянов В. В. О влиянии размытия границы металла на магнитопленочные осцилляции магнитной восприимчивости. — Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 7, с. 126—127.
 134. Ульянов В. В., Косевич Ю. А. О структуре энергетических зон в одномерном случае. — УФЖ, 1980, 25, № 3, с. 468—475.
 135. Эсаки Л. Путешествие в страну туннелирования. — УФН, 1975, 116, № 4, с. 569—583.
 136. Келдыш Л. В. О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла. — ФТТ, 1962, 4, № 8, с. 2265—2267.

137. Аракелян В. С., Аветисян А. Г., Мирзабекян Э. Г., Шавердян Ф. М. Наблюдение эффекта «замораживания» ультразвуковой волны. — Письма в ЖЭТФ, 1978, 27, № 11, с. 656—657.
138. Шик А. И. Сверхрешетки — периодические полупроводниковые структуры. — ФТП, 1974, 8, № 10, с. 1841—1864.
139. Ульянов В. В. О соотношении неопределенностей. — Изв. вузов СССР. Физика, 1975, № 2, с. 146—148.
140. Ульянов В. В., Езерская Е. В. О соотношении неопределенностей. II. — Изв. вузов СССР, Физика, 1979, № 8, с. 99—100.
141. Крылов Н. С., Фок В. А. О двух основных толкованиях соотношения неопределенности для энергии и времени. — ЖЭТФ, 1947, 17, № 2, с. 93—107.
142. Ельяшевич М. А. От возникновения квантовых представлений до становления квантовой механики. — УФН, 1977, 122, № 4, с. 673—717.
143. Богомолов В. Н. Жидкости в ультратонких каналах. (Нитяные и кластерные кристаллы). — УФН, 1978, 124, № 1, с. 171—182.
144. Малеев С. В. О трехмерном обобщении модели Кронига-Пенни. — ФТТ, 1965, 7, № 10, с. 2990—2994.
145. Паргаманик Л. Э., Ульянов В. В. К теории взаимодействия быстрых нейтронов с различными моментами с полупрозрачными ядрами. — ЖЭТФ, 1958, 35, № 1, с. 258—264.
146. Ульянов В. В. О прозрачности степенного потенциального барьера. — УФЖ, 1974, 19, № 5, с. 846—848.
147. Ульянов В. В. О структуре энергетических зон в одномерном случае. — УФЖ, 1974, 19, № 5, с. 867—868.
148. Ульянов В. В. О квазиуровнях в потенциальных ловушках. — УФЖ, 1974, 19, № 10, с. 1736—1739.
149. Ульянов В. В. О прозрачности цепочки одинаковых потенциальных барьеров. — УФЖ, 1974, 19, № 12, с. 2046—2048.
150. Недорезов С. С. О поверхностных эффектах в термодинамике электронов проводимости. — ЖЭТФ, 1966, 51, № 3, с. 868—877.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение	5

Глава I

Нефункциональный подход в квазиклассическом приближении квантовой механики

§ 1. Число и плотность состояний	6
§ 2. Квантование энергии в нефункциональном подходе	13
§ 3. Нефункциональный подход для характеристик движения	21
§ 4. Некоторые вопросы квазиклассического приближения	26
§ 5. Нефункциональный подход вне квазиклассики	30
§ 6. Итоги и перспективы развития нелокальной квазиклассики	34

Глава II

Критические и резонансные свойства локальных связанных состояний квазичастиц

§ 7. Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных состояний	37
§ 8. Проблема существования локальных связанных состояний	45
§ 9. Влияние одной среды на связанные состояния в другой	61
§ 10. Резонансные явления в плоскостных структурах	77
§ 11. Что могут функции Грина?	94
§ 12. Заключительные замечания о критических и резонансных явлениях	100

Глава III

Специальные нелокальные методы в квантовой механике

§ 13. Соотношение неопределенностей и его обобщения	102
§ 14. Метод энергетической плотности состояний	108
§ 15. Метод эффективных полей	120
§ 16. Зоны энергии в одномерных периодических системах	131
§ 17. Резюме по нелокальным методам	144

Заключение	146
------------	-----

Приложение 1. Некоторые функции Грина стационарного уравнения Шредингера для одной частицы	149
--	-----

Приложение 2. Квазиклассическое разложение для функций Грина	150
--	-----

Приложение 3. Об одной симметризации операторной экспоненты	152
---	-----

Список литературы	153
-------------------	-----

Владимир Владимирович Ульянов

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Редактор Л. Ф. Кизилова

Обложка художника В. С. Шиховой

Художественный редактор В. Е. Петренко

Технический редактор Л. Т. Момот

Корректор В. Л. Максименко

Информ. бланк № 6216

Сдано в набор 28.10.81. Подп. в печать 26.04.82. БЦ 16664. Формат 60×84/16. Бумага типогр. № 1. Лит. гарн. Выс. печать. 9,3 усл. печ. л. 9,55 усл. кр.-отт. 10,5 уч.-изд. л. Тираж 1800 экз. Изд. № 923. Зак. 1-407. Цена 1 р. 80 к.

Издательство при Харьковском государственном университете издательского объединения «Вища школа», 310003, Харьков-3, ул. Университетская, 16

Харьковская книжная фабрика «Коммунист», 310012, Харьков-12, ул. Энгельса, 11

