

ДОКЛАДЫ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

1966

том 166, № 5

Ю. Н. ДЕМКОВ

**НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛАПЛАСА**

(Представлено академиком В. А. Фоком 7 VI 1965)

Известно весьма мало случаев, когда нестационарное уравнение Шредингера

$$H(t)\psi = [H_0 + V(t)]\psi = i\partial\psi/\partial t. \quad (1)$$

с зависящим от времени оператором энергии H может быть решено точно или же сведено к решению стационарной задачи с не зависящим от времени оператором H_0 . Мы покажем, что для специального, но все же довольно широкого класса операторов $V(t)$ вида

$$V = |\varphi\rangle\beta t\langle\varphi| \quad (2)$$

задача может быть решена точно в виде контурного интеграла (мы будем далее пользоваться обозначениями Дирака). Таким образом, оператор V должен линейно зависеть от времени и быть оператором проектирования на некоторой орт $|\varphi\rangle$ в пространстве функций $|\psi\rangle$. Мы покажем ниже, что в этом случае свойства оператора энергии H (в частности, поведение его собственных значений со временем) таковы, что для различных конкретных задач, например в теории столкновений, реальный оператор энергии можно приближенно заменить оператором такого типа. Будем искать решение уравнения (1) в виде

$$|\psi\rangle = \int_C e^{-iEt} F(E) (H_0 - E)^{-1} |\varphi\rangle dE. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), учитывая (2), интегрируя по частям и приравнявая подынтегральное выражение нулю, получаем уравнение для $F(E)$

$$(d/dE) [F(E)\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle] = -(i/\beta)F(E). \quad (4)$$

Отсюда получаем в явном виде решение уравнения (1)

$$|\psi\rangle = N \int_C \frac{(H_0 - E)^{-1} |\varphi\rangle}{\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle} \exp\left[-\frac{i}{\beta} \int_C \frac{dE'}{\langle\varphi|(H_0 - E')^{-1}|\varphi\rangle} - iEt\right] dE. \quad (5)$$

Из предположения, что внеинтегральный член при интегрировании по частям должен обратиться в нуль, вытекает условие на контур C

$$\exp\left[-\frac{i}{\beta} \int_C \frac{dE'}{\langle\varphi|(H_0 - E')^{-1}|\varphi\rangle} - iEt\right] \Big|_C = 0. \quad (6)$$

Докажем теперь, что точки перевала экспоненциальной функции совпадают с мгновенными собственными значениями оператора энергии H . Действительно, условие, определяющее точки перевала, имеет вид

$$\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle = -(\beta t)^{-1}. \quad (7)$$

Умножая уравнение для собственных функций

$$[H_0 - E + |\varphi\rangle\beta t\langle\varphi|]|\psi\rangle = 0 \quad (8)$$

слева на $\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}$, приходим также к уравнению (7).

Следует отметить, что при наличии сплошного спектра у оператора H_0 оператор $(H_0 - E)^{-1}$ имеет разрез вдоль области сплошного спектра. Тогда уравнение (7) может иметь решения на «нефизическом» листе, соответст-

вующие квазистационарным или виртуальным состояниям системы, причем возможны переходы корней с физического листа на «нефизический» по мере изменения t (см. (1)).

При $t \rightarrow \pm \infty$ собственные значения H стремятся к предельным значениям, которые определяются уравнением

$$\langle \varphi | (H_0 - E)^{-1} | \varphi \rangle = 0. \quad (9)$$

При $t = 0$ точки перевала, очевидно, совпадают с собственными значениями H_0 .

Выберем представление, в котором оператор V диагонален. Тогда матрица H имеет в этом представлении вид

$$\begin{pmatrix} H_{00} + \beta t & H_{01} & H_{02} \dots \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} \dots \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Если диагонализировать далее субматрицу

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \dots \\ H_{21} & H_{22} \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \dots \\ 0 & \lambda_2 \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix}; \quad \lambda_1 < \lambda_2 < \dots, \quad (11)$$

то матрица H будет приведена к виду

$$\begin{pmatrix} H_{00} + \beta t & H'_{01} & H'_{02} \dots \\ H'_{10} & \lambda_1 & 0 \dots \\ H'_{20} & 0 & \lambda_2 \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Если $|\beta t| \gg |H_{0n}'|$, $n = 0, 1, 2, \dots$, то собственные значения матрицы будут близки к $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ и, следовательно $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ являются предельными собственными значениями оператора H и корнями уравнения (9). Помимо этих собственных значений, у оператора H будет еще одно, близкое к βt при больших $|t|$. Оператор проектирования $|\varphi\rangle\langle\varphi|$ неотрицателен, поэтому при возрастании βt все собственные значения λ_n также монотонно растут. В то же время, поскольку матрица (12) получена из (11) путем «окаймления» (см. (2)), собственные значения (11) и (12) разделяют друг друга на вещественной оси E , так что при изменении t от $-\infty$ до $+\infty$ уровень βt переходит в $\lambda_1, \lambda_1 -$ в λ_2 и т. д.

Спектр оператора H как функция t (термы) изображен на рис. 1 для случая, когда H_0 имеет всего три уровня. При этом мы всегда можем исключить из рассмотрения те уровни, для которых собственные функции ортогональны $|\varphi\rangle$ и, следовательно, не взаимодействуют с возмущением V .

Таким образом, в точках $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ функция $\langle \varphi | (H_0 - E)^{-1} | \varphi \rangle^{-1}$ имеет простые полюса с вещественными вычетами r_1, r_2, \dots . Следовательно, подынтегральная функция в формуле (5) ведет себя в точках λ_n как $(E - \lambda_n)^{-1 - ir_n/\beta}$ и при обходе λ_n приобретает дополнительный множитель $e^{2\pi r_n/\beta}$, так что λ_n являются точками ветвления.

Если мы предположим, что при $t \rightarrow -\infty$ система находилась в состоянии λ_n , то мы должны выбрать контур так, чтобы он при $t \rightarrow -\infty$ проходил только через данную точку перевала: обе ветви контура следует направить в области, в которых экспонента (6) стремится к нулю. При изменении t от $-\infty$ до $+\infty$ контур нужно деформировать, и он будет проходить через многие точки перевала, причем «высоты» этих перевалов будут в пределе $t \rightarrow \infty$ отличаться не зависящими от времени множителями типа $e^{-\pi r_n/\beta}$. Таким образом можно получить все вероятности перехода, S -матрицу и т. п.

Там же методом можно решать квантовые задачи, в которых внешний параметр (например расстояние между ядрами при столкновении ато-

мов), зависевший явно от времени в рассмотренном выше классе задач, заменяется квантовой степенью свободы X , соответствующей свободному движению с эффективной массой M . Тогда энергия является интегралом движения, и мы приходим к уравнению

$$\left(-\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + H_0 + |\varphi\rangle\alpha X\langle\varphi|\right)|\psi\rangle = E_0|\psi\rangle. \quad (13)$$

Аналогичным способом получаем решение

$$|\psi\rangle = N \int_{\mathcal{C}} (2E)^{-1/2} \langle\varphi|(H_0 - E_0 + E)^{-1}|\varphi\rangle^{-1} (H_0 - E_0 + E)^{-1}|\varphi\rangle \times \\ \times \exp\left[(iM/\alpha) \int_{\mathcal{C}}^E (2E')^{-1/2} \langle\varphi|(H_0 - E_0 + E')^{-1}|\varphi\rangle dE' + i(2E)^{1/2}X\right] dE. \quad (14)$$

При больших M и не слишком малых E_0 можно проследить переход к классическому рассмотрению координаты X , когда она равномерно изме-

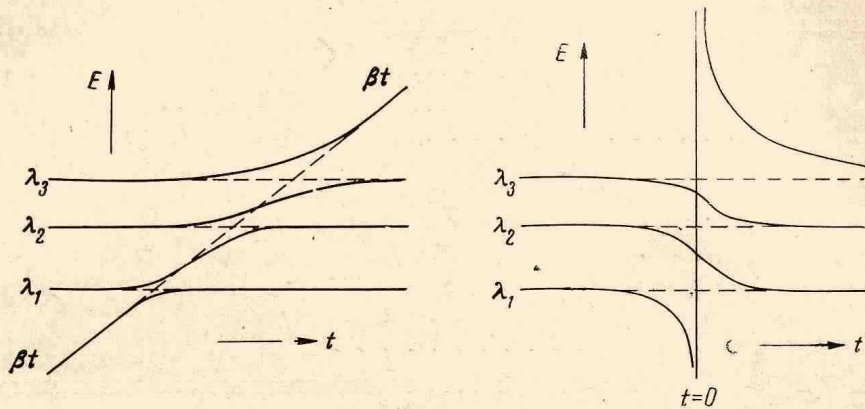


Рис. 1

Рис. 2

няется со временем, и мы возвращаемся к уравнениям (1), (2). Наконец, можно написать решение в явном виде для уравнений (1) или (13), когда множителем при операторе проектирования является дробно-линейная функция от t (или X). Мы напишем решение лишь для случая

$$V = |\varphi\rangle(\gamma t)^{-1}\langle\varphi|. \quad (15)$$

Тогда при $t \rightarrow \pm\infty$ операторы H и H_0 совпадают, однако при $t = 0$ появляется особенность, которой трудно придать какой-либо физический смысл. Общий ход термов для случая, когда H_0 имеет только три уровня, изображен на рис. 2. Решение уравнения (1) получается в виде

$$|\psi\rangle = N \int_{\mathcal{C}} (H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle \exp\left[-\frac{i}{\gamma} \int_{\mathcal{C}}^E \langle\varphi|(H_0 - E')^{-1}|\varphi\rangle dE' - iEt\right] dE. \quad (16)$$

Использование приведенных здесь общих формул при решении конкретных задач связано прежде всего с возможностью вычисления функции $(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle$. Ее легко представить в виде интеграла, если известен оператор резольвенты для H_0 , ядром которого является функция Грина. Функция Грина известна для многих одномерных задач и для некоторых многомерных (свободная частица, осциллятор, атом водорода, короткодействующий потенциал и т. п.). Примеры конкретных задач, решенных рассмотренным здесь методом, можно найти в работах (3) (H_0 — свободная частица, φ — δ -функция) и (4) (H_0 — свободная частица в полупространстве, φ — δ -функция). Простейшим примером является также приближение Ландау — Зинера (5) ($H_0 = a\sigma_x$, где σ_x — матрица Паули, $\psi(\sigma)$ — двухкомпонентная функция, $\varphi = \delta_{1\sigma}$). Квантовое рассмотрение приближения Ландау — Зинера, соответствующее формулам (13), (14), проведе-

но в работе (6). Очевидно, что при столкновении атомов и ионов переход от уравнения (1) к (13) необходим, когда энергия сталкивающихся частиц сравнима с изменением энергии при данном неупругом процессе.

Из рис. 1 видно, что наше приближение удобно применять, когда рассматриваются переходы между группой термов, идущих параллельно (или континуумом), и одним термом, который в отсутствие возмущения пересекает остальные термы под некоторым углом. Такая картина часто приближенно имеет место при столкновении атомов и молекул, когда происходит ионизация, возбуждение колебательных или вращательных уровней молекул. По-видимому, возможны также и другие приложения.

В заключение, для большей конкретности, приведем явный вид полученных формул для случая, когда V является короткодействующим потенциалом, т. е. φ — δ -функция в координатном представлении. В одномерном случае уравнение Шредингера имеет вид

$$[-1/2 \partial^2/\partial x^2 + V_0(x)] \psi = i \partial \psi / \partial t. \quad (17)$$

Оператор V , отличный от нуля лишь в точке x_0 , может быть заменен граничным условием

$$(\partial \psi / \partial x) \Big|_{x_0-0}^{x_0+0} = 2\beta t \psi(x_0, t). \quad (18)$$

Тогда решение может быть представлено в виде

$$\psi = N \int_C \frac{G(x_0, x, E)}{G(x_0, x_0, E)} \exp \left[-\frac{i}{\beta} \int_C^E \frac{dE'}{G(x_0, x_0, E')} - iEt \right], \quad (19)$$

где G — функция Грина для оператора H_0 . В этом случае при $t \rightarrow \pm \infty$ в точке x_0 имеется непроницаемый барьер, предельные собственные значения оператора H соответствуют уровням энергии в правой и левой частях потенциальной ямы V_0 , разделенных этим барьером. Таким образом, мы имеем здесь две системы, независимые при $t \rightarrow \pm \infty$ и взаимодействующие при конечных t , что формально похоже на задачи теории столкновений. В трехмерном случае короткодействующий потенциал можно заменить граничным условием (2, 3)

$$\psi = A(t) [|r - r_0|^{-1} + \beta t] + O(|r - r_0|). \quad (20)$$

При $t \rightarrow \pm \infty$ этот потенциал перестает влиять на H , так что $H \rightarrow H_0$, и разделения системы на две части не происходит. Решение в этом случае может быть написано в виде

$$\psi = N \int G(r, r_0, E) \exp \left[\frac{i}{\beta} \int G_{\text{reg}}(r_0, r_0, E') dE' - iEt \right] dE, \quad (21)$$

где G_{reg} — функция Грина, из которой вычтена сингулярная часть. Именно к этим формулам сводятся те задачи, которые были решены в (2, 3).

Легко видеть, что вывод всех приведенных формул вполне аналогичен методу Лапласа решения обыкновенных линейных дифференциальных уравнений с коэффициентами, линейно зависящими от аргумента (7), так что фактически эти формулы являются обобщением метода Лапласа для случая, когда коэффициентами в уравнении являются не числа, а операторы.

В рассмотренных задачах зависящее от времени возмущение можно считать малым при $t \rightarrow \pm \infty$. Однако при конечных t оно отнюдь не мало и задача решается точно, без разложения в ряд теории возмущений. С этой точки зрения полученные формулы также представляют интерес.

Ленинградский государственный университет
им. А. А. Жданова

Поступило
26 V 1965

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, ЖЭТФ, 49, 691 (1965). ² Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева, Вычислительные методы линейной алгебры, § 48, М., 1960.
³ Ю. Н. Демков, ЖЭТФ, 46, 1126 (1964). ⁴ Ю. Н. Демков, ЖЭТФ, 49, 885 (1965).
⁵ С. Zener, Proc. Roy. Soc., A 137, 696 (1932). ⁶ М. Я. Овчинникова, Оптика и спектроскопия, 17, 824 (1964). ⁷ В. И. Смирнов, Курс высшей математики, 3 ч. II, 1953.