44

ВЕСТНИК ЛЕНИНГРАДСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 4

СЕРИЯ

ФИЗИКИ И ХИМИИ

Выпуск 1

ЛЕНИНГРАД

1966

ФИЗИКА

УДК 530.145

Ю. Н. Демков

СТРУКТУРА S-МАТРИЦЫ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ЗАДАЧ, РАЗРЕШИМЫХ МЕТОДОМ КОНТУРНОГО ИНТЕГРАЛА

В работе [1] найден новый класс квантовых задач, которые могут быть решены точно и которые можно использовать для приближенного описания различных процессов, например в теории столкновений. Мы покажем здесь, что для этих задач S-матрица обладает замечательными и весьма наглядными свойствами: треугольностью и разложимостью на бинарные множители, которые упрощают рассмотрение и позволяют использовать формулу Ландау — Зинера для неадиабатических переходов далеко за пределами ее формальной применимости, при наличии пересечения большого числа параллельных энергетических термов, сплошного спектра и т. п. с одним изолированным термом.

В [1] рассмотрен случай, когда оператор энергии H состоит из не зависящего от времени H_0, для которого известна функция Грина, и возмущения V, которое линейно зависит от времени и является оператором проектирования на заданную функцию $|\varphi\rangle$. Тогда решение уравнения Шредингера

$$(H_0 + |\varphi\rangle \beta t \langle\varphi|)\,|\psi\rangle = i\,(\partial/\partial t)\,|\psi\rangle, \quad (\beta > 0) \tag{1}$$

может быть представлено в виде контурного интеграла

$$|\psi\rangle = N \int\limits_C \frac{(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}|\varphi\rangle} \exp\left[-\frac{i}{\beta}\int^{E} \frac{dE'}{\langle\varphi|(H_0 - E')^{-1}|\varphi\rangle} - iEt\right] dE. \tag{2}$$

Если H_0 имеет дискретный спектр, то можно найти представление, в котором H имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} \beta t & h_1 & h_2 & h_3 & \dots \\ h_1 & \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ h_2 & 0 & \lambda_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (h_i > 0). \tag{3}$$

Функции этого представления являются асимптотическими собственными функциями H при $t \to \pm\infty$, причем функции $|\varphi\rangle$ соответствуют нулевые строка и столбец. Для случая четырех уровней спектр системы как функция времени изображен на рис. 1. В этом представлении формула (2) имеет вид

$$\langle 0|\psi\rangle = N\int\limits_C \Phi(E)\,dE; \quad \langle n|\psi\rangle = Nh_n \int\limits_C (E - \lambda_n)^{-1}\,\Phi\,dE;$$

$$\Phi = \prod_m (E - \lambda_m)^{-ih_m^2/\beta} \exp(iE^2/2\beta - iEt); \tag{4}$$

откуда видно, что h_m^2 являются вычетами функции $\langle\varphi\,|(H_0-E)^{-1}|\,\varphi\rangle^{-1}$, а λ_m — точками ветвления подынтегральной функции.

Если при $t\to-\infty$ система находилась в состоянии $|\varphi\rangle$, то контур интегрирования изображается кривой C (рис. 2). При $t\to+\infty$ его следует деформировать, представив в виде суммы $C=\omega_1+\omega_2+ +\ldots+C'$, причем конечный вклад в компоненту $\langle n\,|\,\psi\rangle$ вносит только петля ω_n. Вводя обозначение $p_n=\exp\left(-2\pi h_n^2/\beta\right)$, $q_n=1-p_m$, получаем следующие формулы для вероятностей перехода:

$$|S_{0n}|^2=p_1p_2\ldots p_{n-1}q_n,\quad |S_{00}|^2=p_1p_2\ldots. \tag{5}$$

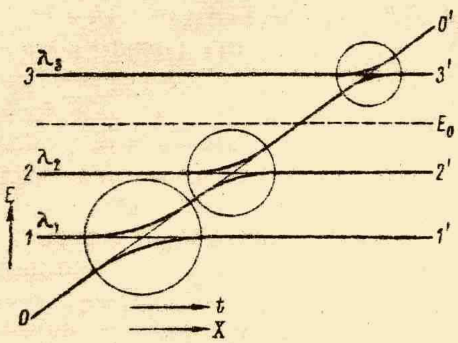

Рис. 1.

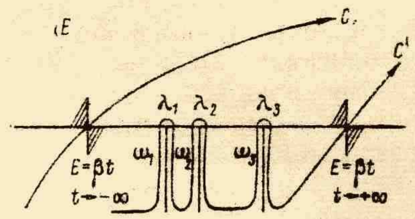

Рис. 2.

Если при $t\to-\infty$ система находилась в состоянии n, то контур и его деформация при $t\to+\infty$ изображены на рис. 3; вблизи точки λ_n контур имеет вид логарифмической спирали. Вероятности перехода получаем в виде

$$\begin{gathered}S_{nm}=0\ (m<n),\ |S_{nm}|^2=q_np_{n+1}\ldots p_{m-1}q_m\quad (m>n),\\ |S_{nn}|^2=p_n,\ |S_{n0}|^2=q_np_{n+1}p_{n+2}\ldots.\end{gathered} \tag{6}$$

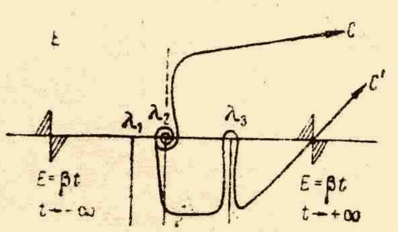

Рис. 3.

Первое из этих равенств означает, что энергия системы при переходе от $t\to-\infty$ к $t\to+\infty$ не может уменьшиться — свойство, которое можно назвать треугольностью S-матрицы. Принцип детального равновесия и симметрия во времени нарушаются здесь состоянием $|\varphi\rangle$, которое имеет разную энергию при $t\to-\infty$ и $t\to+\infty$.

Из формул (5), (6) видно также, что вероятности переходов могут быть получены как произведения вероятностей, подсчитанных по формуле Ландау — Зинера для каждого отдельного квазипересечения термов независимо от соотношения между величинами h_n и $\Delta\lambda_n$ (при малых h_n это утверждение очевидно). Это приводит к тому, что S-матрицу можно представить как произведение матриц, каждая из которых перемешивает только два „пересекающихся" состояния — свойство, которое можно назвать разложимостью на бинарные множители.

При наличии сплошного спектра у H_0 функция $\langle\varphi\,|(H_0-E)^{-1}|\,\varphi\rangle^{-1}$ имеет разрез вдоль области сплошного спектра E, принимая комплексно сопряженные значения на берегах разреза. Обозначая скачок мнимой части через $\Delta(E)$, получаем для чисто сплошного спектра плотность вероятности для перехода из состояния $|\varphi\rangle$ в состояние $|E\rangle$

$$|S_{0E}|^2 = \beta^{-1}\Delta(E)\exp\left[-\beta^{-1}\int\limits_{\varepsilon}^{E}\Delta(E')\,dE'\right], \tag{7}$$

где ε — нижняя граница сплошного спектра.

Точно так же можно рассмотреть случай, когда вместо времени t вводится дополнительная координата X, которая рассматривается квантовомеханически, так что нужно решать уравнение для стационарной задачи

$$[-(2M)^{-1}(\partial^2/\partial X^2) + H_0 + |\varphi\rangle\,\alpha X\,\langle\varphi|\,]\,|\psi\rangle = E_0|\psi\rangle, \quad (\alpha > 0). \tag{8}$$

Решение также может быть представлено в виде контурного интеграла

$$|\psi\rangle = N\int\limits_{C}\frac{G|\varphi\rangle}{\langle\varphi|G|\varphi\rangle}\exp\left(\frac{i}{\alpha}\int^{E}\frac{v_{E'}^{-1}dE'}{\langle\varphi|G(E')|\varphi\rangle} + iMv_EX\right)\frac{dE}{v_E}. \tag{9}$$

$$G = (H_0 - E)^{-1}, \quad v_E = \sqrt{2(E - E_0)/M}.$$

В этом случае каждый уровень λ_n, лежащий ниже дополнительной точки ветвления $E = E_0$, представляет собой открытый канал реакции, причем волна может распространяться как вправо, так и влево, так что, например, общее число открытых каналов на рис. 1 равно пяти. Вероятность любого перехода может быть подсчитана так же, как произведение вероятностей p_n, q_n, но при этом нужно учитывать различные значения скорости (т. е. константы β) в разных точках пересечения и, кроме того, полное отражение при движении по наклонному терму при $E = E_0$. Отсюда нетрудно получить, что равны нулю матричные элементы $S_{ij'} = S_{j'i}$ при $j < i$ и $S_{i'j'}$ при любых i, j. Следовательно: 1) при переходе волны слева направо энергия не может уменьшиться; 2) при переходе волны справа налево энергия не может увеличиться; 3) при движении волны справа налево отсутствует отражение. Последний результат для простейшего случая пересечения двух уровней был установлен в работе [2]. Все эти результаты являются точными в рамках данной модели и следуют из того, что при деформации контур интегрирования минует ту или иную точку ветвления или перевала и интеграл в пределе не дает вклада в соответствующую вероятность перехода.

В обоих рассмотренных случаях отсутствует интерференция — полная вероятность представляет собой произведение вероятностей элементарных переходов p_n, q_n, а не сумму произведений (когда становится существенной разность фаз амплитуд перехода). Это существенно упрощает задачу.

Частные задачи, которые можно рассматривать как приложения описанной здесь методики, рассмотрены в работах [2—4]. Вопрос о пределах применимости моделей такого рода нуждается каждый раз в особом рассмотрении. Для задачи о столкновении отрицательного иона с атомом такие оценки имеются в [3, 4]. Еще более важный случай возбуждения и ионизации при столкновении атомов, когда происходит квазипересечение одного терма с кулоновским сгущением и сплошным спектром для другой группы термов, также может быть описан этим методом. Несомненно, возможны и другие приложения.

В заключение автор благодарит В. М. Бородина, который впервые установил треугольность S-матрицы для задачи, рассмотренной в [3].

Summary

If the Hamiltonian H consists of time independent H_0 and of perturbation V, which linearly depends on time and moreover is a projection operator on the state φ, then the non-stationary and corresponding stationary problems can be solved exactly. In this case the S-matrix is triangular and factorable into binary Landau — Zener factors. This solution can be applied to the heavy particle collision problems when the quasy-crossing of a system of parallel potential curves with a single one takes place.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. Н. Демков. ДАН СССР (в печати).
2. М. Я. Овчинникова. Оптика и спектроскопия, 17, 824, 1964.
3. Ю. Н. Демков. ЖЭТФ, **46**, 1126, 1964.
4. Ю. Н. Демков. ЖЭТФ, **49**, 885, 1965.

Статья поступила в редакцию 9 ноября 1965 г