

СТАЦИОНАРНЫЕ И НЕСТАЦИОНАРНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЗАДАЧИ, РАЗРЕШИМЫЕ МЕТОДОМ КОНТУРНОГО ИНТЕГРАЛА

Ю. Н. Демков, В. И. Ошеров

Показано, что если оператор энергии состоит из не зависящей от времени части H_0 и возмущения, которое линейно зависит от времени и является оператором проецирования на некоторое состояние $|\varphi\rangle$, то точное решение уравнения Шредингера может быть получено в виде контурного интеграла. S -матрица для такой задачи обладает свойством треугольности и разбивается на элементарные множители Ландау—Зинера, каждый из которых перемешивает только пару состояний. Аналогичные результаты получены для соответствующей стационарной задачи. Рассмотрены некоторые обобщения, примеры, связь с решенными ранее задачами по отрыву электрона и по ионизации при столкновении атомов и ионов.

1. Введение

Известно сравнительно мало квантовых задач, для которых уравнение Шредингера может быть решено точно. Особенно это относится к нестационарным задачам, в которых оператор энергии явно зависит от времени. Между тем исследование и решение таких задач крайне необходимо в самых различных областях физики. Одним из наиболее естественных примеров является столкновение атомов или ионов, когда движение тяжелых ядер можно рассматривать классически и исследовать различные неупругие процессы, решая нестационарное уравнение Шредингера для электронов.

Хорошо известно, что при медленных столкновениях (слабой зависимости оператора энергии от времени) применимо адиабатическое приближение, исследованное первоначально в работах Борна и Фока [1, 2]. При этом переходы возможны практически только тогда, когда собственные значения мгновенного оператора энергии почти вырождены.

В том случае, когда можно пренебречь переходами между всеми состояниями, кроме двух, и ограничиться так называемым приближением двух уровней, задача может быть сведена к решению системы из двух связанных линейных дифференциальных уравнений первого порядка. В простейшем случае мы приходим к известной формуле Ландау—Зинера [3, 4]. Дальнейшее исследование приближения двух состояний, различные уточнения формулы Ландау—Зинера и исследование области ее применимости проводилось во многих работах [5, 6].

Однако приближение двух (или даже нескольких) состояний в ряде случаев оказывается недостаточным и нужно рассматривать взаимодействие большого или даже бесконечного числа состояний, особенно в том случае, когда мы имеем дело с переходом электрона в сплошной спектр (ионизация, рекомбинация, свободно-свободные переходы). В последнем случае даже после максимальной схематизации задачи мы приходим к системе бесконечного числа уравнений или же к уравнениям в частных производных.

При этом в реальных задачах естественно возникает случай, когда имеется система параллельных термов — собственных значений операто-

ра энергии (разности между ними не зависят от времени) — и один терм другой природы, который в нулевом приближении пересекает все эти термы. При учете взаимодействия происходит «квазипересечение», так что картина примерно такова, как это показано на рис. 1.

В том случае, когда расщепление уровней в каждой точке квазипересечения мало по сравнению с расстоянием до других уровней, мы можем производить расчет, рассматривая по отдельности каждую такую область и перемножая полученные вероятности перехода. В противном случае

этого делать, вообще говоря, нельзя.

Мы покажем, однако, что при известных условиях указанное выше ограничение можно снять; это оправдывает использование формулы Ландау — Зинера далеко за пределами ее формальной применимости и позволяет сделать весьма простые и наглядные выводы о структуре S -матрицы для задач такого рода.

Задачи такого рода были рассмотрены первоначально для конкретных процессов (отрыв электрона и ионизация при медленных столкновениях атомов и ионов, электронные переходы в кристаллах) [7-12]. Излагаемая в данной статье методика позволяет рассмотреть все эти задачи

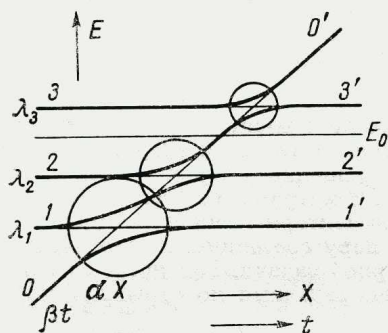


Рис. 1

единым образом и, кроме того, открывает возможности для новых приложений во всех тех случаях, когда речь идет о взаимодействии одного состояния системы с группой состояний другой природы (преионизация, свободно-свободные переходы при столкновениях, аналогичные процессы в твердых телах и т. д.).

2. Нестационарные задачи

Рассмотрим нестационарную систему с оператором энергии $H(t)$, который состоит из не зависящего от времени оператора H_0 и возмущения $V(t)$, причем $V(t)$ линейно зависит от времени и является оператором проектирования на некоторое состояние $|\varphi\rangle$ [13]. Будем искать решение уравнения Шредингера

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

в виде контурного интеграла

$$|\psi\rangle = \int_C G(E) |\varphi\rangle F(E) e^{-iEt} dE, \quad (2)$$

где $G(E) = (H_0 - E)^{-1}$ — оператор резольвенты, ядром которого является функция Грина оператора H_0 . Подставляя (2) в (1), интегрируя по частям, предполагая, что внеинтегральный член исчезает, и приравнявая подынтегральные выражения, получаем уравнение для функции $F(E)$:

$$F(E) = i\beta \frac{d}{dE} [F(E) \langle \varphi | G(E) | \varphi \rangle], \quad (3)$$

и, таким образом, решение уравнения (1) имеет вид

$$|\psi\rangle = N \int_C \frac{G(E)|\varphi\rangle}{\langle\varphi|G(E)|\varphi\rangle} \exp\left(-\frac{i}{\beta} \int^E \frac{dE'}{\langle\varphi|G(E')|\varphi\rangle} - iEt\right) dE. \quad (4)$$

Таким образом, если мы знаем функцию Грина для оператора H_0 (т. е. имеем полное решение стационарной задачи), то мы можем получить в виде интеграла решение целого класса нестационарных задач типа (1) с произвольной функцией $|\varphi\rangle$. При этом никаких предположений о числе степеней свободы и о характере спектра оператора H_0 мы не делали.

Внеинтегральный член при интегрировании по частям должен обратиться в нуль. Отсюда вытекает условие, налагаемое на контур C :

$$\exp\left[-\frac{i}{\beta} \int^E \frac{dE'}{\langle\varphi|G(E')|\varphi\rangle} - iEt\right] \Big|_C = 0. \quad (5)$$

Докажем теперь, что точки перевала экспоненциальной функции в (4), (5) совпадают с мгновенными собственными значениями оператора энергии H . Действительно, условие, определяющее точки перевала, имеет вид

$$\langle\varphi|G(E)|\varphi\rangle = -(\beta t)^{-1}. \quad (6)$$

Умножая уравнение для собственных функций

$$[(H_0 - E) + |\varphi\rangle\beta t\langle\varphi|]|\psi\rangle = 0 \quad (7)$$

слева на $\langle\varphi|(H_0 - E)^{-1}$, приходим также к уравнению (6).

Следует отметить, что при наличии сплошного спектра у H_0 оператор $G(E)$ имеет разрез вдоль области сплошного спектра. Тогда уравнение (6) может иметь решения на «нефизическом» листе, соответствующие квазистационарным или виртуальным состояниям системы, причем возможны переходы корней с физического листа на нефизический по мере изменения t [14].

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

$$\langle\varphi|G(E)|\varphi\rangle = 0. \quad (8)$$

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

Рассмотрим теперь случай, когда оператор H_0 имеет только дискретные собственные значения. Выберем такой базис, в котором нулевой строке и столбцу соответствует функция $|\varphi\rangle$. Тогда оператор H будет иметь вид

$$H = \begin{pmatrix} h_{00} + \beta t, & h_{01}, & h_{02} \dots \\ h_{10}, & h_{11}, & h_{12} \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Выбирая далее начало отсчета времени так, чтобы $h_{00} = 0$, и диагоналируя субматрицу

$$\begin{pmatrix} h_{11}, & h_{12} \dots \\ h_{21}, & h_{22} \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix},$$

получаем наиболее естественное для данной задачи представление [7]

$$H = \begin{pmatrix} \beta t, & h_1, & h_2 \dots \\ h_1, & \lambda_1, & 0 \dots \\ h_2, & 0, & \lambda_2 \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Выбором фазовых множителей константы h_1, h_2, \dots можно всегда сделать вещественными и положительными. Легко убедиться, что если βt велико по сравнению с h_i и λ_i , то собственные значения H близки к βt и к λ_i , так что λ_i являются асимптотическими собственными значениями H и решениями уравнения (7). Следует подчеркнуть, что собственные значения λ_i и собственные значения H_0 являются соответственно нулями и полюсами функции $\langle \varphi | G(E) | \varphi \rangle$, поэтому они никогда не совпадают и следуют попеременно.

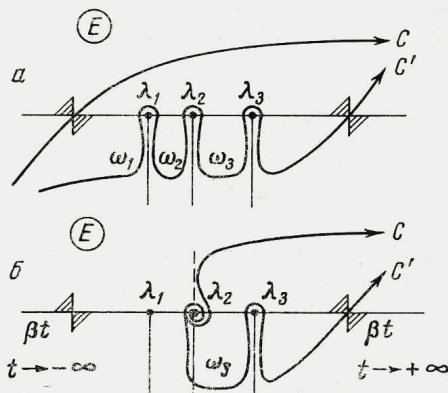


Рис. 2

Для случая, когда имеется только четыре состояния, общая картина термов изображена на рис. 1. Если h_i малы по сравнению с разностью $|\lambda_{i+1} - \lambda_i|$, то расщепление в точках квазипересечения $\beta t_i = \lambda_i$ будет малым и равным $2h_i$. В приближении двух состояний по формуле Ландау — Зинера вероятность неадиабатического перехода (т. е. вероятность того, что система будет «двигаться вдоль» невозмущенного терма) будет равна $p_i = \exp(-2\pi h_i^2 / \beta)$. Вероятность адиабатического поведения, того, что система будет следовать вдоль реального терма, равна $q_i = 1 - p_i$.

Запишем теперь в этом представлении формулу (4). Уравнение для определения собственных значений H_0 имеет вид

$$|H_0 - E| = - \prod_i (\lambda_i - E) \left[E + \sum_j h_j^2 (\lambda_j - E)^{-1} \right] = 0. \quad (11)$$

Легко вычислить также обратную матрицу $(H_0 - E)^{-1}$ и величины $\langle \varphi | G(E) | \varphi \rangle$, $G | \varphi \rangle$. Получаем

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle 0 | \psi \rangle = N \int_C L(E) dE, \quad \langle n | \psi \rangle = N h_n \int_C (\lambda_n - E)^{-1} L(E) dE, \quad (12)$$

$$L(E) = \prod_m (\lambda_m - E)^{-i h_m^2 / \beta} \exp(i E^2 / 2\beta - i E t).$$

Мы видим, что асимптотические собственные значения λ_m являются полюсами и точками ветвления подынтегрального выражения. При больших t точки перевала находятся вблизи от λ_i , а при изменении t от $-\infty$ до $+\infty$ перемещаются от λ_i к λ_{i+1} . Первая точка перевала при $t \rightarrow -\infty$ близка к βt , а при $t \rightarrow +\infty$ — к λ_1 ; последняя (если она существует) при $t \rightarrow -\infty$ близка к наибольшему λ_N , а при $t \rightarrow +\infty$ — к βt .

Перейдем теперь к определению контура интегрирования. Если при $t \rightarrow -\infty$ система находилась в состоянии $|\varphi\rangle$, то контур должен проходить только через точку перевала $E \approx \beta t$. Концы контура уходят на бесконечность, так чтобы экспонента в подынтегральном выражении стремилась к нулю, т. е. в первый и третий квадранты. Общий вид контура изображен на рис. 2, а. Если считать, что $|\beta t| \gg |\lambda_m|$, то в окрестности $E = \beta t$ множители $(\lambda_m - E)^{-i h_m^2 / \beta}$ близки по модулю к единице, и, вычисляя интеграл по методу перевала, получаем

$$\left| \int_C L(E) dE \right| \rightarrow (2\pi\beta)^{1/2}, \quad (13)$$

и, следовательно, нормировочная константа N равна $(2\pi\beta)^{-1/2}$. Очевидно, что за счет множителей $(\lambda_m - E)^{-1}$ все остальные компоненты стремятся к нулю при $t \rightarrow -\infty$.

При $t \rightarrow +\infty$ множитель e^{-iEt} быстро убывает в нижней полуплоскости, а точка перевала $E \approx \beta t$ находится справа от точек ветвления λ_n . Для исследования асимптотики контур C следует деформировать, представив его как сумму петель ω_n , огибающих точки ветвления λ_n так, как это изображено на рис. 2, а (контур C'). Конечный вклад в компоненту $\langle n | \psi \rangle$ при $t \rightarrow \infty$ вносит только петля ω_n , причем существенна только та часть контура, для которой квадраты модулей множителей $(\lambda_m - E)^{-ih_n^2/\beta}$ при $m > n$ близки к единице, а при $m < n$ близки к p_m .

Для вероятностей переходов при этом получаем

$$\begin{aligned} |S_{0n}|^2 &= \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle n | \psi \rangle|^2 = h_n^2 (2\pi\beta)^{-1} p_1 p_2 \dots p_n \cdot \\ &\left| \int_{C'} (\lambda_n - E)^{-1 - ih_n^2/\beta} e^{iEt} dE \right|^2 = \\ &= h_n^2 (2\pi\beta)^{-1} p_1 p_2 \dots p_{n-1} p_n^{1/2} |2\pi/\Gamma(1 + ih_n^2/\beta)|^2 = p_1 \dots p_{n-1} q_n. \end{aligned} \quad (14)$$

$$|S_{00}|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle 0 | \psi \rangle|^2 = p_1 p_2 \dots p_N. \quad (15)$$

В том случае, когда начальным состоянием при $t \rightarrow -\infty$ является n ($n \neq 0$), контур, проходящий только через одну n -ю точку перевала, изображен на рис. 2, б (контур C). Вблизи точки λ_n он близок по форме к логарифмической спирали, т. е. к кривой наискорейшего спуска для функции $(\lambda_n - E)^{-1 - ih_n^2/\beta}$. Используя формулу

$$\int_{\sigma} e^{zt} dt = -2\pi i [\Gamma(z) (1 - e^{2\pi iz})]^{-1} \quad (\text{Im } z > 0), \quad (16)$$

где контур σ имеет вид спирали вблизи начала координат и уходит на бесконечность вдоль верхнего берега разреза в левой полуплоскости, легко получить нормировочный множитель для этого случая:

$$N = (2\pi\beta p_1 p_2 \dots p_{n-1})^{-1/2} (1 - p_n)^{1/2}. \quad (17)$$

При $t \rightarrow +\infty$ контур следует деформировать так, как это изображено на рис. 2, б (контур C').

Для вероятностей перехода получаем

$$\begin{aligned} |S_{nm}|^2 &= 0, \quad 0 < m < n, \\ |S_{nn}|^2 &= p_n, \\ |S_{nm}|^2 &= (1 - p_n) p_{n+1} \dots p_{m-1} (1 - p_m), \quad m > n, \\ |S_{n0}|^2 &= (1 - p_n) p_{n+1} \dots p_N. \end{aligned} \quad (18)$$

Мы видим, что при $m < n$ вероятность перехода равна нулю, поскольку контур минует соответствующие точки перевала. Это означает, что при переходе от $t \rightarrow -\infty$ к $t \rightarrow +\infty$ энергия системы не может уменьшиться, — свойство, которое можно назвать треугольностью S -матрицы [15]. (Это название несколько неточно, так как элементы S_{n0} отличны от нуля.) Поскольку оператор V монотонно растет, очевидно, что должна возрастать средняя энергия любого состояния. Полученное здесь утверждение значительно сильнее. Принцип детального равновесия и симметрия во времени

нарушаются нулевым состоянием $|\varphi\rangle$, которое имеет разную энергию при $t \rightarrow -\infty$ и при $t \rightarrow +\infty$.

Из формул (14), (15), (18) видно также, что вероятности всех переходов могут быть рассчитаны как последовательные произведения вероятностей элементарных переходов p_n, q_n между состояниями 0 и n в каждой точке квазипересечения (см. рис. 1). Иначе говоря, S -матрица может быть разложена на произведение простых множителей, каждый из которых перемешивает только пару «пересекающихся» состояний в соответствии с формулой Ландау — Зинера. Обозначая каждую такую S -матрицу S_{0n} , получаем

$$S = S_{01}S_{02} \dots S_{0N}. \quad (19)$$

Из этого основного результата автоматически вытекает свойство треугольности.

В том случае, когда величины h_n сравнимы с расстоянием между параллельными термами, т. е. с $|\lambda_n - \lambda_{n+1}|$ и $|\lambda_n - \lambda_{n-1}|$, они не определяются прямо через расстояние между термами в точке квазипересечения. Из формулы (10) видно, что

$$h_n = \langle n | H | 0 \rangle. \quad (20)$$

Предположение, что эти матричные элементы не зависят от t для достаточно большого интервала времени, является одним из основных условий применимости метода.

Из формул (14), (15) видно также, что наиболее простое выражение получается для вероятности $w(E)$ того, что система перейдет из состояния $|\varphi\rangle$ в любое из состояний с энергией, большей чем E :

$$w(E) = \prod_{\lambda_n < E} p_n = \exp\left(-2\pi\beta^{-1} \sum_{\lambda_n < E} h_n^2\right). \quad (21)$$

Теперь нетрудно перейти к случаю, когда оператор H_0 имеет участок сплошного спектра собственных значений. Тогда, если мы будем, например, увеличивать область пространства, в которой движется частица, то собственные значения λ_n будут в этом интервале энергии сгущаться, а матричные элементы h_n — стремиться к нулю. В пределе функция $\langle \varphi | G(E) | \varphi \rangle^{-1}$ будет иметь разрез на вещественной оси, причем скачок $\Delta(E)$ мнимой части функции на разрезе равен

$$\Delta(E) = 2\pi \left(\frac{dn}{dE} h_n^2 \right)_{\lambda_n = E}. \quad (22)$$

Таким образом, если спектр оператора H_0 только сплошной, то вероятность $w(E)$ равна

$$w(E) = \exp \left[-\beta^{-1} \int_{\mathcal{E}}^E \Delta(E') dE' \right], \quad (23)$$

где \mathcal{E} — нижняя граница сплошного спектра H_0 .

Если начальное состояние n лежит в сплошном спектре, то при переходе к пределу мы должны изменить нормировку начального состояния, так как нормированная на единицу волновая функция будет стремиться к нулю повсюду. Используя нормировку на δ -функцию по энергии, имеем

$$\psi_E = (dn/dE)^{1/2} \psi_n$$

и, учитывая, что h_n^2 , а следовательно, и q_n стремятся к нулю, получаем для вероятности перехода из состояния с энергией E_0 в состояние с энер-

гией, большей чем E ,

$$w(E_0, E) = \lim_{\Delta\lambda_n \rightarrow 0} \left(\frac{dn}{dE} \frac{2\pi}{\beta} h_n^2 \right)_{\lambda_n = E_0} \cdot \exp \left(-\beta^{-1} \int_{E_0}^E \frac{dn}{dE'} h_n^2 dE' \right) = \beta^{-1} \Delta(E_0) \exp \left(-\beta^{-1} \int_{E_0}^E \Delta(E') dE' \right). \quad (24)$$

Вероятность перехода во все состояния с энергией, меньшей чем E_0 , равна нулю.

3. Стационарные задачи

До сих пор мы рассматривали оператор энергии H , который явно зависел от времени. Иначе говоря, в системе имелся внешний параметр, зависимость которого от времени была заранее задана. В задаче о столкновении атомов или ионов таким параметром является расстояние между ядрами. Если энергия движения ядер невелика и сравнима с энергией электронных переходов, то этот параметр также следует включить в динамическое квантовое рассмотрение. Примем, что этой дополнительной степени свободы, которую мы обозначим X , соответствует эффективная масса M , и сохраним все остальные предположения об операторе H , сделанные в разделе 2. Тогда мы придем к стационарной квантовой задаче (см. [8, 13, 16, 17]):

$$\left[-\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + H_0 + |\varphi\rangle \alpha X \langle \varphi| \right] |\psi\rangle = E_0 |\psi\rangle, \quad (25)$$

где E_0 — полная энергия, H_0 не зависит от X , $\alpha > 0$. В этом случае при больших положительных и при больших отрицательных X волновая функция будет иметь вид плоских волн, умноженных на волновые функции асимптотических состояний $|n\rangle$, определенных в разделе 2. У каждого состояния будут два канала реакции, соответствующих отражению или прохождению волны; обозначим их через n ($X \rightarrow -\infty$) и n' ($X \rightarrow +\infty$). Все каналы, для которых энергия λ_n превосходит E_0 , будут закрыты. На рис. 1 показан случай, когда открыты каналы 0, 1, 1', 2, 2' и закрыты каналы 3, 3', 0'. Канал 0' всегда закрыт: при «движении» по наклонному терму всегда произойдет отражение, если X достаточно велико.

Задача состоит в том, чтобы определить вероятности переходов между открытыми каналами. Тем же способом, что и в разделе 2, легко получить решение в виде интеграла:

$$|\psi\rangle = N \int_c^E G(E) |\varphi\rangle \Phi(E) \exp \left(i\alpha^{-1} \int \Phi(E') dE' + iPX \right) dE, \\ P = [2M(E_0 - E)]^{1/2}, \quad \Phi(E) = \langle \varphi | G(E) | \varphi \rangle^{-1} \frac{dP}{dE}. \quad (26)$$

Переход к классическому пределу для движения по X , когда $E_0 \gg E$, можно произвести, полагая $X = v_0 t$, $P \approx (2ME_0)^{1/2} - Ev_0^{-1}$, $E_0 = Mv_0^2/2$, $dP/dE \approx -v_0^{-1}$, $\beta = \alpha v_0$. Тогда формула (26) переходит в (4). Функция $\Phi(E)$, входящая в интеграл, имеет полюса в тех же точках λ_i , но, кроме того, имеется еще точка ветвления $E = E_0$, которая соответствует отражению при движении вдоль нулевого терма.

Выбор контура интегрирования и исследование асимптотических свойств функции $|\psi\rangle$ проводится тем же методом, что и для нестационар-

ной задачи. Вычеты функции $\Phi(E)$ в точках λ_n , определяющие вероятности элементарных переходов, будут равны

$$h_n^2 (dP/dE)_{\lambda_n} = h_n^2 / v_n, \quad v_n = [2(E_0 - \lambda_n)/M]^{-1/2}.$$

Обозначая

$$p_n = \exp(-2\pi h_n^2 v_n^{-1} \alpha_n^{-1}), \quad (27)$$

получаем для вероятностей переходов между открытыми каналами n и m' те же формулы (14), (18). Вместо формулы (15) имеем $|S_{00'}|^2 = 0$, а для вероятностей переходов с отражением получаем

$$\begin{aligned} |S_{nm}|^2 &= q_n p_{n+1} \dots p_{n_0} p_{n_0} p_{n_0-1} \dots p_{m+1} q_m, \\ |S_{00'}|^2 &= p_1 \dots p_{n_0} p_{n_0} \dots p_1, \quad \lambda_{n_0} < E_0 < \lambda_{n_0+1}, \\ |S_{n'm'}|^2 &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Симметрия во времени здесь, конечно, выполняется, так что, например, $S_{nm} = S_{m'n}$ и т. п.

Таким образом: а) переходы слева направо с уменьшением энергии и справа налево с увеличением энергии запрещены; б) отсутствует отражение при движении справа налево вдоль любого терма. Формула для разложения S -матрицы с учетом отражения в точке E_0 принимает вид

$$S = S_1 S_2 \dots S_{n_0} S_{n_0} S_{n_0-1} \dots S_1. \quad (29)$$

Итак, свойства S -матрицы, рассмотренные в разделе 2, сохраняются и в данном случае. Мы должны только учесть наличие точки поворота и то, что в точках пересечения невозмущенных термов скорости v_n имеют различные значения. Если $E_0 \gg E$, то все $v_n \approx v_0$; тогда, пренебрегая произведением $p_1 p_2 \dots p_{n_0}$ и учитывая, что $\beta = \alpha v_0$, мы приходим к прежним формулам (14), (15), (18). Легко также обобщить эти формулы на случай сплошного спектра оператора H_0 .

4. Возможные обобщения и примеры

Кроме того случая, когда оператор V линейно зависит от времени, задача легко решается также и для любой дробно линейной функции времени, в частности, если V обратно пропорционален времени. Тогда уравнение

$$[H_0 + |\varphi\rangle \gamma t^{-1} \langle \varphi|] |\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (30)$$

имеет решение

$$|\psi\rangle = N \int_C G(E) |\psi\rangle \exp\left(i \int^E \langle \varphi| G(E') |\varphi\rangle dE' - iEt\right) dE, \quad (31)$$

которое имеет даже более простой вид, чем решение (4). К сожалению, возмущение обращается в бесконечность при $t = 0$, что затрудняет использование этой модели в конкретных случаях. Общий ход термов при наличии только трех дискретных состояний изображен на рис. 3. В некоторых случаях, когда можно не принимать во внимание уходящие на бесконечность термы, эту модель все же можно использовать. В частности, если имеется нестационарная задача

$$(H_0 e^{at} + |\psi\rangle b \langle \varphi|) |\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle, \quad (32)$$

т. е. когда имеется система экспоненциально расходящихся термов, взаимодействующая с одним горизонтальным термом, то подстановка $e^{at} = s$ приводит уравнение (32) к (30) и, таким образом, задача тоже точно ре-

шается. Для случая двух состояний эта система рассматривалась Никитиным [5], а также в работе [9] и применялась для исследования задачи о нерезонансной перезарядке и для расчета переходов между компонентами тонкой структуры в щелочных металлах при столкновениях.

Нетрудно также написать решение соответствующей квантовой задачи.

Если оператор V квадратично зависит от времени, то мы приходим к уравнению второго порядка для функции $F(E)$, и задача сводится, таким образом, к исследованию этого уравнения, причем нужно найти поведение решения в окрестности точек λ_i . Квадратичная зависимость позволяет явно ввести симметрию по времени и тем самым облегчает использование модели в конкретных случаях. Отметим, наконец, что уравнение

$$(H_0 + |\varphi\rangle e^{at} \langle \varphi|) |\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (33)$$

приводит к функциональному уравнению для функции $F(E)$, связывающему $F(E)$ и $F(E + \alpha)$, которое также в ряде случаев нетрудно решить или исследовать. В приближении двух уровней элементарные преобразования переводят (33) в (32).

Простейшей задачей, относящейся к рассмотренному в разделе 2 классу, является сама модель Ландау — Зинера. В этом случае функция $|\varphi\rangle$ двухкомпонентна, оператор H имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} \beta t & h \\ h & \lambda \end{pmatrix}, \quad (34)$$

и решение хорошо известно. Другим примером может служить случай, когда имеется одна степень свободы x и $|\varphi\rangle = \delta(x - x_0)$. Тогда $\langle \varphi|G(E)|\varphi\rangle = G(x_0, x_0, E)$ и решение уравнения (1) имеет вид

$$|\psi\rangle = N \int_c \frac{G(x_0, x, E)}{G(x_0, x_0, E)} \exp\left(-\frac{i}{\beta} \int \frac{dE'}{G(x_0, x_0, E')} - iEt\right) dE. \quad (35)$$

В данном примере, в частности, легко уяснить смысл асимптотических состояний $|n\rangle$ и собственных значений λ_n . Действительно, если H_0 есть оператор энергии для частицы в потенциальной яме, то

$$G(x_0, x_0, E) = \psi_1(x_0, E)\psi_2(x_0, E),$$

где ψ_1, ψ_2 — решения уравнения Шредингера, удовлетворяющие граничным условиям соответственно при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow +\infty$. Отсюда видно, что уравнение $G(x_0, x_0, E) = 0$ имеет своими корнями уровни энергии в правой и левой частях потенциальной ямы, если ее разгородить непроницаемой стенкой в точке x_0 . Таким образом, в этом случае до взаимодействия имеются две независимые системы уровней в двух частях потенциальной ямы, разделенных непроницаемой перегородкой, и, кроме того, еще один уровень, локализованный в окрестности x_0 . При изменении t от $-\infty$ до 0 перегородка постепенно исчезает и все уровни «перемешиваются». При $t \rightarrow +\infty$ перегородка снова образуется, но уже без локализованного на

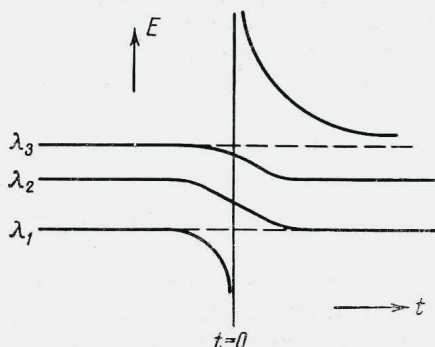


Рис. 3

x_0 состояния. Рассмотренная методика позволяет определить вероятность переходов между всеми состояниями для такой задачи.

Если положить, что $H_0 = -\frac{1}{2}\partial^2 / \partial x^2$ — оператор свободной частицы, то мы получаем немедленно

$$G(x, E) = (-2E)^{-1/2} \exp(-\sqrt{-2E}|x|), \quad G(x_0, x_0, E) = (-2E)^{-1/2}, \quad (36)$$

$$\Delta(E) \sim E^{1/2}, \quad -\ln w(E) \sim E^{3/2} \quad (37)$$

— результат, который был получен в [10], т. е. получаем спектр вылетающих частиц при выталкивании связанного состояния из ямы малого радиуса в сплошной спектр.

Еще один пример применения метода можно получить, если рассмотреть трехмерную потенциальную яму малого радиуса переменной глубины — модель, которая использовалась в работах [10, 11]. Если записать нестационарное граничное условие в той точке \mathbf{r}_0 , где находится яма, в виде

$$|\psi\rangle = A(t) \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \beta t \right) + O(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|), \quad (38)$$

то задача также решается точно.

В отличие от одномерного случая при $t \rightarrow +\infty$ яма исчезает и $H \rightarrow H_0$. При $t \rightarrow -\infty$ также можно считать, что $H \rightarrow H_0$, так как яма становится очень глубокой, энергия связанного состояния в яме $E \approx -\beta v^2 / 2$ очень велика и оно не влияет на остальные. Разделения системы на две части при $t \rightarrow \pm\infty$ не происходит, и в этом отношении трехмерная задача даже проще, чем одномерная.

Решение нестационарного уравнения Шредингера

$$(-\frac{1}{2}\nabla^2 + U_0(\mathbf{r})) |\psi\rangle = H_0 |\psi\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad (39)$$

с граничным условием (38) можно написать в виде

$$|\psi\rangle = N \int_c G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, E) \exp\left(\frac{i}{\beta} \int G_{reg}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, E') dE' - iEt\right) dE, \quad (40)$$

где G_{reg} — функция Грина, из которой вычтена сингулярная часть — определяется формулой

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + G_{reg}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \right). \quad (41)$$

Таким образом, задача сводится к определению вычетов функции $G_{reg}(E)$ в полюсах, т. е. в точках, соответствующих дискретным собственным значениям H_0 , и к определению скачка $G_{reg}(E)$ на разрезе — области сплошного спектра H_0 .

Если $U_0 = 0$, то $G(r, E) = (2\pi r)^{-1} \exp(-\sqrt{-2E}r)$, $G_{reg}(E) = -\sqrt{-2E}$, и легко получить тот же результат (37), что и в одномерном случае. Если считать, что $U_0 = 0$, но частица движется в полупространстве с условием на граничной плоскости $|\psi\rangle = 0$ (антисимметричный случай) или $\partial|\psi\rangle / \partial n = 0$ (симметричный случай), то функция Грина легко получается методом зеркального отражения, и мы приходим к модели, использованной в [11] для описания процесса отрыва электрона при столкновении отрицательного иона с атомом. Случай, когда потенциал U_0 имеет кулоновский характер при больших r , использован в [12] для описания процесса ионизации при медленном столкновении атомов.

Примером стационарной задачи, рассмотренной этим методом, является решенная в [16] задача Ландау — Зинера с одним горизонтальным термом. Именно на этом примере было подмечено свойство треугольности S -матрицы.

Отметим в заключение, что обычно в тех квантовых задачах, которые допускают точное решение, имеется лишь немного (один, два) нетривиальных параметров, что ограничивает возможность их применения. В рассмотренном же здесь классе задач имеется бесконечное число таких параметров (например h_n, λ_n), возможно рассмотрение дискретного, сплошного, смешанного зонного (периодическое поле) спектров оператора H_0 . Поэтому можно ожидать, что этот математический метод можно будет использовать для описания самых различных физических объектов.

Ленинградский государственный
университет
Институт химической физики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
22 июня 1966 г.

Литература

- [1] M. Born, V. Fock. *Zs. f. Phys.*, **51**, 165, 1928.
- [2] P. Güttinger. *Zs. f. Phys.*, **73**, 169, 1931.
- [3] L. Landau. *Sov. Phys.*, **2**, 46, 1932.
- [4] C. Zener. *Proc. Roy. Soc.*, **A137**, 696, 1932.
- [5] Е. Е. Никитин. *Оптика и спектроскопия*, **13**, 761, 1962.
- [6] В. К. Быховский, Е. Е. Никитин, М. Я. Овчинникова. *ЖЭТФ*, **47**, 750, 1964.
- [7] В. И. Ошеров. *ЖЭТФ*, **49**, 1157, 1965.
- [8] В. И. Ошеров. *ДАН СССР*, **168**, 1291, 1966.
- [9] Ю. Н. Демков. *ЖЭТФ*, **45**, 195, 1963.
- [10] Ю. Н. Демков. *ЖЭТФ*, **46**, 1126, 1964.
- [11] Ю. Н. Демков. *ЖЭТФ*, **49**, 885, 1965.
- [12] Ю. Н. Демков, Н. В. Комаров. *ЖЭТФ*, **50**, 286, 1966.
- [13] Ю. Н. Демков. *ДАН СССР*, **166**, 1076, 1966.
- [14] Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев. *ЖЭТФ*, **49**, 691, 1965.
- [15] Ю. Н. Демков. *Вестник ЛГУ*, **4**, 7, 1966.
- [16] М. Я. Овчинникова. *Оптика и спектроскопия*, **17**, 824, 1964.
- [17] В. И. Ошеров. *ТЭХ*, **1**, 680, 1965.

STATIONARY AND NONSTATIONARY QUANTUM PROBLEMS SOLUBLE BY THE CONTOUR INTEGRAL TECHNIQUE

Yu. N. Demkov, V. I. Osherov

It is shown that if the energy operator consists of a time-independent part H_0 and a perturbation which linearly depends on time and is a projection operator of onto a certain state $|\varphi\rangle$, then the exact solution of the Schroedinger equation can be derived in the form of a contour integral. The S -matrix for such a problem possesses the triangularity property and can be decomposed into elementary Landau — Zinger factors, each of which mixes only a pair of states. Similar results have been obtained for the corresponding stationary problem. Some generalizations and examples are considered. The relation of the results to previous work on electron detachment and on ionization in collisions between atoms and ions are also considered.