

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

530.145.6

**ЗАДАЧА О СПЕКТРЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
И ПРОЦЕДУРА «НЕЛИНЕАРИЗАЦИИ»****А. В. Турбинер****СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение	35
2. Теория возмущений	39
а) Основное состояние	40
б) Возбужденные состояния	43
в) Одномерный случай	46
г) О связи со стандартной теорией возмущений	47
3. Алгебраизация процедуры построения теории возмущений	48
а) Гармонический осциллятор как невозмущенная задача	49
б) Кулоновская система, возмущенная произвольным мультипольным статическим взаимодействием	54
в) Заключение	58
4. Произвольные возмущения: теория возмущений и вариационный метод	59
а) О вариационном методе с точки зрения теории возмущений	60
б) «Аргумент Дайсона». Как построить сходящуюся теорию возмущений?	61
в) Примеры	71
5. «Аналог» главного логарифмического приближения в квантовой механике	75
6. Заключение	76
Приложение. Электростатика с гауссовой диэлектрической проницаемостью	76
Цитированная литература	76

1. ВВЕДЕНИЕ

Начиная с 1926 г., когда Шредингер написал свое знаменитое уравнение, и вплоть до настоящего времени было развито много различных методов его решения, в частности для нахождения собственных состояний разнообразных квантовомеханических систем. Существование небольшого класса точно решаемых задач дало толчок к развитию различных теоретико-возмущенческих подходов. А это в свою очередь привело к проблеме больших возмущений или, на другом языке, к проблеме сильной связи, поскольку реальная физика обычно соответствует области больших возмущений. Одним из наиболее существенных и часто встречающихся проявлений возникающих трудностей является нулевой радиус сходимости рядов теории возмущений (ТВ).

Проблема сильной связи — одна из центральных проблем во многих физических науках. Практически всегда, когда удается совершить прорыв в эту область, открываются нетривиальные явления. Поэтому разработка регулярных методов исследования области больших возмущений является важной и актуальной задачей. Попробуем с этой точки зрения оценить ситуацию в квантовой механике и квантовой теории поля, сложившуюся в данный момент. Для дальнейшего более естественно начать с обсуждения квантовой теории поля.

В настоящее время одним из наиболее детально разработанных методов исследования точно не решаемых задач теории поля представляется стан-

дартная техника, основанная на использовании фейнмановских диаграмм. Этот подход использует теорию свободного поля в качестве нулевого приближения и обычно позволяет исследовать область слабой связи, малых констант взаимодействия. Он неэффективен в области больших возмущений, поскольку при его реализации, помимо чисто технических трудностей, возникающих при вычислении многопетлевых диаграмм, имеется такая неприятность принципиального характера, как нулевой радиус сходимости получающегося ряда ТВ по константе связи для физически важных величин. Качественное объяснение этого явления довольно просто и основано на известном «аргументе Дайсона»¹: при больших полях лагранжиан взаимодействия становится «больше», чем лагранжиан свободного поля, вне зависимости от величины рассматриваемой константы взаимодействия. Поясним принципиальный характер этой неприятности, задав себе совсем не академический вопрос: «Решена ли задача, если мы знаем произвольный, n -й член ряда теории возмущений?». Как это ни удивительно, но ответ звучит несколько парадоксально: «Нет, задача не решена!». Ибо даже если известен произвольный член ряда по константе связи, возникает задача, как этот ряд просуммировать. Ведь поскольку его коэффициенты растут с номером факториально и он имеет нулевой радиус сходимости, то задача суммирования весьма неоднозначна. Грубо говоря, можно при заданной константе связи получить любой ответ. Для того чтобы решить, каким все-таки способом суммировать получившийся ряд, нужно исследовать структуру особенностей исследуемой функции вблизи нуля константы взаимодействия. Один из возможных путей решения этой задачи — изучение аналитической структуры столь нетривиальной конструкции, как функциональный интеграл. Сколь эта структура может быть сложна, продемонстрировали Бендер и Ву^{2,3} и Саймон⁴ на примере одномерной теории поля, которой является ангармонический осциллятор $V(x) = m^2 x^2 + gx^4$. Отметим, что в этом примере правильным методом суммирования оказался метод Бореля⁵. Наибольшую опасность при суммировании представляют возможные неаналитические по параметру возмущения члены, дающие нулевые вклады в коэффициенты ряда ТВ. В настоящее время имеется довольно ограниченное число задач, для которых известен правильный метод суммирования.

На практике обычно известно конечное, хотя в некоторых случаях довольно большое, число членов ряда ТВ. Для того чтобы выйти за пределы применимости ТВ, используют различные методы аппроксимации: аппроксиманты Паде, улучшенную ТВ, метод Паде — Бореля, конформных преобразований и т. п. (см., например,⁶⁻⁷; эти методы получили существенное развитие в последнее время после работ Липатова⁸, см. также обзор⁹), предложившего способ нахождения асимптотического поведения коэффициентов ряда ТВ). Однако практически всегда при использовании подобных методов а priori не ясно, сходятся ли они к правильным результатам *).

Несколько лучшая, хотя и далекая от удовлетворительной, ситуация в нерелятивистской квантовой механике. В дальнейшем мы будем обсуждать ситуацию в случае связанных состояний и поэтому сделаем небольшой обзор методов, обычно используемых при решении задач этого типа, уделяя особое внимание их недостаткам, предполагая, что достоинства хорошо известны.

1) *Теория возмущений Рэлея — Шрёдингера* **). Этот подход является одним из наиболее известных и широко применяется. Для его реализации необходимо знание всего спектра невозмущенной задачи и всех матричных элементов. Таким образом, нулевое приближение — точно решаемая задача. Обычная ситуация — расходящиеся ряды ТВ и все те проблемы, о которых речь шла выше.

*) Пример сходимости аппроксимант Паде к неправильному пределу приведен в работах¹⁰.

**) См., например,¹¹, гл. 6.

2) *Вариационный принцип и различные его модификации (метод Хартри, Хартри — Фока и т. д.)*. Вариационный подход — единственный инструмент при решении сколько-нибудь сложных многомерных задач, в частности задач атомной физики. Основным его недостатком является отсутствие оценки точности получающихся результатов. Всевозможные оценки снизу вариационных расчетов типа оценки Темпля (см., например, ¹²) обычно очень грубы. Уточнение их — сложная задача. Кроме того, отсутствуют достаточно строгие критерии выбора пробных функций, которые бы максимально быстро приводили к требуемым точностям. Более того, поскольку энергия состояния — довольно грубая характеристика системы, высокая точность в энергии не гарантирует точности в других, более тонких характеристиках. Большие трудности могут возникать при построении пробных функций возбужденных состояний (проблема ортогональности).

3) *Квазиклассическое приближение (метод ВКБ)*. Этот подход имеет довольно ограниченную область применимости, будучи обычно справедливым для высоковозбужденных состояний, хотя, например, его модификация, предложенная Мариновым и Поповым ¹³, значительно расширила сферу его возможностей. Для исследования низколежащих состояний необходимо использовать высшие порядки квазиклассического приближения, нахождение которых связано с большими трудностями (см., например, ¹⁴). Отметим также, что квазиклассическое приближение детально разработано только для одномерных и сферически-симметричных случаев.

4) *Численные методы*. Хотя у многих людей есть ощущение, что на хорошей ЭВМ можно решить любую задачу, это далеко не так. Когда речь идет о задачах на собственные значения, то пока численные расчеты дают надежные результаты только в одномерном случае. Даже двумерная задача представляется уже очень сложной с точки зрения численного счета: как результат этого — противоречивые результаты расчетов (см. ниже).

На этом мы завершим краткий обзор стандартных и общеизвестных подходов к решению стационарного уравнения Шрёдингера. Математическая сторона дела и дальнейшие подробности описаны, например, в монографиях ^{15–16}. Естественно, в настоящее время существует большое количество разнообразных модификаций этих подходов, как обладающих достаточной общностью, так и приспособленных для решения данной конкретной задачи, о которых мы не упомянули.

Прежде чем переходить к обсуждению подхода, которому посвящена данная статья, дадим краткий обзор современного положения с несколькими классическими квантовомеханическими задачами, которые упоминаются практически в любой учебной книге по квантовой механике и которые мы в дальнейшем рассмотрим в качестве примеров применения описываемого в работе подхода.

а) Атом водорода в постоянном электрическом поле (эффект Штарка). В этой задаче область сильной связи в случае основного состояния начинается с полей $\mathcal{E} \sim 0,1$ а. е. Имеется несколько расчетов энергии и ширины основного состояния в области больших полей — как численные, так и в рамках подхода, описанного в данной статье. Практически все численные расчеты в области $\mathcal{E} \geq 0,15$ а. е. дают разные результаты (см. работу ¹⁷ и ссылки в ней), причем некоторые различаются по порядку величины.

б) Атом водорода в постоянном магнитном поле (эффект Зеемана). Для этой задачи не решена проблема классификации состояний *). В принципе задача проще задачи об эффекте Штарка, поскольку отсутствует явление туннелирования. Имеется довольно много расчетов (см. ¹⁸ и ссылки в ней). Расчеты проведены только для не-

*) В самое последнее время наблюдается значительный прогресс в классификации высоковозбужденных состояний ²¹.

скольких низших состояний. Результаты для энергий при полях 10^{11} — 10^{12} Гс, встречающихся в астрофизике и физике полупроводников, различаются на несколько порядков.

в) Атом водорода в скрещенных полях. Также не решена задача классификации состояний. Фактически существует только качественное рассмотрение (см. ¹⁹⁻²⁰). В области слабой связи для основного состояния неизвестен даже первый перекрестный член ТВ порядка $\xi^2 \mathcal{H}^2$.

* * *

Подход, которому посвящена данная статья, представляет собой объединение теории возмущений и вариационного метода и может быть отнесен к разряду вариационно-итерационных. С точки зрения ТВ он представляет собой попытку регулярного метода исследования области сильной связи, больших возмущений и не содержит формального малого параметра. По сути дела, он состоит из трех частей: 1) ТВ, не требующей знания полного спектра невозмущенной задачи, 2) представления вариационного расчета как двух первых членов некоторой ТВ и 3) сравнения потенциалов исходной и невозмущенной задач с точки зрения «аргумента Дайсона». Важным техническим моментом является использование языка потенциалов вместо волновых функций, основанное на тривиальном утверждении, что *любая нормируемая функция есть собственная функция некоторого состояния в некотором потенциале*. Это позволяет оценивать «качество» вариационного расчета (или, эквивалентно, невозмущенной задачи на языке ТВ), сравнивая потенциал, отвечающий вариационной пробной функции, с потенциалом исходной задачи, в отличие от сравнения пробной функции с неявной истинной волновой функцией. При этом имеется физически осмысленный критерий разумности, основанный на «аргументе Дайсона».

■ ТВ, не нуждающаяся в знании спектра невозмущенной задачи, предлагалась уже довольно давно. По-видимому, впервые она была построена в 1954 г. Прайсом ²² и несколько позднее Зельдовичем ²³ (см. также ²⁴, с. 142) для основного состояния в одномерном случае. Прайс использовал переход от уравнения Шрёдингера к уравнению Риккати, а Зельдович нашел функцию Грина уравнения Шрёдингера явно. Все поправки при этом выразились в виде явных квадратур. Затем эта ТВ была переоткрыта Киржницем ^{25, 26}, который с ее помощью вычислил поправку к приближению Хартри — Фока при расчете двухэлектронных атомов. В работах Далгарно — Левиса и Стейнхаммера развивался несколько другой подход к ТВ, позволяющий также получать формулы в квадратурах (см. обзор ²⁷). В дальнейшем подобные подходы и замкнутые формулы для поправок ТВ многократно переоткрывались разными авторами ²⁸⁻³², которые демонстрировали их преимущества перед стандартными *). В частности, в ³⁰ был построен пример некоторой быстросходящейся итерационной схемы для решения задачи об ангармоническом осцилляторе. Как было позднее показано, эта схема также сводится к обсуждаемой ТВ. В ³² был впервые сформулирован рецепт получения сходящихся рядов ТВ. В качестве примера была построена ТВ для низших состояний в потенциале $V(x) = x^{2n}$. Подробное исследование метода было проведено в работе ³³.

Обобщение подхода на случай возбужденных состояний в одномерном случае было предложено Поликановым ³⁴, а затем Аароновым и Ау ³¹ и в общем случае в ^{33, 35}.

Многомерное обобщение данного подхода было сформулировано в ³⁶ и независимо в ³⁷. В работе ³⁵ была описана связь ТВ с вариационным принципом. Было показано, что результаты вариационных расчетов пред-

*) Процесс переоткрытия продолжается до сих пор. После написания данной статьи была опубликована статья ¹⁰⁰, в которой авторы пишут о построении новой (!), очень удобной ТВ, которая сводится к обсуждаемой нами ТВ.

ставляют собой первые два коэффициента некоторого ряда ТВ, и поэтому вычисление следующих коэффициентов этого ряда позволяет оценивать точность вариационных расчетов и итерационным способом ее повышать. Кроме того, в этой работе было найдено, что рецепт получения сходящихся рядов ТВ, сформулированный ранее ³², есть не что иное, как обычные требования, исходя из которых строится класс пробных функций для вариационных расчетов. В частности, рецепт, предложенный в ³⁰, — частный случай общего рецепта, справедливый только для неотрицательных и растущих на бесконечности потенциалов. В работах ³³, ³⁵ было также описано обобщение подхода на случай возбужденных состояний в многомерном случае. Кроме того, было показано, что когда можно реализовать стандартную ТВ, данный подход становится чисто алгебраической процедурой, сводящейся к решению рекуррентных соотношений ³⁸.

В настоящее время этот подход интенсивно развивается. Происходит перерассмотрение практически всех известных задач квантовой механики как с точки зрения исследования обычной ТВ, так и в рамках аналитического изучения области произвольных возмущений: ангармонический осциллятор (см., например, ³⁰⁻³², ³³), штарк-эффект (например, ¹⁷, ³⁹), эффект Зеемана ¹⁸, ⁴⁰, экранированный кулоновский потенциал (например, ⁴¹), атом водорода в скрещенных полях ⁴² и др. Отметим также, что ТВ, не использующая знание всего спектра невозмущенной задачи, имеет различные названия в литературе: «теория возмущений в квадратурах» ²²⁻²⁶, «метод F -функций Далгарно» ²⁷, «логарифмическая теория возмущений» ³⁶, «метод нелинеаризации» ³²⁻³³, ³⁵, ³⁶, ³⁸. Мы будем придерживаться последнего названия.

Несмотря на довольно длительную историю и интенсивное развитие, в настоящий момент отсутствует связанное изложение данного метода. Единственный обзор на эту тему ²⁷ посвящен методу F -функций и касается только ТВ. Он практически не содержит примеров. Мы попытались заполнить этот пробел.

2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Построение ТВ начнем с предварительных замечаний общего характера.

Очевидно, что волновую функцию произвольного связанного состояния в гладком потенциале можно представить в следующей форме:

$$\psi(x) = f(x) \exp[-\phi(x)], \quad (2.1)$$

где функции $f(x)$ и $\phi(x)$ не имеют особенностей при действительных $x \in \mathbb{R}^k$. Конечно, представление (2.1) неоднозначно. Вопрос о том, как его фиксировать, мы обсудим ниже. На данном этапе это несущественно. Пусть теперь потенциал задачи состоит из двух частей: невозмущенной V_0 и возмущения V_1 :

$$V = V_0 + \lambda V_1, \quad (2.2)$$

где λ — формальный параметр, и мы хотим решить исходную задачу в теории возмущений по параметру λ . Имеется несколько способов развития теории возмущений, по-разному разлагая в ряд по λ волновую функцию *):

$$а) \quad \phi(x) \equiv 0, \quad f(x) = \sum_n \lambda^n f_n(x).$$

Это не что иное, как стандартная ТВ Рэлея — Шредингера (см. ¹¹, гл. 6).

$$б) \quad \phi(x) = \phi_0(x), \quad f(x) = \sum_n \lambda^n f_n(x).$$

Данная процедура называется методом F -функций Далгарно (см. обзор ²⁷); в частности, именно этот метод с успехом использовался Банксом, Бенде-

*) Индекс нуль характеризует величины, относящиеся к невозмущенной задаче.

ром и Ву при исследовании одномерного и двумерного ангармонических осцилляторов ^{2-3, 43-44}.

$$\text{в) } \phi(x) = \sum_n \lambda^n \phi_n(x), \quad f(x) = \begin{cases} 1 & \text{в случае основного состояния,} \\ f_0(x) & \text{в случае возбужденных состояний с известным положением} \\ & \text{узловых поверхностей,} \\ \sum_n \lambda^n f_n(x) & \text{в общем случае возбужденных состояний.} \end{cases}$$

Построению, изучению и использованию этой формы ТВ, которая является наиболее общей при представлении (2.1), и посвящена, в основном, данная статья.

Рассмотрим сначала случай основного состояния, волновая функция которого не обращается в нуль в конечных точках.

а) Основное состояние

Суть метода, если посмотреть на него с несколько другой стороны, чем это только что проделывалось, заключается в процедуре преобразования, которую мы назовем процедурой *нелинеаризации* ³⁶⁻³⁷ k -мерного уравнения Шредингера, являющегося линейным уравнением второго порядка,

$$\Delta\psi + (E - V)\psi = 0, \quad (2.3)$$

в нелинейное уравнение, но зато первого порядка, с правой частью, и в развитии ТВ уже применительно к этому уравнению. Преобразование, которое реализует эту процедуру в случае основного состояния, имеет вид *)

$$y = -\frac{\nabla\psi}{\psi} = -\nabla(\ln \psi), \quad (2.4)$$

где Δ, ∇ — обычные k -мерные операторы Лапласа и градиента соответственно. Используя (2.3)—(2.4), получаем следующее уравнение:

$$\operatorname{div} y - y^2 = E - V, \quad (2.5)$$

которое эквивалентно исходному уравнению Шредингера при условии, что поле y — потенциальное, т. е.

$$y = \nabla\phi(x), \quad (2.6)$$

где $\phi(x)$ — скалярная функция; другими словами, должна равняться нулю кося производная

$$\partial_i y_j - \partial_j y_i = 0. \quad (2.6')$$

Уравнение (2.5) с условиями (2.6) или (2.6') — это основное уравнение, с помощью которого строится наш метод. Отметим, что в одномерном случае оно превращается в известное уравнение Риккати (см., например, Камке ⁴⁹). Вопрос о граничных условиях для (2.5) обсудим ниже.

Начнем теперь построение ТВ, сделав следующее предварительное замечание. Очевидно, что исследуемый потенциал $V(x)$ всегда можно представить в виде суммы (2.2) или в общем случае как

$$V(x) = \sum_n \lambda^n V_n(x), \quad (2.2')$$

*) Это преобразование неоднократно использовалось ранее в различных физических ситуациях: Вентцелем — Крамерсом — Бриллюэном — при построении квазиклассического приближения, Рытовым — в теории колебаний (см. обсуждение в ⁴⁵), Биюлом ⁴⁶, Боголюбовым — Зубаревым ⁴⁷ и Пенроузом — Онзагером ⁴⁸ — в задачах статистической физики.

где λ — формальный параметр, введенный для удобства, причем уравнение

$$\Delta\psi_0 + (E_0 - V_0)\psi_0 = 0 \quad (2.7)$$

имеет явное решение. Или, с другой стороны, это можно сформулировать следующим образом: возьмем любую достаточно гладкую функцию $\psi_0(x) \in L_2(\mathbb{R}^k)$ и найдем потенциал

$$V_0 - E_0 = \frac{\Delta\psi_0}{\psi_0}, \quad (2.7')$$

ей соответствующий. Тогда потенциал возмущения $V_1(x)$ будет равняться разности $(V - V_0)$. Следует отметить, что

$$\mathbf{y}_0 = -\frac{\nabla\psi_0}{\psi_0}. \quad (2.8)$$

После этого замечания, которое нам будет очень полезно в дальнейшем, приступим к построению ТВ для основного состояния.

Как отмечалось выше, для достаточно гладких потенциалов волновая функция основного состояния нигде не обращается в нуль. Это означает, что вектор-функция \mathbf{y} не содержит полюсных особенностей при действительных x *). Запишем теперь разложение E и \mathbf{y} в ряд Тейлора по параметру λ :

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_0 + \lambda\mathbf{y}_1 + \lambda^2\mathbf{y}_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \mathbf{y}_n, \quad (2.9)$$

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_n; \quad (2.10)$$

при этом E_0 и \mathbf{y}_0 даются (2.7') и (2.8) соответственно. Подставляя (2.9)—(2.10) в (2.5) и собирая члены при λ^n , получаем для определения E_n и \mathbf{y}_n уравнение

$$\operatorname{div}(\psi_0^2 \mathbf{y}_n) = (E_n - Q_n)\psi_0^2, \quad (2.11)$$

или, в эквивалентном виде,

$$\operatorname{div} \mathbf{y}_n - 2\mathbf{y}_0 \mathbf{y}_n = E_n - Q_n, \quad (2.11')$$

причем векторное поле \mathbf{y}_n должно еще удовлетворять и условию потенциальности (2.6) или (2.6'). Здесь

$$Q_1 = V_1, \quad Q_n = -\sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{y}_i \mathbf{y}_{n-i}, \quad n \geq 2. \quad (2.12)$$

Подчеркнем любопытный факт: для нахождения n -й поправки нужно решать одно и то же уравнение (2.11), но с разными правыми частями. Поэтому Q_n при $n > 1$ можно трактовать как эффективный потенциал возмущения. Уравнение (2.11) вместе с условием потенциальности поля \mathbf{y}_n — это уравнение обычной (только многомерной) электростатики, в которой ψ_0^2 и \mathbf{y}_n играют роль диэлектрической проницаемости и напряженности поля соответственно, а $(E_n - Q_n)\psi_0^2$ — плотности заряда.

Обсудим теперь вопрос о граничных условиях. Поскольку нас интересует проблема связанных состояний, то в исходном уравнении (2.5) граничное условие можно записать как отсутствие тока частиц на бесконечности:

$$|\mathbf{y}\psi^2| \rightarrow 0 \text{ при } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.13)$$

Для уравнения (2.11), исходя из условия (2.13), граничное условие можно задать в виде

$$|\mathbf{y}_n \psi_0^2| \rightarrow 0 \text{ при } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.14)$$

*) Здесь и далее для краткости мы пишем x , подразумевая точку в пространстве \mathbb{R}^k с координатами (x_1, x_2, \dots, x_k) .

Поскольку волновые функции связанных состояний обычно спадают на бесконечности экспоненциально, то (2.14) означает, что векторное поле y_n не должно на больших расстояниях расти быстрее, чем степень. Граничное условие можно пояснить с физической точки зрения: в случае, когда потенциал возмущения равен нулю, все поправки E_n и y_n тождественно равны нулю, т. е. решение однородного уравнения (2.11) или (2.11') должно быть тождественным нулем.

Условие (2.14) можно немедленно превратить в информацию о поправках E_n . Для этого проинтегрируем (2.11) по всему пространству и преобразуем получающийся в правой части интеграл в поверхностный, согласно теореме Остроградского — Гаусса. Тогда, учитывая условие (2.14), получим ^{33, 35-37}

$$E_n = \int_{\mathbb{R}^k} Q_n \psi_0^2 dx \left(\int_{\mathbb{R}^k} \psi_0^2 dx \right)^{-1}. \quad (2.15)$$

Выражение (2.15) дает величину произвольной поправки к уровню энергии основного состояния невозмущенной задачи. Отметим, что выражение для первой поправки E_1 совпадает со стандартным выражением ТВ Рэля — Шредингера ¹¹, а вторая поправка

$$E_2 = - \int y_1^2 \psi_0^2 dx \left(\int \psi_0^2 dx \right)^{-1}$$

всегда отрицательна, как и должно быть.

Однако для того, чтобы вычислять различные поправки E_n при $n \geq 2$, необходимо решить электростатическую задачу (2.11), которая эквивалентна решению эллиптического уравнения общего вида

$$\frac{1}{\psi_0^2} \operatorname{div} (\psi_0^2 \operatorname{grad} \phi_n) = E_n - Q_n \quad (2.16)$$

с граничным условием (2.14), где $y_n = \operatorname{grad} \phi_n$, а E_n дается (2.15). Отметим, что оператор

$$\frac{1}{\psi_0^2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi_0^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \right),$$

стоящий в правой части (2.16), — оператор Лапласа в кривом пространстве с конформно-плоской метрикой, причем ψ_0 играет роль детерминанта метрического тензора. Таким образом, задача построения ТВ эквивалентна нахождению функции Грина оператора Лапласа в конформно-плоском пространстве со специального вида метрикой.

Итак, задача вычисления поправок уже не есть задача на собственные значения (E_n и Q_n предполагаются известными из предыдущих итераций). По этой причине задача нахождения поправок E_n и соответственно y_n много проще с точки зрения численного счета, чем решение исходного уравнения Шредингера. Кроме того, эквивалентность этой задачи электростатической позволяет в принципе использовать аналоговые вычислительные машины.

Обсудим теперь вопрос о нахождении поправок y_n более конкретно. Решение уравнения (2.11) с дополнительным условием потенциальности (2.6) имеет следующий вид:

$$\psi_0^2 y_n(x) = \int_{\mathbb{R}^k} G_k(x, x') (E_n - Q_n) \psi_0^2 dx', \quad (2.17)$$

где $G_k(x, x')$ — функция Грина уравнения (2.11) с дополнительным условием (2.6), индекс k указывает размерность пространства. В общем случае, когда ψ_0^2 — произвольная функция $\psi_0 \in L_2(\mathbb{R}^k)$, функция Грина неизвестна и, по-видимому, ее невозможно построить в явном виде. Однако в не-

скольких частных случаях это можно сделать. Во-первых, для сферически-симметричных ψ_0^2 и V_1 функция Грина имеет вид

$$G_h(x, x') = \frac{1}{\sigma_h} \frac{x-x'}{|x-x'|^h}, \quad (2.18)$$

где $\sigma_h = 2\pi^{h/2}/\Gamma(h/2)$ — площадь h -мерной сферы единичного радиуса. Тогда решение (2.17) после интегрирования по угловым переменным дается следующей формулой:

$$r^{h-1} \psi_0^2 y_n(r) = \int_0^r (E_n - Q_n) \psi_0^2 r'^{(h-1)} dr', \quad y_n = y_n(r) \frac{r}{r}. \quad (2.19)$$

Подчеркнем здесь, что эта формула также дает общее решение в одномерном случае. Во-вторых, задача решается явно также и когда диэлектрическая проницаемость гауссова,

$$\psi_0^2 = a \exp(-\alpha x^2).$$

Общее решение уравнения (2.11) дается формулой

$$y_n = \frac{1}{2\pi^{h/2}} \int_{\mathbb{R}^h} dx' (E_n - Q_n(x')) \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} (t + \alpha)^{(h-2)/2} \times \\ \times \exp[-(\sqrt{t} x - \sqrt{t + \alpha} x')^2] (\sqrt{t} x - \sqrt{t + \alpha} x'), \quad (2.20)$$

которая будет выведена в приложении. Мне неизвестны другие функции Грина в явном виде, однако для возмущенной двухчастичной кулоновской задачи, несмотря на отсутствие явной формулы для функции Грина, ТВ может быть построена явно благодаря явлению алгебраизации (см. гл. 3). В случае, когда сферически-несимметричный потенциал содержит конечное число гармоник, также имеется большое упрощение процедуры построения ТВ. Нулевое приближение берется сферически-симметричным, а поправки ищутся в виде конечных разложений по гармоникам; коэффициентные функции при гармониках находятся из решения одномерных уравнений. Такой метод использовался при исследовании задачи о двумерном несимметричном ангармоническом осцилляторе³⁵. В общем случае для решения уравнения (2.11) необходимо привлекать численные методы.

б) Возбужденные состояния

Перейдем теперь к рассмотрению возбужденных состояний. Необходимость их отдельного рассмотрения связана с несколькими причинами. Во-первых, в случае возбужденных состояний в интегралах (2.15) возникают неинтегрируемые особенности, поскольку нули возбужденных волновых функций трансформируются в полюсные особенности вектор-функции y , а интегралы (2.15) зависят от Q_n , являющихся квадратичными формами от y_i . В одномерном случае было показано³⁴, что уводя контур интегрирования в комплексную плоскость, чтобы обойти эти особенности, можно получить правильные результаты. Этот метод кажется сложным с технической точки зрения, а, кроме того, неясно его обобщение на многомерный случай. Мы опишем более простой способ^{33, 35}, в котором размерность пространства не играет существенной роли. Во-вторых, вопрос о возбужденных состояниях в многомерном случае практически не исследован математически, в частности, отсутствует решение задачи о классификации состояний^{*}). Это обстоятельство сильно усложняет ситуацию.

Итак, правдоподобно, что волновая функция возбужденного состояния характеризуется некоторым множеством S_0 , на котором она обращается

^{*}) Современное состояние проблемы дано в работе Корша¹⁰².

в нуль. Поэтому волновую функцию можно представить в виде (2.1)

$$\psi(x) = f(x) \exp[-\phi(x)],$$

где $f(x)$ и $\phi(x)$ не содержат сингулярностей при конечных $x \in \mathbb{R}^k$, а $f(x)$ растет при $|x| \rightarrow \infty$ не быстрее степени, причем $f(x) = 0$, а $\nabla f(x) \neq 0$ при $x \in S^*$, т. е. мы в явном виде выделяем функцию $f(x)$, несущую информацию об узловых поверхностях, где исходная волновая функция обращается в нуль. Эта процедура неоднозначна. Чтобы устранить произвол, наложим условие минимальности, потребовав, чтобы $f(x)$ содержало минимальную информацию, не относящуюся к узловым поверхностям. Поясним суть этого требования на одномерном примере. Известно, что волновая функция l -го возбужденного состояния характеризуется l нулями. Поэтому требуем, чтобы $f(x)$ было полиномом l -й степени с действительными корнями. Теперь введем в рассмотрение вектор $g = \nabla \phi(x)$, и тогда вектор-функция u (2.4) будет равна

$$u = -\frac{\nabla \psi}{\psi} = g - \frac{\nabla f}{f}. \quad (2.21)$$

Следовательно, мы выделили явным образом ту часть векторного поля u , которая содержит сингулярности, связанные с обращением в нуль волновой функции. Подставив (2.21) в (2.5) и умножив результат на $f(x)$, приходим к следующему уравнению^{33, 35}:

$$f \nabla g - f g^2 - \Delta f + 2g \nabla f = (E - V) f. \quad (2.22)$$

Это уравнение и лежит в основе всего развиваемого подхода. Отметим, что при $g = 0$ оно переходит в обычное уравнение Шредингера, а при $f(x) = 1$ — в уравнение (2.5).

Начнем теперь развивать ТВ. Пусть потенциал имеет вид (2.2') и ψ_0 — волновая функция уравнения (2.7), записанная в виде (2.1), причем множество S_0 , на котором $\psi_0(x)$ обращается в нуль, задается условием $f_0(x) = 0$. Разложим теперь в ряд по λ не только E и g (см. (2.8), (2.10)), но и функцию $f(x)$, характеризующую множество нулей и их деформацию^{**}):

$$f = f_0 + \lambda f_1 + \lambda^2 f_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n f_n. \quad (2.23)$$

Соберем теперь члены первого порядка по λ и после простых математических преобразований получим

$$\operatorname{div}(\psi_0^2 g_1 + e^{-2\phi_0}(f_1 \nabla f_0 - f_0 \nabla f_1)) = (E_1 - V_1) \psi_0^2, \quad (2.24)$$

где индекс нуль характеризует нулевое приближение. Интегрируя по всему пространству (2.24) и учитывая условие (2.14) (в котором u заменено на g), получаем формулу для E_1 , которая совпадает с (2.15) при $n = 1$. Отметим, что если положить $g_1 = 0$, то уравнение (2.24) переходит в уравнение Далгарно — Левиса (см. обзор²⁷). Общее решение уравнения (2.24) можно

*) В точках самопересечения узловых поверхностей, где происходит разветвление, должно выполняться условие $\nabla f(x) = 0$.

**) В одномерном случае S — дискретное множество точек, а f — полином

$$f(x) = \prod_i^m (x - \alpha_i),$$

где m — число нулей. Поэтому в принципе можно разлагать в ряд по λ прямо положения нулей α_i , т. е. писать, что $\alpha_i = \sum \lambda^k \alpha_{ik}$, как это предлагалось в^{31, 34}. Однако этот способ не допускает обобщения на многомерие (см. ниже) и, кроме того, неэкономичен, так как происходит превышение точности в предэкспоненте f : поправка $f_n \lambda^n$ содержит вклады от высших порядков. Другими словами, для построения ТВ излишне знать, как деформируются фрагменты узловых поверхностей, достаточно знать, как меняется картина в целом.

записать в виде

$$\psi_0^2 g_1 + e^{-2\phi_0} (f_1 \nabla f_0 - f_0 \nabla f_1) = \int_{\mathbb{R}^k} dx' G_{\text{ex}}(x, x') (E_1 - V_1) \psi_0^2, \quad (2.25)$$

где $G_{\text{ex}}(x, x')$ — функция Грина уравнения (2.24), причем выражение $\psi_0^2 G_{\text{ex}}(x, x')$ должно удовлетворять условию потенциальности (2.6) или (2.6') по переменной x . Другое условие фиксации функции Грина — требование, чтобы правая часть (2.25) была вектором, направленным по ∇f_0 при $x \in S_0$. Тогда деформация множества S_0 в первом порядке по λ характеризуется условием

$$f_1(x) = \frac{\nabla f_0 \cdot \int G_{\text{ex}}(x, x') (E_1 - V_1) \psi_0^2 dx'}{(\nabla f_0)^2 \exp[-2\phi_0(x)]}, \quad x \in S_0. \quad (2.26)$$

Аналогичным образом находятся уравнения для определения высших поправок. По структуре они похожи на (2.24) и отличаются от него только правой частью:

$$\text{div} [\psi_0^2 g_n + e^{-2\phi_0} (f_n \nabla f_0 - f_0 \nabla f_n)] = (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2, \quad (2.27)$$

или, в эквивалентной форме,

$$\nabla g_n - 2g_0 g'_n - \frac{\Delta f_n - 2g_0 \nabla f_n - 2g_n \nabla f_0}{f_0} + f_n \frac{\Delta f_0 - 2g_0 \nabla f_0}{f_0^2} = E_n - \tilde{Q}_n, \quad (2.28)$$

где

$$Q_n \equiv - \sum_{i=1}^{n-1} g_i g_{n-i} - \frac{1}{f_0} \left[\sum_{k=1}^{n-1} f_k \left(\sum_{i=0}^{n-k} g_i g_{n-k-i} - \nabla g_{n-k} \cdot \nabla f_{n-k} - E_{n-k} - V_{n-k} \right) - 2 \sum_{k=1}^{n-1} g_k \nabla f_{n-k} \right], \quad n \geq 2. \quad (2.28')$$

Поправка к энергии получается из тех же соображений, что и в случае основного состояния, и имеет вид, аналогичный (2.15):

$$E_n = \int dx \tilde{Q}_n \psi_0^2 \left(\int dx \psi_0^2 \right)^{-1}, \quad (2.29)$$

где \tilde{Q}_n при $n \geq 2$ дается (2.28'), а $\tilde{Q}_1 = V_1$. Если вспомнить о потенциальности поля g , то мы видим, что, как и в случае основного состояния, задача нахождения поправок сводится к решению электростатической задачи с переменной диэлектрической проницаемостью. В данном случае роль вектора напряженности электрического поля играет величина $(g_n - \nabla(f_n/f_0))$.

Решение уравнения (2.27) можно записать в том же виде, что и решение уравнения (2.24):

$$\psi_0^2 g_n + (f_n \nabla f_0 - f_0 \nabla f_n) e^{-2\phi_0} = \int_{\mathbb{R}^k} dx' G_{\text{ex}}(x, x') (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2, \quad (2.30)$$

с той же самой функцией Грина $G_{\text{ex}}(x, x')$, что и в (2.25). Информация о высших поправках f_n , характеризующих деформацию множества нулей, дается соотношением

$$f_n(x) = \frac{\nabla f_0 \cdot \int G_{\text{ex}}(x, x') (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx'}{(\nabla f_0)^2 \exp(-2\phi_0)}, \quad x \in S_0. \quad (2.31)$$

Итак, казалось бы, мы имеем все необходимое для построения ТВ для возбужденных состояний. Однако это не совсем так. Поясним, в чем дело.

Проблема заключается в необходимости знания свойств узловых поверхностей. Когда нам из каких-либо соображений удалось угадать их положение, то построение ТВ не представляет трудностей, поскольку задача фактически сводится к той, которая была в случае основного состояния, так как

$$f_n = 0, \quad n \geq 1,$$

и, следовательно *),

$$\tilde{Q}_1 = Q_1 = V_1, \quad \tilde{Q}_n = Q_n = - \sum_{i=1}^{n-1} g_i g_{n-i}. \quad (2.32)$$

Например, подобная ситуация имеет место при исследовании уровней с нулевым радиальным квантовым числом в сферически-симметричных задачах, при нулевых параболических квантовых числах в задаче об эффекте Штарка, для некоторых состояний в задаче об эффекте Зеемана (см. ниже).

В общем же случае ситуация представляется довольно неопределенной, поскольку для нахождения деформаций многообразия нулей $f_n(x)$ необходимо привлекать дополнительные соображения, которые позволили бы продолжить $f_n(x)$ из области $x \in S_0$ (см. (2.31)), в которой они определены, на все пространство \mathbb{R}^h . В одномерном случае эта дополнительная информация дается осцилляционной теоремой (см. ¹¹, § 21).

В многомерном случае подобная дополнительная информация отсутствует, поскольку многомерный аналог осцилляционной теоремы в настоящее время неизвестен. Единственно, что известно об узловых поверхностях, — это, что узловые поверхности n -уровня делят пространство не более чем на n частей ¹⁶ (см. обсуждение в ¹⁰²). Эта трудность отражает факт отсутствия классификации состояний в многомерном случае. Итак, прежде чем строить ТВ, необходимо решить классификационную задачу. В некоторых частных случаях (когда невозмущенная задача — точно решаемая) проблема классификации может быть решена технически, с помощью решения секулярного уравнения. В принципе эту трудность можно обойти, используя вариационный принцип и следя за ортогональностью пробных функций.

в) Одномерный случай

Остановимся более подробно на одномерном случае, поскольку здесь ТВ можно построить до конца. Для основного состояния уравнение (2.5) в одномерном случае превращается в хорошо известное уравнение Риккати, а условия (2.6) или (2.6') выполняются тождественно. Легко показать, что решение уравнения (2.11) дается формулой (2.18), которую можно привести к следующему виду ²²:

$$y_n = \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^x (E_n - Q_n) \psi_0^2(x') dx', \quad (2.33)$$

где Q_n определено в (2.18). Поправки к энергии E_n по-прежнему даются формулой (2.15).

В случае возбужденных состояний решение уравнения (2.27), имеющее вид (2.30), преобразуется к форме ^{33, 35}

$$g_n(x) = \left(\frac{f_n}{f_0} \right)^2 + \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^x (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx', \quad (2.34)$$

тогда как деформация многообразия нулей f_n дается формулой (2.31). Поскольку в одномерном случае множество S — совокупность нескольких

*) Обратим внимание, что, как и в случае основного состояния, поправка E_2 всегда отрицательна.

точек на прямой, то величины, определяющие деформации их положений, есть

$$f_n(x_i^0) = \int_{-\infty}^{x_i^0} (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx' [f_0'(x_i^0) e^{-2\phi_0(x_i^0)}]^{-1}, \quad x_i^0 \in S_0, \quad i = 1, \dots, l, \quad (2.35)$$

где l — номер исследуемого уровня, \tilde{Q}_n дается (2.28). Для нахождения деформации многообразия нулей $f_n(x)$ привлечем осцилляционную теорему (см., например, ¹¹). Суть этой теоремы заключается в том, что предэкспонента $f(x)$ — полином степени, равной номеру изучаемого уровня, поэтому поправки $f_n(x)$ должны быть полиномами степеней, не превышающих величины номера уровня. Таким образом, задача нахождения поправок $f_n(x)$ сводится к определению коэффициентов полинома $(l-1)$ -й степени $P_n^{(l-1)}(x)$, заданного в точках x_i^0 ($P_n^{(l-1)}(x_i^0) = f_n(x_i^0)$). Решение этой задачи может быть получено с помощью решения системы l линейных уравнений с l неизвестными, роль которых играют коэффициенты полинома a_j ($P_n^{(l-1)}(x) = \sum_{j=0}^{l-1} a_j x^j$). Это стандартная задача линейной алгебры. Ее решение приведено, например, в ⁵⁰ (гл. 3, с. 46). Подчеркнем, что когда рассматривается первый возбужденный уровень, поправки $f_n(x)$ являются постоянными и формулы совпадают с теми, которые приводятся в ³¹. Также стоит отметить, что поправки $g_n(x)$ не имеют особенностей на действительной оси.

В случае многомерной сферически-симметричной задачи формулы (2.33)–(2.35) очевидным образом модифицируются. В случае основного состояния они выписаны в работах ^{23–26}, ³⁰. Обратим внимание на важное обстоятельство: построение ТВ для возбужденных состояний с нулевым радиальным квантовым числом особенно просто, поскольку не деформируются узловые поверхности, и фактически оно сводится к случаю основного состояния.

Обратим внимание, что в рамках рассматриваемого подхода после n итераций находится n -я поправка к волновой функции и $(n+1)$ -я поправка к энергии. В работах Поликанова ²⁸, ³⁴ и Ау ⁵¹ было показано, что в одномерном случае в данном подходе с небольшими модификациями сходимость итерации можно значительно ускорить: n -я итерация позволяет вычислить $(2^n - 1)$ -ю поправку к волновой функции и энергии. Так же как и ранее, все поправки выражаются в виде явных квадратур. Чтобы пояснить суть дела, рассмотрим для простоты основное состояние, следуя при этом работе ⁵¹. Итак, пусть мы нашли первую поправку y_1 . Какому потенциалу соответствует функция $(y_0 + \lambda y_1)$? Подставляя $(y_0 + \lambda y_1)$ в уравнение Риккати (2.5), получаем, что этот потенциал равен $V_0 + \lambda V_1 - \lambda^2 y_1^2$. Вычислим теперь первый порядок в ТВ, где нулевое приближение $y_0^{(1)} = y_0 + \lambda y_1$, а потенциал возмущения равен $-\lambda^2 y_1^2$. Возьмем, как и ранее, $y_0^{(1)} + \lambda^2 y_1^{(1)} \equiv y_0^{(2)}$ в качестве нулевого приближения. Тогда потенциал возмущения будет порядка λ^4 и равен $-\lambda^4 y_2^{(1)2}$. Поэтому поправки на предыдущем шаге имели порядок λ^3 . Очевидно, что после n -го шага итераций, потенциал возмущения будет иметь порядок λ^{2^n} , следовательно, n -я итерация имеет порядок λ^{2^n-1} . Отметим, что обобщение этой процедуры на возбужденные состояния достаточно очевидно ³⁴. Стоит подчеркнуть, что в рамках этой процедуры теряется алгебраизация (см. ниже, гл. 3).

г) О связи со стандартной теорией возмущений

Обсудим теперь связь данной ТВ со стандартной ТВ Рэля — Шредингера. Ее легко проследить, если сравнить разложение волновой функции в обычном подходе,

$$\psi = \psi_0 + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \dots = \sum \lambda^n \psi_n, \quad (2.36)$$

и в подходе, развиваемом в настоящей статье:

$$\psi = (f_0 + \lambda f_1 + \lambda^2 f_2 + \dots) \exp(-\phi_0 - \lambda \phi_1 - \lambda^2 \phi_2 - \dots) = (\sum \lambda^m f_m) e^{-\sum \lambda^m \phi_m}. \quad (2.37)$$

Вспомни теперь выражения для ψ_m и E_m в обычном подходе (см., например, ¹¹ § 38) и сравним их с соответствующими в нашем (для этого экспоненту в (2.37) нужно разложить в ряд) *). Тогда получаются два семейства правил сумм (для краткости приведем по одному представителю каждого) **)

$$\psi_1^{(n)} = \sum_m' \frac{\langle m | V_1 | n \rangle}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \psi_0^{(m)} = \left(-\phi_1 + \frac{f_1}{f_0} \right) \psi_0^{(n)}, \quad (2.38)$$

$$E_2^{(n)} = \sum_m' \frac{|\langle m | V_1 | n \rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = \int \tilde{Q}_2 \{ \psi_0^{(n)} \}^2 dx \left(\int \{ \psi_0^{(n)} \}^2 dx \right)^{-1}, \quad (2.39)$$

где нижний индекс — номер поправки, верхний — номер рассматриваемого уровня; факт, что возникают подобные правила сумм, неоднократно отмечался ^{23, 28, 30-37}. В ^{31, 37} они были построены явно для основного состояния применительно к одномерному случаю. В частности, в ³¹ было проведено прямое доказательство (2.39), а формула (2.38) была фактически доказана в основополагающей работе Зельдовича ²³. Исследование этих правил сумм дает информацию о спектре невозмущенной задачи.

Итак, мы сформулировали нестандартную ТВ. При ее построении мы нигде не пользовались знанием всего спектра невозмущенной задачи. Нам потребовалось знание только того уровня, к которому ищется поправка. Объяснение этого явления особенно просто в одномерном случае. Пусть мы знаем $\psi_0^{(n)}$ — невозмущенную волновую функцию n -го состояния с энергией $E = E_0^{(n)}$, которая есть решение линейного дифференциального уравнения второго порядка (коим является уравнение Шредингера). Далее, если известно одно решение, то с помощью квадратур мы можем построить второе, линейно независимое решение. Следовательно, поскольку известны оба линейно независимых решения, то можно построить функцию Грина при фиксированной энергии $E = E_0^{(n)}$. С другой стороны, во все формулы ТВ входит функция Грина именно при энергии $E = E_0^{(n)}$, поскольку уравнение для определения m -й поправки имеет вид

$$\Delta \psi_m^{(n)} + (E_0^{(n)} - V_0) \psi_m^{(n)} = F(E_0^{(n)}, \psi_i^{(n)}), \quad i < m. \quad (2.40)$$

Поэтому все формулы можно написать в виде квадратур, что и было фактически сделано Зельдовичем ²³. К сожалению, в многомерном случае подобная процедура построения функции Грина в настоящее время неизвестна.

3. АЛГЕБРАИЗАЦИЯ ПРОЦЕДУРЫ ПОСТРОЕНИЯ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В предыдущем разделе мы описали общую структуру ТВ, а теперь начнем рассмотрение более конкретных задач. Предметом этого раздела будет изучение ситуации, в которой может быть построена стандартная ТВ Релея—Шредингера, т. е. когда невозмущенная задача — точно решаемая. Мы покажем, что в этом случае построение нашей ТВ — чисто алгебраическая задача, сводящаяся к решению довольно простых рекуррентных соотношений. При этом появляется возможность проанализировать структуру произвольной поправки ряда ТВ в случае произвольных возмущений полиномиального

*) Обратим внимание, что, если найдены первые m поправок в разложении (2.37), то воспроизводятся не только первые m поправок разложения (2.36), но также часть вкладов от высших поправок.

**) Ради простоты ограничимся случаем, когда в задаче отсутствует непрерывный спектр и вырождение. Отметим, что учет этих явлений не меняет правой части возникающих правил сумм.

вида, а некоторые подструктуры этой поправки найти в явном виде. Как побочный продукт у нас в руках оказывается алгебраический способ вычисления различных матричных элементов, основанных на использовании правил сумм типа (2.38).

а) Гармонический осциллятор как невозмущенная задача

1) Общее рассмотрение

Потенциал нулевого приближения, отвечающий гармоническому осциллятору, имеет вид

$$V_0 = \sum_{i=1}^d a_i x_i^2, \quad a_i > 0, \quad (3.1)$$

а потенциал возмущения пусть будет полиномиальным:

$$V_1 = \sum_{\{i_1 i_2 \dots i_d\}}^{i_1 \max \dots i_d \max} a_{i_1 i_2 \dots i_d} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_d^{i_d}. \quad (3.2)$$

Требование полиномиальности возмущения не ограничивает общности нашего рассмотрения, поскольку в противном случае потенциал возмущения можно разложить в ряд Тейлора и рассматривать (3.2) как бесконечную сумму. Ради простоты будем считать гармонический осциллятор сферически-симметричным, т. е. $a_i = 1$. В дальнейшем мы продемонстрируем несущественность этого условия. Кроме того, будем предполагать, что задача классификации возбужденных состояний решена.

Прежде чем перейти к подробному рассмотрению, поясним, почему возникает алгебраизация. Для этого запишем, например, первую поправку обычной ТВ Рэлея — Шредингера

$$\psi_1^{(n)} = \sum_k' \frac{V_{nk}}{E_0^{(n)} - E_0^{(k)}} \psi_0^{(k)}.$$

Невозмущенная волновая функция $\psi_0^{(k)}$ имеет вид полинома Эрмита (комбинации полиномов Эрмита), умноженного на гауссову функцию. С другой стороны, известно (см., например, ¹¹), что если возмущение полиномиально, то имеется ограниченное число ненулевых матричных элементов переходов V_{nk} *). Это, в свою очередь, означает, что в ряду по промежуточным состояниям содержится конечное число членов и формула для поправки представляет собой суперпозицию полиномов Эрмита с некоторыми весами, умноженных на одну и ту же гауссову функцию. Таким образом, предэкспонента является конечным полиномом. Аналогичное рассуждение проводится и для произвольной поправки $\psi_1^{(n)}$. Это и есть объяснение явления алгебраизации. Впервые на это явление обратили внимание и использовали Бендер и Ву ^{2, 3}, которые работали в формализме F -функций Далгарно. Ими были выписаны рекуррентные соотношения, с помощью которых они вычислили 75 коэффициентов в разложении энергии основного состояния одномерного ангармонического осциллятора и нашли асимптотики поведения этих коэффициентов. Совместно с Банксом ⁴³⁻⁴⁴ они проделали аналогичную процедуру для основного состояния двумерного несимметричного ангармонического осциллятора. В рамках обсуждаемого в данной статье формализма алгебраизация в одномерном случае для основного состояния была использована в работах ^{30, 52}, а в двумерном — в работе ³³. В многомерном случае при произвольном полиномиальном возмущении утверждение об алгебраи-

*) Это является тривиальным следствием свойств гауссовых интегралов, возникающих в данной задаче.

зации ТВ для основного состояния было сформулировано в ³⁸. В настоящее время подход интенсивно развивается в направлении использования как метода F -функций Далгарно и его модификаций, так и данного метода (см., например, ^{39-42, 53-55}).

Рассмотрим уравнение (2.28). Первое чудо, с которым мы сталкиваемся, это сокращение в комбинации

$$\frac{f_n}{f_0} (\Delta f_0 - 2g_0 \nabla f_0) = -2k \frac{f_n}{f_0}, \quad g_0 = x, \quad (3.3)$$

так как в данном случае f_0 — многомерный полином Эрмита или линейная комбинация таких полиномов (см. ⁵⁶), k — «главное квантовое число»; например, если $f_0 = H_{k_1}(x_1) \dots H_{k_d}(x_d)$, где $H_i(y)$ — обычный полином Эрмита, то

$$k = k_1 + k_2 + \dots + k_d. \quad (3.3')$$

Поэтому уравнение (2.28) с учетом (3.3) приобретает вид

$$\nabla g_n - 2g_0 g_n + \frac{2\nabla g_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2g_0 \nabla f_n + 2k f_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.4)$$

Учитывая теперь потенциальность поля

$$g_n = \nabla \phi_n, \quad (3.5)$$

получаем окончательно ($g_0 = x$)

$$\Delta \phi_n - 2x \nabla \phi_n + \frac{2\nabla \phi_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2x \nabla f_n + 2k f_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.6)$$

Отметим, что если f_0 — полином Эрмита с главным квантовым числом k , то выражение в скобках обращается в нуль.

Теперь можно сформулировать основное утверждение данного раздела.

Т е о р е м а 4. Построение теории возмущений для гармонического осциллятора в случае полиномиального потенциала возмущения — алгебраическая задача. Это значит, что ϕ_n и f_n — многомерные полиномы, коэффициенты которых находятся из рекуррентных соотношений, следующих из (3.6). В частности, если старшая степень в потенциале возмущения по переменной x_i равна I_i , то старшая степень по этой переменной в произвольной поправке ϕ_n лежит в интервале от $(nI_i - 2n + 2)$ до nI_i в зависимости от конкретного вида потенциала возмущения (3.2).

Д о к а з а т е л ь с т в о. В случае основного состояния доказательство фактически содержится в работе ³⁸. Рассмотрим общий случай, предположив, что проблема классификации решена, т. е. f_0 — некоторый многомерный полином, являющийся суперпозицией многомерных полиномов Эрмита с заданным главным квантовым числом. Доказательство будем вести по индукции.

Рассмотрим уравнение на первую поправку

$$\Delta \phi_1 - 2x \nabla \phi_1 + \frac{2\nabla \phi_1 \nabla f_0 - (\Delta f_1 - 2x \nabla f_1 + 2k f_1)}{f_0} = E_1 - V_1. \quad (3.7)$$

Очевидно, что ϕ_1 — некоторый многомерный полином, содержащий те же комбинации степеней $\{i_1 i_2 \dots i_d\}$, что и потенциал V_1 (поскольку оператор $x \nabla$ — однородный), а также комбинации подобных степеней *). Одно из условий нахождения поправки f_1 — это требование сокращения дроби в (3.7), поскольку поправка ϕ_1 не должна содержать особенностей при конечных x (см. обсуждение на с. 44). Таким образом,

$$\frac{2\nabla \phi_1 \nabla f_0 - (\Delta f_1 - 2x \nabla f_1 + 2k f_1)}{f_0} \equiv R_1, \quad (3.8)$$

*) Подобными комбинациями степеней мы будем называть комбинации, которые содержат степени $(i_1 - 2p_1, i_2 - 2p_2, \dots, i_d - 2p_d)$, где p_1, p_2, \dots, p_d — целые положительные числа, причем выполнено условие $(i_l - 2p_l) \geq 0$ для любого l .

где R_1 — некоторый полином, который мы должны найти. Или, эквивалентно,

$$\Delta f_1 - 2\mathbf{x}\nabla f_1 + 2kf_1 = 2\nabla\phi_1\nabla f_0 - R_1 f_0. \quad (3.9)$$

Напомним, что f_0 — суперпозиция многомерных полиномов Эрмита с главным квантовым числом k и f_0 удовлетворяет однородному уравнению (3.9). Разложим правую часть (3.9) в ряд по многомерным полиномам Эрмита *) и потребуем отсутствия в этом разложении членов с главными квантовыми числами, большими или равными k . Из этого условия сразу определяются коэффициенты полинома R_1 . Тогда решение (3.9) в виде ряда по полиномам Эрмита однозначно находится. Стоит отметить, что R_1 будет содержать те же комбинации степеней, что и ϕ_1 , с единственным условием, что все p_i не обращаются в нуль одновременно.

Итак, на первом этапе возникают рекуррентные соотношения для коэффициентов R_1 , а после этого — на втором этапе — рекуррентные соотношения для коэффициентов ϕ_1 , следующие из уравнения

$$\Delta\phi_1 - 2\mathbf{x}\nabla\phi_1 + R_1 = E_1 - V_1. \quad (3.10)$$

Введем теперь функцию R_n как обобщение R_1 . Поскольку $n > 1$, то R_n будет содержать вклад от правой части (3.4), т. е. от \tilde{Q}_n , включающей члены с f_0 в знаменателе:

$$\begin{aligned} R_n = [2\nabla\phi_n \cdot \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\mathbf{x}\nabla f_n + 2kf_n) - \\ - \sum_{i=1}^{n-1} \{f_i [-\Delta\phi_{n-i} + 2\mathbf{x}\nabla\phi_{n-i} + (E_{n-i} - V_{n-i}) + \\ + \sum_{j=1}^{n-i} \nabla\phi_j \nabla\phi_{n-i-j}] - 2\nabla f_i \nabla\phi_{n-i}\}] f_0^{-1}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

или, с учетом того, что выражение в квадратных скобках равно R_{n-i} ,

$$R_n = [2\nabla\phi_n \cdot \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\mathbf{x}\nabla f_n + 2kf_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2\nabla f_i \nabla\phi_{n-i})] f_0^{-1}. \quad (3.12)$$

Тогда уравнение для определения f_n принимает вид, аналогичный (3.9):

$$\Delta f_n - 2\mathbf{x}\nabla f_n + 2kf_n = \sum_{i=0}^{n-1} (2\nabla f_i \nabla\phi_{n-i} - f_i R_{n-i}). \quad (3.13)$$

Предположив теперь, что ϕ_i , f_i и R_i при $i < n$ — полиномы, причем f_i содержит полиномы Эрмита с главными квантовыми числами, меньшими либо равными k , аналогично тому, как это делалось для f_1 , найдем сначала R_n , а затем f_n . После этого возникают рекуррентные соотношения для ϕ_n из уравнения

$$\Delta\phi_n - 2\mathbf{x}\nabla\phi_n + R_n = E_n - Q_n, \quad (3.14)$$

где $Q_n = -\sum_{i=1}^{n-1} g_i g_{n-i}$, поскольку уравнение (3.14) допускает полиномиальное решение, ибо правая часть его представляет собой полином по построению, что и требовалось доказать.

Вышеприведенное рассуждение, конечно, нельзя считать строгим доказательством, а скорее очень правдоподобной его схемой.

В заключение отметим тот факт, что для анализа старших степеней поправки ϕ_n не требуется знание R_i и f_i , поскольку они не дают вклада

*) Естественно, правая часть будет содержать конечное число членов, причем старший член будет характеризоваться квантовым числом

$$M = k + i_{1\max} + i_{2\max} + \dots + i_{d\max} - 2.$$

в старшие степени. Таким образом, эти коэффициенты не зависят от рассматриваемого уровня и зависят только от старших степеней в потенциале возмущения V_1 . Они могут быть найдены в явном виде, что будет сделано ниже.

2) Одномерный ангармонический осциллятор

Мы рассмотрим теперь первый конкретный пример — классическую задачу об одномерном ангармоническом осцилляторе

$$V = x^2 + gx^4 \quad (3.15)$$

и построим ТВ по константе связи g . В этом случае невозмущенная волновая функция k -го уровня равна

$$\psi_0 = H_k(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad (3.16)$$

где $H_k(x)$ — k -й полином Эрмита, т. е. $f_0 = H_k(x)$. Уравнение (3.4) приобретает тогда вид

$$\phi_n'' - 2x\phi_n' + \frac{2\phi_n'f_0' - (f_n'' - 2xf_n' + 2kf_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.17)$$

Либо, вспоминая определение (3.12)

$$R_n = \frac{2\phi_n'f_0' - (f_n'' - 2xf_n' + 2kf_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2f_i'\phi_{n-i}')}{f_0}, \quad (3.18)$$

можно записать это уравнение в более удобной форме:

$$\phi_n'' - 2x\phi_n' + R_n = E_n - Q_n, \quad (3.19)$$

где $Q_1 = V_1$, $Q_n = -\sum_{i=1}^{n-1} \phi_i'\phi_{n-i}'$. Начнем с вычисления первого порядка.

Ясно, что $g_1 = \phi_1'$ имеет вид полинома третьей степени, содержащего только нечетные степени (из симметрии задачи), а функция R_1 — вид полинома $\alpha x^2 + \beta$. Подставляя R_1 в правую часть (3.18) и переразлагая в ряд по полиномам Эрмита, видим, что возникло разложение, содержащее полиномы H_{k+2} , H_k , H_{k-2} , H_{k-4} . Занулим коэффициенты при H_{k+2} и H_k ; это позволит нам определить полином R_1 . Подставим теперь R_1 в (3.19), после чего сразу находим ϕ_1 . Теперь (см. (3.9)) в уравнении на поправку f_1 определена правая часть. Ищем f_1 в виде суперпозиции H_{k-2} и H_{k-4} . Поскольку H_k — решение уравнения для поправки, то оно может входить с произвольным коэффициентом в f_1 . Мы этот коэффициент положим равным нулю, так как он фиксирует нормировку волновой функции, которая для нас несущественна. Окончательный вид первой поправки следующий:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{x^4}{8} + \frac{x^2}{4} \left(k + \frac{3}{2}\right), \quad E_1 = \frac{3}{2} \left(k^2 + k + \frac{1}{2}\right), \\ f_1 &= k \frac{k!}{(k-2)!} H_{k-2} + \frac{1}{4} \frac{k!}{(k-4)!} H_{k-4}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Столь же легко и просто находится вторая поправка:

$$\begin{aligned} -\phi_2 &= \frac{x^6}{48} + \frac{x^4}{64} (6k + 11) + \frac{x^2}{32} (9k^2 + 25k + 21), \\ f_2 &= \left(-\frac{85}{32} k^2 - \frac{3}{32} k - \frac{9}{8}\right) \frac{k!}{(k-2)!} H_{k-2} + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{23}{16} k + \frac{17}{32}\right) \frac{k!}{(k-4)!} H_{k-4} + \\ &\quad + \left(\frac{k}{8} - \frac{7}{24}\right) \frac{k!}{(k-6)!} H_{k-6} + \frac{1}{32} \frac{k!}{(k-8)!} H_{k-8}, \\ -E_2 &= \frac{34k^3 + 51k^2 + 59k + 21}{16}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Выражения для E_1 и E_2 совпадают со стандартными (см., например, ⁵⁷). В предэкспонентах f_1 и f_2 содержатся полиномы меньших степеней, чем в H_k . Спуская ϕ_1 и ϕ_2 из экспоненты вниз, т. е. разлагая экспоненту в ряд, восстанавливаем все возможные матричные элементы переходов V_{mk} . Отметим, что E_1 дает значение диагонального матричного элемента. Итак, мы алгебраически нашли соотношения между различными матричными элементами (см. обсуждение в разделе 2, п. г)).

Из (3.17) — (3.19) легко показать, что произвольная поправка имеет следующий функциональный вид:

$$\phi_n = \sum_{i=0}^n a_i^{(n)} x^{2i+2}, \quad (3.22)$$

$$R_n = \sum_{i=0}^n \alpha_i^{(n)} x^{2i}, \quad f_n = \sum_{i=1}^{2n} A_i^{(n)} H_{k-2i}(x),$$

и практически не представляет особого труда найти несколько старших коэффициентов в (3.22), решая явно рекуррентные соотношения, опускаясь сверху вниз (от старшего коэффициента к младшему). Для ϕ_n получается

$$\left. \begin{aligned} a_n^{(n)} &= (-1)^{n-1} \frac{(2n-2)!}{2^{2n} (n+1)! (n-1)!}, \\ a_{n-1}^{(n)} &= \frac{(-1)^{n+1}}{n} \left[\frac{1}{4} + \left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{(2n-1)!}{2^{2n} n! (n-1)!} \right], \\ a_{n-2}^{(n)} &= (-1)^{n+1} \left\{ \frac{1}{2} \left(k + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(2n-2)!}{3 \cdot 2^{2n+3} n! (n-1)!} \left[12 (4n+1) \left(k + \frac{1}{2} \right)^2 + 40n^2 - 20n + 9 \right] \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

а для f_n

$$A_{2n}^{(n)} = \frac{1}{2^{2n} n!} \frac{k!}{(k-4n)!}, \quad (3.24)$$

$$A_{2n-1}^{(n)} = \frac{k - \frac{7}{3} (n-1)}{2^{2n-1} (n-1)!} \frac{k!}{(k-4n+2)!}.$$

Аналогичным образом можно находить и следующие коэффициенты, хотя громоздкость вычислений резко нарастает при переходе к каждому следующему коэффициенту. Эта задача просто решается на ЭВМ с помощью символических языков программирования, позволяющих производить аналитические расчеты. Отметим, что старший коэффициент в (3.23) не зависит от рассматриваемого уровня, как и должно быть. Для основного состояния он был впервые вычислен в ³⁰.

Кратко проанализируем свойства коэффициентов $a_{n-i}^{(n)}$ и $A_{2n-i}^{(n)}$ (см. (3.22)). Коэффициент $A_{2n-i}^{(n)}$ содержит в качестве множителя выражение $k!/(k-4n+2i)!$. Оставшееся выражение представляет собой полином по k степени i . В случае первого возбужденного состояния $k=1$, коэффициенты $A_i^{(n)} \equiv 0$, а при $k=2$ поправка f_n является константой, зависящей только от номера n . Коэффициент $a_{n-i}^{(n)}$ представляет собой полином по k степени i , в частности, коэффициент при младшей степени x в поправке ϕ_n является полиномом по k степени n . При больших n коэффициенты $a_{n-i}^{(n)} \sim n^i$. Таким образом, если при небольших i они ведут себя как степень, то при $i \sim n$ их рост становится факториальным. В принципе, из анализа рекуррентных соотношений могут быть найдены формулы, описывающие асимптотическое поведение коэффициентов $a_{n-i}^{(n)}$ и $A_{2n-i}^{(n)}$, а следовательно, и E_n .

В заключение отметим, что аналогичным образом может быть построена ТВ в случае системы из d связанных гармонических осцилляторов, возмущенных полиномиальным потенциалом. Хотя громоздкость вычислений

нарастает, но тем не менее несколько первых поправок получаются в явном виде, а для произвольной поправки может быть проанализирована функциональная структура. В⁶³ эта программа была проведена для случая, когда потенциал возмущения — многомерный полином четвертого порядка. В качестве одного из результатов подчеркнем возникновение нетривиальных явлений при переходе к пределу бесконечного числа осцилляторов.

б) Кулоновская система, возмущенная
произвольным мультипольным статическим
взаимодействием

1) Общее рассмотрение

В предыдущем разделе был рассмотрен гармонический осциллятор, возмущенный полиномиальным взаимодействием. Была показана алгебраизация процедуры построения ТВ. В этом разделе аналогичный факт будет установлен для случая кулоновской системы, описываемой потенциалом

$$V_0 = -\frac{2\alpha N}{r} \quad (3.25)$$

(α , N — некоторые параметры, введенные для удобства), которая возмущается произвольным мультипольным статическим потенциалом, содержащим конечное число гармоник:

$$V_1 = \sum V_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (3.26)$$

с ограничением

$$V_{lm}(r) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} a_k r^k. \quad (3.27)$$

Явление алгебраизации процедуры построения ТВ для кулоновской задачи отмечалось в работах^{38, 58} и использовалось различными авторами, например, ⁴¹ (задача об экранированном кулоновском взаимодействии), ³⁹ (эффект Штарка), ⁴⁰ (эффект Зеемана), ^{38, 42} (атом водорода в скрещенных полях). Рассматривалось не только основное, но и возбужденные состояния. Во всех этих работах демонстрировалось, что использование данного метода позволяет с легкостью находить практически любое желаемое число коэффициентов ряда ТВ.

Рассмотрение данной задачи начнем с замечания, что, так же как и в случае гармонического осциллятора, происходит сокращение в выражении

$$\frac{f_n}{f_0} (\Delta f_0 - 2g_0 \nabla f_0) = -\frac{2\alpha(N-1)}{r} \frac{f_n}{f_0}, \quad (3.28)$$

где N — некоторая комбинация квантовых чисел, которая будет определена несколько позже. Если ψ_0 — кулоновская волновая функция в сферических координатах (мы не заботимся о нормировке), равная

$$\psi_0 = r^l \tilde{R}_{n_r, l}(2\alpha r) Y_l^m(\theta, \varphi) e^{-\alpha r}, \quad E_0 = -\alpha^2, \quad (3.29)$$

то

$$f_0^{(N)} = r^l \tilde{R}_{n_r, l}(2\alpha r) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad g_0 = \alpha \frac{r}{r}, \quad (3.29')$$

где $\tilde{R}_{n_r, l}(2\alpha r)$ — полином Лагерра, а

$$Y_l^m = P_l^m(\theta) \begin{cases} \cos m\varphi, & m \geq 0, \\ \sin |m|\varphi, & m < 0 \end{cases}$$

— сферические гармоники в нормировке Бейтмана и Эрдейи⁵⁶. В этом случае параметр N дается формулой

$$N = n_r + l + 1, \quad (3.30)$$

причем N имеет смысл главного квантового числа (см. также (3.25)), n_r — радиальное квантовое число, характеризующее число нулей полинома Лагерра. Когда используются параболические координаты,

$$N = n_1 + n_2 + 1, \quad (3.31)$$

где n_1, n_2 — параболические квантовые числа. Уравнение (2.28) с учетом (3.28) приобретает вид

$$\nabla g_n - 2g_0 g_n + \frac{2g_n \nabla f_0 - \left(\Delta f_n - 2g_0 \nabla f_n + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_n \right)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.32)$$

Обратим внимание, что $f_0^{(N)}$ из (3.29') удовлетворяет уравнению

$$\Delta f_0^{(N)} - 2g_0 \nabla f_0^{(N)} + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_0^{(N)} = 0. \quad (3.33)$$

Введем функции R_n , аналогичные (3.12):

$$R_n = \frac{2g_n \nabla f_0 - \left[\Delta f_n - 2g_0 \nabla f_n + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_n \right] - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2\nabla f_i g_{n-1})}{f_0} \quad (3.34)$$

и сформулируем теорему, аналогичную теореме 1.

Т е о р е м а 2. Построение теории возмущений для кулоновской задачи со взаимодействием (3.26) — (3.27) — число алгебраическая задача. Поправки ϕ_n и f_n содержат конечное число гармоник с полиномиальными по r коэффициентами, которые определяются из рекуррентных соотношений, следующих из уравнений (3.32) и (3.34).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Мы не будем на доказательстве останавливаться детально, ибо оно очень похоже на доказательство теоремы 1. Отметим только некоторые узловые моменты.

Поправка f_n находится из уравнения, аналогичного (3.13) и следующего из (3.34):

$$\Delta f_n - 2g_0 \nabla f_n + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_n = \sum_{i=0}^{n-1} (2\nabla f_i g_{n-i} - f_i R_{n-i}). \quad (3.35)$$

Правая часть этого уравнения может быть разложена в ряд по функциям типа $f_0^{(N)}$ (см. (3.29')) с различными n_r и l . Функция R_n находится из требования отсутствия в этом разложении членов с $N_i > N$, где $N_i = n_r^i + l^i + 1$. После того как функция R_n найдена, она подставляется в уравнение

$$\Delta \phi_n - 2g_0 \nabla \phi_n + R_n = E_n - Q_n. \quad (3.36)$$

Решение этого уравнения ищем в виде ряда по гармоникам

$$\phi_n = \sum_{l, m} \phi_{lm}^{(n)} Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (3.37)$$

Легко видеть, что это разложение содержит конечное число гармоник с полиномиальными по r коэффициентными функциями $\phi_{lm}^{(n)}(r)$. Коэффициенты в $\phi_{lm}^{(n)}$ находятся из очевидных рекуррентных соотношений, что и требовалось доказать.

Итак, для возмущенной кулоновской задачи также возникает явление алгебраизации. Однако, поскольку мы знаем, что алгебраизация имеется для возмущенного гармонического осциллятора, то, возможно, нас это не должно удивлять, ибо кулоновская задача эквивалентна четырехмерному гармоническому осциллятору (см., например, ⁵⁹).

Теперь на примере задачи об эффекте Зеемана продемонстрируем, как работает алгебраизация для кулоновских задач.

2) Атом водорода в постоянном магнитном поле (эффект Зеемана)

Изучение деформации спектра атома водорода при включении постоянного магнитного поля — одна из наиболее старых задач квантовой механики. Однако из-за существенной трехмерности задачи решение ее еще далеко от завершения: на сегодняшний день полностью не решена даже задача классификации состояний. Регулярно рассмотрены лишь низшие состояния спектра (см. обзор ⁶⁰ и ссылки в нем). В последние годы к задаче возник большой интерес в связи с возможными астрофизическими применениями. Это обусловило значительный поток работ на эту тему (см., например, ^{18, 40, 60, 63} и ссылки в них).

Мы подробно рассмотрим ситуацию в случае слабого поля для некоторого класса состояний, включающих основное, и вычислим коэффициенты ряда ТВ вплоть до членов $\sim \mathcal{H}^6$ включительно. Для простоты будем считать атом бесспиновым.

Итак, для атома водорода в постоянном магнитном поле до сих пор не решена задача классификации состояний. Поэтому даже значение первой поправки к энергии для квадратичного эффекта Зеемана в общем случае неизвестно. Однако существует несколько классов состояний, которые невырождены (и поэтому не перемешиваются). В частности, к таким состояниям относятся крайние и предкрайние компоненты кулоновских мультиплетов при нулевом радиальном квантовом числе

$$n_r = 0, \quad m = \pm l, \quad \pm (l - 1), \quad (3.38)$$

где m — магнитное квантовое число (см., например, ⁶²). Этот класс состояний мы и рассмотрим.

Разложение энергии имеет вид

$$E = -\alpha^2 + \mathcal{H}m + E_1 \mathcal{H}^2 + E_2 \mathcal{H}^4 + \dots + E_n \mathcal{H}^{2n} + \dots, \quad (3.39)$$

где \mathcal{H} — магнитное поле в безразмерных единицах, направленное по оси z . Потенциал возмущения (3.26) равен $V_1 = \mathcal{H}^2 (x^2 + y^2)/4$, а $\alpha = 1/N$. Поставим себе целью найти E_1, E_2, E_3 .

Предэкспонента для данного класса состояний (3.38)

$$f = f_0 = r^l Y_l^m(\theta, \varphi), \quad |m| = l, \quad l - 1, \quad (3.40)$$

и не меняется при наложении возмущений, т. е. $f_n = 0$ при $n > 0$. В экспоненте произвольная поправка содержит конечное число гармоник *)

$$\phi_n = \sum_{i=0}^n R_{n, 2i}(r) Y_{2i}^0. \quad (3.41)$$

Уравнение (3.32) для определения поправок ϕ_n с учетом (3.40) приобретает вид

$$\Delta \phi_n - 2\alpha \frac{\partial \phi_n}{\partial r} + 2 \frac{\nabla \phi_n \nabla f_0}{f_0} = E_n - Q_n, \quad (3.42)$$

где Q_n дается (2.13). В силу теоремы 2 коэффициентные функции представляют собой полиномы, а их функциональный вид

$$R_{n, 2i} = \sum_{k=\max(2, 2i)}^{2n+1} a_{n, 2i, k} r^k \quad (3.43)$$

может быть легко найден из анализа рекуррентных соотношений, следующих из (3.42). Стоит обратить внимание, что полином при старшей гармонике Y_{2n}^0 содержит только два члена, при предстаршей Y_{2n-2}^0 — четыре и т. д.

*) Это утверждение справедливо для любого рассматриваемого уровня, поскольку перемешиваются только предэкспоненциальные факторы.

Так же как и в случае возмущенного гармонического осциллятора, можно найти коэффициенты функции при старших гармониках. Их явные выражения даны в ^{40, 18}.

Вычисления первых поправок в ряду ТВ достаточно просто и легко формализуются для использования ЭВМ. Мы применили программу для аналитических вычислений REDUCE-2. Приведем получившийся ряд для энергии *):

$$\begin{aligned}
 E = & -\frac{1}{N^2} + \mathcal{H}m + \mathcal{H}^2 \frac{N^2(N+1)(N-k)}{4} - \\
 & - \mathcal{H}^4 \frac{N^6(N+1)}{16} \left[\frac{46}{45} N^3 + \frac{137}{60} N^2 + \frac{17}{15} N - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{45} - \left(\frac{185}{180} N^2 + \frac{359}{108} N + \frac{61}{54} \right) k + \left(\frac{3}{4} N + \frac{7}{6} \right) k^2 \right] + \\
 & + \mathcal{H}^6 \frac{N^{10}(N+1)}{64} \left[\frac{407}{135} N^5 + \frac{16373}{1080} N^4 + \frac{3071}{168} N^3 + \frac{3182}{135} N^2 + \right. \\
 & \left. + \frac{22}{3} N - \left(\frac{513433}{68040} N^4 + \frac{8626423}{249480} N^3 + \frac{2785715}{49896} N^2 + \frac{25985163}{748440} N + \frac{183107}{24948} \right) k + \right. \\
 & \left. + \left(\frac{1055}{168} N^3 + \frac{2759}{108} N^2 + \frac{24851}{756} N + \frac{673}{54} \right) k^2 - \right. \\
 & \left. - \left(\frac{7}{4} N^2 + \frac{221}{36} N + \frac{11}{2} \right) k^3 \right] + \dots, \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

где N — главное квантовое число ($N = l + 1$),

$$k = \begin{cases} 0 & \text{при } m = \pm l, \\ 1 & \text{при } m = \pm (l-1). \end{cases}$$

Несколько слов об общей структуре поправки E_n . Можно показать, что произвольный член ряда (2.10) имеет функциональный вид

$$E_n = (-1)^{n+1} N^{4n-2} (N+1) P_{2n-1}(N), \quad (3.45)$$

где $P_{2n-1}(N)$ — полином степени $(2n-1)$, причем коэффициент при старшей степени этого полинома N^{2n-1} не зависит от величины m — проекции углового момента, т. е. числа k , и положителен. Обратим внимание, что в нефизических точках $N = 0, -1$ вклад в энергию от квадратичного эффекта Зеемана равен нулю. Подчеркнем, что *зачленение E_n при $N = 0$ имеет место не только для рассматриваемых состояний, но и для любых других состояний. В этой точке обращаются в нуль и все поправки ϕ_n .* Природа этого явления неясна. Стоит только напомнить, что аналогичная ситуация возникла при исследовании ангармонического осциллятора $V(r) = r^2 + gr^4$ в d -мерном пространстве, когда в нефизической размерности пространства $d = -2$ все поправки к энергии обращались в нуль ³⁰. В той ситуации оказалось возможным найти точное решение уравнения Шредингера для основного состояния при $d = -2$, и была сделана попытка построить ТВ по размерности пространства, т. е. по величине $\varepsilon = d + 2$. К сожалению, в данном случае найти решение уравнения Шредингера при $N = 0$ или $N = -1$ не удается.

Обсудим теперь формулу (3.44). В случае $N = 1$ (основное состояние) она совпадает с результатами стандартного расчета, проведенного, например, в работе ⁶¹. Однако, когда $N = 2, l = 1$, имеется небольшое численное расхождение с результатами расчета ⁶⁴. Коэффициент при члене \mathcal{H}^2 для случая произвольного N совпадает с известным (см., например, ⁶⁰).

Вернемся теперь к обсуждению формулы (3.44) и рассмотрим вопрос, какая информация может быть из нее извлечена. Известно, что ряд ТВ (3.44)

*) Расчеты были проведены на ЕС-1060.

является расходящимся, его коэффициенты растут факториально и он имеет нулевой радиус сходимости (см. работы ^{61, 62}). В случае высоковозбужденных состояний коэффициенты ряда ТВ еще зависят степенным образом от главного квантового числа и нарастают. Это приводит к тому, что область применимости ТВ резко сужается с ростом N . Можно сделать простую оценку области применимости ТВ при $N \gg 1$:

$$(\mathcal{H}^2)_{\text{ТВ}} \lesssim \frac{4}{N^6}. \quad (3.46)$$

Это означает, что для состояний с $N \geq 30 \div 40$ даже стандартные лабораторные поля 2—4 Т являются сильными, ТВ неприменима и ситуация становится неопределенной.

в) Заключение

В заключение обсудим вопрос об алгебраизации процедуры построения ТВ для других точно решаемых задач. Сначала заметим, что практически все такие известные задачи обладают тем свойством, что явно-отфакторизовывается полином, задающий положения узловых поверхностей. Этот полином обычно дается некоторой гипергеометрической функцией. Процесс факторизации происходит в некоторых специальных координатах. Например, для потенциала Морса $V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$ новые координаты $\xi = e^{-\alpha x}$ (см. ¹¹). Однако множитель, остающийся в волновой функции после выделения полинома, не всегда является экспонентой типа (2.1). Такова ситуация с потенциалом $V(x) = -V_0/\text{ch}^2 \alpha x$. Однако в других известных точно решаемых задачах этот множитель — экспонента в некоторых координатах. Поэтому может быть сделан вывод, что если точно решаемая задача допускает представление волновой функции в виде (2.1) и потенциал возмущения полиномиален по отношению к координатам, в которых возможно представление (2.1), то процедура построения ТВ — чисто алгебраическая. Это справедливо для следующих потенциалов ⁶³:

$$V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad \xi = e^{-\alpha x}, \quad (3.47)$$

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}, \quad \xi = r, \quad (3.48)$$

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2, \quad \xi = r^2. \quad (3.49)$$

В формулах (3.47)–(3.49) мы указали также координаты, в которых должна быть полиномиальность возмущения *). Видимо, с некоторыми модификациями полиномиальность возмущений будет приводить к алгебраизации и в других точно решаемых задачах. В частности, когда волновая функция не может быть представлена в виде (2.1), алгебраизация возможна при реализации метода F -функций Далгарно.

На этом мы завершаем рассмотрение задач, в которых нулевым приближением служат точно решаемые задачи.

4. ПРОИЗВОЛЬНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ: ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

В предыдущем разделе мы продемонстрировали возможности и преимущества нашего подхода по сравнению со стандартным, основанным на ТВ Рэлея — Шредингера, в ситуациях, когда стандартный метод может быть реализован. Однако много более частыми и предпочтительными являются ситуации, когда стандартный метод не может быть реализован, поскольку

*) В недавней работе ¹⁰¹ была явно продемонстрирована алгебраичность процедуры построения ТВ для (3.48).

нулевое приближение является не точно решаемой задачей. В нашем подходе мы пока еще совсем не пользовались таким его мощным свойством, как ненужность знания всего спектра невозмущенной задачи. В этом разделе мы воспользуемся этим свойством. Оно позволит нам строить процедуры, сходящиеся при любом параметре возмущения, выбирая потенциал нулевого приближения почти произвольно, а, с другой стороны, — оценивать точность вариационных расчетов! Кроме того, у нас в руках окажется критерий «разумности» выбора нулевого приближения (пробных функций) в вариационных вычислениях, основанный на «аргументе Дайсона»¹.

Таким образом, в этом разделе мы изложим регулярный метод исследования области сильной связи в квантовой механике. В качестве примеров будет рассмотрено несколько классических задач квантовой механики, являющихся пробным камнем для любого метода.

а) О вариационном методе с точки зрения теории возмущений

Итак, мы имеем итерационную процедуру для нахождения собственных чисел оператора Шредингера, не требующую знания всего спектра невозмущенной задачи. Таким образом, у нас в руках оказался такой мощный произвол, как выбор потенциала невозмущенной задачи. Этот произвол позволяет почти любым желаемым образом представить исследуемый потенциал V в виде суммы $V_0 + V_1$, а, следовательно, дает возможность построения сходящейся ТВ, установив связь между теорией возмущений и вариационным принципом.

Начнем обсуждение этого вопроса с очевидного высказывания; любая достаточно гладкая функция $\psi_0 \in L_2(\mathbb{R}^k)$ является собственной функцией некоторого состояния в потенциале V_0 , равном

$$V_0 - E_0 = \frac{\Delta\psi_0}{\psi_0}, \quad (4.1)$$

где E_0 — энергия этого состояния. Предположим теперь, что мы хотим найти положение какого-либо уровня в потенциале V с помощью вариационного принципа и построили для этого некоторый класс пробных функций $\psi_0(\lambda)$ *). Посмотрим теперь, каким потенциалам $V_0(\lambda)$ соответствуют эти пробные функции, воспользовавшись для этого (4.1). Для этого взглянем на вариационный расчет с точки зрения ТВ. Вариационная энергия равна

$$E_{\text{var}} = \min_{\{\lambda\}} \int \psi_0 \hat{H} \psi_0 = \min_{\{\lambda\}} \left[E_0 + \int \psi_0 (\hat{H} - \hat{H}_0) \psi_0 \right] = \min_{\{\lambda\}} (E_0 + E_1); \quad (4.2)$$

здесь $\hat{H}(\hat{H}_0) = p^2 + V(V_0)$, $\hat{H}_0\psi_0 = E_0\psi_0$, а $E_1 = \int \psi_0 (V - V_0) \psi_0$ — первая поправка к уровню энергии в случае, когда потенциал возмущения V_1 равен $V - V_0$. Итак, мы получили, что вариационный расчет дает первые два члена ряда ТВ (см. (2.10)), в которой потенциал возмущения равен отклонению исходного потенциала от того, который соответствует пробной функции $\psi_0(\lambda)$ (см. (4.1)). Вычисляя следующие члены в ряду ТВ (2.10) E_2, E_3, \dots , получаем возможность оценивать точность вариационных расчетов и итерационным способом их улучшать **). Кроме того, сравнивая потенциалы V и V_0 , можно видеть, сколь разумно построен класс пробных функций. Что при этом имеется в виду, будет разъяснено ниже.

*) Где λ — совокупность параметров, по которым происходит минимизация. Однако для нижеследующего несущественно, проведена минимизация или нет.

**) Конечно, в случае, если ряд ТВ сходится.

б) «Аргумент Дайсона». Как построить сходящуюся теорию возмущений?

Перейдем теперь к обсуждению вопроса о сходимости описанной выше процедуры, т. е. к рассмотрению того, когда ряды (2.9), (2.10), (2.23) будут сходиться. Предварительно поясним, почему ряды ТВ обычно расходятся *). Рассмотрим в качестве примера ангармонический осциллятор $V = x^2 + gx^4$ ($V_0 = x^2$, $V_1 = x^4$). Когда $g > 0$ (рис. 1, а), в потенциале имеется бесконечный ряд связанных состояний, а при $g < 0$ (рис. 1, б), причем сколь угодно малом, возникает явление туннелирования, т. е. энергия уровней $E(g)$ перестает быть действительной, приобретает мнимую часть. Это означает, что при $g = 0$ функция $E(g)$ имеет особенность, а поскольку ряд ТВ — это разложение в нуле, т. е. непосредственно в особенности, то ряд ТВ имеет нулевой радиус сходимости. В этом и заключается объяснение расходимости

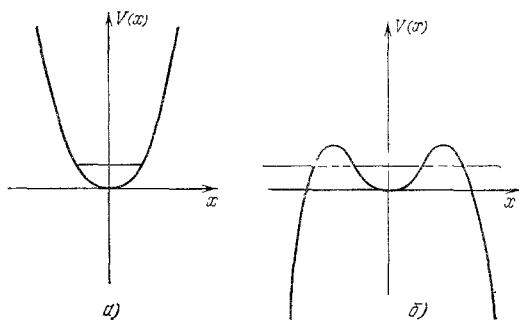


Рис. 1. Потенциал ангармонического осциллятора $V(x) = x^2 + gx^4$ при $g > 0$ (а) и $g < 0$ (б).

Прямые символически указывают положение одного из уровней.

ТВ. Впервые строгое рассмотрение этого явления на примере ангармонического осциллятора было проведено Вайнштейном⁶⁵, а также Лангером⁶⁶, которые показали для энергии основного состояния, что от точки $g = 0$ начинается разрез, и вычислили скачок на этом разрезе в пределе $g \rightarrow -0$.

Теперь мы понимаем, что одна из причин расходимости ряда ТВ состоит в том, что потенциал возмущения более сингулярен на бесконечности, чем невозмущенный. В этом случае происходит коренная перестройка спектра при варьировании параметра возмущения g : уровень может стать квазистационарным, как это было в только что описанном примере, а может перейти в непрерывный спектр. Поэтому общий рецепт получения сходящихся рядов ТВ звучит следующим образом^{32, 33, 37}:

Сконструируем волновую функцию нулевого приближения таким образом, чтобы потенциал V_0 , ей соответствующий (см. (4.1)), воспроизводил бы как можно больше характерных свойств изучаемого потенциала V . В частности, особенно важно, чтобы были воспроизведены все сингулярности и асимптотическое поведение исходного потенциала.

На языке волновых функций это означает, что ψ_0 должно содержать максимально много свойств истинной волновой функции ψ : поведение на бесконечности, в нуле, вблизи сингулярностей потенциала, информацию о нулях и т. д. Нетрудно увидеть, что этот рецепт (на языке волновых функций) фактически совпадает с тем, который обычно используется при построении класса пробных функций в нелинейном вариационном методе Ритца (см. ¹⁵, гл. 9, а также прекрасную монографию⁶⁷).

Вернемся к обсуждению вопроса о сходимости и сформулируем следующую теорему применительно к случаю основного состояния³³:

*) Нижеследующее рассуждение обычно называется «аргументом неустойчивости Дайсона»¹, который подобным методом доказал расходимость ряда ТВ по α в квантовой электродинамике.

Т е о р е м а 3. Если первая поправка y_1 — ограниченная вектор-функция, т. е. (1) $|y_1| < a_1$, и, кроме того, (2) $|\psi_0^{-2}| \int |G(x, x') \psi_0^2| dx \leq A$, причем (3) $a_1 A < 1/8$, то ряды (2.9)—(2.10) сходятся.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для доказательства воспользуемся методом математической индукции. Из условий (1), (2) сразу убеждаемся, что все поправки — ограниченные вектор-функции,

$$|y_1| \leq 2A \sum_{i=1}^{n-1} a_i a_{n-i} \equiv a_n, \quad n \geq 2, \quad (4.3)$$

причем

$$|E_n| \leq \sum_{i=1}^{n-1} a_i a_{n-i}, \quad (4.4)$$

где число a_n ограничивает модуль вектор-функции y_n . Для нахождения области сходимости рядов (2.9)—(2.10) вычислим, чему равна сумма

$$S = \sum_{i=1}^{\infty} a_i. \quad (4.5)$$

С помощью (4.3) легко показать, что

$$2AS^2 + a_1 = S. \quad (4.6)$$

Нужное нам решение (4.6) имеет вид

$$S = \frac{1 - \sqrt{1 - 8Aa_1}}{4A}. \quad (4.7)$$

Таким образом, для y_n и E_n мы построили мажорирующие последовательности, которые сходятся при

$$8Aa_1 \leq 1, \quad (4.8)$$

и теорема доказана.

Утверждение этой теоремы довольно слабое, и его можно значительно усилить. Представляется почти очевидным, что в случае, когда $|y_0|$ — растущая при $|x| \rightarrow \infty$ функция, для сходимости рядов (2.9)—(2.10) достаточно выполнения условия (1). Стоит также отметить, что аналогичную теорему можно доказать для возбужденных состояний, требуя вместо (1) ограниченности вектор-функции g_1 . Обратим внимание, что в разделе 3, где рассматривались задачи, для которых заранее было известно о расходимости рядов ТВ во всех случаях, условие (1) не выполнялось.

Резюмируя, хотелось бы подчеркнуть, что вопрос о сходимости рядов ТВ — достаточно тонкий и деликатный. К сожалению, в настоящее время мне неизвестны сколь-нибудь строгие, конструктивные результаты в этой области.

в) П р и м е р ы

Теперь продемонстрируем на примерах, как использование «аргумента Дайсона» при выборе волновых функций нулевого приближения позволяет довольно быстро и просто получать результаты с высокой точностью.

1) Одномерный ангармонический осциллятор

В этом разделе мы рассмотрим задачу об ангармоническом осцилляторе, описываемом потенциалом

$$V(x) = m^2 x^2 + g x^{2n}, \quad (4.9)$$

при $n = 2$. Известно, что при достаточно малых g работает обычная ТВ по степеням g , поэтому исследуем вначале область ультрасильной связи

$g \rightarrow \infty$, т. е. изучим задачу о спектре в потенциале

$$V = x^{2n}. \quad (4.9')$$

Тот факт, что потенциал (4.9') описывает область ультрасильной связи, легко понять из соотношения рескейлинга (см., например, ⁴⁾) для спектра

$$E^{(k)}(m^2, g) = g^{1/(n+1)} E^{(k)}\left(\frac{m^2}{g^{2/(n+1)}}, 1\right), \quad (4.10)$$

где k — номер уровня.

Одной из простейших функций основного состояния, удовлетворяющих требованиям, сформулированным в гл. 4, п. б), является, например, ³²

$$\psi_0^{(0)} = \exp\left(-\frac{ax^2}{2} - \frac{\sqrt{g}}{n+1} |x|^{n+1}\right), \quad (4.11)$$

где нижний индекс указывает на номер приближения. Эта функция представляет собой волновую функцию основного состояния в полиномиальном потенциале

$$V_0^{(0)} = -(\sqrt{g}n |x|^{n-1} - 2a\sqrt{g} |x|^{n+1}) + a^2x^2 + gx^{2n}, \quad E_0^{(0)} = a, \quad (4.12)$$

где a — параметр, который будет специфицирован далее.

Отвлекаясь несколько в сторону, подчеркнем важный момент: точная волновая функция основного состояния полиномиального потенциала (4.12) дается (4.11). Более того, очевидно, что любая экспонента от полинома с отрицательным старшим коэффициентом — точная волновая функция основного состояния в некотором полиномиальном потенциале с определенными соотношениями между коэффициентами. Обобщение на случай возбужденных состояний достаточно прямолинейно: нужно взять волновую функцию в виде полинома, умноженного на экспоненту от полинома, тогда потенциал будет содержать полюсы, которые часто удается устранить подбором коэффициентов полиномов экспоненты и предэкспоненты. На первый взгляд может показаться, что таким способом можно искать новые точнорешаемые задачи. Однако никак не удается найти *более одного* состояния в данном потенциале, за исключением хорошо известных точнорешаемых случаев! Видимо, это указывает, что остальные волновые функции спектра не факторизуются на экспоненту и предэкспоненту. Отметим, что вся эта деятельность по поиску точных решений в полиномиальных потенциалах началась, по-видимому, с работ ^{32, 68} и в настоящее время интенсивно развивается (например, ⁶⁹⁻⁷⁰ и ссылки в них). В частности, найдены собственные функции полиномиальных потенциалов в виде определенных интегралов.

1.4) Потенциал $V(x) = x^{2n}$. Пусть в выражениях (4.11) — (4.12) параметр g равен 1. Отметим следующий важный факт: потенциал (4.12) при $g = 1$ воспроизводит поведение исследуемого потенциала на бесконечности, поэтому он разумен с точки зрения «аргумента Дайсона». Потенциал возмущений, являющийся разностью между исследуемым потенциалом и потенциалом (4.12), дается формулой

$$V_1^{(0)}(x) = (n |x|^{n-1} - 2a |x|^{n+1}) - a^2x^2. \quad (4.13)$$

Подставим теперь (4.11) — (4.12) в (2.15), (2.33) и вычислим значения поправок y_k и E_k . В табл. I представлены найденные таким способом поправки E_k ($k = 1, 2$) для случая $a = 1$ (см. ^{32, 37}). Видно, что сходимость метода довольно хорошая, особенно для потенциала x^6 . Учет E_3 приводит к точности лучше процента, ¹ даже в худшем случае потенциала x^4 .

Теперь проведем минимизацию выражения $(E_0 + E_1)$ по параметру a (см. гл. 4, п. а)). В результате получим вариационное значение энергии основного состояния с пробной функцией (4.11). Вычисляя E_2 при $a = a_{\min}$, сразу оцениваем точность вариационного расчета, которая оказывается на

Проведем теперь минимизацию по параметру a , вычислим E_2 и сравним полученные результаты с результатами численного интегрирования уравнения Шредингера. Можно видеть (табл. II), что точность метода такова, что даже простейшая пробная функция (4.11) позволяет воспроизвести несколько знаков после запятой в области как малых, так и больших значений константы связи g . Формула (4.15) позволяет исследовать аналитическую структуру энергии как функции константы связи, причем учет высших поправок не меняет структуры особенностей.

2) Атом водорода в постоянных полях. Случай электрического поля (эффект Штарка)

Поведение атома водорода в постоянном электрическом поле — первая многомерная задача, которую мы рассмотрим. При малых полях $\mathcal{E} \lesssim 0,1$ а. е. величина сдвига уровня хорошо описывается ТВ по степеням поля \mathcal{E} , которая последнее время была довольно подробно исследована^{83–85, 39}. Однако, поскольку ряды ТВ являются расходящимися и знакопостоянными⁸⁵, попытки выйти за область применимости ТВ с помощью различных методов суммирования рядов оказались неудачными.

Поэтому расчеты штарк-эффекта вне рамок применимости ТВ осуществляются в основном различными численными методами^{86–89}, которые, однако, в области полей $\mathcal{E} \gtrsim 0,15$ а. е. дают несогласующиеся результаты как для сдвига уровня, так и для его ширины. В работе¹⁷ был проведен аналитический расчет основного состояния в рамках метода «нелинеаризации», который совпал с ТВ в области ее применимости и с результатом работы⁸⁷ за пределами этой области. Покажем, как это получилось, следуя в изложении¹⁷. Отметим, что довольно подробный обзор подходов к штарк-эффекту дан в⁹⁰, а также в недавней работе¹⁰³.

Уравнение Шредингера для атома водорода в постоянном электрическом поле имеет вид

$$\left(\frac{1}{2} \Delta + \varepsilon + \frac{1}{r} - \mathcal{E}z \right) \psi = 0, \quad (4.16)$$

где ε — энергия уровня, а \mathcal{E} — величина электрического поля в атомных единицах. Переходя к параболическим координатам $\xi = r + z$ и $\eta = r - z$ и вводя для основного состояния $\psi = F(\xi) G(\eta) (\xi\eta)^{-1/2}$, получим следующую систему уравнений (см., например,¹¹ *):

$$\xi F'' + \left(\frac{1}{4\xi} + \frac{1}{2} \varepsilon \xi - \frac{1}{4} \mathcal{E} \xi^2 + \alpha \right) F = 0, \quad (4.17)$$

$$\eta G'' + \left(\frac{1}{4\eta} + \frac{1}{2} \varepsilon \eta + \frac{1}{4} \mathcal{E} \eta^2 + \beta \right) G = 0, \quad (4.17')$$

где константы разделения α и β связаны условием

$$\alpha + \beta = 1. \quad (4.18)$$

Величины G и β являются аналитическими продолжениями соответственно F и α по параметру \mathcal{E} :

$$G(\mathcal{E}) = F(-\mathcal{E}), \quad \beta(\mathcal{E}) = \alpha(-\mathcal{E}). \quad (4.19)$$

Существенным пунктом является переход от уравнения (4.17) к уравнению Риккати с помощью подстановки $f = F'/F$ (ср. (2.4), (2.5)):

$$f' + f^2 + \frac{1}{4\xi^2} + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\mathcal{E}\xi}{4} + \frac{\alpha}{\xi} = 0. \quad (4.20)$$

Мы будем строить ТВ для этого уравнения. В качестве нулевого приближения выберем функцию, правильно описывающую решение (4.20) при $\xi \rightarrow \infty$

*) Этот переход необходим для сведения задачи к «почти» одномерной, для которой ТВ может быть реализована в квадратурах (гл. 2, п. в)).

и $\xi \rightarrow 0$:

$$f_0 = \frac{1}{2\xi} - \frac{F_1}{2} \sqrt{1 + \mathcal{E}\xi}, \quad (4.21)$$

и будем строить ряд ТВ по отклонению от f_0 :

$$f(\xi) - f_0(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\xi), \quad \alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n, \quad \varepsilon = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n. \quad (4.22)$$

Величины $f_n(\xi)$, α_n , ε_n определяются порядком за порядком с помощью рекуррентной системы соотношений (ср. (2.11))

$$f'_n + 2f_n f_0 = \kappa_n - \frac{\alpha_n}{\xi} - \varphi_n(\xi), \quad (4.23)$$

где $\kappa_n = -(2\varepsilon_n + \delta_{n1})/4$, $\varphi_1 = -\frac{\sqrt{1+\mathcal{E}\xi}}{2\xi} - \frac{\mathcal{E}}{4\sqrt{1+\mathcal{E}\xi}}$, причем φ_1 играет роль потенциала возмущения; при $n > 1$ $\varphi_n = \sum_{i=1}^{n-1} f_i(\xi) f_{n-i}(\xi)$.

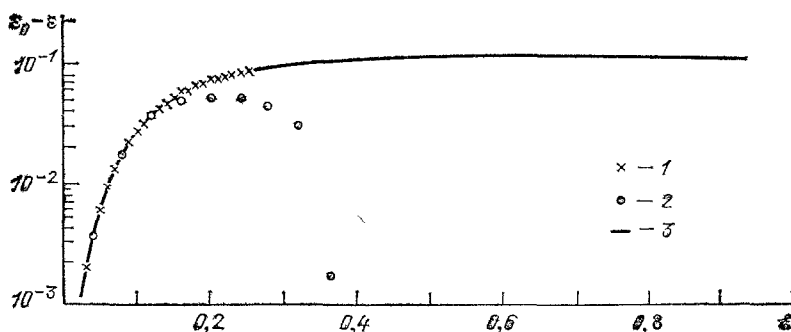


Рис. 2. Сдвиг энергии основного состояния ($\varepsilon_0 = -1/2$) в зависимости от напряженности электрического поля.

1 — расчет из работы ²⁷, 2 — ²⁸, 3 — ¹⁷.

Убывающее при $\xi \rightarrow \infty$ решение уравнения (4.23) имеет вид

$$f_n = -\frac{1}{\xi} e^{K(\xi)} \int_{\xi}^{\infty} dt t e^{-K(t)} \left(\kappa_n - \varphi_n - \frac{\alpha_n}{t} \right), \quad (4.24)$$

где $K(t) = \left(\frac{2}{3\mathcal{E}}\right) (1 + \mathcal{E}t)^{3/2}$. Из условия $\xi f(\xi) \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow 0$ определяем величину

$$\alpha_n = \langle t(\kappa_n - \varphi_n) \rangle, \quad (4.25)$$

где введено обозначение

$$\langle \varphi \rangle = \int_0^{\infty} dt e^{-K(t)} \varphi(t) \left(\int_0^{\infty} dt e^{-K(t)} \right)^{-1}.$$

Используя условия (4.18), (4.19), получим разложение собственного значения энергии:

$$\kappa_n = \frac{\langle t\varphi_n \rangle + \langle t\varphi_n \rangle + \delta_{n1}}{\langle t \rangle + \langle t \rangle}, \quad (4.26)$$

где δ_{n1} — символ Кронекера, а черта означает аналитическое продолжение от \mathcal{E} к $(-\mathcal{E})$.

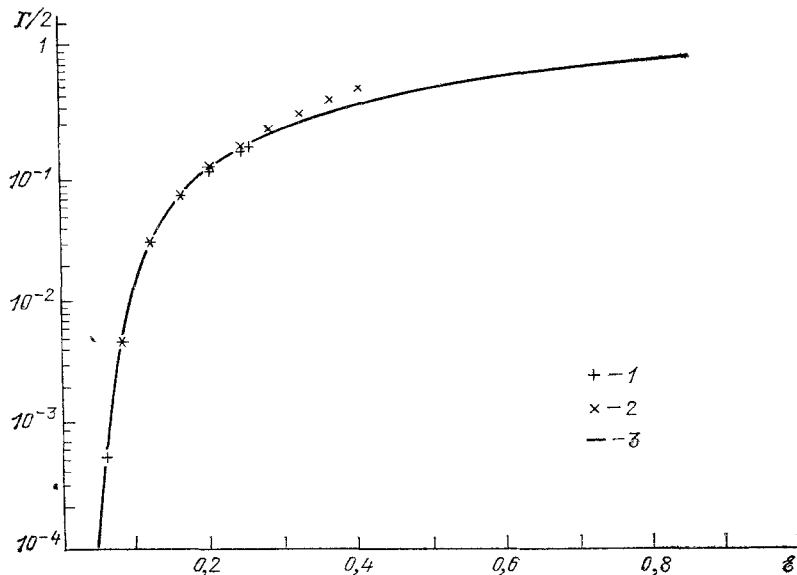


Рис. 3. Зависимость ширины основного состояния в зависимости от напряженности электрического поля.

1 — расчет из ⁸⁷, 2 — ⁸⁹, 3 — ¹⁷.

Величины κ_n (4.3) являются комплексными и определяют как сдвиг, так и ширину основного уровня водорода. Переразложение $\sum \kappa_n$ по степеням \mathcal{E} воспроизводит ряд обычной ТВ. Мнимая часть κ_1 получается при $\mathcal{E} \rightarrow 0$ экспоненциально малой и отличается от квазиклассического выражения ⁹¹ лишь предэкспоненциальным множителем. При больших полях с помощью (4.26) можно получить

$$\kappa_n = c_n e^{-i\pi/3 \mathcal{E}^{2/3}} [1 + O(\mathcal{E}^{-1/3})], \quad (4.27)$$

где $c_1 = -(1/2) (3/2)^{2/3} / \Gamma(4/3)$, а $c_2 \approx 0,2 c_1$. Если ряд $\sum c_n$ сходится, то результат (4.27) противоречит работе ⁸⁵, где было получено, что $\kappa \sim \mathcal{E}^{2/3} \ln \mathcal{E}$. Можно показать, что наша процедура является сходящейся при малых полях, и кажется правдоподобным, что и при больших полях она также сходится.

Мы вычислили сдвиг энергии и ширину уровня основного состояния водорода с учетом первых двух порядков описанной здесь ТВ. Результаты представлены на рис. 2 и 3. На рис. 4 представлены отношения вкладов второго порядка к первому для действительной и мнимой частей энергии. Видно, что всюду второй порядок мал по сравнению с первым, что свидетельствует о численной аккуратности метода. Эти отношения растут при больших \mathcal{E} , однако равенство (4.27) показывает, что при $\mathcal{E} \rightarrow \infty$ они не превосходят 0,2.

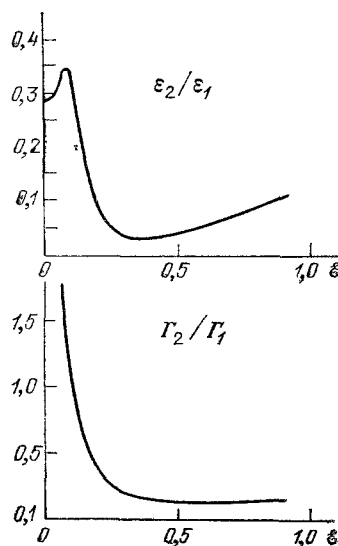


Рис. 4. Отношение вкладов второго порядка к первому для сдвига уровня и ширины в зависимости от напряженности электрического поля.

3) Атом водорода в произвольном постоянном магнитном поле
(эффект Зеемана)

В гл. 3, п. б), 2) мы рассмотрели случай слабых магнитных полей и показали, что область применимости обычной ТВ, которая описывает поведение водорода в слабом поле, существенным образом зависит от степени возбуждения атома. В данном разделе мы продемонстрируем, что наш подход позволяет исследовать задачу в целом, при любых значениях поля. Фактически мы ограничимся проведением «корректного» вариационного расчета с разумной (в духе «аргумента Дайсона») пробной функцией. Обсуждение коснется только состояний (3.38).

Итак, разумной при любых полях волновой функции нулевого приближения должен соответствовать потенциал, имеющий кулоновское поведение вблизи начала координат и воспроизводящий потенциал двумерного гармонического осциллятора на больших расстояниях. Простейшей волновой функцией, удовлетворяющей этим требованиям и описывающей состояния (3.38), является следующая¹⁸:

$$\psi_0 = r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \exp \left[-\frac{\alpha r}{N} - \frac{\mathcal{H}}{4} (x^2 + y^2) \right]. \quad (4.28)$$

Потенциал, который ей соответствует, имеет вид

$$V_0 = -\frac{2\alpha}{r} + \frac{\mathcal{H}^2}{4} (x^2 + y^2) + \frac{\alpha \mathcal{H}}{N} \frac{x^2 + y^2}{r}, \quad (4.29)$$

а энергия дается формулой

$$E_0 = -\frac{\alpha^2}{N^2} + \mathcal{H} (|m| + m + 1), \quad (4.30)$$

где α — параметр, который положим равным единице. Сразу видно, что этот выбор волновой функции довольно удачен: отклонение V_0 от исходного потенциала мало не только в асимптотических областях, но и при средних значениях r , причем величина отклонения уменьшается с ростом номера рассматриваемого состояния. Более того, энергия E_0 (4.30) при малых полях переходит в формулу для кулоновского спектра, а при больших полях — в формулу Ландау, описывающую спектр электрона, движущегося в постоянном магнитном поле¹¹.

Будем теперь развивать ТВ по отклонению потенциала (4.29) от исходного. Потенциал возмущения имеет вид

$$V_1 = V - V_0 = -\alpha \mathcal{H} r \sin^2 \theta \cdot N^{-1}. \quad (4.31)$$

С точки зрения «аргумента Дайсона» эта ТВ будет сходящейся, причем с ростом главного квантового числа сходимость будет более быстрой. Первая поправка к энергии E_1 может быть приведена к следующей форме¹⁸:

$$E_1 = -\mathcal{H} (k+1) (N-k) \frac{\int_0^\infty d\eta \frac{\eta^N e^{-\eta}}{\left(1 + \frac{\mathcal{H} N^2}{2} \eta\right)^{N+1}} \left(\frac{\mathcal{H} N^2 k}{2} \eta^2 + k\eta - N\right)}{\int_0^\infty d\eta \frac{\eta^N e^{-\eta}}{\left(1 + \frac{\mathcal{H} N^2}{2} \eta\right)^N} \left(\frac{\mathcal{H} N^2 k}{2} \eta^2 + k\eta - (N-k)\right)}. \quad (4.32)$$

Напомним, что N — главное квантовое число, а

$$k = \begin{cases} 0, & |m| = l, \\ 1, & |m| = l-1. \end{cases}$$

Выражение $(E_0 + E_1)$ содержит много характерных свойств истинной энергии уровня: при малых \mathcal{H} оно дает правильное описание линейного эффекта Зеемана, хотя коэффициент при \mathcal{H}^2 отличается от истинного на двойку; при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$, когда кулоновская часть потенциала малосущественна — правильно описывает спектр электрона в постоянном магнитном поле, давая к нему логарифмические по полю поправки; при $\mathcal{H}^2 = 0$ имеется особенность, приводящая к расходимости ряда ТВ по полю. Так же как и в случае ангармонического осциллятора, у энергии в комплексной плоскости \mathcal{H}^2 есть разрез, идущий от $\mathcal{H}^2 = 0$ до $-\infty$. В работе ⁶² Аврон вычислил скачок на этом разрезе в пределе $\mathcal{H}^2 \rightarrow -0$, который оказался экспоненциально малым. Выражение (4.32) также содержит разрез $[0, -\infty)$, причем скачок при $\mathcal{H}^2 \rightarrow -0$ экспоненциально мал, хотя предэкспоненциальный фактор не совпадает с полученным Авроном.

Помимо достоинств, выражение для $(E_0 + E_1)$ содержит и некоторые недостатки. В его разложении по степеням \mathcal{H} возникают нечетные степени \mathcal{H} , которых а priori не должно быть. Однако можно показать, что учет следующих поправок E_2 , E_3 и т. д. последовательно устраняет нечетные степени. При $\mathcal{H} \rightarrow \infty$ не возникает следующий за главным член асимптотики $\sim \ln^2 \mathcal{H}$, а разложение начинается с члена $\sim \ln \mathcal{H}$. Этот недостаток также устраняется при учете высших поправок. Тем не менее формулы (4.30), (4.32) с высокой точностью описывают ситуацию при любых значениях \mathcal{H} . В табл. III приведены результаты расчетов по этим формулам для состояний с $N = 1, 2$

Таблица III

Энергии (в а.е.) $1s$ - и $2p_{+1}$ -уровней в зависимости от величины магнитного поля

\mathcal{H} , а.е.	$1s$					$2p_{+1}$		
	Brandt ⁹⁴	Kaschiev ⁹³	Galindo ⁶⁴	Формула (4.32) с $\alpha = 1$	Формула (4.28) с минимизацией по α	Prad- daude ⁹⁵	Galindo ⁶⁴	Формула (4.32) с $\alpha = 1$
0				-1	-1			-0,25
0,1	-1	-0,999957	-0,99505	-0,9916	-0,9932	-0,10169	-0,10039	-0,08971
1	-1	-0,66228	-0,66331	-0,6056	-0,6201	2,08682	2,37576	2,1402
5		2,2396	2,21382	2,392	2,387	13,28*	14,3397	13,453
20	15,68	15,59		15,95	15,79			57,586
100	92,74	92,5223	92,4045	93,65	92,20	294,7*	299,33	296,20

Результаты Ларсева ⁹⁶ отмечены звездочкой.

с неотрицательными проекциями момента. Видно, что при больших полях зависимость энергии от поля становится почти линейной, однако ни одно из рассматриваемых состояний не выходит в непрерывный спектр, т. е. их энергия остается меньше энергии свободного электрона в магнитном поле. В табл. III проводится сравнение с расчетами других авторов. Имеется неплохое согласие. Вопросы о точности наших расчетов мы коснемся ниже, а пока их можно рассматривать как вариационные с пробной функцией (4.28).

Обсудим теперь вопрос о связи кулоновских состояний (малые поля) с состояниями двумерного гармонического осциллятора (большие поля, режим Ландау). Формулы (4.30), (4.32) сразу дают ответ на вопрос, какие состояния каким соответствуют. Наблюдается полное согласие со схемой соответствия, приведенной в обзоре ⁶⁰ для первых возбужденных состояний. Наше рассмотрение позволяет получить более общие результаты. Очевидным результатом является уход всех нижних компонент мультиплетов с $m = -l, -l + 1$ в нулевую зону Ландау, тогда как верхние компоненты попадают в различные зоны Ландау. В связи с этим происходят всевозмож-

ные пересечения уровней. В частности, все уровни с $m = -l, -l + 1$ при $l \geq 2$ ($N \geq 3$) пересекают уровень $3p_{+1}$, при $l \geq 3$ ($N \geq 4$) — уровни $3d_{+2}$, $3d_{+1}$, при $l \geq 4$ ($N \geq 5$) — уровни $4f_{+3}$, $4f_{+2}$ и т. д. Причем имеет место истинное пересечение уровней, ибо они имеют различную симметрию вследствие сохранения магнитного квантового числа. В табл. IV приведены положения первых пересечений. Отметим, что пересечение $2p_{+1}$ и $3d_{-2}$ происходит при полях порядка 10^8 Гс.

Таблица IV

Пересечения различных уровней, найденные по формуле (4.32)

	$3d_{-2}$	$3d_{-1}$	$4f_{-3}$	$4f_{-2}$	$5g_{-4}$	$5g_{-3}$
$2p_{+1}$	0,062	0,090	0,087	0,119	0,105	0,137
$3d_{+1}$			0,015	0,021	0,023	0,030
$3d_{+2}$			0,011	0,013	0,016	0,019
$4f_{+2}$					0,0042	0,005
$4f_{+3}$					0,0035	0,0040

Как следствие того факта, что проекция момента является точным интегралом задачи, между верхними и нижними компонентами мультиплетов имеется очевидное соотношение

$$\Delta E_l^m \equiv E_l^m - E_l^{-m} = 2\mathcal{H}m, \quad (4.33)$$

которое справедливо при любых полях. Соотношение (4.33) приводит к другому точному соотношению:

$$\hat{\Delta} E_l^m \equiv \Delta E_l^m - \Delta E_l^{m-1} = \delta^+ E_l + \delta^- E_l = 2\mathcal{H}, \quad (4.34)$$

где $\delta^+ E_l = E_l^m - E_l^{m-1}$ — расстояние между верхними, а $\delta^- E_l = E_l^{-m+1} - E_l^{-m}$ — расстояние между нижними компонентами для состояний (3.38). Отметим, что правая часть (4.34) не зависит от главного квантового числа N .

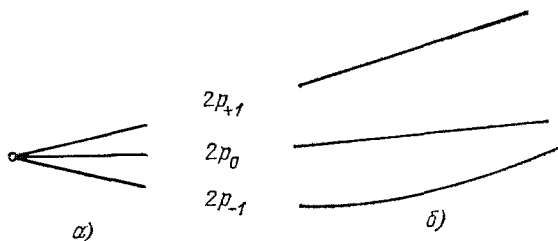


Рис. 5. Расстояние между верхними и нижними компонентами мультиплета при малых полях (а) и больших полях (б).

Величины $\delta^\pm E_l$ могут оказаться полезными при идентификации спектральных линий. Из формул (4.30), (4.32) легко видеть, как они зависят от величины поля: если при малых полях они практически равны $\delta^+ E_l = \delta^- E_l$, поскольку расщепление пропорционально величине поля, то с ростом величины \mathcal{H} происходит перекося $\delta^+ E_l > \delta^- E_l$, причем при $\mathcal{H} \gg 1$ $\delta^+ E_l = 2\mathcal{H} - O(\ln \mathcal{H})$. Это явление наблюдается в эксперименте (см. ⁹²), особенно наглядно для состояний с $N = 2$. Схематически оно показано на рис. 5.

Довольно интересной представляется ситуация при больших значениях главного квантового числа. Исследование выражений (4.30), (4.32) позволяет получить следующую формулу при $\mathcal{H} \gg 1$ для крайних компонент:

$$E_N = \mathcal{H} (|m| + m + 1) - \frac{2^{5/4}}{e} N^{-7/4} \mathcal{H}^{-3/4} + \dots, \quad (4.35)$$

где e — основание натуральных логарифмов. Таким образом, при больших N довольно быстро происходит выход на режим Ландау, причем поскольку поправка к формуле Ландау имеет отрицательный знак, то никогда не происходит выхода уровней в непрерывный спектр. Приближение уровней к границе континуума происходит степенным образом и тем быстрее, чем больше величина поля. Подчеркнем некоммутативность предельных переходов к большим полям и высоким возбуждениям.

Обсудим теперь вопрос о точности полученных результатов. Везде выше мы пользовались первыми двумя членами ряда ТВ, что эквивалентно вариационному расчету (см. выше). Поскольку «аргумент Дайсона» дает нам основание верить в сходимость ряда ТВ, вычисление E_2 нам даст не только член в ряду ТВ, но и позволит оценить точность вариационного расчета с пробной функцией (4.28). Сразу отметим важное обстоятельство: поскольку узловые поверхности не деформируются, вторая поправка к энергии всегда отрицательна (см. (2.32)), поэтому наши результаты для энергий состояний $(E_0 + E_1)$ дают верхнюю границу энергии. Для вычисления E_2 нужно знать поправку ϕ_1 (см. (2.29)), т. е. необходимо решить уравнение электростатики (2.24). Чтобы найти его решение, воспользуемся следующей итерационной процедурой. Найдем асимптотики функции ϕ_1 :

$$\begin{aligned}\phi_1 &\xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{E_1 r^2}{2(2N+1)}, \\ \phi_1 &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} Nr(1 - |\mu|),\end{aligned}\tag{4.36}$$

и построим интерполирующую функцию

$$\phi_1 = \frac{E_1 r^2}{2(2N+1)} \left[1 + \frac{E_1 r}{2(2N+1)N(1-|\mu|)} \right]^{-1}.\tag{4.37}$$

Используя функцию (4.37) как нулевое приближение, подставим ее в уравнение (2.24). Сделав одну итерацию, убеждаемся, что она мала по сравнению с (4.37). Подставляя (4.37) и выражение (2.29) для E_2 , получаем оценку E_2 . Эта процедура была проделана при $\mathcal{B} = 1$, и мы убедились, что относительная точность наших результатов порядка 10^{-N} .

Можно провести детальный вариационный расчет, взяв в качестве пробной функции (4.28) и считая α свободным параметром. В табл. III приведены результаты минимизации для энергии основного состояния. Отметим, что α можно придать смысл параметра экранировки заряда протона. С ростом поля экранировка возрастает.

5. «АНАЛОГ» ГЛАВНОГО ЛОГАРИФИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ (АГЛП) В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В этой главе мы хотели бы предложить новый способ продолжения результатов, справедливых в области слабой связи, в область сильной связи и больших возмущений. Этот способ кардинальным образом отличается от обычно используемых в таких ситуациях методов Паде, Паде — Бореля и других, являясь по сути близким аналогом главного логарифмического приближения (ГЛП) квантовой теории поля. Поэтому, прежде чем приступить к его построению и обсуждению, напомним кратко, что такое ГЛП.

Главное логарифмическое приближение — один из наиболее часто используемых методов исследования перенормируемых моделей в квантовой теории поля. Суть его состоит в следующем. Вклад любой n -петлевой диаграммы ТВ представляется полиномом по логарифму импульса плюс степенные члены. ГЛП есть сумма старших степеней полиномов. Область применимости ГЛП оценивается из условия малости предстаршей степени в полиноме по сравнению со старшей. Во всех выполненных на сегодняшний день расчетах суммы по лидирующим степеням логарифма имеют конечный радиус

сходимости *), хотя хорошо известно, что в тех же самых теориях ряды ТВ расходятся, имея нулевой радиус сходимости. Таким образом, ГЛП выделяет из расходящегося ряда с факториально растущими коэффициентами сходящийся подряд. Поэтому можно предположить, что расходимость рядов ТВ проявляется в расходимости сумм по младшим степеням логарифма. В связи с этим, однако, возникает вопрос, правомерна ли перестановка порядка суммирования и сколь справедливо само приближение. В настоящее время не существует строгих ответов. Такова ситуация с ГЛП в квантовой теории поля. В квантовой механике нет прямого физического аналога ГЛП квантовой теории поля, однако можно построить приближение, математически похожее на ГЛП. Поскольку квантовая механика много проще квантовой теории поля, оказывается возможным довольно подробно исследовать это приближение.

В основе рассматриваемого приближения лежит явление алгебраизации процедуры построения ТВ в области слабой связи (см. гл. 3, теоремы 1—2). Мы видели ранее, что поправки $\phi_n(x)$ являются полиномами, и не представляет особого труда найти коэффициенты при старших степенях в случае практически произвольных возмущений. При этом ряды ТВ с учетом только старших степеней оказываются сходящимися. Идея подхода — использовать эти суммы в качестве нулевых приближений ТВ. Поясним все на простом примере.

Рассмотрим одномерный ангармонический осциллятор (4.9) при $n = 2$. В гл. 3, п. а), 2) было показано, что поправка $\phi_n(x)$ — полином $(2n + 2)$ -степени (см. (3.22)), который мы запишем в следующем виде:

$$\phi_n(x) = x^{2n+2} \sum_{i=0}^n (a_{n-i}^{(n)} x^{2i}), \quad (4.38)$$

причем коэффициенты $a_n^{(n)}$, $a_{n-1}^{(n)}$, $a_{n-2}^{(n)}$ известны (см. (3.23)). Легко найти сумму ряда ТВ по старшим степеням полиномов:

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n a_n^{(n)} x^{2n+2} = \frac{1}{3g} [(m^2 + gx^2)^{3/2} - m^3]. \quad (4.39)$$

Этот ряд сходится при $|gx^2| < m^2$, а приближение старших степеней полиномов осмысленно при $x \gtrsim 1$. Поэтому, если понимать (4.39) как аналитическое продолжение по x суммы ряда ТВ по старшим степеням в область $|gx^2| \gtrsim m^2$, то $\hat{\phi}(x)$ в этой области должно правильно аппроксимировать $\phi(x)$. Это в самом деле имеет место. И более того, $\hat{\phi}(x)$ воспроизводит правильную асимптотику при $x \rightarrow 0$.

Итак, в качестве волновой функции нулевого приближения для k -го уровня возьмем

$$\psi_0^{(k)} = P_k(x) \exp[-\hat{\phi}(x)], \quad (4.40)$$

где $P_k(x)$ — полином k -й степени, имеющий k действительных корней. Потенциал, отвечающий функции (4.40), имеет вид

$$V_0^{(k)} = m^2 x^2 + gx^4 - g_0(x) - \frac{gx^2}{g_0(x)} + \frac{P_k''(x) - 2xg_0(x)P_k'(x)}{P_k(x)}, \quad (4.41)$$

где $g_0(x) = (m^2 + gx^2)^{1/2}$. Очевидно, что потенциал (4.41) правильно воспроизводит асимптотику исходного потенциала при $|x| \rightarrow \infty$. Потенциал возмущения равен

$$V_1^{(k)} = (1 - m^2)x^2 + g_0(x) + \frac{gx^2}{g_0(x)} - \frac{P_k''(x) - 2xg_0(x)P_k'(x)}{P_k(x)}. \quad (4.42)$$

*) Так же как и суммы по некоторым из следующих за главными степеням логарифма.

На первый взгляд потенциал возмущения $V_1^{(k)}$ ужасен — он содержит простые полюса. Однако точно такие же полюса с теми же вычетами содержит и $V_0^{(k)}$. Поэтому они взаимно компенсируются. В процессе построения ТВ нигде не возникает расходящихся интегралов. Потенциал $V_0^{(k)}(x)$ воспроизводит поведение исходного потенциала $V(x)$ при $|x| \rightarrow \infty$. Следовательно, с точки зрения «аргумента Дайсона» сходимость ряда ТВ обеспечена.

Всю эту процедуру с построением (4.39) и развитием ТВ относительно потенциала нулевого приближения (4.41) мы будем называть «аналогом» главного логарифмического приближения (АГЛП).

Мы провели расчеты энергий первых четырех уровней осциллятора (4.9). В табл. V приведены результаты расчета для потенциала $V(x) = x^4$ (осциллятор в области ультрасильной связи (см. (4.10) и обсуждение на стр. 62).

Таблица V

Расчеты первых четырех уровней в потенциале x^4 с АГЛП в качестве нулевого приближения (см. (4.40))

Уровень:		Нулевой	Первый	Второй	Третий
Приближение					
0	a_{\min} $f_0(x)$ E_0	1,003960 1 0	1,431950 x 0	1,800056 $2,997103 \cdot x^2 - 1$ 0	2,1223 $x(1,166267 \cdot x^2 - 1)$ 0
1	$f_1(x)$ E_1	0 1,0606687	0 3,8002786	0,007604 7,4567270	0,004420 x 11,6463337
2	$-E_2$ $E_1 + E_2$	0,0003010 1,0603677	0,0006056 3,7996729	0,0010410 7,4556860	0,0016802 11,6446535
$E_{\text{точное}}$		1,06036211	3,79967315	7,45569862	11,6447475

Видно, что E_1 (вариационный расчет) дает абсолютную точность $\sim 10^{-3}$ — 10^{-4} , а учет E_2 (поправки к вариационному расчету) приводит к абсолютным точностям $\sim 10^{-5}$ — 10^{-6} . Оценка точности в духе теоремы 3 показывает, что учет E_3 увеличивает абсолютную точность до $\sim 10^{-7}$ — 10^{-8} . Обратим внимание, что абсолютная точность расчета слабо зависит от номера уровня. В табл. II, VI приведены результаты расчетов нулевого и второго уровней

Таблица VI

Энергия второго уровня ангармонического осциллятора с АГЛП в качестве нулевого приближения (см. (4.40)). Нормировка — как в табл. II; x_0 , $\Delta_1 x_0$ — положение и деформация нуля волновой функции

g	a_{\min}	x_0	$-\Delta_1 x_0$	E_1	$-E_2$	$E_1 + E_2$	E из ⁸¹
0,1	1,4817	0,6306	0,0010	3,1386452	0,0000269	3,1386183	3,13862
1	3,6945	0,4902	0,0013	5,179652	0,000452	5,179200	5,17929
10	14,009	0,3469	0,0014	10,34831	0,00175	10,34656	10,3471
100	62,200	0,2383	0,0009	21,90991	0,00371	21,90619	21,9069
1000	286,555	0,1626	0,0006	47,02409	0,00745	47,01663	47,0173

при различных значениях параметра g с учетом первых двух приближений. Отметим согласие с расчетами, проведенными в ⁸¹. Абсолютная точность расчетов практически не зависит от g и колеблется на уровне 10^{-6} — 10^{-7} .

Табл. II позволяет сравнить результаты расчетов основного состояния в рамках данного приближения и приближения, основанного на использовании волновой функции (4.11). Преимущество АГЛП несомненно.

В заключение — несколько слов о АГЛП в случае многомерной сферически-несимметричной задачи. Мы сразу же сталкиваемся с трудностями. Продемонстрируем их на примере задачи об эффекте Зеемана. Ранее было показано, что поправка ϕ_n имеет вид (3.41). Учтем (3.43) и запишем (3.41) в следующем виде:

$$\phi_n = \sum_{j=2}^{2n+1} r^j \sum_{i=0}^n a_{n, i, j} \sin^{2i} \theta. \quad (4.43)$$

Для того чтобы построить АГЛП, необходимо вычислить двойную сумму

$$\hat{\phi} = \sum_{n=0}^{\infty} r^{2n+1} \mathcal{B}^{2n} \sum_{i=0}^{\infty} a_{n, i, 2n+1} \sin^{2i} \theta, \quad (4.44)$$

и сразу возникает проблема. С одной стороны, несложно найти несколько первых одинарных сумм, например

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} r^{2n+1} \mathcal{B}^{2n} a_{n, n, 2n+1} \sin^{2n} \theta = \frac{2r}{N} \sqrt{1 + \frac{\mathcal{B}^2 r^2}{4N-2} \sin^2 \theta} \\ \hat{\phi}_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} r^{2n+1} \mathcal{B}^{2n} a_{n, n-1, 2n+1} \sin^{2n-2} \theta = -\frac{\mathcal{B}^4 r^3 \sin^3 \theta}{90 \hat{\phi}_0^3}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

однако можно строго показать, что $\hat{\phi}_{n-1}^*$ не записывается в конечном виде *). Функция $\hat{\phi}_0^*$ имеет правильное поведение при $r \rightarrow 0$, совпадающее с кулоновской функцией, причем в этом пределе вкладом от $\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \dots$ и т. д. можно пренебречь. В пределе $r \rightarrow \infty$, $\hat{\phi}_0 \rightarrow \mathcal{B}_\omega(x^2 + y^2)/2\sqrt{3}$, что соответствует двумерному осциллятору, однако с силой в $1/\sqrt{3}$ раз меньше, чем в исходном потенциале. Можно показать, что суммы $\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2$ имеют в пределе $r \rightarrow \infty$ тот же порядок, что и $\hat{\phi}_0$.

Единственный конструктивный выход из положения: подправить $\hat{\phi}_0$, чтобы было соответствие с осциллятором, написав

$$\hat{\phi}_0^{(1)} = \frac{2r}{N} \sqrt{1 + \frac{\mathcal{B}^2 r^2}{4N-2} \sin^2 \theta} \quad (4.46)$$

либо

$$\hat{\phi}_0^{(2)} = \frac{2r}{N} \sqrt{1 + \frac{\mathcal{B}^2 r^2}{4N-2} \sin^4 \theta}. \quad (4.47)$$

И тот, и другой варианты приемлемы. Если провести вариационный расчет, считая N свободным параметром, точность будет много выше, чем в расчете с функцией (4.28) (см. табл. VII).

Итак, из вышесказанного можно сделать следующий вывод. Когда построение АГЛП возможно, расчеты имеют довольно высокую точность. Если АГЛП построить в полной мере затруднительно, то подход дает подсказку, какой вид пробной функции желателен.

*) Это делается следующим образом: исходя из рекуррентных соотношений, пишется уравнение на ϕ_{n-1} , которое оказывается уравнением Риккати, не относящимся к классу тех, чьи решения выражаются в конечном виде.

Таблица VII

Энергия 1s-состояния при $\mathcal{E}=1$, вычисленная с помощью (4.28) и (4.46) без минимизации по α и с ней

Формула (4.28)		(4.46)		По 93
$\alpha=1$ -0,6056	$\alpha=\alpha_{\min}=0,879$ -0,6201	$\alpha=1$ -0,6352	$\alpha=\alpha_{\min}=1,1359$ -0,6543	-0,6623

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, мы изложили нестандартный подход к задаче о спектре в квантовой механике, который можно рассматривать как теорию сильной связи. Он обладает многими достоинствами: прост и прозрачен при реализации, не требует знания всего спектра невозмущенной задачи, дает возможность оценивать точность вариационных расчетов, приводит в некоторых случаях к алгебраизации процедуры построения ТВ. Весьма полезной оказалась идея сравнения потенциалов — исходного и соответствующего пробной функции нулевого приближения — вместо сравнения волновых функций. Это дало нам в руки критерий «разумности» нулевого приближения. На многочисленных примерах мы продемонстрировали мощь подхода при всей его простоте и практически ни в одном из них не получили негативных результатов. Более того, в последнее время были рассмотрены двухцентровые задачи: молекулярный ион и молекула водорода в постоянном магнитном поле¹⁰⁵. Простейшие пробные функции, представляющие очевидное обобщение (4.28), позволили единым образом описать всю область существующих в природе полей вплоть до $10^{12} - 10^{13}$ Гс. Полученные результаты находятся в прекрасном согласии с более ранними (для иона H_2^+) вычислениями, выполненными гораздо более сложными и изощренными способами, а для молекулы H_2 являются первыми при полях больших 10^9 Гс.

Мне кажется, что подход имеет довольно большие перспективы. Его можно было бы применить к более сложным задачам многих тел и попытаться взглянуть на теорию поля со стороны квантовой механики. В частности, было бы интересно проанализировать задачу трех тел на языке теории возмущений в рамках данного подхода. В настоящее время предложено релятивистское обобщение как на случай уравнения Клейна — Гордона, так и на случай уравнения Дирака⁹⁷⁻⁹⁸. Видимо, определенный интерес представляет рассмотрение задач рассеяния в рамках данного формализма. Стоит также подчеркнуть попытки реализации похожей идеологии применительно к задачам теории поля, предпринятые в работах¹⁰⁶⁻¹⁰⁷, когда исходное действие S разбивается на нетривиальную сумму $S_0 + S_1$ и развивается ТВ по отношению к S_1 , при этом существенным требованием к разбиению является его разумность с точки зрения «аргумента Дайсона».

Конечно, имеется много трудностей. Практически неизвестно ни одной сколько-нибудь нетривиальной функции Грина оператора Лапласа в кривом конформно-плоском пространстве, которая необходима для нетривиальной реализации процедуры в многомерном случае. Для сложных задач не совсем просты процедуры построения волновых функций нулевого приближения, особенно в многомерном случае. Существуют и чисто математические проблемы. В частности, совершенно не ясно, как строить нулевые приближения для возбужденных состояний в многомерных задачах, как выходить за пределы вариационного расчета, поскольку не решена проблема классификации состояний. В связи с этим было интересно исследовать хотя бы простейшую задачу, где имеется квазипересечение уровней, которой является, например, двумерный ангармонический осциллятор.

В заключение мне хотелось бы выразить свою признательность В. Л. Гинзбургу за предложение написать этот обзор. Также я хочу поблагодарить К. Г. Борескова, А. Д. Долгова, Я. Б. Зельдовича, А. Б. Кайдалова, Ю. А. Симонова и особенно К. А. Тер-Мартirosяна за полезные обсуждения и интерес к работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ЭЛЕКТРОСТАТИКА С ГАУССОВОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ

Для решения электростатической задачи с гауссовой диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon = \psi_0^2 = a \exp(-\alpha x^2) \quad (\text{II.1})$$

воспользуемся уравнением (2.12), в котором сразу учтем условие потенциальности (2.6). Вспоминая, что $y_0 = 2\alpha x$, получаем, что исходное уравнение преобразуется к виду

$$\Delta \phi_n - 2\alpha x \nabla \phi_n = q_n(x), \quad (\text{II.2})$$

где $q_n(x)$ — некоторая функция, очевидным образом связанная с плотностью заряда, а $\phi_n(x)$ — потенциал ($y_n = \nabla \phi_n$, а для удобства индекс n мы будем в дальнейшем опускать). Это уравнение можно решать по-разному, однако наиболее простым и красивым способом является следующий: сделаем преобразование подобия $x \rightarrow xt$ и заметим, что оператор

$$x \nabla_x \phi(xt) = t \frac{\partial}{\partial t} \phi(xt) \quad (\text{II.3})$$

является однородным. Тогда уравнение (II.2) принимает форму

$$\frac{1}{t^2} \Delta_x \phi(x, t) - 2\alpha t \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = q(x, t); \quad (\text{II.4})$$

при этом ищется его решение, имеющее вид функции от произведения xt . Для того чтобы его найти, воспользуемся преобразованием Фурье по переменной x . В результате получится уравнение

$$-\frac{p^2}{t^2} \tilde{\phi} - 2\alpha t \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} = \tilde{q}, \quad (\text{II.5})$$

где p — переменная, сопряженная x ; $\tilde{\phi}$, \tilde{q} — фурье-образы искомой функции и правой части уравнения (II.4) соответственно. После простых и не очень длинных выкладок получаем, что решение уравнения (II.2) имеет вид

$$\phi(x) = \int dx' q(x') \int_0^\infty dt \frac{(t+\alpha)^{(k-2)/2}}{4\pi^{k/2} t} \exp[-(\sqrt{tx} - \sqrt{t+\alpha}x')^2]. \quad (\text{II.6})$$

Напряженность электрического поля, отвечающая такому потенциалу,

$$y = \int dx' q(x') \int_0^\infty dt \frac{(t+\alpha)^{(k-2)/2}}{2\pi^{k/2} t^{1/2}} \exp[-(\sqrt{tx} - \sqrt{t+\alpha}x')^2] (\sqrt{tx} - \sqrt{t+\alpha}x'), \quad (\text{II.7})$$

и дает искомую формулу (2.20).

Полученные только что формулы представляют интерес с разных точек зрения. Во-первых, это решение нетривиальной электростатической задачи. Во-вторых, с точки зрения гравитации — это конформно-плоский мир, который замкнут, поскольку интеграл от метрического тензора сходится. В-третьих, формулы с диэлектрической проницаемостью (II.1) могут быть полезны при построении теории возмущений для квазистационарных состояний, где α играет роль параметра регуляризации возникающих интегралов (см. работу Зельдовича²⁹ и монографию²⁴, гл. 7, § 6). И последнее: конечно, эти формулы важны при реализации подхода, описанного в данном обзоре.

Институт теоретической
и экспериментальной физики,
Москва

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Dyson F. — Phys. Rev., 1952, v. 85, p. 631.
2. Bender C. M., Wu T. T. — Ibid., 1969, v. 184, p. 1231.
3. Bender C. M., Wu T. T. — Ibid. Ser. D, 1973, v. 7, p. 1620.
4. Simon B. — Ann. Phys. (N.Y.), 1970, v. 58, p. 79.

5. Graffi S., Grecchi V., Simon B.— *Phys. Lett. Ser. B*, 1970, v. 32, p. 631.
6. Попов В. С., Елецкий В. Л., Турбинер А. В.— *Письма ЖЭТФ*, 1977, т. 26, с. 193; *ЖЭТФ*, 1978, т. 74, с. 445.
7. Shirkov D. V.— *Lett. Nuovo Cimento*, 1977, v. 18, p. 452.
Казakov Д. И., Тарасов О. В., Ширков Д. В.— *ТМФ*, 1979, т. 38, с. 15.
Казakov Д. И., Shirkov D. V.— *Fortschr. Phys.*, 1980, Bd. 28, S. 465.
8. Липатов Л. Н.— *ЖЭТФ*, 1976, т. 71, с. 2010; *ЖЭТФ*, 1977, т. 72, с. 411.
9. Bogomolny E. B., Fateev V. A., Lipatov L. N.— *Sov. Sci. Rev.*, 1980, p. 247.
10. Turchetti G., et al.— *Nuovo Cimento Ser. B*, 1971, v. 4, p. 313.
Graffi S., Grecchi V.— *J. Math. Phys.*, 1978, v. 19, p. 1002.
11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика*.— М.: Наука, 1974.
12. Hill R. H.— *J. Math. Phys.*, 1980, v. 21, p. 2182.
13. Marinov M. S., Poroov V. S.— *J. Phys. Ser. A*, 1975, v. 8, p. 1575.
14. Hioe F. T., Montroll E. W., Yamawaki M.— In: *Perspectives in Statistical Physics*/Ed. H. H. Raveche.— Amsterdam: North-Holland, 1981.— Ch. 16, p. 297.
15. Морс Ф. М., Фешбах Г. *Методы теоретической физики. Т. 2*.— М.: ИЛ, 1960.
16. Курант Р., Гильберт Д. *Методы математической физики. Т. 1*.— М.: Гостехиздат, 1945.
17. Dolgov A. D., Turbiner A. V.— *Phys. Lett. Ser. A*, 1980, v. 77, p. 15.
18. Turbiner A. V. Preprint ITP-79.— Moscow, 1982; *J. Phys. Ser. A*, 1984, v. 17, p. 859.
19. Демков Ю. Н., Монозон Б. С., Островский В. А.— *ЖЭТФ*, 1969, т. 57, с. 1431.
20. Буркова Л. А., Дзялошинский И. Е., Друкарев Г. Ф., Монозон Б. М.— *ЖЭТФ*, 1976, т. 71, с. 526.
21. Соловьев Е. А.— *ЖЭТФ*, 1982, т. 82, с. 1762.
Браун П. А.— *ЖЭТФ*, 1983, т. 84, с. 850.
Delos J. B., Knudson S. K., Noid D. N.— *Phys. Rev. Lett.*, 1983, v. 50, p. 583.
Казанцев А. П., Покровский В. Л.— *Письма ЖЭТФ*, 1983, т. 37, с. 471.
22. Price R. J.— *Proc. Phys. Soc.*, 1954, v. 67, p. 383.
23. Зельдович Я. Б.— *ЖЭТФ*, 1956, т. 31, с. 1101.
24. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*.— М.: Наука, 1971.
25. Киржниц Д. А.— *Опт. и спектр.*, 1958, т. 5, с. 486.
26. Киржниц Д. А. *Полевые методы теории многих частиц*.— М.: Атомиздат, 1963.
27. Hirschfelder J. O., Brown W. B., Epstein S. T.— *Adv. Quantum Chem.*, 1964, v. 1, p. 225.
28. Поликанов В. С.— *ЖЭТФ*, 1967, т. 52, с. 1326.
29. Пекар В. С.— *ТМФ*, 1971, т. 9, с. 440.
30. Долгов А. Д., Попов В. С.— *ЖЭТФ*, 1978, т. 75, с. 2010.
31. Ахагонов Y., Au C. K.— *Phys. Rev. Lett.*, 1979, v. 42, p. 1582; 1979, v. 43, p. 176(E); 1980, v. 44, p. 619 (E).
32. Турбинер А. В.— *Письма ЖЭТФ*, 1979, т. 30, с. 379.
33. Турбинер А. В.— *ЖЭТФ*, 1980, т. 79, с. 1719.
34. Поликанов В. С.— *ТМФ*, 1975, т. 24, с. 230.
35. Turbiner A. V. Preprint ITP-139.— Moscow, 1979.
36. Au C. K., Ahaogonov Y.— *Phys. Rev. Ser. A*, 1979, v. 20, p. 2245.
37. Turbiner A. V. Preprint ITP-117.— Moscow, 1979; *J. Phys. Ser. A*, 1981, v. 14, p. 1641.
38. Турбинер А. В.— *Письма ЖЭТФ*, 1981, т. 33, с. 181.
39. Alliluev S. P., Eletsky V. L., Poroov V. S.— *Phys. Lett. Ser. A*, 1979, v. 73, p. 103; 1980, v. 78, p. 43.
Privman A. V. Preprint TECHNION-PH-80-99.— 1980.
40. Turbiner A. V.— *Zs. Phys. Ser. A*, 1982, Bd. 308, S. 111.
41. Privman V.— *Phys. Lett. Ser. A*, 1981, v. 81, p. 326.
Елецкий В. Л., Вайнберг В. Н., Попов В. С.— *ЖЭТФ*, 1981, т. 81, с. 1567.
42. Турбинер А. В.— *ЖЭТФ*, 1983, т. 84, с. 1329.
43. Banks T., Bender C. M., Wu T. T.— *Phys. Rev. Ser. D*, 1973, v. 8, p. 3346.
44. Banks R., Bender C. M.— *Ibid.*, 1973, v. 8, p. 3366.
45. Найфэ А. Х. *Методы возмущений*.— М.: Мир, 1976.
46. Bijl A.— *Physica*, 1940, v. 7, p. 869.
47. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н.— *ЖЭТФ*, 1955, т. 28, с. 129.
48. Repose O., Onsager L.— *Phys. Rev.*, 1956, v. 104, p. 576.
49. Камке Э. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*.— М.: Наука, 1976.

50. Фаддеев Д. К., Соминский И. С. Сборник задач по высшей алгебре.— М.: Наука, 1977.
51. Au C. K.— Phys. Lett. Ser. A, 1980, v. 77, p. 221.
52. Hikami S., Brezin E.— J. Phys. Ser. A, 1979, v. 12, p. 759.
53. Privman V. Preprint TECHNION-PH-80-37.— 1980.
54. Dolgov A. D., Porov V. S.— Phys. Lett. Ser. A, 1979, v. 86, p. 185.
55. Долгов А. Д., Елецкий В. Л., Попов В. С.— ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 1704.
56. Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 2.— М.: Наука, 1974.
57. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1.— М.: Мир, 1974.
58. Au C. K., Aharonov Y.— Phys. Rev. Ser. A, 1980, v. 22, p. 328.
59. Chen A. C.— Ibid., p. 333.
60. Garstang R. H.— Rept. Prog. Phys., 1977, v. 40, p. 105.
61. Avron J. et al.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 43, p. 691.
62. Avron J.— Ann. Phys. (N.Y.), 1981, v. 131, p. 73.
63. Турбинер А. В.— В кн.: 9-я школа физики ИТЭФ.— М.: Энергоатомиздат, 1982.— Вып. 2, с. 39.
64. Galindo A., Pascual P.— Nuovo Cimento Ser. A, 1976, v. 34, p. 155.
65. Вайнштейн А. И. Препринт ИЯФ СО АН СССР.— Новосибирск, 1964.
66. Langer J. S.— Ann. Phys. (N.Y.), 1967, v. 41, p. 108.
67. Эпштейн С. Вариационный метод в квантовой химии.— М.: Мир, 1977.
68. Flessas G. P.— Phys. Lett. Ser. A, 1979, v. 72, p. 289.
69. Gerschenson M. E., Turbinder A. V. Preprint ITP-57.— Moscow, 1981; ЯФ, 1982, т. 35, с. 1437.
70. Flessas G. P., Anagnostatos G. S.— J. Phys. Ser. A, 1982, v. 15, p. L537.
71. Caswell W. E.— Ann. Phys. (N.Y.), 1979, v. 123, p. 153.
72. Eletsky V. L., Porov V. S.— Phys. Lett. Ser. A, 1980, v. 94, p. 65.
73. Drummond J. E.— J. Phys. Ser. A, 1981, v. 14, p. 1651.
74. Kesarwani R. N., Varshni Y. P.— J. Math. Phys., 1981, v. 22, p. 1983.
75. Lakshmanan M., Karlsson F., Fröman P. O.— Phys. Rev. Ser. D, 1981, v. 24, p. 2586.
76. Bozzolo G., Plastino A.— Ibid., p. 3113.
77. Richardson J. L., Blankenbeller R.— Ibid., 1979, v. 19, p. 496.
78. Halliday I. G., Suranyi P.— Phys. Lett. Ser. B, 1979, v. 85, p. 421; Phys. Rev. Ser. D, 1980, v. 21, p. 1529.
79. Killingbeck J.— J. Phys. Ser. A, 1980, v. 13, p. 49.
80. Hioe F. T., Montroll E. W.— J. Math. Phys., 1975, v. 16, p. 1945.
81. Hioe F. T., McMillen D., Montroll E. W.— Phys. Rept., 1978, v. 43, p. 306.
82. Crutchfield W. Y. II.— Phys. Lett. Ser. B, 1978, v. 77, p. 109.
83. Аллилуев С. П., Малкин И. А.— ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 128.
84. Silverstone H. J.— Phys. Rev. Ser. A, 1978, v. 18, p. 1853.
85. Benassi L., Grecchi V., Harrel F., Simon B.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 42, p. 704.
86. Alexander M. H.— Phys. Rev., 1969, v. 178, p. 34.
87. Hehenberger M., McIntosh H. V., Brandas E.— Ibid. Ser. A, 1975, v. 10, p. 1494.
88. Froelich P., Brandas E.— Ibid., v. 12, p. 1.
89. Damburg R. J., Kolosov V. V.— J. Phys. Ser. B, 1976, v. 9, p. 3149.
90. Дамбург Р. Я., Колосов В. В. Препринт ЛАФИ-022.— Саласпилс, 1980.
91. Oppenheimer J. R.— Phys. Rev., 1928, v. 31, p. 66.
92. Гершензон Е. М., Гольцман Г. Н., Елантьев А. И.— ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 1061.
93. Kaschiev M. S. et al.— Phys. Rev. Ser. A, 1980, v. 22, p. 557.
94. Brandi H. S.— Ibid., 1975, v. 11, p. 1835.
95. Praddaude H. C.— Ibid., 1972, v. 6, p. 1321.
96. Larsen D. M.— Journ. Phys. Chem. Sol., 1968, v. 29, p. 271.
97. Михайлов А. И., Поликанов В. С.— ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 175.
98. Au C. K., Rogers G. W.— Phys. Rev. Ser. A, 1980, v. 20, p. 1820.
99. Зельдович Я. Б.— ЖЭТФ, 1960, т. 39, с. 776.
100. Imbo T., Sukhatme U. Preprint UIC-83-5.— 1983.
101. Буренин А. В.— Опт. и спектр., 1983, т. 55, с. 638.
102. Korsch H. J.— Phys. Lett. Ser. A, 1983, v. 97, p. 77.
103. Korsch H. J., Mohlenkamp R.— Zs. Phys. Ser. A, 1983, v. 314, p. 267.
104. Au C. K., Rogers G. W., Aharonov Y.— Phys. Lett. Ser. A, 1983, v. 95, p. 287.
105. Турбинер А. В.— Письма ЖЭТФ, 1983, т. 38, с. 510.
106. Ушверидзе А. Г.— ЯФ, 1983, т. 38, с. 798.
107. Shaverdyan B. S., Ushveridze A. G.— Phys. Lett. Ser. B, 1983, v. 123, p. 316.