Декабрь 1990 г. *Том 160, вып. 12*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

530.145

ОБ ОДНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Г. А. Варданян, Г. С. Мкртчян

(Ереванский государственный университет)

Рассмотрим одномерное движение электрона в периодическом поле гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U\sin kx,$$

где U и k — произвольные вещественные постоянные.

Уравнение для матрицы плотности гласит [1]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, x', t) = (\hat{H} - \hat{H}'^*)\rho(x, x', t); \tag{1}$$

здесь $\hat{H}'$ — тот же оператор, действующий на x'. Непосредственной проверкой легко убедиться, что (1) имеет точное стационарное решение:

$$\rho(x, x') = C\exp\left\{-\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2\cos\left[\frac{k}{2}(x-x')\right] - \alpha U\sin\left[\frac{k}{2}(x+x')\right]\right\}; \tag{2}$$

здесь C — нормировочная константа, α — произвольная постоянная.

Пусть одномерное движение происходит на отрезке $x \in [0, L]$. Наложим периодические граничные условия

$$\rho(x+L, x') = \rho(x, x'), \quad \rho(x, x'+L) = \rho(x, x'). \tag{3}$$

Подставляя (2) в (3), убеждаемся, что последние условия выполняются, лишь если

$$k = \frac{4\pi}{L}\nu, \quad \nu = 1, 2, 3, \ldots \tag{4}$$

Нормировочная константа C определяется из условия

$$\int_0^L \rho(x, x)\,dx = 1.$$

Откуда находим

$$C = \exp\left[\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2\right]\left[\int_0^L \exp(-\alpha U\sin kx)\,dx\right]^{-1} = \tilde{C}\exp\left[\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2\right],$$

где

$$\widetilde{C} = \left[\int_0^L \exp(-\alpha U \sin kx)\,\mathrm{d}x\right]^{-1}. \tag{5}$$

Окончательно для $\rho(x, x')$ имеем

$$\rho(x, x') = \widetilde{C} \exp\left[-\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2 \left\{\cos\left[\frac{k}{2}(x-x')\right]-1\right\} - \alpha U \sin\left[\frac{k}{2}(x+x')\right]\right]. \tag{6}$$

Найдем функцию Вигнера, соответствующую найденному решению (6). Исходим из общей формулы [2]

$$f(p, x) = \int_0^\infty \rho\left(x+\frac{t}{2},\ x-\frac{t}{2}\right)\exp\left(-\frac{ipt}{\hbar}\right)\frac{\mathrm{d}t}{2\pi\hbar}. \tag{7}$$

Подставляя сюда (6), получаем

$$f(p, x) = \widetilde{C}\exp(-\alpha U \sin kx) \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2\right] \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n\left(\frac{m}{\alpha}\left(\frac{2}{\hbar k}\right)^2\right)\delta\left(p-\frac{n\hbar k}{2}\right), \tag{8}$$

где $I_n(z)$ — модифицированная функция Бесселя порядка n, здесь $\delta(z)$ — дельта-функция, $n=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ Непосредственной проверкой убеждаемся в выполнении условия нормировки [2]:

$$\int f(p, x)\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}x = 1.$$

Используя (8), находим среднее значение импульса электрона:

$$\langle p \rangle = 0.$$

Аналогично с помощью (8) находим

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2\alpha}.$$

Классический предел $f(p, x)$ легко получить, устремив в (8) $\hbar \to 0$. Получаем

$$f(p, x) = \widetilde{C}\left(\frac{\alpha}{2\pi m}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha p^2}{2m} - \alpha U \sin kx\right). \tag{9}$$

Обратим внимание на то, что если параметру α^{-1} придать смысл температуры T (в энергетических единицах), то (9) переходит в классическое распределение Гиббса для частицы в поле $U \sin kx$:

$$f(p, x) = \frac{\widetilde{C}}{(2\pi m T)^{1/2}} \exp\left(-\frac{H(p, x)}{T}\right).$$

Напомним, что $\widetilde{C}$ в этой формуле дается выражением (5).

Выражаем глубокую благодарность Л. П. Питаевскому за обсуждение статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика.— М.: Наука, 1963.
2. *Фейнман Р.* Статистическая механика.— М.: Мир, 1975.