

ЛИТЕРАТУРА

1. Aeckerlein G. Phys. Zschr., 7, 594, 1906.
2. Pauthenier M. Ann. de Physique, 14, 239, 1920.
3. Minard J. J. rech. CNRS, No. 60, 253, 1962.
4. Борн М. Оптика, § 79. ОНТИУ, 1937.
5. Замков В. А. «Оптика и спектроскопия», 15, 654, 1963.
6. Замков В. А. Сб. «Оптические исследования молекулярного движения и межмолекулярных взаимодействий в жидкостях и растворах». Ташкент, 1965, стр. 128.
7. Hellwarth R. W. J. Chem. Phys., 52, 2128, 1970.
8. Brace J. A., Champion J. V. J. Phys., 2, 2408, 1969.
9. Замков В. А., Радкевич В. А. Деп. ВИНТИ № 1710—70 деп., 1970.
10. Замков В. А., Радкевич В. А. «Оптика и спектроскопия», 31, 811, 1971.
11. Guggenheim E. A. Thermodynamics, An Advanced Treatment for Chemists and Physicists, 5 rev. ed. Amsterdam, 1967.

Поступила в редакцию
8.4 1971 г.

Кафедра
молекулярной физики

УДК 530.145

ТХАИ КУАНГ

ОБ ОДНОМ СИНГУЛЯРНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ОДНОРОДНЫХ И ПОСТОЯННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

Уравнение Шредингера для заряженной частицы с зарядом e и массой m в электромагнитном поле, описываемом независимыми от времени потенциалами \vec{A} и φ , как известно, имеет вид

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(\vec{r}, t) = 0, \quad (1)$$

где

$$H = e\varphi + \frac{1}{2m} \left(i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2.$$

Запаздывающая функция Грина уравнения (1) может быть представлена в виде [1]

$$G^{ret}(\vec{r}, \vec{r}', t' - t) = \frac{i}{\hbar} \theta(t - t') D(\vec{r}, \vec{r}', t' - t), \quad (2)$$

где

$$D(\vec{r}, \vec{r}', t' - t) = \sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}) e^{icK_n(t'-t)},$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{при } x > 0 \\ 0 & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (3)$$

Функция $D(\vec{r}, \vec{r}', t' - t)$ удовлетворяет уравнению (1) по переменным \vec{r}, t

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) D = 0 \quad (4)$$

и комплексно-сопряженному уравнению по переменным \vec{r}', t'

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H^* \right) D = 0, \quad (5)$$

а также начальному условию:

$$D(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6)$$

В этой заметке методом [2—4] находится функция Грина уравнения Шредингера в однородных, постоянных и параллельных электрическом и магнитном полях. Функции Грина уравнения Шредингера и уравнения Паули в случае одного только магнитного или электрического поля были рассмотрены в [5—8].

В случае однородных, постоянных и параллельных электрического и магнитного полей с потенциалами $A_2 = Hx_1$, $\varphi = -Ex_3$ уравнение (4) в новых переменных

$$x_i \rightarrow \left(\frac{\hbar c}{eH}\right)^{1/2} x_i \quad (i = 1, 2, 3), \quad t \rightarrow \left(\frac{\hbar}{eHc}\right)^{1/2} t, \quad m \rightarrow \left(\frac{\hbar eH}{c^3}\right)^{1/2} m$$

имеет вид

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} - \frac{ix_1}{m} \frac{\partial}{\partial x_2} + \gamma x_3 - \frac{x_1^2}{2m} + \kappa_0 \right) D = 0, \quad (7)$$

где $\gamma = \frac{E}{H}$, а $(\hbar ceH)^{1/2} \kappa_0 = U_0$ — дополнительная энергия взаимодействия частицы с полем.

Полагая [4]

$$D(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \mathcal{D}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) e^{-\frac{i}{2} [(x_1+x'_1)\xi_2 + \gamma(x_3+x'_3)\tau]}, \quad (8)$$

где $\tau = t' - t$, $\xi_i = x'_i - x_i$, находим уравнение для функции \mathcal{D} :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \frac{i}{2m} \left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - i \frac{\gamma \tau}{2m} \frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{\gamma \xi_3}{2} - \frac{1}{8m} (\gamma^2 \tau^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2) + \kappa_0 \right] \mathcal{D} = 0. \quad (9)$$

Функция \mathcal{D} , согласно (5), также должна удовлетворять уравнению:

$$\left[-i \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\Delta'}{2m} + \frac{i}{2m} \left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial x'_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial x'_1} \right) - \frac{i\gamma\tau}{2m} \frac{\partial}{\partial x'_3} + \frac{\gamma \xi_3}{2} - \frac{1}{8m} (\gamma^2 \tau^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2) + \kappa_0 \right] \mathcal{D} = 0. \quad (10)$$

Переходя в уравнениях (9) и (10) к общим переменным τ, ξ , имеем соответственно:

$$\left[-i \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\gamma^2 \tau^2}{8m} - O(\xi_1, \xi_2, \xi_3) - \frac{i}{2m} \left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} \right) + \frac{i\gamma\tau}{2m} \frac{\partial}{\partial \xi_3} - \frac{\gamma \xi_3}{2} \right] \mathcal{D} = 0, \quad (11)$$

$$\left[-i \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\gamma^2 \tau^2}{8m} - O(\xi_1, \xi_2, \xi_3) + \frac{i}{2m} \left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} \right) - \frac{i\gamma\tau}{2m} \frac{\partial}{\partial \xi_3} + \frac{\gamma \xi_3}{2} \right] \mathcal{D} = 0, \quad (12)$$

где

$$O(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = -\frac{1}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} - \frac{1}{4} (\xi_1^2 + \xi_2^2) \right] - \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} - \kappa_0. \quad (13)$$

Уравнения (11) и (12) должны быть тождественными, поэтому имеем:

$$\left[\frac{i}{m} \left(\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_2} - \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_1} \right) - \frac{i\gamma\tau}{m} \frac{\partial}{\partial \xi_3} + \gamma \xi_3 \right] \mathcal{D} = 0. \quad (14)$$

Задача сводится, таким образом, к решению уравнения:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\gamma^2 \tau^2}{8m} + O(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \right] \mathcal{D} = 0 \quad (15)$$

с начальным условием

$$\mathcal{D}_{\tau=0} = \delta(\xi_1) \delta(\xi_2) \delta(\xi_3). \quad (16)$$

Уравнение (15) решается методом разложения решения по собственным функциям оператора $O(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ [4, 9]

$$F_{nn'k}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{(2\pi)^2} e^{-\frac{\xi_1^2}{4}} L_n^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\xi_1^2}{2} \right) e^{-\frac{\xi_2^2}{4}} L_{n'}^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\xi_2^2}{2} \right) e^{ik\xi_3}$$

соответствующим собственным значениям

$$O_{nn'k} = \frac{n + n' + \frac{1}{2}(1 + k^2)}{m} - \kappa_0,$$

где $L_n^{-\frac{1}{2}}(x)$ — полином Лагерра; $n, n' = 0, 1, 2, \dots$; $k = -\infty \dots +\infty$. Функции $F_{nn'k}$ нормированы условием [3]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dk F_{nn'k}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \delta(\xi_1) \delta(\xi_2) \delta(\xi_3). \quad (17)$$

Коэффициент разложения $\mathcal{D}_{nn'k}(\tau)$ удовлетворяет уравнению

$$\left[i \frac{d}{d\tau} + \frac{\gamma^2 \tau^2}{8m} + O_{nn'k} \right] D_{nn'k}(\tau) = 0,$$

решением которого, с учетом (16) и (17), является

$$D_{nn'k}(\tau) = e^{i \left(\frac{\gamma^2 \tau^3}{24m} + O_{nn'k} \tau \right)}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{n'=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \mathcal{D}_{nn'k}(\tau) F_{nn'k}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \\ &= \left(\frac{i}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\left(\frac{m}{\tau} \right)^{\frac{1}{2}}}{2 \sin \left(\frac{\tau}{2m} \right)} e^{-i \left[\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{4} \operatorname{ctg} \left(\frac{\tau}{2m} \right) + \frac{m\xi_3^2}{2\tau} - \frac{\gamma^2 \tau^3}{24m} + \kappa_0 \tau \right]}. \end{aligned} \quad (18)$$

При получении (18) были использованы формулы [2, 9, 10]

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{-\frac{1}{2}}(x) t^n &= (1-t)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{xt}{1-t}}, \quad |t| < 1, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(ax^2 + 2bx)} &= \left(\frac{\pi i}{a} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i \frac{b^2}{a}}. \end{aligned}$$

Нетрудно проверить, что решение (18) удовлетворяет и уравнению (14).

Чтобы восстановить явную зависимость от E и H , надо умножить выражение (18) на $\left(\frac{eH}{\hbar c}\right)^{\frac{3}{2}}$ и заменить ξ_i^2 , τ , m на $\xi_i^2 \left(\frac{eH}{\hbar c}\right)$, $\tau \left(\frac{eHc}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$, $m \left(\frac{c^3}{\hbar eH}\right)^{\frac{1}{2}}$. В результате имеем:

$$D = \left(\frac{mi}{2\pi\hbar\tau}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{eH\tau}{2mc}\right) \frac{1}{\sin\left(\frac{eH\tau}{2mc}\right)} e^{-i\frac{m(\xi_1^2 + \xi_2^2)}{2\hbar\tau} \left(\frac{eH\tau}{2mc}\right) \text{ctg}\left(\frac{eH\tau}{2mc}\right)} \times \\ \times e^{-i\left[\frac{m\xi_3^2}{2\hbar\tau} - \frac{(eE)^2\tau^3}{24m\hbar} + \frac{U_0}{\hbar}\tau\right]}. \quad (19)$$

Из (2), (8) и (19) получаем:

$$G^{ret}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(-\tau) D e^{-\frac{ie}{2\hbar} \left[\frac{H}{c}(x_1+x'_1)\xi_3 + E(x_3+x'_3)\tau \right]}. \quad (20)$$

При стремлении H к нулю из (20) получается функция Грина уравнения Шредингера в однородном, постоянном электрическом поле [6, 7]:

$$G^{ret}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \frac{i}{\hbar} \theta(-\tau) D_E e^{\frac{-ieE(x_3+x'_3)\tau}{2\hbar}},$$

где

$$D_E = \left(\frac{mi}{2\pi\hbar\tau}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{m(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)}{2\hbar\tau}} e^{i\frac{(eE)^2\tau^3}{24m\hbar}}.$$

При стремлении E к нулю из (20) получается соответствующий результат [8], а при стремлении E , H и U_0 к нулю выражение (20) переходит в известную временную функцию Грина уравнения Шредингера для свободной частицы [11].

Функция Грина (матрица) уравнения Паули может быть получена из (20) заменой U_0 на $\mu_0 H \sigma_3$, где μ_0 — собственный магнитный момент частицы, а σ_3 — матрица Паули.

Автор выражает благодарность А. Б. Куканову за предложение темы и обсуждение результатов, а также проф. В. Л. Бонч-Бруевичу за полезные советы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Соколов А. А. Введение в квантовую электродинамику. М., 1958.
2. Géhéniau J. Physica, **16**, 822, 1950.
3. Demeur M. Physica, **17**, 933, 1951.
4. Demeur M. Academie R. de Belgique, **28**, Fasc. 5, 5, 1953.
5. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г. «Физика твердого тела», **2**, 489, 1960.
6. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. М., 1957.
7. Feynman R. P., Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. N.—Y., 1965.
8. Кассандров В. В. Дипломная работа, МГУ, 1970.
9. Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. М., 1953.
10. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1963.
11. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1966.

Поступила в редакцию
5.4 1971 г.

Кафедра
теоретической физики