Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 3—1972

УДК 530.145

В. В. КАССАНДРОВ

ФУНКЦИИ ГРИНА УРАВНЕНИЙ ТИПА ШРЕДИНГЕРА — ПАУЛИ В СЛУЧАЕ ПОСТОЯННЫХ ОДНОРОДНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

В работе получено замкнутое аналитическое выражение для временной запаздывающей функции Грина уравнений типа Шредингера — Паули в постоянных, однородных и произвольно расположенных относительно друг друга электрических и магнитных полях. Постановка задачи и представления в виде ряда или интеграла статистических функций Грина и их Фурье-образов имеются в [1 и 2] для магнитного и [3 и 4] для электрического поля. Случай одного магнитного поля рассматривался ранее в [5]. Случай параллельных электрического и магнитного полей был рассмотрен в работе [5].

Общее рассмотрение

Пусть имеем обобщенное уравнение движения вида

$$\{\hat{E} - H(\hat{\vec{p}})\}\,\Psi(\vec{r},\ t) = 0, \tag{1}$$

где $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi(\vec{r})$, $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})$ — операторы энергии и обобщенного импульса во внешнем поле с потенциалами $\Phi(\vec{r})$ и $\vec{A}(\vec{r})$.

Решение соответствующего неоднородного уравнения

$$\{\hat{E} - H(\hat{\vec{p}})\}\,\overline{\Psi}(\vec{r},\ t) = -\rho(\vec{r},\ t) \tag{2}$$

может быть, как известно (см., например, [7]), представлено в виде

$$\overline{\Psi}(\vec{r},\ t) = \Psi(\vec{r},\ t) + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt' \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d^3x'\rho(\vec{r}'\ t')\sum_{\{n\}}\psi_n^*(\vec{r}')\,\psi_n(\vec{r})\,e^{icK_n(t'-t)}. \tag{3}$$

Здесь $\psi_n(\vec{r})$ — собственные функции оператора $H(\hat{\vec{p}}) + e\Phi(\vec{r})$, соответствующие собственным значениям K_n; $\Psi(\vec{r},\ t)$ — полное решение уравнения (1).

Из (3) следует, что запаздывающая функция Грина для уравнения (2) может быть выбрана в виде

$$G^{\mathrm{ret}} = \frac{i}{\hbar}\theta(-\tau)\,D(\tau,\ \vec{r},\ \vec{r}'),$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, \text{ при } x > 0, \\ 0, \text{ при } x < 0; \end{cases} \qquad \tau = t' - t,$$

причем функция $D(\tau, \vec{r}, \vec{r}')$ должна удовлетворять уравнениям

$$\{\hat{E} - H(\hat{\vec{p}})\} D(\tau, \vec{r}, \vec{r}') = 0, \quad \{\hat{E}^{*\prime} - H(\hat{\vec{p}}^{*\prime})\} D(\tau, \vec{r}, \vec{r}') = 0,$$

с начальным условием

$$D(0, \vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{R}) \tag{4}$$

$\vec{R} = \vec{r}' - \vec{r} = \{\xi, \eta, \zeta\}$. Здесь $\hat{E}^* \doteq -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - e\Phi(\vec{r}')$,

$\hat{\vec{p}}^{*\prime} = i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}')$, функция H предполагается действительной и разложимой в ряд Тейлора. Тогда для вспомогательной функции

$$\tilde{D}(\tau, \vec{r}, \vec{r}') = D(\tau, \vec{r}, \vec{r}') \exp\left\{-\frac{ie}{\hbar c}\varphi(\tau, \vec{r}, \vec{r}')\right\}$$

($\varphi(\tau, \vec{r}, \vec{r}')$ — произвольная функция) получим систему уравнений:

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{e}{2}(\tilde{\Phi} + \tilde{\Phi}') + \frac{1}{2}\left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}\right) + H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}'\right)\right]\right\}\tilde{D} = 0,$$

$$\left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}\right) + e\tilde{\Phi}\right]\tilde{D} = \left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\tilde{\vec{A}}'\right) + e\tilde{\Phi}'\right]\tilde{D},$$

$$\tilde{\Phi} = \Phi(\vec{r}) + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t}, \quad \tilde{\vec{A}} = \vec{A}(\vec{r}) - \vec{\nabla}\varphi,$$

$$\tilde{\Phi}' = \Phi(\vec{r}') - \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t'}, \quad \tilde{\vec{A}}' = A(\vec{r}') + \vec{\nabla}'\varphi. \tag{5}$$

В общем случае однородных полей удается аналогично работам [8—10] выбрать функцию $\varphi(\tau, \vec{r}, \vec{r}')$ так, чтобы потенциалы (5) оказались зависящими только от $(\tau, \vec{R})$, а начальное условие (4) не менялось.

В самом деле, пусть имеются одновременно поля $\vec{\mathfrak{R}} = \{0, 0, \mathfrak{R}\}$ и $\vec{\mathfrak{E}} = \{\mathfrak{E}_\perp, 0, \mathfrak{E}_\parallel\}$, тогда для потенциалов можем взять:

$$\Phi(\vec{r}) = -\mathfrak{E}_\perp x - \mathfrak{E}_\parallel z; \quad \vec{A}(\vec{r}) = \{0, 0, \mathfrak{R}\}. \tag{6}$$

Положим функцию φ равной

$$\varphi(\tau, \vec{r}, \vec{r}') = \int_{M'}^{M} \vec{A}(\vec{r}'')\, d\vec{r}'' - \int_{M', t'}^{M, t} \Phi(\vec{r}'')\, dt'',$$

где интегрирование ведется по прямой от точки $M'(x', y', z')$ в момент t' до точки $M(x, y, z)$ в момент t; при этом, учитывая (6) и полагая $\vec{r}'' = \vec{r}' - \vec{R}u$, $t'' = t' - \tau u$, получим

$$\varphi = -\frac{\mathfrak{E}_\parallel}{2}c\tau(z' + z) - \frac{\mathfrak{E}_\perp}{2}c\tau(x' + x) - \frac{\mathfrak{R}}{2}\eta(x' + x).$$

Тогда потенциалы (5) принимают вид

$$\widetilde{\Phi}(\vec{R}) = -\widetilde{\Phi}'(\vec{R}) = \frac{\mathfrak{E}_{\parallel}}{2}\zeta + \frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{2}\xi, \tag{7}$$

$$\widetilde{\vec{A}}(\tau, \vec{R}) = -\widetilde{\vec{A}}'(\tau, \vec{R}) = \left\{\frac{\mathfrak{N}}{2}\eta + \frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{2}c\tau, \; -\frac{\mathfrak{N}}{2}\xi, \; \frac{\mathfrak{E}_{\parallel}}{2}c\tau\right\}. \tag{8}$$

Для функции $D(\tau, \vec{R})$ получим окончательно следующую систему уравнений:

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{1}{2}\left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\widetilde{\vec{A}}\right) + H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} + \frac{e}{c}\widetilde{\vec{A}}\right)\right]\right\}\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = 0,$$

$$\left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} - \frac{e}{c}\widetilde{\vec{A}}\right) + e\widetilde{\Phi}\right]\widetilde{D} = \left[H\left(i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{R}} + \frac{e}{c}\widetilde{\vec{A}}\right) - e\widetilde{\Phi}\right]\widetilde{D}, \tag{9}$$

$$\widetilde{D}(0, \vec{R}) = \delta(\vec{R})$$

$$\left(\text{так как, } \delta(\vec{R})\exp\frac{ie\mathfrak{N}}{2\hbar c}\eta(x' + x) \equiv \delta(\vec{R})\right).$$

Случай уравнений типа Шредингера — Паули

Пусть $H(\hat{\vec{p}}) = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + U_0$, тогда при $U_0 = 0$ мы имеем уравнение Шредингера, при $U_0 = \frac{e\hbar}{2mc}\mathfrak{N}\sigma_z$ — уравнение Паули $\left(\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right)$.

Система (9) с потенциалами (7, 8) принимает тогда вид:

$$\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{e^2\mathfrak{E}_{\parallel}^2}{2mc^2}\left(\frac{c\tau}{2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_R + \frac{e^2\mathfrak{N}^2}{2mc^2}\frac{\sigma'}{2} + U_0\right\}\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = 0, \tag{10}$$

$$i\frac{\hbar}{mc}\left\{\mathfrak{N}\left(\eta + \frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{\mathfrak{N}}c\tau\right)\frac{\partial}{\partial\xi} - \mathfrak{N}\xi\frac{\partial}{\partial\eta} + \mathfrak{E}_{\parallel}c\tau\frac{\partial}{\partial\zeta}\right\}\widetilde{D} = (\mathfrak{E}_{\parallel}\zeta + \mathfrak{E}_{\perp}\xi)\widetilde{D}, \tag{11}$$

$$\widetilde{D}(0, \vec{R}) = \delta(\vec{R}).$$

Здесь $\sigma' = \frac{1}{2}\left[\xi^2 + \left(\eta + \frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{\mathfrak{N}}c\tau\right)^2\right]$.

Решение ищем методом разделения переменных в уравнении (11), полагая

$$\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = T(\tau)X(\tau, \xi)Y(\tau, \eta)Z(\tau, \zeta).$$

Тогда простейшее возможное решение, удовлетворяющее (11), будет:

$$\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = T(\tau)e^{i\psi(\tau)\sigma'}\exp\left\{i\frac{mc}{\hbar}\left(\frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{\mathfrak{N}}\right)\eta\right\}\exp\left\{-\frac{i}{2}\frac{m\zeta^2}{\hbar\tau}\right\}, \tag{12}$$

где $T(\tau)$, $\psi(\tau)$ — произвольные пока функции τ.

Подставляя (12) в уравнение (10) и переходя для удобства к новой переменной $\xi \to \sigma'$, получим для функций $T(\tau)$, $\psi(\tau)$ уравнения вида

$$\frac{\partial\psi}{\partial\tau} = \frac{\hbar}{m}\psi^2 + \frac{e^2\mathfrak{N}^2}{4mc^2\hbar}, \tag{13}$$

$$\frac{\partial T}{\partial\tau} = \left\{-\frac{1}{2\tau} + \frac{\hbar}{m}\psi(\tau) + \frac{ie^2\mathfrak{E}_{\parallel}^2}{8m\hbar}\tau^2 + \frac{imc^2}{2\hbar}\left(\frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{\mathfrak{N}}\right)^2 + \frac{iU_0}{\hbar}\right\}T. \tag{13a}$$

Решая уравнение (13), получаем простейшее решение в виде

$$\psi(\tau) = -\frac{e\mathfrak{N}}{2\hbar c}\operatorname{ctg}\frac{e\mathfrak{N}}{2mc}\tau, \tag{14}$$

тогда интегрируя уравнение (13a), имеем:

$$T(\tau) = \frac{C}{\sqrt{\tau}\sin\frac{e\mathfrak{N}}{2mc}\tau}\exp\left\{i\frac{U_0}{\hbar}\tau\right\}\exp\left\{\frac{i}{2}\frac{mc}{\hbar}\left(\frac{\mathfrak{E}_{\perp}}{H}\right)^2 c\tau\right\}\cdot\exp\left\{\frac{ie^2\mathfrak{E}_{\parallel}^2}{24m\hbar}\tau^3\right\}. \tag{15}$$

Подставляя (14), (15) в (12) и вводя обозначения

$$\chi^2 = \frac{e\mathfrak{E}}{2\hbar c}, \quad \varkappa^2 = \frac{e\mathfrak{N}}{2\hbar c}, \quad \gamma = \frac{mc}{\hbar}; \quad \omega_0 = \frac{1}{\hbar}U_0; \quad \varphi_\tau = \frac{\varkappa^2}{\gamma}c\tau;$$

$$\sigma = \frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2),$$

получим для $\widetilde{D}(\tau, \vec{R})$:

$$\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = \frac{C}{\sqrt{\tau}\sin\varphi_\tau}e^{i\omega_0\tau}e^{-\frac{i\gamma\zeta^2}{2c\tau}}e^{-i\varkappa^2\sigma\operatorname{ctg}\varphi_\tau}\times$$

$$\times\exp\left\{\frac{i}{6\gamma}\chi_{\parallel}^4(c\tau)^3\right\}\exp\left\{i\gamma\frac{\chi_{\perp}^2}{\varkappa^2}\left(\eta + \frac{\chi_{\perp}^2}{\varkappa^2}\frac{c\tau}{2}\right)(1 - \varphi_\tau\operatorname{ctg}\varphi_\tau)\right\}.$$

Постоянную C определяем из условия:

$$\lim_{\substack{\tau\to 0\\ <0}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{D}(\tau, \vec{R})\,d\vec{R} = \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(\vec{R})\,d\vec{R} = 1.$$

После этого окончательно получаем

$$\widetilde{D}(\tau, \vec{R}) = \left(\frac{i}{\pi}\right)^{3/2}\frac{\varphi_\tau}{\sin\varphi_\tau}e^{i\omega_0\tau}e^{\frac{i\gamma\zeta^2}{2c\tau}}\quad e^{-i\varkappa^2\sigma\operatorname{ctg}\varphi_\tau}\left(\frac{\gamma}{2c\tau}\right)^{3/2}e^{\frac{i}{6\gamma}\chi_{\parallel}^4(c\tau)^3}\times$$

$$\times\exp\left\{i\gamma\frac{\chi_{\perp}^2}{\varkappa^2}\left(\eta + \frac{\chi_{\perp}^2}{\varkappa^2}\frac{c\tau}{2}\right)(1 - \varphi_\tau\operatorname{ctg}\varphi_\tau)\right\}.$$

При этом запаздывающая функция Грина

$$G^{\text{ret}} = \frac{i}{\hbar}\theta(-\tau)\widetilde{D}(\tau, \vec{R})\exp - i\{\chi_{\parallel}^2 c\tau(z' + z) + \chi_{\perp}^2 c\tau(x' + x) + \varkappa^2\eta(x' + x)\}.$$

В случае уравнения Шредингера $e^{i\omega_0\tau}\rightrightarrows 1$, причем в частных случаях получаем:

$$\mathfrak{N} = 0, \quad \mathfrak{E} \neq 0, \quad \chi^2 = \frac{e\mathfrak{E}}{2\hbar c};$$

$$G^{ret} = \frac{i}{\hbar}\theta(-\tau)\left(\frac{i}{\pi}\right)^{3/2}\left(\frac{\gamma}{2c\tau}\right)^{3/2}e^{-\frac{i\gamma R^2}{2c\tau}}\exp\left\{\frac{i}{6\gamma}\chi^4(c\tau)^3\right\}\times$$

$$\times\exp - i\{\chi^2\, c\tau(z' + z)\}; \tag{16}$$

$$\mathfrak{E}=0,\quad \mathfrak{N}\neq 0,\quad \varkappa^2=\frac{e\mathfrak{N}}{2\hbar c};\qquad \varphi_\tau=\frac{\varkappa^2}{\gamma}c\tau,\qquad \sigma=\frac{\xi^2+\eta^2}{2};$$

$$G^{ret}=\frac{i}{\hbar}\,\theta(-\tau)\left(\frac{i}{\pi}\right)^{3/2}\frac{\varphi_\tau}{\sin\varphi_\tau}\left(\frac{\gamma}{2c\tau}\right)^{3/2}e^{-\frac{i\gamma\zeta^2}{2c\tau}}\,e^{-i\varkappa^2\sigma\operatorname{ctg}\varphi_\tau}\,e^{-i\varkappa^2\eta(x'+x)}. \tag{17}$$

Выражение (17) было получено нами ранее [5] по другой методике, аналогичной работам [8—10]. Случай $\mathfrak{E}_\perp=0, \mathfrak{E}_\parallel=0, \mathfrak{N}\neq 0$, т. е. случай параллельных полей, рассмотрен в работе [6]. В случае уравнения Паули $e^{i\omega_0\tau}\rightleftarrows e^{-i\varphi_\tau\sigma_z}=\cos\varphi_\tau-i\sigma_z\sin\varphi_\tau$ (так как $\sigma_z^2=1$), поэтому:

$$G^{ret}=\frac{i}{\hbar}\,\theta(-\tau)\left(\frac{i}{\pi}\right)^{3/2}\varphi_\tau(\operatorname{ctg}\varphi_\tau-\sigma_z)\left(\frac{\gamma}{2c\tau}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{i\gamma\zeta^2}{2c\tau}\right)\times$$

$$\times\exp(-i\varkappa^2\sigma\operatorname{ctg}\varphi_\tau)\exp\left\{\frac{i}{6\gamma}\chi_\parallel^4(c\tau)^3\right\}\exp\left\{i\gamma\frac{\chi_\perp^2}{\varkappa^2}\left(\eta+\frac{\chi_\perp^2}{\varkappa^2}\cdot\frac{c\tau}{2}\right)\times\right.$$

$$\left.\times(1-\varphi_\tau\operatorname{ctg}\varphi_\tau)\right\}\exp-i\{\chi_\parallel^2c\tau(z'+z)+\chi_\perp^2c\tau(x'+x)+\varkappa^2\eta(x'+x)\}. \tag{18}$$

В частных случаях:

$\mathfrak{N}=0,\quad G^{ret}_{\text{Паули}}=G^{ret}_{\text{Шредингера}}$ (см. 16)); $\mathfrak{E}=0, \mathfrak{N}\neq 0$,

$$G^{ret}=\frac{i}{\hbar}\,\theta(-\tau)\left(\frac{i}{\pi}\right)^{3/2}\varphi_\tau(\operatorname{ctg}\varphi_\tau-\sigma_z)\left(\frac{\gamma}{2c\tau}\right)^{3/2}e^{-\frac{i\gamma\zeta^2}{2c\tau}}\,e^{-i\varkappa^2\sigma\operatorname{ctg}\varphi_\tau}\,e^{-i\varkappa^2\eta(x'+x)}.$$

Таким образом, функция Грина для уравнения Паули может быть представлена в виде двух слагаемых, первое из которых ответственно за все сингулярности, второе же выражает матричную структуру, имея лишь одну δ-образную сингулярность при $\tau\to 0$.

Временные запаздывающие функции Грина вида (17) и (18) были использованы в [5].

Автор благодарен Б. А. Лысову за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л., Миронова А. Г. «Физика твердого тела», **2**, 489, 1960.
2. Цицишвили Е. Г. «Физика твердого тела», 8, 1193, 1966.
3. Касаманян З. А. «Вести. Моск. ун-та», физ., астрон., № 6, **41**, 1966.
4. Келдыш Л. В., Вавилов В. С., Брицын К. И. Inter Confer on Semicon. Phys. Prag., 1960, p. 824.
5. Кассандров В. В. Дипломная работа. МГУ, 1971.
6. Тхай Куанг. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., **12**, № 2, 1972.
7. Соколов А. А. Введение в квантовую электродинамику. М., 1958.
8. Demeur M. Physica, **12**, 933, 1951.
9. Gehéniau J. Physica, **16**, 822, 1950.
10. Demeur M. Academie r. d. Belgique, **28**, Fasc. 5, 1953.

Поступила в редакцию
7.5 1971 г.

Кафедра
теоретической физики