УДК 530.145.6

О ЗАВИСИМОСТИ ПОТЕНЦИАЛА ОТ ХАРАКТЕРИСТИК ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В. Б. Гостев, А. Р. Френкин

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

В настоящей работе изучается зависимость потенциалов центрального поля от характеристик дискретного спектра уравнения Шредингера (УШ) при фиксированной спектральной плотности непрерывного спектра, если он имеется.

Рассмотрим сначала задачу об изменении спектральных характеристик радиального УШ

$$\frac{d^2}{dr^2}\varphi(E, r) + \{2E - V_l(r)\}\varphi(E, r) = 0, \quad V_l(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \qquad (1)$$

с удерживающим потенциалом $V(r)$ произвольного вида ($\lim\limits_{r\to\infty} V(r) = \infty$). Для таких потенциалов при любом фиксированном моменте l ($l = 0, 1, \ldots$) уравнение (1) имеет чисто дискретный спектр с бесконечным числом уровней энергии. Спектр E_{ln} и нормировочные постоянные C_{ln} регулярных в нуле ($\varphi(E, r) \underset{r\to 0}{\simeq} r^{l+1}$) собственных функций $\varphi(E_{ln}, r)$ однозначно определяются видом потенциала $V(r)$.

Исследуем изменение потенциала $V(r)$, который будем называть опорным, и регулярных решений УШ (1) $\varphi(E, r)$ при переходе от спектральных характеристик E_{ln}, C_{ln} ($n = 0, 1, \ldots$) к новым характеристикам $\tilde{E}_{ln}$, $\tilde{C}_{ln}$ ($n = 0, 1, \ldots$). Новый (измененный) потенциал $\tilde{V}(r) = V(r) + \Delta V(r)$ и регулярные решения $\tilde{\varphi}(E, r)$ УШ с этим потенциалом, однозначно определяемые заданием $\tilde{E}_{ln}$, $\tilde{C}_{ln}$, могут быть получены с помощью уравнения Гельфанда — Левитана [1, 2], которое при изменении конечного числа спектральных характеристик решается в замкнутом виде. При этом возможны три различных случая, последовательность которых соответствует определенной иерархии асимптотического поведения поправки к потенциалу $\Delta V(r)$.

1. Изменение числа состояний в любой конечной области спектра $0 < E < E_l^0$ на величину $\Delta N = N_2 - N_1$. Этот случай соответствует выключению N_1 состояний с энергиями E_{ln_i} и нормировочными постоянными C_{ln_i} ($i = 1, \ldots, N_1$) и одновременному включению N_2 новых состояний с энергиями E'_{li} и нормировочными постоянными C'_{li} ($i = N_1 + 1, \ldots, N_1 + N_2$; $E'_{li} \in \tilde{E}_{ln}$, $C'_{li} \in \tilde{C}_{ln}$, $n = 0, 1, \ldots$). Отметим, что этот случай для потенциалов степенного роста $V(r) \underset{r\to\infty}{\simeq} r^{\alpha}$, $\alpha > 0$ при $|\Delta N| = 1$ подробно рассмотрен в работе [3].

2. Совместное выключение и включение одинакового числа состояний, т. е. произвольное смещение конечного числа уровней с изменением нормировочных постоянных (см. также работу [4]). Этот случай формально соответствует случаю 1 при $\Delta N = 0$, $N_1 = N_2 \neq 0$, однако в отличие от него не имеет классического аналога.

3. Изменение нормировочных постоянных C_{ln_i} для N_3 произвольных состояний УШ с опорным потенциалом $V(r)$ на величины $\Delta C_{ln_i} > -C_{ln_i}$ без изменения числа состояний и смещения уровней

энергии ($\Delta C_{ln_i} = -C_{ln_i}$ соответствует выключению состояния с энергией E_{ln_i}).

В связи с тем, что метод обратной задачи достаточно разработан [1], приведем решение для любого конечного числа $N = N_1 + N_2 + N_3$ изменений элементов спектральных характеристик УШ. Регулярное решение $\tilde{\varphi}(E, r)$ УШ с потенциалом $\tilde{V}(r)$ и поправка к потенциалу $\Delta V(r)$ равны:

$$\tilde{\varphi}(E, r) = \varphi(E, r) - \frac{1}{\Delta(r)} \sum_{i,j=1}^{N} A_{ij}(r) b_i \varphi(\tilde{E}_{ln_i}, r) I(\tilde{E}_{ln_j}, E, r), \tag{2}$$

$$\Delta V(r) = -2 \frac{d^2}{dr^2} \ln \Delta(r). \tag{3}$$

Здесь $\Delta(r)$ — определитель Фредгольма уравнения Гельфанда — Левитана с вырожденным ядром:

$$\Delta(r) = \det a_{ij}(r), \tag{4}$$

$$a_{ij}(r) = \delta_{ij} + b_i I(\tilde{E}_{ln_i}, \tilde{E}_{ln_j}, r), \tag{5}$$

$$I(E_1, E_2, r) = \int_0^r \varphi(E_1, x) \varphi(E_2, x)\, dx, \tag{6}$$

$A_{ij}(r)$ — алгебраическое дополнение элемента $a_{ij}(r)$ матрицы (5), b_i — величина изменения нормировочной постоянной или нормировочная постоянная вновь включенного состояния. Суммирование по индексам i, j $(1 \leqslant i, j \leqslant N)$ соответствует всем рассмотренным изменениям элементов спектральных характеристик.

Для физических приложений наибольший интерес представляет поведение $\tilde{\varphi}(\tilde{E}_{ln}, r)$ и $\Delta V(r)$ при $r \to 0$ и $r \to \infty$. При малых r регулярные собственные функции, как и должно быть, имеют вид $\tilde{\varphi}(\tilde{E}_{ln}, r) \underset{r \to 0}{\simeq} r^l +$ а поправка к потенциалу равна

$$\Delta V(r) \underset{r \to 0}{\simeq} -4(l+1) r^{2l+1} \sum_{1 \leqslant i \leqslant N} b_i + O(r^{4l+3}), \tag{7}$$

что при $l = 0$ и $\sum_{1 \leqslant i \leqslant N} b_i \neq 0$ соответствует существенному искажению опорных потенциалов $V(r)$ (особенно степенного вида $V(r) \underset{r \to 0}{\sim} r^\gamma$ при $\gamma \geqslant 1$) вблизи начала координат. Специально отметим, что при $l = 0$ членов $O(r^2)$ в разложении поправки к потенциалу $\Delta V(r)$ нет.

Исследование асимптотического поведения $(r \to \infty)$ собственных функций $\tilde{\varphi}(\tilde{E}_{ln}, r)$ и поправки к потенциалу $\Delta V(r)$ значительно сложнее. Это связано с тем, что определитель Фредгольма (4) при $r \to \infty$ в основном зависит от поведения диагональных элементов матрицы (5), точнее от наличия или отсутствия в этих элементах экспоненциальных множителей вида $\exp\left\{\pm 2 \int_{r_0}^{r} \sqrt{V_l(r) - 2E}\, dx\right\}$ (r_0 — наибольший из корней уравнения $V_l(r_0) = 2E$), определяющих асимптотику регулярных решений $\varphi(E, r)$ УШ (1) для любого монотонно растущего (при $r > \tilde{r} \geqslant 0$) опорного потенциала $V(r)$. Эти множители присутствуют в диагональных элементах $a_{ii}(r)$ матрицы (5) лишь в случаях выключе-

ния состояний (для $1 \leqslant i \leqslant N_1$ знак минус в экспоненте) или включения новых состояний (для $N_1+1 \leqslant i \leqslant N_1+N_2$ знак плюс в экспоненте) и могут быть вынесены из определителя Фредгольма, так как подобные множители всегда имеются ($1 \leqslant i, j \leqslant N$) и в недиагональных элементах матрицы (5). После двукратного дифференцирования $\ln\Delta(r)$ по r (3) соответствующие этим экспоненциальным множителям члены в случаях 1 и 2 дают основной вклад в поправку к потенциалу $\Delta V(r)$ при $r \to \infty$.

В трех рассмотренных случаях изменения спектральных характеристик УШ имеется сходное асимптотическое поведение всех новых собственных функций $\tilde{\varphi}(\tilde{E}_{ln}, r)$, аналогичное (то же самое экспоненциальное убывание) асимптотическому поведению опорных функций $\varphi(E_{ln}, r)$, однако асимптотики поправок к потенциалу $\Delta V(r)$ в случаях 1, 2, 3 существенно различаются.

В случае 1

$$\Delta_1 V(r) \underset{r\to\infty}{\simeq} -2\Delta N \frac{V_l'(r)}{V_l^{1/2}(r)} \tag{8}$$

(отметим, что для правильного перехода к классической механике в формуле (8) оставлен малый при $r \to \infty$, по сравнению с потенциалом $V(r)$, центробежный член $l(l+1)r^{-2}$).

В случае 2

$$\Delta_2 V(r) \underset{r\to\infty}{\simeq} 2\frac{V'(r)}{V^{3/2}(r)} \left\{ \sum_{1\leqslant i\leqslant N_1} E_{ln_i} - \sum_{N_1+1\leqslant i\leqslant N_1+N} \tilde{E}_{ln_i} \right\} \tag{9}$$

(при равенстве нулю выражения, стоящего в скобках, формула (9) требует уточнения и должны быть учтены следующие члены разложения по $E/V(r)$).

В случае 3 поправка к потенциалу $\Delta V(r)$ экспоненциально убывает с ростом r:

$$\Delta_3 V(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \exp\left\{-2\int_{\tilde{r}_0}^{r} V^{1/2}(x)\,dx\right\}, \quad V(\tilde{r}_0) \approx 2E_l^0. \tag{10}$$

Как видно из приведенных формул (8)—(10), при $r \to \infty$ поправка к потенциалу $\Delta V(r)$ более чувствительна к изменению числа состояний (случай 1), а при $\Delta N = 0$, $N_1 = N_2 \neq 0$ к изменению энергий (случай 2), чем к изменению только одних нормировочных постоянных. Изменение же нормировочных постоянных существенно влияет на поведение $\Delta V(r)$ лишь вблизи начала координат, причем одинаково во всех трех случаях (см. (7)). Отметим, что в отличие от случаев 2 и 3, когда $\Delta_{2,3}V(r) \underset{r\to\infty}{\to} 0$ для любых опорных потенциалов, в случае 1 поправка к потенциалу $\Delta_1 V(r)$ возрастает при $r \to \infty$ для потенциалов $V(r)$, растущих быстрее, чем r^2 (при $V(r) = r^2$, $\Delta V(r) \underset{r\to\infty}{\to} \mathrm{const}$ [5]). Однако при любых изменениях конечного числа спектральных характеристик УШ с произвольным удерживающим потенциалом $V(r)$ отношение $\left|\frac{\Delta V(r)}{V(r)}\right| \underset{r\to\infty}{\to} 0$, что соответствует дискретной природе спектра и совпадению спектральных характеристик УШ для потенциалов $\tilde{V}(r)$ и $V(r)$ при энергиях $E > E_l^0$. При этом для $r \to \infty$ графики потенциалов $\tilde{V}(r)$ и $V(r)$ сближаются по r по закону

$$\delta r = \left|\frac{\Delta V(r)}{V'(r)}\right| \underset{r\to\infty}{\to} 0, \quad V(r+\delta r) = \tilde{V}(r).$$

В целях уяснения соответствия с классической механикой рассмотрим асимптотическое поведение поправки к потенциалу $\Delta_1 V(r)$ при изменении числа состояний. В этом случае асимптотика величины $\Delta_1 V(r)$ (8) определяется лишь поведением опорного потенциала $V(r)$ независимо от изменения энергии состояний. Тогда для больших радиальных квантовых чисел n, которые отвечают энергиям $E_{ln} \gg E_l^0$, разность энергий $\Delta E = E_{l,n+\Delta N} - E_{ln}$ состояний с номерами n и $n+\Delta N$ равна $(E = E_{ln})$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \langle \Delta_1 V(r) \rangle, \quad \Delta E = \frac{dE(n)}{dn} \Delta N. \tag{11}$$

Здесь усреднение берется по собственным функциям $\varphi(E_{ln}, r)$ состояния с номером n $(E_{l,n+\Delta N} = E_{ln})$. При $E_{ln} \gg E_l^0$ вместо точного значения собственной функции $\varphi(E_{ln}, r)$ в (11) можно взять ее квазиклассическое приближение. Тогда формула (11) соответствует известному выражению классической механики [6]

$$2 \int\limits_{r_{\min}(E)}^{r_{\max}(E)} \left\{ 2E - V(r) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 r^{-2} \right\}^{-1/2} dr = T(E), \tag{12}$$

где $r_{\min}(E)$ и $r_{\max}(E)$ — классические точки поворота, а

$$T(E) = 2\pi \frac{dn(E)}{dE}$$

период радиальных колебаний в центральном поле (обычно траектория не замкнута). В формуле (12), как принято в квазиклассике [7], произведена замена центробежного члена $l(l+1)r^{-2} \to (l+1/2)^2 r^{-2}$.

Таким образом, асимптотическое поведение поправки к потенциалу $\Delta_1 V(r)$ определяет зависимость периода классического движения T от энергии E.

Рассмотренный метод может быть использован и для исследования зависимости регулярного решения $\tilde{\varphi}(E, r)$ и поправки к потенциалу $\Delta V(r)$ от изменения характеристик дискретного спектра УШ с притягивающими потенциалами $V(r)$ произвольного вида $(V(r) < 0,\ V'(r) > 0$ при $r > \tilde{r} \geqslant 0,\ \lim\limits_{r\to\infty} V(r) = 0)$. В отличие от рассмотренных ранее удерживающих потенциалов, когда непрерывный спектр УШ отсутствовал, уравнение (1) с притягивающим потенциалом имеет как дискретный $(E < 0)$, так и непрерывный $(E \geqslant 0)$ спектры, причем число состояний дискретного спектра (l фиксировано) может быть как конечным (короткодействующие потенциалы), так и бесконечным со сгущением спектра при $E = 0$ (дальнодействующие потенциалы, удовлетворяющие условию $\lim\limits_{r\to\infty} r^2 V(r) = \infty$). К дальнодействующим потенциалам относятся, например, потенциалы с асимптотическим поведением вида

$$V(r) \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{1}{r^\beta}, \quad 0 < \beta < 2.$$

Полученные ранее для удерживающих потенциалов общие формулы (2), (3) оказываются справедливыми и в случае притягивающих потенциалов, и дают зависимость регулярного решения $\varphi(E, r)$ и величины $\Delta V(r)$ от изменения конечного числа характеристик дискретного спектра E_{ln}, C_{ln} при неизменной спектральной плотности [1]

$$\frac{d\rho(E)}{dE} = \frac{2k^{2l+1}}{\pi |F_l(k)|^2}, \quad k^2 = 2E > 0$$

($F_l(k)$ — функция Йоста) непрерывного спектра. (Например, случай выключения основного состояния УШ с потенциалом $V(r)=-1/r$ рассмотрен в [8].) Однако переход к квазиклассике (например, формула (12)), связанный с рассмотрением состояний с большими радиальными квантовыми числами n ($|E_l^0| \gg |E_{ln}|$), может быть выполнен лишь в случае монотонно стремящихся к нулю дальнодействующих притягивающих потенциалов, так как для короткодействующих потенциалов ($\lim\limits_{r\to\infty} r^2V(r)=0$) самому верхнему уровню спектра (в том числе и УШ с новым потенциалом $\tilde{V}(r)$) соответствует ограниченное значение величины $r_{\max}(E)$.

Результаты настоящей работы наглядно демонстрируют связь обратной задачи квантовой механики с известными задачами классической механики и могут быть использованы при конструировании потенциалов с заданными спектральными характеристиками.

Авторы глубоко благодарны акад. И. М. Лифшицу за внимание и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Шадан К., Сабатье П. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. М.: Мир, 1980. [2] Гельфанд И. М., Левитан Б. М. Изв. АН СССР. Сер. Мат., 1951, 15, с. 309. [3] Гостев В. Б., Минеев В. С., Френкин А. Р. ДАН СССР, 1982, 262, № 6, с. 1364. [4] Адамян М. Н. ТМФ, 1981, 48, № 1, с. 70. [5] Гостев В. Б., Минеев В. С., Френкин А. Р. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1982, 23, № 2, с. 75. [6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Физматгиз, 1958, с. 37—47. [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Гл. 7. М.: Наука, 1974. [8] Abraham P. B., Moses H. E. Phys. Rev., 1980, A22, N 4, p. 1333.

Поступила в редакцию
16.03.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 5

УДК 621.318.1:538.22.082.78

МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ, ЭФФЕКТ ХОЛЛА И НАМАГНИЧЕННОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛА ГАДОЛИНИЯ ПРИ ГЕЛИЕВЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ В ПОЛЯХ ДО 63 кЭ

Л. В. Лазарева, О. С. Галкина

(кафедра магнетизма)

В электронной теории металлов [1, 2] показано, что гальваномагнитные эффекты определяются структурой электронного энергетического спектра. Параметром, от которого зависят эти эффекты, является величина $r_H l^{-1}$, где r_H — радиус орбиты, а l — длина свободного пробега электронов проводимости в магнитном поле H. Этот вывод коррелирует с правилом Колера, согласно которому магнитосопротивление поликристаллов и некоторых монокристаллов, определяемое как

$$\Delta\rho(H)\rho^{-1}=(\rho_H-\rho^*)\rho^{-1}, \tag{1}$$

является функцией эффективного поля

$$H_{\text{эфф}}=H_e\rho_{273}\rho_0^{-1}=mH_e, \tag{2}$$

ρ_H — сопротивление во внешнем магнитном поле H_e, ρ^* — остаточное сопротивление в отсутствие поля, ρ_{273} — сопротивление при $T=273$ K, ρ_0 — сопротивление при абсолютном нуле.