УДК 530.1

ОБ ИНСТАНТОНАХ В СИСТЕМЕ N ЧАСТИЦ НА РЕШЕТКЕ

Д. С. Голиков

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

E-mail: golikov@qs.phys.msu.ru

Построена туннельная асимптотика волновой функции основного состояния системы бозонов с бинарным взаимодействием. При различных соотношениях на параметры, аналогичных условию Боголюбова в теории сверхтекучести, реализуются два возможных случая: либо основное состояние пространственно однородно, либо существуют два разных асимптотических состояния, между которыми имеется симметрия. Последние можно интерпретировать как аналог вихревых решений в теории сверхтекучести. С помощью квазиклассических методов Маслова вычислено значение экспоненциально малого расщепления энергии возбужденных решений.

Инстантонные решения классических уравнений движения в мнимом времени, соединяющие минимумы потенциала, играют важную роль в квантовой механике [1, 2] и квантовой теории поля [3, 4] при изучении туннельных процессов. Аналогичные методы применимы и к задачам статистической механики. В работе рассматривается квантовая система N частиц на решетке. Как показано в работах [5, 6], при определенных соотношениях параметров при $N \to \infty$ могут быть применимы квазиклассические методы: теория комплексного ростка Маслова в точке [7], методы туннельной квазиклассики и туннельного канонического оператора Маслова [8]. При этом параметром квазиклассического разложения (аналогом постоянной Планка) является $1/N$.

В ряде случаев классический гамильтониан, соответствующий рассматриваемой необычной квазиклассической системе, имеет два вырожденных минимума. Волновые функции, сосредоточенные в окрестностях минимумов, могут туннелировать друг в друга, что приводит к экспоненциально малому расщеплению энергетических уровней [9].

Система N взаимодействующих между собой частиц описывается гамильтонианом [2]

$$H = \int dx\, b^+(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right) b(x) + \\ + \frac{\varepsilon}{2}\int dx\, dy\, V(x,y) b^+(x) b^+(y) b(y) b(x).$$

Операторы рождения и уничтожения $b^+(x)$, $b(x)$ действуют в пространстве Фока [10]. Решеточная аппроксимация гамильтониана имеет вид

$$H = \sum_{i,j=1}^{M} T_{ij} b_i^+ b_j + \frac{\varepsilon}{2}\sum_{i,j=1}^{M} V_{ij} b_i^+ b_j^+ b_j b_i. \tag{1}$$

Все элементы матрицы T_{ij}, аппроксимирующей дифференциальный оператор $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$, обращаются в нуль, кроме T_{ii}, $T_{i,i+1}$, $T_{i+1,i}$. Операторы рождения и уничтожения подчиняются коммутационным соотношениям статистики бозе: $[b_i, b_j^+] = \delta_{ij}$, $[b_i, b_j] = 0$, $[b_i^+, b_j^+] = 0$ и могут быть записаны в представлении чисел заполнения [11], в котором состояния системы задаются волновыми функциями $\psi(n_1, \dots, n_M) = \langle n_1, \dots, n_M|\psi\rangle$:

$$\langle n_1, \dots, n_M|b_i|\psi\rangle = \sqrt{n_i+1}\langle n_1, \dots, n_i+1, \dots, n_M|\psi\rangle,$$

$$\langle n_1, \dots, n_M|b_i^+|\psi\rangle = \sqrt{n_i}\langle n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_M|\psi\rangle,$$

или $b_i = \mathrm{e}^{\frac{\partial}{\partial n_i}}\sqrt{n_i}$, $b_i^+ = \sqrt{n_i}\,\mathrm{e}^{-\frac{\partial}{\partial n_i}}$. Гамильтониан системы в представлении чисел заполнения имеет вид

$$H = \sum_{i,j=1}^{M} T_{ij}\sqrt{n_i}\,\mathrm{e}^{-\frac{\partial}{\partial n_i}}\,\mathrm{e}^{\frac{\partial}{\partial n_i}}\sqrt{n_i} + \\ + \frac{\varepsilon}{2}\sum_{i,j=1}^{M} V_{ij} n_i n_j - \frac{\varepsilon}{2}\sum_{i=1}^{M} V_{ii} n_i.$$

В случае $M = 2$ положим $T_{11} = T_{22} = T_1$, $T_{12} = T_{21} = T_2$, $V_{11} = V_{22} = V_1$, $V_{12} = V_{21} = V_2$. Поэтому стационарное уравнение Шрёдингера запишется в виде

$$\begin{aligned} &\varepsilon\,(V_2 - V_1)\, n(N-n)\Psi(n) + \\ &+ T_2\sqrt{n}\sqrt{N-n+1}\Psi(n-1) + \\ &+ T_2\sqrt{N-n}\sqrt{n+1}\psi(n+1) = E\Psi(n), \end{aligned} \tag{2}$$

причем энергия системы отсчитывается от уровня $NT_1 + \frac{N(N-1)}{2}\varepsilon V_1$. Произведем замену переменной $n = xN$, $x \in (0,1)$. Волновую функцию $\Psi(xN)$ обозначим через $\psi(x)$. Учитывая, что $\varepsilon = \alpha/N$, получим

$$\begin{aligned} &N\alpha\,(V_2 - V_1)\, x(1-x)\psi(x) + \\ &+ NT_2\sqrt{x}\sqrt{1 - x + \frac{1}{N}}\psi\left(x - \frac{1}{N}\right) + \\ &+ NT_2\sqrt{1-x}\sqrt{x + \frac{1}{N}}\psi\left(n + \frac{1}{N}\right) = E\psi(x). \end{aligned} \tag{3}$$

Развитый в работе [6] применительно к N-частичным системам метод комплексного ростка Маслова дает возможность построения приближенного решения задачи с любой наперед заданной точностью порядка степени числа частиц. Асимптотика волновой функции строится только в тех точках, где она не является экспоненциально малой. Таким образом, в случае больших отклонений чисел заполнения от их средних значений экспоненциальная асимптотика волновой функции не может быть построена методом комплексного ростка Маслова. Для этого может быть применена туннельная асимптотика. Она позволяет решить задачу на собственные значения уравнения Шрёдингера с точностью до $e^{-\beta N}$. Его решение будем искать в виде $\psi(x)=\varphi(x,N)\,e^{NS(x)}$, где действительные функции $\varphi(x)$, $S(x)$ подразумеваются достаточно гладкими. Имеют место следующие равенства для волновых функций: $\psi\left(x\pm\frac{1}{N}\right)=$ $=\ e^{NS(x)\pm S'(x)+\frac{1}{2N}S''(x)}\left(\varphi(x)\pm\frac{1}{N}\varphi'(x)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)$, которые с учетом разложения $e^{\frac{1}{2N}S''(x)}=1+$ $+\frac{1}{2N}S''(x)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ запишутся в виде $\psi\left(x\pm\frac{1}{N}\right)=$ $=e^{NS(x)}\,e^{\pm S'(x)}\,\varphi(x)+\frac{1}{N}\,e^{NS(x)}\,e^{\pm S'(x)}\left(\frac{1}{2}\varphi(x)S''(x)\pm\right.$ $\left.\pm\,\varphi'(x)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)$. Будем считать, что асимптотика собственных значений имеет следующий квазиклассический вид: $E=NE_0+E_1+O\left(\frac{1}{N}\right)$. Соответствующие асимптотические уравнения, учитывающие члены первого порядка малости разложения по степеням числа частиц, будут

$$\alpha(V_2-V_1)x(1-x)+2T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{ch}\,S'(x)=E_0, \quad (4)$$

$$\begin{aligned}&\frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{x}{1-x}}\,e^{-S'(x)}+\frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{1-x}{x}}\,e^{S'(x)}+\\&+T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{ch}\,S'(x)S''(x)+\\&+2T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{sh}\,S'(x)\,(\ln\varphi(x))'=E_1.\end{aligned} \quad (5)$$

Пусть функция $S(x)$ имеет максимум в точке $x_0\in(0,1)$. Тогда $S'(x_0)=0$, $S''(x_0)<0$ — достаточное условие существования. Введем функцию классического гамильтониана

$$f(x,p)=\alpha(V_2-V_1)x(1-x)+2T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{ch}\,p. \quad (6)$$

Тогда уравнение (4) запишется в виде туннельного уравнения Гамильтона–Якоби

$$f(x,S'(x))=E_0. \quad (7)$$

Исследуем это уравнение для нахождения возможных значений x_0, соотношений на параметры гамильтониана (1), обеспечивающих их существование, и соответствующего спектра энергии. Дифференцируя уравнение (7) в точке x_0, получим уравнение для x_0:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0,S'(x_0))+\frac{\partial f}{\partial p}\left(x_0,S'(x_0)\right)S''(x_0)=0. \quad (8)$$

Используя определение (6), последнее запишем в виде

$$(1-2x_0)\left(\alpha\frac{V_1-V_2}{T_2}-\frac{1}{\sqrt{x_0(1-x_0)}}\right)=0. \quad (9)$$

Всегда есть решение $x_0=1/2$. Оно соответствует состоянию системы, в котором половина частиц находится в состоянии 1, а другая половина — в состоянии 2. Если $\frac{V_1-V_2}{T_2}>0$, то возможно существование еще двух решений $x_{1,2}=\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{1-4\left(\frac{T_2}{\alpha(V_1-V_2)}\right)^2}$ при $\alpha\frac{V_1-V_2}{T_2}>2$. Значение E_0 найдем из (6), (7) в точке x_0:

$$E_0=\alpha(V_2-V_1)x_0(1-x_0)+2T_2\sqrt{x_0(1-x_0)}\,\mathrm{ch}\,S'(x_0). \quad (10)$$

Решению $x_0=1/2$ соответствует энергия $E_0=$ $=\frac{\alpha}{4}(V_2-V_1)+T_2$. Для точек x_1, x_2 — $E_0=\frac{T_2^2}{\alpha(V_1-V_2)}$, $\alpha\frac{V_1-V_2}{T_2}>2$.

Величину $S''(x_0)$ можно найти двукратным дифференцированием уравнения (7) в точке x_0. Таким образом получается

$$(S''(x_0))^2=\frac{1}{4x_0^2(1-x_0)^2}-\frac{\alpha}{\sqrt{x_0(1-x_0)}}\frac{V_1-V_2}{T_2}.$$

$S''(x_0)<0$ — достаточное условие максимума действительной функции $S(x)$ в точке x_0. Следовательно,

$$S''(x_0)=-\sqrt{\frac{1}{4x_0^2(1-x_0)^2}-\frac{\alpha}{\sqrt{x_0(1-x_0)}}\frac{V_1-V_2}{T_2}},$$

$$\alpha\frac{V_1-V_2}{T_2}<\frac{1}{4(x_0(1-x_0))^{3/2}}.$$

Запишем его для найденных корней уравнения (9):

$$\begin{aligned}&S''(x_0)=-\sqrt{4-2a},\quad a<2;\\&S''(x_{1,2})=-\tfrac{a}{2}\sqrt{a^2-4},\quad a>2,\qquad a\equiv\alpha\tfrac{V_1-V_2}{T_2}.\end{aligned}$$

Как видно, достаточное условие существования действительной функции $S(x)$ с максимумами в точках x_1, x_2 совпадает с условием существования этих решений.

Так как функция $\varphi(x)$ подразумевается гладкой, то все ее производные должны быть конечны. Поэтому при $x\to x_0$ $\varphi(x)=\mathrm{const}(x-x_0)^n+$ $+O\left((x-x_0)^{n+1}\right)$, где $n=0,1,2,\ldots$. Из уравнения (5)

$$\begin{aligned}E_1=&\frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{x}{1-x}}\,e^{-S'(x)}+\frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{1-x}{x}}\,e^{S'(x)}+\\&+T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{ch}\,S'(x)S''(x)+\\&+2T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{sh}\,S'(x)\,(\ln\varphi(x))'.\end{aligned}$$

Имеет место предельное соотношение

$$\begin{aligned}\lim_{x\to x_0}\mathrm{sh}\,S'(x)\cdot(\ln\varphi(x))'=n\lim_{x\to x_0}\tfrac{\mathrm{sh}\,S'(x)}{x-x_0}=\\=n(\mathrm{ch}\,S'(x_0))S''(x_0),\end{aligned}$$

поэтому выражение для E_1 при $x \to x_0$ перейдет в

$$E_1 = \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{x_0}{1-x_0}}\,\mathrm{e}^{-S'(x_0)} + \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{1-x_0}{x_0}}\,\mathrm{e}^{S'(x_0)} + (1+2n)T_2\sqrt{x_0(1-x_0)}\,\mathrm{ch}\,S'(x_0)S''(x_0). \tag{11}$$

Полученную формулу можно записать в виде $E_1^{(n)} = E_1^{(0)} + \omega n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Этот результат совпадает с результатами, полученными методом комплексного ростка Маслова в точке [6, 12]. Пользуясь выражением для $S''(x_{1,2})$, из (11) получим

$$E_1 = \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{x_0}{1-x_0}} + \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{1-x_0}{x_0}} - (1+2n)T_2\sqrt{\frac{1}{4x_0(1-x_0)} - \alpha\sqrt{x_0(1-x_0)}\frac{V_1-V_2}{T_2}}.$$

Точке $x_0 = 1/2$ соответствует значение

$$E_1 = T_2 - (1+2n)T_2\sqrt{1 - \frac{\alpha}{2}\frac{V_1-V_2}{T_2}}, \quad \alpha\frac{V_1-V_2}{T_2} < 2,$$

а решениям x_1, x_2 —

$$E_1 = \frac{\alpha(V_1-V_2)}{2} - (1+2n)\alpha\frac{V_1-V_2}{2}\sqrt{1 - 4\left(\frac{T_2}{\alpha\,(V_1-V_2)}\right)^2}, \quad \alpha\frac{V_1-V_2}{T_2} > 2.$$

Из противоположности условий на параметры гамильтониана для существования максимумов функции $S(x)$ в точках x_0 и $x_{1,2}$ следует, что реализуется либо состояние с максимумом в точке x_0, либо состояние с максимумами в точках $x_{1,2}$. Решение $x_0 = 1/2$ пространственно однородное. Это решение является аналогом безвихревого решения в теории сверхтекучести [11, 13, 14]. Решение с двумя максимумами в точках $x_{1,2}$ является аналогом возникновения вихрей в теории сверхтекучести [15].

В случае двух точек максимума функции $S(x)$ уравнение Шрёдингера имеет два решения $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, $\psi_i(x) = \varphi_i(x)\,\mathrm{e}^{NS_i(x)}$, $i = 1, 2$. Действие и предэкспоненциальную функцию определим как

$$S_i(x) = \int\limits_{x_i}^{x} |\,\mathrm{arcch}\,f(y)|\,\mathrm{sgn}(x_i - y)\,dy, \qquad \varphi_i(x) = \exp\left\{\int\limits_{x_i}^{x} g_i(y)\,dy\right\}, \tag{12}$$

где x_i — максимум функции $S_i(x)$, $i = 1, 2$,

$$f(x) = \frac{E_0 + \alpha(V_1-V_2)x(1-x)}{2T_2\sqrt{x(1-x)}},$$

$$g_i(x) = \left(E_1 - \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{x}{1-x}}\,\mathrm{e}^{-S_i'(x)} - \frac{T_2}{2}\sqrt{\frac{1-x}{x}}\,\mathrm{e}^{S_i'(x)} - T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{ch}\,S_i'(x)S_i''(x)\right) \times \left(2T_2\sqrt{x(1-x)}\,\mathrm{sh}\,S_i'(x)\right)^{-1}.$$

Так как $x_1 + x_2 = 1$, $f(1-x) = f(x)$, то $S_2(1-x) = S_1(x)$, $S_2'(1-x) = -S_1'(x)$, $S_2''(1-x) = S_1''(x)$, $g_2(1-x) = -g_1(x)$, $\varphi_2(1-x) = \exp\left\{\int\limits_{x_2}^{1-x} g_2(y)\,dy\right\} = \exp\left\{-\int\limits_{x_1}^{x} g_2(1-t)\,dt\right\} = \exp\left\{\int\limits_{x_1}^{x} g_1(t)\,dt\right\}$. Поэтому для предэкспоненциальной функции выполняются соотношения $\varphi_2(1-x) = \varphi_1(x)$, $\varphi_2'(1-x) = -\varphi_1'(x)$. Система частиц может находиться в симметричном или антисимметричном состоянии с волновыми функциями, составленными из комбинаций собственных функций гамильтониана: $\psi_\pm(x) = \psi_1(x) \pm \psi_2(x)$. Вычислим разность энергий этих двух состояний. Уравнение Шрёдингера для них имеют вид $H\psi_\pm(x) = E_\pm\psi_\pm(x)$. Домножим первое уравнение на $\psi_-(x)$, второе — на $\psi_+(x)$, вычтем их и просуммируем по x от нуля до $\bar{x} \approx 1/2$ с шагом $1/N$:

$$\sum_{x=0}^{\bar{x}} \left(\psi_-(x)H\psi_+(x) - \psi_+(x)H\psi_-(x)\right) = (E_+ - E_-)\sum_{x=0}^{\bar{x}} \psi_+(x)\psi_-(x).$$

Пользуясь уравнением Шрёдингера в виде (3), последнее можно записать в виде

$$NT_2\sqrt{1-\bar{x}}\sqrt{\bar{x} + \tfrac{1}{N}} \times \left(\psi_+\left(\bar{x} + \frac{1}{N}\right)\psi_-(\bar{x}) - \psi_+(\bar{x})\,\psi_-\left(\bar{x} + \frac{1}{N}\right)\right) = (E_+ - E_-)\sum_{x=0}^{\bar{x}} \psi_+(x)\psi_-(x).$$

В переменных $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ разность энергий есть

$$E_+ - E_- = 2NT_2\sqrt{1-\bar{x}}\sqrt{\bar{x} + \frac{1}{N}} \times \frac{\psi_1(\bar{x})\,\psi_2\left(\bar{x} + \frac{1}{N}\right) - \psi_2(\bar{x})\,\psi_1\left(\bar{x} + \frac{1}{N}\right)}{\sum\limits_{x=0}^{\bar{x}}\left(\psi_1^2(x) - \psi_2^2(x)\right)}.$$

Воспользуемся методом Лапласа для оценки суммы в знаменателе. Пусть функция $\chi(x)$ имеет максимум в точке $x_0 \in (a, b)$, $\chi''(x_0) < 0$. Тогда имеет место формула [16]

$$\int\limits_a^b \psi(x)\,\mathrm{e}^{N\chi(x)}\,dx = \mathrm{e}^{N\chi(x_0)} \times \left(\sqrt{-\frac{2\pi}{N\chi''(x_0)}}\,\psi(x_0) + O\left(N^{-3/2}\right)\right).$$

В области значений $x \in (0, \bar{x})$ действие $S_2(x)$ не имеет максимума, поэтому волновой функцией $\psi_2(x)$ по сравнению с $\psi_1(x)$ в сумме можно пренебречь:

$$\sum_{x=0}^{\bar{x}} \psi_1^2(x) = \sqrt{\frac{2\pi N}{a\sqrt{a^2-4}}}.$$

В последнем равенстве были использованы определения действия и предэкспоненциальной функции, $a = \alpha\frac{V_1 - V_2}{T_2} > 2$. Если разложить числитель по степеням числа частиц и положить $\bar{x} = 1/2$, то

$$E_+ - E_- = T_2 \sqrt{\frac{a\sqrt{a^2-4}}{2\pi N}} \psi_1\left(\frac{1}{2}\right) \psi_1'\left(\frac{1}{2}\right) \times \\ \times \left(1 + \frac{1}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right),$$

где $\psi_1(1/2)$ определяется из (12).

Автор глубоко благодарен В.П. Маслову, Б.И. Садовникову за постановку задачи, О.Ю. Шведову, Г.В. Ковалю, А.Э. Рууге, А.В. Полякову за внимание к работе и ценные замечания.

Литература

1. *Маслов В.П.* Задача рассеяния в квазиклассическом приближении // ДАН СССР. 1963. **151**, №2. С. 306.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М., 2001.
3. *Belavin A.A., Polyakov A.M., Shvarts A.S., Tyupkin Yu.S.* // Phys. Lett. 1975. **B59**. P. 85.
4. *t'Hooft G.* // Phys. Rev. 1976. **D14**. P. 3432.
5. *Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // Матем. заметки. 1995. **57**, №1. С. 133.
6. *Маслов В.П., Шведов О.Ю.* Метод комплексного ростка в задаче многих частиц и квантовой теории поля. М., 2000.
7. *Маслов В.П.* Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М., 1977.
8. *Маслов В.П.* Асимптотические методы и теория возмущений. М., 1989.
9. *Доброхотов С.Ю., Колокольцов В.Н.* // ТМФ. 1993. **94**, №3. С. 426.
10. *Березин Ф.А.* Метод вторичного квантования. М., 1965.
11. *Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.).* Введение в квантовую статистическую механику. М., 1965.
12. *Белов В.В., Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // Матем. заметки. 1993. **53**, №5. С. 14.
13. *Боголюбов Н.Н.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1947. **11**, №1. С. 77.
14. *Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // ТМФ. 1994. **98**, №2. С. 266.
15. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Статистическая физика. Ч. 2. М., 2000.
16. *Федорюк М.В.* Метод перевала. М., 1976.

Поступила в редакцию
06.12.02

УДК 517.956.224

О ЗАДАЧЕ С КОСОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ВНЕ РАЗРЕЗОВ НА ПЛОСКОСТИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

К. В. Прозоров, П. А. Крутицкий

(*кафедра математики*)

E-mail: kprozorov@afrodita.phys.msu.su

Изучена задача с косой производной вне разрезов на плоскости для уравнения Гельмгольца, решения которого удовлетворяют принципу максимума. Доказано существование и единственность решения. Получено интегральное представление для решения в виде потенциалов, плотность в которых определяется из однозначно разрешимой системы интегральных уравнений.

Задача с косой производной вне разрезов на плоскости для уравнения Гельмгольца, описывающего распространяющиеся волны, изучалась в работе [1], где искалось ее комплексное решение в случае чисто мнимого коэффициента при касательной производной в граничном условии. В настоящей работе эта задача рассматривается для уравнения Гельмгольца, решения которого не описывают распространяющиеся волны, а удовлетворяют принципу максимума. При этом коэффициент при касательной производной в граничном условии предполагается вещественным и ищется вещественное решение задачи. Следует отметить, что задача с косой производной для уравнения Гельмгольца вне разрезов на плоскости возникает при изучении рассеяния приливных волн на рифах [1].

В декартовых координатах $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ рассмотрим совокупность простых разомкнутых кривых $\Gamma_1, \ldots, \Gamma_N$ из класса $C^{2,\lambda}$, $\lambda \in (0, 1]$, не имеющих общих точек, в том числе и концов. Указанную совокупность кривых будем называть контуром Γ. Пусть контур Γ параметризован и в качестве пара-