

ИИД 300063

ИТЭФ – 24 ✓



ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

А.В.ТУРБИНЕР

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА:
НОВЫЙ ВЗГЛЯД
НА СТАРУЮ ТЕОРИЮ ВОЗМУЩЕНИЙ
Лекция, прочитанная на школе
физиков ИТЭФ, февраль 1981

МОСКВА 1982

УДК 530.145.6

М-16

I. Введение

Проблема сильной связи — одна из центральных проблем во многих фундаментальных науках. Практически всегда, когда удается совершить прорыв в эту область, открываются нетривиальные явления. Поэтому разработка регулярных методов исследования области больших возмущений является важной и актуальной задачей. Попробуем с этой точки зрения оценить ситуацию в квантовой механике и квантовой теории поля, сложившуюся в данный момент.

В настоящее время единственным детально разработанным методом исследования точно не решаемых задач теории поля представляется стандартная техника, основанная на использовании фейнмановских диаграмм. Этот подход использует теорию свободного поля в качестве нулевого приближения и позволяет исследовать область слабой связи, малых констант взаимодействия и неэффективен в области больших возмущений. При его реализации помимо чисто технических трудностей, возникающих при вычислении многопетлевых диаграмм, имеется большая неприятность принципиального характера как нулевой радиус сходимости получающегося ряда теории возмущений по константе связи. Качественное объяснение этого явления довольно просто и основано на известном "аргументе Дайсона": при больших полях лагранжиан взаимодействия становится "больше", чем лагранжиан свободного поля вне зависимости от величины рассматриваемой константы взаимодействия. В связи с такой ситуацией поясним принципиальный характер этой неприятности, задав себе совсем не академический вопрос: "Решена ли задача, если мы знаем произвольный, n -й член ряда теории возмущений?" Как это ни удивительно, но ответ звучит несколько парадоксально: "Нет, задача не решена!" Ибо даже если известен произвольный член ря-

да по константе связи, возникает задача, как этот ряд просуммировать. Ведь поскольку его коэффициенты растут с номером факториально и он имеет нулевой радиус сходимости, то задача суммирования весьма неоднозначна. Грубо говоря, можно при заданной константе связи получить любой ответ. Для того чтобы решить, каким все-таки способом суммировать получившийся ряд, нужно исследовать структуру особенностей исследуемой функции вблизи нуля константы взаимодействия. Один из возможных путей решения этой задачи - изучение аналитической структуры столь нетривиальной конструкции как функциональный интеграл. Сколь эта структура может быть сложна, продемонстрировали Бендер и Ву /1,2/ и Саймон /3/ на примере одномерной теории поля, коей является ангармонический осциллятор $V(x) = m^2 x^2 + g x^4$. Отметим, что в этом примере правильным методом суммирования оказался метод Бореля /4/.

Несколько лучшая, хотя и далекая от удовлетворительной, ситуация в нерелятивистской квантовой механике. В дальнейшем мы будем обсуждать ситуацию в случае связанных состояний и поэтому сделаем небольшой обзор методов, обычно используемых при решении задач этого типа, уделяя особое внимание недостаткам, предполагая, что достоинства хорошо известны.

1) Теория возмущений Релея-Шредингера^{*)}

Этот подход является одним из наиболее известных и широко применяется. Для его реализации необходимо знание всего спектра невозмущенной задачи и всех матричных элементов. Т.е. нулевое приближение - точно решаемая задача. Обычная ситуация - расходящиеся ряды теории возмущений (ТВ) и все те проблемы, о которых речь шла выше.

^{*)} См., например, /5/, гл.6.

2) Вариационный принцип Релея-Ритца и различные его модификации (метод Хартри, Хартри-Фока и т.д.)

Вариационный подход - единственный инструмент при решении сколь-нибудь сложных многомерных задач, в частности, задач атомной физики. Основным его недостатком является отсутствие оценки точности получающихся результатов. Всевозможные оценки снизу вариационных расчетов типа оценки Темпля [6] - обычно очень грубы. Уточнение их - сложная задача. Кроме того, отсутствуют сколь-нибудь строгие критерии выбора пробных функций, которые бы максимально быстро приводили к требуемым точностям. Большие трудности возникают при построении пробных функций возбужденных состояний (проблема ортогональности).

3) Квазиклассическое приближение (метод ВКБ)

Этот подход имеет довольно ограниченную область применимости, однако обычно справедливым для высоковозбужденных состояний, хотя, например, его модификация, предложенная Мариновым и Поповым [7], значительно расширила сферу его возможностей. Отметим, что квазиклассическое приближение детально разработано только для одномерных и сферически-симметричных случаев.

4) Численные методы

Хотя у многих людей есть ощущение, что на хорошей ЭВМ можно решить любую задачу, это далеко не так. Когда речь идет о задачах на собственные значения, то численные расчеты дают надежные результаты только в одномерном случае. Даже двумерная задача представляется уже очень сложной с точки зрения численного счета, как результат этого - противоречивые результаты (см. ниже).

На этом мы завершим краткий обзор методов и рассмотрим реальную ситуацию с несколькими классическими квантовомеханическими задачами, которые описываются практически в любой учебной книге по квантовой механике.

1) Атом водорода в постоянном электрическом поле (эффект Штарка)

В этой задаче область сильной связи начинается с полей $\mathcal{E} \lesssim 0,1$ а.е. В настоящее время имеется 5 расчетов энергии связи основного состояния в области больших полей: четыре - численных и пятый - в рамках подхода, описанного в данной лекции. Все четыре численных расчета дают разные результаты (см. [8] и ссылки в ней), причем некоторые различаются по порядку величины.

2) Атом водорода в постоянном магнитном поле (эффект Зеемана)

Не решена задача классификации состояний. Эта задача в принципе проще задачи об эффекте Штарка, поскольку отсутствует явление туннелирования. Имеется довольно много расчетов (см. [9] и ссылки в ней). Результаты для энергий низших состояний при полях 10^{11} - 10^{12} Гс, встречающихся в астрофизике и физике полупроводников, различаются на несколько порядков.

3) Атом водорода в скрещенных полях

Существует только качественное рассмотрение (см. [10]). В области слабой связи неизвестен даже первый перекрестный член порядка $\mathcal{E}^2 \mathcal{H}^2$.

На этом мы закончим введение и приступим к основной части лекции.

2. Описание подхода

Предваря конкретную реализацию нашего метода, изложим его основную идею. Вполне очевидно, что любую волновую функцию связанного состояния в гладком потенциале можно символически представить в виде

$$\Psi(x) = f(x) \exp \{-\phi(x)\}, \quad (2.1)$$

где функции $f(x)$ и $\phi(x)$ не имеют особенностей при действительных $x \in \mathbb{R}^k$. Конечно, представление (2.1) неоднозначно.

Пусть теперь потенциал задачи состоит из двух частей: невозмущенной V_0 и возмущения V_1

$$V = V_0 + \lambda V_1, \quad (2.2)$$

где λ - формальный параметр и мы хотим решить исходную задачу по теории возмущений, разлагая все величины в ряд по параметру λ . Какие теперь открываются возможности, поскольку имеется несколько способов реализовать теорию возмущений?

$$а) \quad \phi(x) \equiv 0, \quad f(x) = \sum \lambda^n f_n(x).$$

Это не что иное как стандартная ТВ Релея-Шредингера (см./5/, гл.6).

$$б) \quad \phi(x) = \phi_0(x), \quad f(x) = \sum \lambda^n f_n(x).$$

Данная процедура называется методом F -функций Дальгарно (см. обзор /II/); этот метод с успехом использовался Банксом и др. при исследовании одномерного и двумерного ангармонических осцилляторов /I-2, I2-I3/.

$$в) \quad \phi(x) = \sum \lambda^n \phi_n, \quad f(x) = \begin{cases} I - \text{в случае основного состояния} \\ f_0(x) - \text{в случае возбужденных состояний с известным положением узловых поверхностей} \\ \sum \lambda^n f_n - \text{в общем случае возбужденных состояний} \end{cases}$$

Построению, изучению и использованию этой формы ТВ, которая является наиболее общей при представлении (2.1), и посвящена, в основном,

наша лекция. История создания, довольно любопытная, будет изложена ниже. А теперь начнем описание метода, рассмотрев сначала случай основного состояния, волновая функция которого нигде не обращается в нуль (конечно, если потенциал "хороший").

2.1. Основное состояние

Суть метода, если посмотреть на нее с несколько другой стороны, чем это только что проделывалось, заключается в процедуре преобразования, которую мы назовем процедурой нелинейаризации /14-17/, k -мерного уравнения Шредингера, являющегося линейным уравнением второго порядка

$$\Delta \Psi + (E - V) \Psi = 0 \quad (2.3)$$

в нелинейное уравнение, но зато первого порядка, с правой частью и в развитии ТВ уже применительно к этому уравнению. Преобразование, которое реализует эту процедуру, имеет вид /15-17/

$$\vec{y} = -\nabla \Psi / \Psi = -\nabla (\ln \Psi), \quad (2.4)$$

где Δ , ∇ - обычные k -мерные операторы Лапласа и градиента соответственно. Используя (2.3)-(2.4), получаем следующее уравнение /15-18/

$$\operatorname{div} \vec{y} - \vec{y}^2 = E - V, \quad (2.5)$$

которое эквивалентно исходному уравнению Шредингера при условии, что поле \vec{y} - потенциальное

$$\vec{y} = \nabla \phi(x). \quad (2.6)$$

где $\phi(x)$ - скалярная функция; другими словами, должна равняться нулю косая производная

$$\partial_i y_j - \partial_j y_i = 0. \quad (2.6^a)$$

Уравнение (2.5) с условиями (2.6) или (2.6^a) - это основное урав-

нение, с помощью которого строится наш метод. Отметим, что в одномерном случае оно превращается в известное уравнение Риккати. Вопрос о граничных условиях для (2.5) обсудим ниже.

Начнем теперь построение ТВ, сделав следующее предварительное замечание. Очевидно, что исследуемый потенциал $V(x)$ всегда можно представить в виде суммы (2.2) или в общем случае как

$$V(x) = \sum \lambda^n V_n(x), \quad (2.2')$$

где λ — формальный параметр, введенный для удобства, причем уравнение

$$\Delta \psi_0 + (E_0 - V_0) \psi_0 = 0 \quad (2.7)$$

может быть разрешено точно. Другими словами, это звучит так, для любой достаточно гладкой функции $\psi_0(x) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^k)$ можно найти потенциал

$$V_0 - E_0 = \Delta \psi_0 / \psi_0, \quad (2.7')$$

ей соответствующий, и тогда потенциал возмущений V_1 будет равняться разности $(V - V_0)$. Следует отметить, что

$$\vec{y}_0 = -\nabla \psi_0 / \psi_0. \quad (2.8)$$

После этого замечания, которое нам будет очень полезно в дальнейшем, приступим к построению ТВ для основного состояния.

Как отмечалось выше, для достаточно гладких потенциалов волновая функция основного состояния нигде не обращается в нуль. Это означает, что вектор-функция \vec{y} не содержит полюсных особенностей при действительных x ^{*)}. Запишем теперь разложение E и \vec{y} в ряд Тейлора по параметру λ :

$$\vec{y} = \vec{y}_0 + \lambda \vec{y}_1 + \lambda^2 \vec{y}_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \vec{y}_n, \quad (2.9)$$

*) Здесь и далее для краткости мы пишем x , подразумевая точку в пространстве \mathbb{R}^k с координатами (x_1, x_2, \dots, x_k) .

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots = \sum \lambda^n E_n, \quad (2.10)$$

при этом E_0 и \vec{y}_0 даются (2.7') и (2.8) соответственно. Подставляя (2.9)-(2.10) в (2.5) и собирая члены при λ^n , получаем для определения E_n и \vec{y}_n уравнение

$$\operatorname{div}(\psi_0^2 \vec{y}_n) = (E_n - Q_n) \psi_0^2, \quad (2.11)$$

или, в эквивалентном виде,

$$\operatorname{div} \vec{y}_n - \lambda \vec{y}_0 \vec{y}_n = E_n - Q_n, \quad (2.12)$$

причем векторное поле \vec{y}_n должно еще удовлетворять и условию потенциальности (2.6) или (2.6'). Здесь

$$Q_1 = V_1, \quad Q_n = - \sum_{i=1}^{n-1} \vec{y}_i \vec{y}_{n-i}, \quad n \geq 2. \quad (2.13)$$

Подчеркнем любопытный факт: уравнение (2.11) вместе с условием потенциальности поля \vec{y}_n - это уравнение обычной (только многомерной) электростатики, в которой ψ_0^2 и \vec{y}_n играют роль диэлектрической проницаемости и напряженности поля, соответственно, а $(E_n - Q_n) \psi_0^2$ - плотности заряда.

Обсудим теперь вопрос о граничных условиях. Поскольку нас интересует проблема связанных состояний, то вполне естественным кажется требование, чтобы векторное поле \vec{y}_n не росло при больших $|x|$ быстрее, чем степень. Это условие можно записать

в виде

$$|\vec{y}_n \psi_0^2| \rightarrow 0 \quad \text{при } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.14)$$

Граничное условие можно несколько пояснить с физической точки зрения: в случае, когда потенциал возмущения равен нулю, то все поправки E_n и \vec{y}_n тождественно равны нулю. Это означает, что решение однородного уравнения (2.12) должно быть тождественным нулем.

Условие (2.14) можно немедленно превратить в информацию о поправках E_n . Для этого проинтегрируем (2.11) по всему пространству и преобразуем получающийся в правой части интеграл в поверхностный, согласно теореме Остроградского Гаусса. Тогда, учитывая условие (2.14), получим [15]

$$E_n = \int_{R^k} Q_n \psi_0^2 dx / \int_{R^k} \psi_0^2 dx. \quad (2.15)$$

Выражение (2.15) дает величину произвольной поправки к уровню энергии основного состояния невозмущенной задачи. Отметим, что выражение для первой поправки E_1 совпадает стандартным ТВ Релея-Шредингера [5], а вторая поправка E_2 всегда отрицательна, как и должно быть.

Однако, для того чтобы вычислять различные поправки E_n при $n \geq 2$, необходимо решить электростатическую задачу (2.11), которая эквивалентна решению эллиптического уравнения общего вида

$$\frac{1}{\psi_0^2} \operatorname{div}(\psi_0^2 \operatorname{grad} \phi_n) = E_n - Q_n \quad (2.16)$$

с граничным условием (2.14), где $\vec{y}_n = \text{grad } \phi_n$, а E_n дается (2.15). Отметим, что оператор

$$\frac{1}{\psi_0^2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi_0^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \right),$$

стоящий в правой части (2.16) – оператор Лапласа в кривом пространстве с конформно-плоской метрикой, причем ψ_0 играет роль детерминанта метрического тензора. Таким образом, задача эквивалентна нахождению функции Грина оператора Лапласа в конформно-плоском пространстве со специального вида метрикой.

Итак, задача вычисления поправок уже не есть задача на собственные значения (E_n и \vec{y}_n предполагаются известными из предыдущих итераций.). По этой причине задача нахождения поправок E_n и соответственно \vec{y}_n много проще с точки зрения численного счета, чем решение исходного уравнения Фредгольма. Кроме того, эквивалентность этой задачи некоторой электростатической позволяет использовать аналоговые вычислительные машины.

Обсудим теперь вопрос о нахождении поправок \vec{y}_n более детально. Решение уравнения (2.11) с дополнительным условием потенциальности (2.6) имеет следующий вид

$$\psi_0^2 \vec{y}_n(x) = \int_{R^k} \vec{G}_k(x, x') (E_n - Q_n) \psi_0^2 dx', \quad (2.17)$$

где $\vec{G}(x, x')$ – функция Грина уравнения (2.11) с дополнительным условием (2.6) или (2.6'), а индекс k означает размерность пространства. В общем случае, когда ψ_0^2 – произвольная функция $\psi_0 \in \mathcal{L}_2(R^k)$, решение нам не известно и, по-видимому, его невозможно построить в явном виде. Однако, в нескольких частных случаях это можно сделать. Во-первых, для сферически-

II

симметричных ψ_0^2 и V_1 функция Грина имеет вид

$$\vec{G}_k(x, x') = \frac{1}{\sigma_k} \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|x - x'|^k}, \quad (2.18)$$

где $\sigma_k = 2\pi^{k/2} / \Gamma(k/2)$ - площадь k -мерной сферы единичного радиуса. Тогда решение (2.17) становится

$$\psi_0^2 \vec{y}_n(x) = \frac{1}{\sigma_k} \int_{R^k} \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|x - x'|^k} (E_n - Q_n) \psi_0^2 dx'. \quad (2.19)$$

Подчеркнем здесь, что эта формула также дает общее решение в одномерном случае. Во-вторых, задача решается явно, когда диэлектрическая проницаемость гауссова

$$\psi_0^2 = a \cdot \exp\{-\alpha \vec{x}^2\}.$$

Общее решение уравнения (2.11) дается формулой

$$\vec{y}_n = \frac{1}{2\pi^{k/2}} \int_{R^k} dx' (E_n - Q_n(x')) \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} (t + \alpha)^{\frac{k-2}{2}} \exp\{-\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t + \alpha} \vec{x}'\} \cdot \left\{ \sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t + \alpha} \vec{x}' \right\}, \quad (2.20)$$

которая будет выведена ниже. В данный момент мне не известны другие функции Грина в явном виде, однако для возмущенной кулоновской задачи, несмотря на отсутствие явной формулы для функции Грина, теория возмущения может быть выявь построена (см. раздел 3). Также отметим большое упрощение, которое возникает в случае, когда нулевое приближение берется сферически-симметричным, а учет сферически-несимметричных частей в поправках делается с помощью разложения по сферическим гармоникам, как делалось в задаче о двумерном ангармоническом осцилляторе общего вида /16/. Определение коэффициентов функций в этом разложении — одномерная задача. Прежде, чем перейти к рассмотрению случая возмущенных состояний, покажем вывод формулы (2.20), которая представляет самостоятельный интерес.

Техническая подробность. Электростатика с гауссовой диэлектрической проницаемостью (получение формулы (2.20))

Для решения электростатической задачи с гауссовой диэлектрической проницаемостью

$$\epsilon \equiv \psi_0^2 = a \exp\{-\alpha x^2\} \quad (\text{ТП.1})$$

воспользуемся уравнением (2.12), в котором сразу учтем условие потенциальности (2.6). Вспоминая, что $\vec{y}_0 = 2\alpha \vec{x}$, получаем, что исходное уравнение преобразуется к виду

$$\Delta \phi_n - 2\alpha \vec{x} \nabla \phi_n = q_n(x), \quad (\text{ТП.2})$$

где $q_n(x)$ — некоторая функция, очевидным образом связанная с плотностью заряда, а $\phi_n(x)$ — потенциал ($\vec{y}_n = \nabla \phi_n$, а для удобства индекс n мы будем в дальнейшем опускать). Это уравнение можно решать по-разному, однако, наиболее простым и красивым способом является следующий *): сделаем преобразование подобия $x \rightarrow xt$ и заметим, что оператор

*) Я благодарен В.А.Фатееву, указавшему мне на этот прием.

$$\vec{x} \nabla_x \phi(xt) = t \frac{\partial}{\partial t} \phi(xt) \quad (\text{П.3})$$

является однородным. Тогда уравнение (П.2) принимает форму

$$\frac{1}{t^2} \Delta_x \phi(x, t) - 2\alpha t \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = q(t, x), \quad (\text{П.4})$$

при этом ищется его решение, имеющее вид функции от произведения xt . Для того, чтобы его найти, воспользуемся преобразованием Фурье по переменной x . В результате получится уравнение

$$-\frac{p^2}{t^2} \tilde{\phi} - 2\alpha t \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} = \tilde{q}, \quad (\text{П.5})$$

где p - переменная, сопряженная x ; $\tilde{\phi}$, \tilde{q} - Фурье-образы искомой функции и правой части уравнения (П.4), соответственно. После простых и не очень длинных выкладок получаем, что решение уравнения (П.2) имеет вид

$$\phi(x) = \int dx' q(x') \int_0^{\infty} \frac{dt}{4\pi^{1/2} t} (t+\alpha)^{\frac{k-2}{2}} \exp\left\{-\left(\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+\alpha} \vec{x}'\right)^2\right\}. \quad (\text{П.6})$$

Напряженность электрического поля, отвечающая такому потенциалу,

$$\vec{y} = \int dx' q(x') \int_0^{\infty} \frac{dt (t+\alpha)^{\frac{k-2}{2}}}{2\pi^{1/2} t^{1/2}} \exp\left\{-\left(\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+\alpha} \vec{x}'\right)^2\right\} \left\{\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+\alpha} \vec{x}'\right\} \quad (\text{П.7})$$

и дает искомую формулу (2.20). Ее можно несколько обобщить на случай диэлектрической проницаемости более общего вида

$$\epsilon \equiv \psi_0^2 = a \exp\left\{-\alpha x^2 - \vec{k} \vec{x}\right\}, \quad (\text{П.8})$$

где \vec{k} - некоторый постоянный вектор. В этом случае $\vec{y}_0 = 2\alpha \vec{x} + \vec{k}$, и уравнение (2.12) сводится к (П.2) заменой $\vec{x}_1 = \vec{x} + \vec{k}/2\alpha$, хотя в правой части будет стоять не $q(x)$, а $q(x, -k/2\alpha)$.
Окончательная формула для потенциала

$$\Phi(x) = \int_{R^k} dx' q(x') \int_0^{\infty} \frac{dt}{4\pi^{k/2} t} (t+d)^{\frac{k-2}{2}} \exp\left\{-\left(\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+d} \left(\vec{x}' + \frac{\vec{k}}{2d}\right)\right)^2\right\}, \quad (\text{III.9})$$

а для напряженности поля

$$\vec{y}(x) = \int_{R^k} dx' q(x') \int_0^{\infty} \frac{dt \cdot (t+d)^{\frac{k-2}{2}}}{2\pi^{k/2} \sqrt{t}} \exp\left\{-\left(\sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+d} \left(\vec{x}' + \frac{\vec{k}}{2d}\right)\right)^2\right\} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \sqrt{t} \vec{x} - \sqrt{t+d} \left(\vec{x}' + \frac{\vec{k}}{2d}\right) \right\}. \quad (\text{III.10})$$

Отметим, что регуляризация расходящихся интегралов в выражениях для потенциалов (III.6), (III.9) выполняется стандартным способом. В полученных выражениях (III.6)–(III.7)–(III.10) отсутствует зависимость от мультипликативной константы a диэлектрической проницаемости (III.1), (III.8), как и должно быть (см. (2.17)).

Полученные только что формулы представляют интерес с разных точек зрения. Во-первых, это все-таки решение нетривиальной электростатической задачи. Во-вторых, с точки зрения гравитации – это конформно-плоский мир, который замкнут, поскольку интеграл от метрического тензора сходится. Во-третьих, формулы с диэлектрической проницаемостью (III.8) могут быть полезны при построении теории возмущений для квазистационарных состояний, где d играет роль параметра регуляризации возникающих интегралов (см. работу Зельдовича [19] и монографию [20], гл.7, § 6). И последнее: конечно же, эти формулы важны при реализации

подхода, описанного в данной лекции.

В заключение отметим, что, по-видимому, не представляет особой проблемы обобщить полученные результаты на случай, когда диэлектрическая проницаемость является многомерным полиномом Эрмита, умноженным на гауссову функцию типа (П.1) или (П.8).

2.2. Возбужденные состояния

Перейдем теперь к рассмотрению возбужденных состояний. Необходимость их отдельного рассмотрения связана с несколькими причинами. Во-первых, в случае возбужденных состояний в интегралах (2.15) возникают неинтегрируемые особенности, поскольку нули возбужденных волновых функций трансформируются в полюсные особенности вектор-функции \vec{y} , а интегралы (2.15) зависят от Q_n , являющихся квадратичными формами \vec{y}_i . В одномерном случае было показано [21], что увода контур интегрирования в комплексную плоскость, чтобы обойти эти особенности, можно получить правильные результаты. Нам этот метод кажется сложным с технической точки зрения, а кроме того, чрезвычайно сложна его реализация в многомерном случае. Мы предложим много более простой способ, в котором размерность пространства не играет существенной роли. Во-вторых, вопрос о возбужденных состояниях в многомерном случае практически не исследован, что сильно отразится на нашем рассмотрении.

Итак, несомненно, что волновая функция возбужденного состояния характеризуется некоторым множеством S_0 , на котором она обращается в нуль. Поэтому волновую функцию можно представить в виде (2.1)

$$\Psi(x) = f(x) \exp\{-\phi(x)\},$$

где $f(x)$ и $\phi(x)$ не содержат сингулярностей при конечных $x \in \mathbb{R}^k$, а $f(x)$ растет при $|x| \rightarrow \infty$ не быстрее степени, причем $f(x) = 0$, а $\nabla f(x) \neq 0$ при $x \in S^*$). Таким образом, мы в явном виде выделяем функцию $f(x)$, несущую информацию об узловых поверхностях, т.е. поверхностях, где исходная волновая функция обращается в нуль. Поскольку эта процедура неоднозначна, то желательно это разделение сделать минимальным образом, т.е. так, чтобы $f(x)$ содержало минимальную информацию, не относящуюся к узловым поверхностям. Теперь введем в рассмотрение вектор

$\vec{g} = \nabla \phi(x)$, и тогда вектор-функция \vec{y} (2.4) будет равна

$$\vec{y} = -\nabla \Psi / \Psi = \vec{g} - \nabla f / f. \quad (2.21)$$

Следовательно, мы выделили явным образом ту часть векторного поля \vec{y} , которая содержит сингулярности. Подставив (2.21) в (2.5) и умножив результат на $f(x)$, приходим к следующему уравнению [16, 17].

$$f \nabla \vec{g} - f \vec{g}^2 - \Delta f + 2\vec{g} \nabla f = (E - V)f. \quad (2.22)$$

Это уравнение и лежит в основе всего развиваемого подхода. Отметим, что при $\vec{g} = 0$ оно переходит в обычное уравнение Шредингера, а при $f(x) = 1$ - в уравнение (2.5). Начнем теперь развивать ТВ. Пусть потенциал имеет вид (2.2') и Ψ_0 - волновая функция уравнения (2.7), записанная в виде (2.1), причем множество S_0 , на котором Ψ_0 обращается в нуль, задается условием $f_0(x) = 0$. Разложим теперь в ряд по λ не только E и \vec{g} (см. (2.9), (2.10)),

* В точках самопересечения узловых поверхностей, где происходит разветвление, должно выполняться условие $\nabla f = 0$.

но и функцию f , характеризующую множество нулей и их деформации^{*)}

$$f = f_0 + \lambda f_1 + \lambda^2 f_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n f_n. \quad (2.23)$$

Соберем теперь члены первого порядка по λ и после простых математических преобразований получим

$$\operatorname{div}(\psi_0^2 \vec{g}_1 + e^{-2\phi_0}(f_1 \nabla f_0 - f_0 \nabla f_1)) = (E_1 - V_1) \psi_0^2, \quad (2.24)$$

где индекс нуль характеризует нулевое приближение. Интегрируя по всему пространству (2.24) и учитывая условие (2.14) (в котором \vec{g} заменено на \vec{g}_1), получаем формулу для E_1 , которая совпадает с (2.15) при $n=1$. Общее решение уравнения (2.24) можно записать в виде

$$\psi_0^2 \vec{g}_1 + e^{-2\phi_0}(f_1 \nabla f_0 - f_0 \nabla f_1) = \int_{R^k} dX' \vec{G}_{ex}(X, X') (E_1 - V_1) \psi_0^2, \quad (2.25)$$

где $\vec{G}_{ex}(X, X')$ - функция Грина уравнения (2.24), причем выражение $\psi_0^2(X) \vec{G}_{ex}(X, X')$ должно удовлетворять условию потенциальности (2.6) или (2.6') по переменной X . Другое условие фиксации функции Грина - требование, чтобы правая часть (2.25) была вектором, направленным по ∇f_0 при $X \in S_0$. Тогда деформация множества S_0 в первом порядке по λ характеризуется условием

*) В одномерном случае S - дискретное множество точек, а f - полином

$$f(x) = \prod_{i=1}^m (x - \alpha_i),$$

где m - число нулей. Поэтому, в принципе, можно разлагать в ряд по λ прямо положения нулей α_i , т.е. писать $\alpha_i = \sum \lambda^k \alpha_{ik}$, как это предлагалось в [22, 23]. Однако, этот способ не допускает обобщения на многомерные (см. ниже) и, кроме того, незаконен, т.к. происходит повышение точности в предэкспоненте f : поправка $f_n \lambda^n$ содержит вклады от высших порядков. Другими словами, для построения ТВ излишне знать, как деформируются фрагменты узловых поверхностей, достаточно знать, как меняется вся картина в целом.

$$f_1(x) = \frac{\nabla f_0 \cdot \int \vec{G}_{ex}(x, x') (E_1 - V_1) \psi_0^2 dx'}{(\nabla f_0)^2 \exp\{-2\phi_0\}}, \quad x \in S_0. \quad (2.26)$$

Аналогичным образом находятся уравнения для определения высших поправок. По структуре они похожи на (2.24) и отличаются от него только правой частью

$$\operatorname{div} \left\{ \psi_0^2 \vec{g}_n + e^{-2\phi_0} (f_n \nabla f_0 - f_0 \nabla f_n) \right\} = (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2, \quad (2.27)$$

или, в эквивалентной форме,

$$\nabla \vec{g}_n - 2\vec{g}_0 \vec{g}_n - \frac{\Delta f_n - 2\vec{g}_0 \nabla f_n - 2\vec{g}_n \nabla f_0}{f_0} + f_n \frac{\Delta f_0 - 2\vec{g}_0 \nabla f_0}{f_0^2} = E_n - \tilde{Q}_n \quad (2.28)$$

$$\tilde{Q}_n = - \sum_{i=1}^{n-1} \vec{g}_i \vec{g}_{n-i} - \frac{1}{f_0} \left\{ \sum_{k=1}^{n-1} f_k \left[\sum_{i=0}^{n-k} \vec{g}_i \vec{g}_{n-k-i} - \nabla \vec{g}_{n-k} + E_{n-k} - V_{n-k} \right] - 2 \sum_{k=1}^{n-1} \vec{g}_k \nabla f_{n-k} \right\}, \quad n \geq 2. \quad (2.28')$$

Поправка к энергии получается из тех же соображений, что и в случае основного состояния, и имеет вид, аналогичный (2.15)

$$E_n = \int dx \tilde{Q}_n \psi_0^2 / \int dx \psi_0^2, \quad (2.29)$$

где \tilde{Q}_n при $n \geq 2$ дается (2.28'), а $\tilde{Q}_1 = V_1$. Если вспомнить о потенциальности поля \vec{g} и переписать уравнение (2.27) в виде

$$\operatorname{div} \left\{ \psi_0^2 \operatorname{grad} (\phi_n - f_n/f_0) \right\} = (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2, \quad \nabla \phi_n = \vec{g}_n. \quad (2.27')$$

то мы видим, что как и в случае основного состояния, задача нахождения поправок сводится к решению электростатической задачи с переменной диэлектрической проницаемостью. В данном случае роль вектора напряженности электрического поля играет величина $(\vec{g}_n - \nabla(f_n/f_0))$.

Решение уравнения (2.27) можно записать в том же виде, что и решение уравнения (2.24):

$$\psi_0^2 \vec{g}_n + (f_n \nabla f_0 - f_0 \nabla f_n) e^{-2\phi_0} = \int_{R^k} dx' \vec{G}_{ex}(x, x') (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 \quad (2.30)$$

с той же самой функцией Грина $\vec{G}_{ex}(x, x')$, что и в (2.25). Информация о высших поправках f_n , характеризующих деформацию множества нулей, дается соотношением

$$f_n(x) = \frac{\nabla f_0 \cdot \int \vec{G}_{ex}(x, x') (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx'}{(\nabla f_0)^2 \exp\{-2\phi_0\}} \quad (2.31)$$

Итак, казалось бы, мы имеем все необходимое для построения ТВ для возбужденных состояний. Однако это не совсем так. Поясним, в чем дело.

Когда нам из каких-либо соображений удалось угадать положения нулевых поверхностей, то построение ТВ не представляет трудностей, поскольку задача фактически сводится к той, которая была в случае основного состояния, так как

$$f_n = 0, \quad n \geq 1$$

и, следовательно,

$$\tilde{Q}_1 = Q_1 \equiv V_1, \quad \tilde{Q}_n = Q_n = - \sum_{i=1}^{n-1} \tilde{g}_i \tilde{g}_{n-i}. \quad (2.32)$$

В общем же случае ситуация представляется довольно неопределенной, поскольку для нахождения деформаций многообразия нулей $f_n(x)$ необходимо привлекать дополнительные соображения, которые позволили бы продолжить $f_n(x)$ из области $x \in S_0$ (см. (2.31)), в которой они определены, на все пространство \mathbb{R}^k . В одномерном случае эта дополнительная информация дается осцилляционной теоремой (см. [5], § 2I). Смысл этой теоремы заключается в том, что предэкспонента $f(x)$ - полином степени, равной номеру изучаемого уровня, а поправки f_n должны быть полиномами степеней, не превышающих величины номера уровня. Поскольку в одномерии S' - совокупность нескольких точек на прямой, то величина деформаций их положений дается (2.31).

$$f_n(x_i^0) = \int_{-\infty}^{x_i^0} (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx' / f_0'(x_i^0) e^{-2\phi_0(x_i^0)}; \quad x_i^0 \in S_0, \quad i=1, \dots, \ell \quad (2.31^2)$$

где ℓ - номер исследуемого уровня. Итак, задача сводится к определению коэффициентов полинома $(\ell - 1)$ степени $P_n^{(\ell-1)}(x)$, заданного в точках x_i^0 ($P_n^{(\ell-1)}(x_i^0) = f_n(x_i^0)$)^{х)}.

В многомерии подобная дополнительная информация отсутствует, поскольку многомерный аналог осцилляционной теоремы в настоящее время неизвестен. Единственно, что известно об узловых

х) Поэтому необходимо решить систему ℓ уравнений с ℓ неизвестными. Отметим, что очень просто это решение может быть получено по правилу Крамера, причем определитель системы является определителем Вандермонда.

поверхностях в многомерии — узловые поверхности N -уровни делит пространство не более чем на N частей [24]. Эта трудность отражает факт отсутствия классификации состояний в многомерном случае. Итак, прежде чем строить ТВ, необходимо решить классификационную задачу. В некоторых частных случаях (когда невозмущенная задача — точнорешаемая) проблема классификации может быть решена технически, с помощью решения секулярного уравнения. Это свойство будет нами использоваться в разделе 3.

2.3. 0 связь со стандартной теорией возмущения

Обсудим теперь связь данной ТВ со стандартной ТВ Релея-Прендлера. Ее легко проследить, если сравнить разложение волновой функции в обычном подходе

$$\Psi = \Psi_0 + \lambda \Psi_1 + \lambda^2 \Psi_2 + \dots = \sum \lambda^n \Psi_n \quad (2.33)$$

и в подходе, развиваемом в настоящей лекции,

$$\Psi = (f_0 + \lambda f_1 + \lambda^2 f_2 + \dots) \exp\{-\phi_0 - \lambda \phi_1 - \lambda^2 \phi_2 - \dots\} = \left\{ \sum \lambda^n f_n \right\} e^{-\sum \lambda^n \phi_n} \quad (2.34)$$

Вспомним теперь выражения для Ψ_n и E_n в обычном подходе (см. напр., [5] § 38) и сравним их с соответствующими в нашем (для этого экспоненту в (2.34) нужно разложить в ряд). Тогда получаются два семейства правил сумм (для краткости приведем по одному представителю каждого) ^{х)} [17]

х) Ради простоты не будем обращать внимание на поправки к формулам стандартной ТВ при наличии непрерывного спектра в невозмущенной задаче и модификации этих формул вследствие вырождения.

$$\psi_1^{(n)} = \sum_m \frac{\langle m | V_1 | n \rangle}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \psi_0^{(m)} = \left(-\phi_1 + \frac{f_1}{f_0} \right) \psi_0^{(n)}, \quad (2.35)$$

$$E_2^{(n)} = \sum_m \frac{|\langle m | V_1 | n \rangle|^2}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} = \int \tilde{Q}_2 \{ \psi_0^{(n)} \}^2 dx / \int \{ \psi_0^{(n)} \}^2 dx, \quad (2.36)$$

где нижний индекс - номер поправки, верхний - номер рассматриваемого уровня; факт, что возникают подобные правила сумм, неоднократно отмечался во многих работах [14-18, 21-22, 23, 25]. В [15, 23] они были построены явно для основного состояния применительно к одномерному случаю. В частности, в [23] было проведено прямое доказательство (2.36), а формула (2.35) была фактически доказана в основополагающей работе Зельдовича [26]. Исследование этих правил сумм дает информацию о спектре невозмущенной задачи в случаях, когда он заранее неизвестен.

В чем же состоит принципиальное различие (2.33) и (2.34)? Ответ на этот вопрос заключается в следующем. Если мы находим первые N_1 поправок в разложении (2.34), то воспроизводятся не только первые N_1 поправок разложения (2.33), но также учитывается часть вкладов высших поправок. При построении данного подхода мы нигде не пользовались знанием всего спектра невозмущенной задачи. Нам потребовалось знание только того уровня, к которому ищется поправка. Объяснение этого явления особенно просто в одномерном случае. Пусть, мы знаем $\psi_0^{(k)}$ - невозмущенную волновую функцию k -го состояния с энергией $E = E_0^{(k)}$, которая есть решение линейного дифференциального уравнения второго порядка (которым является уравнение Шредингера). Далее, если

известно одно решение, то с помощью квадратур мы можем построить второе, линейно независимое решение. Следовательно, поскольку известны оба линейно независимых решения, то можно построить функцию Грина при фиксированной энергии $E = E_0^{(k)}$. С другой стороны, во все формулы ТВ входит функция Грина именно при энергии $E = E_0^{(k)}$, поскольку уравнение для определения n -й поправки имеет вид:

$$\Delta \Psi_n + (E_0^{(k)} - V_0) \Psi_n = F(E_i, \Psi_i), \quad i < n. \quad (2.37)$$

Поэтому все формулы можно написать в виде квадратур, что и было фактически сделано Зельдовичем [26]. К сожалению, в многомерии подобная процедура построения функции Грина в настоящее время неизвестна.

На этом мы завершим изложение подхода и уделим некоторое внимание истории вопроса.

Историческое отступление. Об истории развития данного метода.

Экскурс в историю вопроса я бы начал с шуточного замечания, что новое — это хорошо забытое или малозвестное старое. Многие аспекты вышеизложенного подхода в той или иной степени высказывались ранее. Например, преобразование (2.4) использовалось классиками ВКБ при построении квазиклассического приближения. Рытовым — в теории колебаний (см. монографию Наафе [27]), Бемлом [28], Пенроузом-Онзагером [29] Боголюбовым-Зубаревым [30] — в задачах многих тел и статистической физики. Теория возмущений в квадратурах в одномерном случае была впервые описана в работе Прайса [31] с помощью перехода к уравнению Риккати и независимо Зельдовичем [26], а затем Киржницем [32] — не-

посредственно в уравнении Шредингера. Отметим, что Киржницу с помощью данного подхода удалось найти поправку к приближению Хартри-Фока при расчете двухэлектронных атомов (см. [32] и монографию [33]). В работах Далгарно-Левиса и Стейнхаммера развивался несколько другой подход к ТВ, позволяющий также получать формулы в квадратурах (см. обзор [11]). В дальнейшем подобные подходы и замкнутые формулы для поправок ТВ многократно перекрывались разными авторами [14-18, 21-23, 25, 34], которые демонстрировали их преимущества перед стандартными. В частности, в [25] был построен пример некоторой быстроходящейся итерационной схемы для решения задачи об ангармоническом осцилляторе. Как было позднее показано в одной из работ автора, эта схема сводится к описанной в лекции ТВ. Подробное исследование метода было дано авторам в работе [17], причем в [14] был впервые сформулирован рецепт получения сходящихся рядов ТВ. В качестве примера была построена ТВ для низших состояний в потенциале X^{2n} . В [8] в рамках данного подхода была решена задача об основном состоянии атома водорода в произвольном постоянном электрическом поле, а в [16] - об основном состоянии двумерного сферически-несимметричного ангармонического осциллятора.

Обобщение подхода на случай возбужденных состояний в одномерном случае было предложено Поликановым [21-22], а затем Ароновым-Лу [23] и в общем случае - автором [16-17].

Многомерное обобщение данного подхода было сформулировано в [15] и независимо в [18]. В работе [16] была описана связь ТВ с вариационным принципом. Было показано, что результаты вариационных расчетов представляют собой первые два коэффициента некоторого ряда ТВ и поэтому вычисление следующих коэффициентов

этого ряда позволяет оценивать точность вариационных расчетов и итерационным способом ее повышать. Кроме того, в этой работе было найдено, что рецепт получения сходящихся рядов ТВ, сформулированный ранее [14], есть не что иное как обычные требования, исходя из которых строится класс пробных функций для вариационных расчетов. В частности, рецепт, предложенный в [25] - частный случай общего рецепта, справедливый только для неотрицательных и растущих на бесконечности потенциалов. В работах [16-17] было также описано обобщение подхода на случай возбужденных состояний. Кроме того, было доказано, что когда можно реализовать стандартную ТВ, данный подход становится чисто алгебраической процедурой, сводящейся к решению рекуррентных соотношений [35].

В настоящее время подход интенсивно развивается. Происходит перерасмотрение практически всех известных задач квантовой механики.

3. Алгебраизации стандартной теории возмущений

В предыдущем разделе мы описали общую структуру метода и теперь начнем рассмотрение более конкретных задач. Предметом этого раздела будет ситуация, в которой может быть построена стандартная ТВ Релея-Шредингера: невозмущенная задача - точно-решаемая. Мы покажем, что в этом случае построение нашей ТВ - чисто алгебраическая задача, сводящаяся к решению довольно простых рекуррентных соотношений. При этом появляется возможность проанализировать структуру произвольной поправки ряда ТВ в случае произвольных возмущений полиномиального вида, а некоторые элементы этой поправки найти в явном виде. Как побочный продукт у нас в руках оказывается алгебраический способ вычисления различных матричных элементов, основанный на использовании правил сумм (2.35).

Итак, первая важная задача, которую мы рассмотрим, — возмущенный гармонический осциллятор.

3.1. Гармонический осциллятор как невозмущенная задача

Не будем напоминать читателю о важности этой задачи — она встречается практически в любой физической науке. Потенциал нулевого приближения, отвечающий гармоническому осциллятору, имеет вид

$$V_0 = \sum_{i=1}^d a_i x_i^2, \quad a_i > 0, \quad (3.1)$$

а потенциал возмущения пусть будет полиномиальным

$$V_1 = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_d\}}^{l_{1, \max} \dots l_{d, \max}} a_{i_1 i_2 \dots i_d} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_d^{i_d}. \quad (3.2)$$

Требование полиномиальности возмущения не ограничивает общности нашего рассмотрения, поскольку в противном случае потенциал возмущения можно разложить в ряд Тейлора и рассматривать (3.3) как бесконечную сумму. Ради простоты будем считать гармонический осциллятор сферически симметричным, т.е. $a_i = 1$. В дальнейшем мы продемонстрируем несущественность этого условия. Рассмотрим уравнение (2.28). Первое чудо, с которым мы сталкиваемся, это сокращение в комбинации

$$\frac{f_n}{f_0} (\Delta f_0 - 2\vec{g}_0 \cdot \nabla f_0) = -2k \frac{f_n}{f_0}, \quad \vec{g}_0 = \vec{x}, \quad (3.3)$$

так как f_0 в данном случае — многомерный полином Эрмита или линейная комбинация таких полиномов (см. /36/), где k — "главное квантовое число"; например, если $f_0 = H_{k_1}(x_1) \dots H_{k_d}(x_d)$, где $H_i(x)$ — обычный полином Эрмита /36/, то

$$k = k_1 + k_2 + \dots + k_d. \quad (3.3')$$

Поэтому уравнение (2.28) с учетом (3.3) приобретает вид

$$\nabla \vec{g}_n - 2\vec{g}_0 \vec{g}_n + \frac{2\vec{g}_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\vec{g}_0 \nabla f_n + 2k f_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.4)$$

Учитывая теперь потенциальность поля \vec{g}_n

$$\vec{g}_n = \nabla \phi_n, \quad (3.5)$$

получаем окончательно ($\vec{g}_0 = \vec{x}$)

$$\Delta \phi_n - 2\vec{x} \nabla \phi_n + \frac{2\nabla \phi_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\vec{x} \nabla f_n + 2k f_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.6)$$

Отметим, что если f_0 - полином Эрмита с главным квантовым числом k , то выражение в скобках обращается в нуль.

Теперь можно сформулировать основное утверждение данного раздела.

Теорема I. Построение теории возмущений для гармонического осциллятора в случае полиномиального потенциала возмущения - алгебраическая задача. Это значит, что ϕ_n и f_n - многомерные полиномы; коэффициенты которых находятся из рекуррентных соотношений, следующих из (3.6). В частности, если старшая степень в потенциале возмущения по переменной x_i равна I_i , то старшая степень по этой переменной в произвольной поправке ϕ_n лежит в интервале от $(nI_i - 2n + 2)$ до nI_i в зависимости от конкретного вида потенциала возмущения (3.2).

Доказательство. В случае основного состояния доказательство фактически содержится в работе /35/. Рассмотрим общий случай, предположив, что проблема классификации решена, т.е. f_0 - некоторый многомерный полином, являющийся суперпозицией многомерных полиномов Эрмита с заданным главным квантовым числом. Доказательство будем вести по индукции.

Рассмотрим уравнение на первую поправку

$$\Delta \phi_1 - 2\bar{x} \nabla \phi_1 + \frac{2\nabla \phi_1 \nabla f_0 - (\Delta f_1 - 2\bar{x} \nabla f_1 + 2k f_1)}{f_0} = E_1 - V_1. \quad (3.7)$$

Очевидно, что ϕ_1 - некоторый многомерный полином, содержащий те же комбинации степеней $\{i_1, i_2, \dots, i_d\}$, что и потенциал V_1 , поскольку оператор $\bar{x} \nabla_x$ - однородный, а также комбинации подобных степеней^{ж)}. Одно из условий нахождения поправки f_1 - это требование сокращения дроби в (3.7), т.е.

$$\frac{2\nabla \phi_1 \nabla f_0 - (\Delta f_1 - 2\bar{x} \nabla f_1 + 2k f_1)}{f_0} = R_1, \quad (3.8)$$

где R_1 - некоторый полином, который мы должны найти. Или, эквивалентно,

$$\Delta f_1 - 2\bar{x} \nabla f_1 + 2k f_1 = 2\nabla \phi_1 \nabla f_0 - R_1 f_0. \quad (3.9)$$

Напомним, что f_0 - суперпозиция многомерных полиномов Эрмита с главным квантовым числом k и f_0 удовлетворяет однородному уравнению (3.9). Разложим правую часть (3.9) в ряд по многомерным полиномам Эрмита^{жж)} и потребуем отсутствия в этом разложении членов с главными квантовыми числами, большими или равными k . Из этого условия сразу определяются коэффициенты полинома R_1 . Тогда решение (3.9) в виде ряда по полиномам Эрмита однозначно находится. Стоит отметить, что R_1 будет содержать те же комбинации степеней, что и ϕ_1 с единственным условием, что все p_i не обращаются в нуль одновременно^{жж)}.

ж) Подобными комбинациями степеней мы будем называть комбинации, которые содержат степени $\{i_1 - 2p_1, i_2 - 2p_2, \dots, i_d - 2p_d\}$, где $p_1, p_2, \dots, p_{d-1}, p_d$ - целые положительные числа, причем выполнено условие $(i_c - 2p_c) \geq 0$ для любого c .

жж) Естественно, правая часть будет содержать конечное число членов, причем старший член будет характеризоваться квантовым числом $M = k + i_{1 \max} + i_{2 \max} + \dots + i_{d \max} - 2$.

Итак, на первом этапе возникают рекуррентные соотношения для коэффициентов R_i , а после этого - на втором этапе - рекуррентные соотношения для коэффициентов ϕ_i , следующие из уравнения

$$\Delta \phi_i - 2\vec{x} \nabla \phi_i + R_i = E_i - V_i. \quad (3.10)$$

Прежде чем перейти к рассмотрению произвольной поправки ϕ_n , сделаем несколько подготовительных замечаний. Введем функцию R_n по аналогии с R_i . Поскольку $n > 1$, то R_n будет содержать вклад от правой части (3.4), т.е. от \tilde{Q}_n , содержащий члены с f_0 в знаменателе

$$R_n = \left\{ 2\nabla \phi_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\vec{x} \nabla f_n + 2k f_n) - \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ f_i \left[-\Delta \phi_{n-i} + 2\vec{x} \nabla \phi_{n-i} + (E_{n-i} - V_{n-i}) + \sum_{j=1}^{n-i} \nabla \phi_j \nabla \phi_{n-i-j} \right] - 2\nabla f_i \nabla \phi_{n-i} \right\} \right\} / f_0, \quad (3.11)$$

или, с учетом того, что выражение в квадратных скобках равно R_{n-i}

$$R_n = \left\{ 2\nabla \phi_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\vec{x} \nabla f_n + 2k f_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2\nabla f_i \nabla \phi_{n-i}) \right\} / f_0. \quad (3.12)$$

Тогда уравнение для определения f_n принимает вид, аналогичный (3.9)

$$\Delta f_n - 2\vec{x} \nabla f_n + 2k f_n = \sum_{i=0}^{n-1} (2\nabla f_i \nabla \phi_{n-i} - f_i R_{n-i}). \quad (3.13)$$

Предположив теперь, что ϕ_i , f_i и R_i при $i < n$ - полиномы, причем f_i содержит полиномы Эрмита с главными квантовыми числами, меньшими либо равными k , аналогично тому как это делалось для f_i , найдем сначала R_n , а затем f_n . После этого возникнут рекуррентные соотношения для ϕ_n из уравнения

$$\Delta \phi_n - 2\vec{x} \nabla \phi_n + R_n = E_n - Q_n. \quad (3.14)$$

где $Q_n = - \sum_{i=1}^{n-1} \vec{g}_i \vec{g}_{n-i}$, поскольку уравнение (3.14) допускает полиномиальное решение, ибо правая часть его представляет собой полином по построению, что и требовалось доказать.

Вышеприведенное рассуждение, конечно, нельзя считать строгим доказательством, а скорее очень правдоподобной его схемой. Однако, нет сомнений что его можно сделать строгим.

В заключение отметим тот факт, что для анализа старших степеней поправки ϕ_n не требуется знание R_i и f_i , которые не дают вклада в старшие степени. Таким образом, эти коэффициенты не зависят от рассматриваемого уровня и более того, могут быть найдены в явном виде, что будет сделано ниже.

Прежде чем перейти к рассмотрению конкретных задач, поясним почему возникла алгебраизация. Для этого запишем, например, первую поправку обычной ТВ Релея-Шредингера

$$\psi_n^{(1)} = \sum_k^{(1)} \frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}$$

Невозмущенная волновая функция $\psi_k^{(0)}$ имеет вид полинома Эрмита (комбинация полиномов Эрмита), умноженного на гауссову функцию. С другой стороны, известно (см. [5]), что если возмущение полиномиально, то имеется ограниченное число ненулевых матричных элементов переходов V_{nk} . Это, в свою очередь, означает, что в ряду по промежуточным состояниям содержится конечное число членов и формула для поправки представляет собой суперпозицию полиномов Эрмита с некоторыми весами, умноженных на одну и ту же гауссову функцию. Таким образом, предэкспонента является конечным полиномом. Аналогичное рассуждение проводится и для произвольной поправки $\psi_n^{(i)}$. Это и есть объяснение явления алгебраизации. Впервые на это явление обратил внимание Бендер и

Бу [1,2], которые работали в формализме F - функций Дальгарно применительно к задаче об основном состоянии одномерного ангармонического осциллятора. Им были выписаны рекуррентные соотношения, с помощью которых они вычисляли 75 коэффициентов в разложении энергии основного состояния и нашли асимптотические поведения этих коэффициентов. В компании с Банксом [12-13], они проделали аналогичную процедуру для основного состояния двумерного несимметричного осциллятора. В рамках обсуждаемого в лекции формализма алгебраизация в одномерном случае для основного состояния была обнаружена в работах [25,37], а в двумерном - в работе [17]. В многомерном случае при произвольном полиномиальном возмущении утверждение об алгебраизации ТВ для основного состояния было сформулировано в [35]. В настоящее время подход интенсивно развивается как в направлении использования метода F - функций Дальгарно и его модификаций [38], так и в рамках данного подхода, описанного в работе [39].

3.1а Одномерный ангармонический осциллятор

Мы теперь рассмотрим первый конкретный пример - классическую задачу об одномерном ангармоническом осцилляторе

$$V = x^2 + gx^4 \quad (3.15)$$

и построим ТВ по константе связи g . В этом случае невозмущенная волновая функция k -го уровня равна

$$\Psi_0 = H_k(x) \exp\left\{-\frac{x^2}{2}\right\}, \quad (3.16)$$

где $H_k(x)$ - k -й полином Эрмита, т.е. $f_0 = H_k(x)$

Уравнение (3.4) приобретает тогда вид

$$\phi_n'' - 2x\phi_n' + \frac{2\phi_n' f_0' - (f_n'' - 2xf_n' + 2kf_n)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.17)$$

Либо, вспоминая определение (3.12)_{n-1},

$$R_n = \frac{2\phi_n' f_0' - (f_n'' - 2xf_n' + 2kf_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2f_i' \phi_{n-i}')}{f_0}, \quad (3.18)$$

можно записать это уравнение в более удобной форме

$$\phi_n'' - 2x\phi_n' + R_n = E_n - Q_n, \quad (3.19)$$

где $Q_1 = V_1$, $Q_n = -\sum_{i=1}^{n-1} \phi_i' \phi_{n-i}'$. Начнем с вычисления первого порядка. Ясно, что $q_1 = \phi_1'$ имеет вид полинома третьей степени, содержащего только нечетные степени (из симметрии задачи), а функция R_1 - вид полинома $\alpha x^2 + \beta$. Подставляя R_1 в правую часть (3.18) и перерезгая в ряд по полиномам Эрмита, видим, что возникло разложение, содержащее полиномы $H_{k+2}, H_k, H_{k-2}, H_{k-4}$. Занулим коэффициенты при H_{k+2} и H_k , и это позволит нам определить полином R_1 . Подставим теперь R_1 в (3.19), после чего сразу находим ϕ_1 . Теперь (см. (3.9)) в уравнении на поправку f_1 определена правая часть. Ищем f_1 в виде суперпозиции H_{k-2} и H_{k-4} . Поскольку H_k - решение уравнения для поправки, то оно может входить с произвольным коэффициентом в f_1 . Мы этот коэффициент занулим, т.к. он фиксирует нормировку волновой функции, которая для нас несущественна. Окончательный вид первой поправки следующий:

$$\phi_1 = \frac{x^4}{8} + \frac{x^2}{4} \left(k + \frac{3}{2}\right), \quad E_1 = \frac{3}{2} \left(k^2 + k + \frac{1}{2}\right),$$

$$f_1 = k \frac{k!}{(k-2)!} H_{k-2} + \frac{1}{2} \frac{k!}{(k-4)!} H_{k-4}. \quad (3.20)$$

Столь же легко и просто находится вторая поправка

$$-\phi_2 = \frac{x^6}{48} + \frac{x^4}{64} (6k+11) + \frac{x^2}{32} (9k^2 + 25k + 21),$$

$$f_2 = \left(-\frac{87}{32}k^2 + \frac{7}{32}k - \frac{3}{2}\right) \frac{k!}{(k-2)!} H_{k-2} + \left(\frac{k^2}{2} - \frac{5k}{16} + \frac{35}{32}\right) \frac{k!}{(k-4)!} H_{k-4} + \left(\frac{k}{3} - \frac{13}{24}\right) \frac{k!}{(k-6)!} H_{k-6} + \frac{1}{16} \frac{k!}{(k-8)!} H_{k-8}; \quad -E_2 = \frac{3k^3 + 51k^2 + 59k + 21}{16}. \quad (3.21)$$

Выражения для E_1 и E_2 совпадают со стандартными /40/. В экспоненте f_1 и f_2 содержатся полиномы меньших степеней, чем в H_k . Спуская ϕ_1 и ϕ_2 из экспоненты вниз, т.е. разлагая экспоненту в ряд, восстанавливаем все возможные матричные элементы переходов V_{mk} . Отметим, что E_1 дает значение диагонального матричного элемента. Итак, мы алгебраически нашли соотношения между различными матричными элементами.

Из (3.17)-(3.19) легко показать, что произвольная поправка имеет следующий функциональный вид

$$\phi_n = \sum_{i=0}^n a_i^{(n)} x^{2i+2},$$

$$R_n = \sum_{i=0}^n \alpha_i^{(n)} x^{2i}, \quad f_n = \sum_{i=1}^{2n} A_i^{(n)} H_{k-2i}(x), \quad (3.22)$$

и практически не представляет особого труда найти несколько старших коэффициентов в (3.22), решая явно рекуррентные соотношения, опускаясь сверху вниз (от старшего коэффициента к младшему). Для

$$\phi_n \text{ получается}$$

$$a_n^{(n)} = (-)^{n+1} \frac{(2n-2)!}{(n+1)! (n-1)!},$$

$$a_{n-1}^{(n)} = \frac{(-)^{n+1}}{n} \left\{ \frac{1}{4} + \left(k + \frac{1}{2}\right) \frac{(2n-1)!}{2^{2n} n! (n-1)!} \right\},$$

$$a_{n-2}^{(n)} = (-)^{n+1} \left\{ \frac{1}{2} \left(k + \frac{1}{2}\right) + \frac{(2n-2)!}{3 \cdot 2^{2n+3} n! (n-1)!} \left[12(4n+1) \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 + 40n^2 - 20n + 9 \right] \right\}, \quad (3.23)$$

а для

$$A_{2n}^{(n)} = \frac{1}{2^{2n-1} n!} \frac{k!}{(k-4n)!},$$

(3.24)

$$A_{2n-1}^{(n)} = \left\{ \frac{k - \frac{4}{3}(n-1)}{2^{2n-3} (n-1)!} - \frac{k-1}{2^{n-1} (2n-1)!!} \right\} \frac{k!}{(k-4n+2)!}.$$

Аналогичным образом можно находить и следующие коэффициенты. Эта задача очень просто решается на ЭВМ с помощью символических языков программирования типа **REDUCE-2**. Отметим, что старший коэффициент в (3.23) не зависит от рассматриваемого уровня, как и должно быть. Для основного состояния это коэффициент был впервые вычислен в /25/. Кратко проанализируем свойства коэффициентов $a_{n-i}^{(n)}$ (см. (3.22)). Можно показать, что с увеличением i степень роста этих коэффициентов увеличивается в зависимости от n по приближительному закону $a_{n-i}^{(n)} \sim n^i$. Таким образом, если при небольших i они ведут себя как степень, то при $i \sim n$ их рост становится факториальным. В принципе, из анализа рекуррентных соотношений могут быть найдены формулы, описывающие асимптотическое поведение коэффициентов $a_{n-i}^{(n)}$ и $A_i^{(n)}$, а следовательно и E_n . Но эта задача будущего исследования, и если ее удастся решить, то возникнет альтернатива квазиклассическим вычислениям: а ля Липатов /41/.

3.16. Многомерный ангармонический осциллятор (система связанных ангармонических осцилляторов)

Покажем, как работает развитый метод для системы связанных ангармонических осцилляторов. Эта задача представляет особый интерес, поскольку встречается в физике твердого тела и является дискретным аналогом теории поля.

Итак, нулевое приближение — полностью несимметричный ангармонический осциллятор в пространстве размерности

$$V_0 = \sum_{i=1}^d m_i^2 x_i^2, \quad (3.25)$$

где $m_i \neq m_j \neq 0$ для любых i и j . Пусть потенциал возмущения имеет вид формы четвертого порядка

$$V_1 = \sum_{i=1}^d g_i x_i^4 + \sum_{i,j=1}^d g_{ij} x_i^2 x_j^2, \quad g_{ij} = g_{ji}. \quad (3.26)$$

Эта задача обладает одним уникальным свойством - в ней отсутствует вырождение и поэтому нет проблем классификации состояний. Состояния характеризуются наборами из d квантовых чисел k_1, k_2, \dots, k_d . Волновая функция нулевого приближения произвольного состояния имеет вид

$$\Psi_0^{(k_1, k_2, \dots, k_d)} = \prod_{i=1}^d H_{k_i}(\sqrt{m_i} x_i) e^{-\frac{m_i x_i^2}{2}}, \quad (3.27)$$

где $H_k(x)$ - обычный полином Эрмита. Энергия состояния

$$E_0 = \sum_{i=1}^d m_i (2k_i + 1). \quad (3.28)$$

Начнем развивать теорию возмущений и в качестве примера найдем первую поправку. Результат сокращения в комбинации (3.3)

$$\frac{f_1}{f_0} (\Delta f_0 - 2\vec{g}_0 \cdot \nabla f_0) = -\frac{f_1}{f_0} \sum_{i=1}^d 2m_i k_i \quad (3.29)$$

приводит к тому, что уравнения для первой поправки имеют вид

$$\Delta \phi_1 - 2 \sum_{i=1}^d m_i x_i \frac{\partial \phi_1}{\partial x_i} + R_1 = E_1 - V_1, \quad (3.30)$$

$$\Delta f_1 - 2\vec{g}_0 \cdot \nabla f_1 + f_1 \sum_{i=1}^d 2m_i k_i = 2\vec{g}_1 \cdot \nabla f_0 - R_1 f_0, \quad (3.31)$$

где $\vec{g}_1 = \nabla \phi_1$, а $\vec{g}_0 = (m_1 x_1, m_2 x_2, \dots, m_d x_d)$. Уравнение (3.31) характеризует деформацию узловых поверхностей. Будем искать ϕ_1 в следующем функциональном виде

$$\Phi_1 = \frac{1}{2} \sum_i a_i x_i^2 + \frac{1}{4} \sum_i b_i x_i^4 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} x_i^2 x_j^2 \quad (3.32)$$

с. $c_{ij} = c_{ji}$, а R_1 как

$$R_1 = \sum_i d_i x_i^2 + \beta. \quad (3.33)$$

Разложим теперь правую часть (3.31) в ряд по полиномам Эрмита и получим

$$2\bar{g}_1 \nabla f_0 - R_1 f_0 = A \prod_i H_{k_i} + \sum_i (A_i^{(1)} H_{k_i+2} + A_i^{(2)} H_{k_i-2} + A_i^{(3)} H_{k_i-4}) x \quad (3.34)$$

$$+ \prod_{j \neq i} H_{k_j} + \sum_{i,j} (A_{ij}^{(1)} H_{k_i+2} H_{k_j-2} + A_{ij}^{(2)} H_{k_i-2} H_{k_j-2}) \prod_{c \neq i,j} H_{k_c}.$$

Потребуем теперь задуления коэффициентов A и $A_i^{(1)}$ в этом разложении и сразу же определим

$$d_j = 2b_j k_j + 2 \sum_i c_{ij} k_i,$$

$$\beta = 2 \sum_i a_i k_i + 3 \sum_i \frac{b_i k_i^2}{m_i} + \sum_{i,j} c_{ij} \frac{k_i (2k_j + 1)}{m_j} - \sum_i d_i \frac{(2k_i + 1)}{2m_i}. \quad (3.35)$$

После нахождения коэффициентов R_1 (3.35), произведем подстановку R_1 в (3.30) и найдем a_i , b_i и c_{ij} в (3.32), а затем и E_1 . Окончательное выражение для ϕ_1 и E_1 дается формулами

$$\phi_1 = \sum_{i=1}^d \left\{ \frac{2k_i+3}{8m_i^2} + \frac{1}{8m_i} \sum_{j \neq i} g_{ij} \frac{2k_j+1}{m_i+m_j} \right\} x_i^2 + \sum_{i=1}^d \frac{g_i x_i^4}{8m_i} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} g_{ij} \frac{x_i^2 x_j^2}{4(m_i+m_j)} \quad (3.36)$$

и

$$E_1 = \sum_{i=1}^d \frac{3g_i}{4m_i^2} (2k_i^2 + 2k_i + 1) + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{(2k_i+1)(2k_j+1)}{8m_i m_j} g_{ij} \quad (3.37)$$

Отметим то обстоятельство, что коэффициенты при старших степенях в (3.36) не зависят от рассматриваемого состояния. Теперь, зная коэффициенты a_i , b_i и c_{ij} , находим $A_i^{(2)}$, $A_i^{(3)}$ и $A_{ij}^{(1)}$, $A_{ij}^{(2)}$ в (3.34) и таким образом определяем правую часть (3.31). Ищем решение (3.31) в виде суперпозиции многомерных полиномов Эрмита таких же, что и в правой части уравнения (3.31). Окончательно выражение для деформации узловых поверхностей в первом порядке

$$f_1 = \left\{ \sum_{(i,j)} \frac{g_{ij}}{2m_i m_j (m_i + m_j)} \frac{k_i!}{(k_i-2)!} \frac{k_j!}{(k_j-2)!} \frac{H_{k_i-2} H_{k_j-2}}{H_{k_i} H_{k_j}} + \frac{g_{ij}}{8m_i (m_i^2 - m_j^2)} \times \right. \quad (3.38)$$

$$\left. \frac{k_j!}{(k_j-2)!} \frac{H_{k_i+2} H_{k_j-2}}{H_{k_i} H_{k_j}} + \sum_i \left\{ \frac{g_i}{4m_i^3} \frac{k_i!}{(k_i-4)!} \frac{H_{k_i-4}}{H_{k_i}} + \left[\frac{k_i g_i}{m_i^3} + \sum_j g_{ij} \frac{2k_j+1}{4m_i^2 m_j} \right] \frac{k_i!}{(k_i-2)!} \frac{H_{k_i-2}}{H_{k_i}} \right\} \prod_{i=1}^d H_{k_i}$$

Итак, без особого труда мы нашли первый порядок ТВ. Несильно более сложно находится второй порядок, формулы для которого мы не будем приводить в силу их громоздкости. Этот процесс вычисления поправок можно продолжить и далее.

Проанализируем теперь структуру ответа для первой поправки к энергии и посмотрим, какие эффекты возникают при переходе к

случае бесконечного числа связанных осцилляторов. Пусть между константами g_i имеется связь $g_i = C m_i^2 g^i$, где C и g — некоторые параметры. Тогда очевидно, что в первой поправке к энергии имеется член

$$\tilde{E}_1 \sim \frac{3}{4} C \frac{g^{d-1}}{g-1} \quad (3.37^I)$$

и при $g = 1$ первая поправка к энергии становится бесконечной, даже если параметр C очень мал, при $d \rightarrow \infty$. Таким образом, в полевом пределе (а наш осциллятор имеет своим полевым пределом некоторую нелокальную теорию поля), начиная с некоторых констант связи, поправка к энергии вакуума или другим, возбужденным состояниям становится бесконечной, причем эта бесконечность не убирается перенормировкой зарядов. Это означает, что если мы сразу работаем с теорией поля, то получим полюс в энергии и в принципе не будем знать природу этого полюса. С нашей же точки зрения мы вьвязь видим, как он возникает при переходе к пределу, хотя в конечномерном случае этот полюс отсутствует. Этот простой факт позволяет надеяться на некий нетривиальный взгляд на теорию поля с точки зрения квантовой механики и, в частности, на создание альтернативной методики вычисления порядков ТВ, отличной от фейнмановской диаграммной техники.

Несколько слов о структуре произвольной поправки ТВ. Можно легко показать, что функциональный вид поправки в экспоненте следующий:

$$\Phi_n = \frac{1}{2n+2} \sum_i b_i^{(n)} x_i^{2n+2} + \sum_{\substack{l=1 \\ ij}}^{l=n-1} C_{ij}^{(n)} x_i^{2l} x_j^{2n+2-2l} + \left\{ \begin{array}{l} \text{комбинации} \\ \text{подобных} \\ \text{степеней} \end{array} \right\} \quad (3.39)$$

Это выражение помимо явно выписанных старших степеней содержит также комбинации подобных степеней. Поразительным является обстоятельство, что можно вычислить въявь некоторые коэффициенты при любом n , в частности,

$$b_i^{(n)} = (-1)^{n+1} \frac{(2n-2)!}{2^{2n-1} n! (n-1)!} \frac{q_i^n}{m_i^{2n-1}}. \quad (3.40)$$

Отметим, что коэффициенты (3.40) не зависят от рассматриваемого состояния. Столь же просто выписывается функциональная структура f_n . Мы не будем ее приводить из-за громоздкости выражений.

На этом закончим рассмотрение возмущенного гармонического осциллятора и перейдем к обсуждению возмущенной кулоновской задачи.

3.2. Кулоновская система, возмущенная произвольным мультипольным статическим взаимодействием.

В предыдущем разделе был рассмотрен гармонический осциллятор, возмущенный полиномиальным взаимодействием. Было показана алгебраизация процедуры построения ТВ. В этом разделе аналогичный факт будет установлен для случая кулоновской системы, описываемой потенциалом

$$V_0 = - \frac{2\alpha N}{r}, \quad (3.41)$$

где α , N - некоторые параметры, введенные для удобства, причем эта система возмущается произвольным мультипольным статическим потенциалом, содержащим конечное число гармоник Y_{lm} .

$$V_1 = \sum_{l,m} V_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.42)$$

с ограничением, что

$$V_{lm}(r) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} a_k r^k. \quad (3.43)$$

Сделаем несколько предварительных замечаний. Так же как и в случае гармонического осциллятора, происходит сокращение в комбинации

$$\frac{f_n}{f_0^2} (\Delta f_0 - 2\vec{g}_0 \nabla f_0) = -\frac{2\alpha(N-1)}{r} \frac{f_n}{f_0}, \quad (3.44)$$

где N - некоторая комбинация квантовых чисел задачи, которая будет определена несколько позже. В случае, когда ψ_0 - кулоновская волновая функция в сферических координатах (мы не заботимся о нормировке), равная

$$\psi_0 = r^L \tilde{R}_{n,r,l}(2\alpha r) Y_{lm}(\theta, \varphi) e^{-\alpha r}, \quad E_0 = -\alpha^2, \quad (3.45)$$

тогда

$$f_0^{(N)} = r^L \tilde{R}_{n,r,l}(2\alpha r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \vec{g}_0 = \alpha \frac{\vec{r}}{r}. \quad (3.45^I)$$

где $\tilde{R}_{n_r, \ell}$ - полином Лагерра, а $Y_{\ell m} = P_{\ell}^m(\theta) \begin{cases} \cos m\varphi & m \geq 0 \\ \sin |m|\varphi & m < 0 \end{cases}$ - сферические гармоники в нормировке Беймана и Эрдейи [36]. В этом случае параметр N дается формулой

$$N = n_r + \ell + 1, \quad (3.46)$$

причем N имеет смысл главного квантового числа, где n_r - радиальное квантовое число, характеризующее число нулей полинома Лагерра. Для параболических квантовых чисел, когда задача рассматривается в параболических координатах,

$$N = n_1 + n_2 + 1, \quad (3.47)$$

где n_1, n_2 - параболические квантовые числа. Уравнение (2.28) с учетом (3.44) приобретает вид

$$\nabla_{\vec{q}_0}^2 - 2\vec{q}_0 \cdot \nabla_{\vec{q}_0} + \frac{2\vec{q}_0 \cdot \nabla_{\vec{q}_0} - (\Delta f_0 - 2\vec{q}_0 \cdot \nabla_{\vec{q}_0} + \frac{2d(N-1)}{r} f_0)}{f_0} = E_n - \tilde{Q}_n. \quad (3.48)$$

Обратим внимание на факт, что $f_0^{(N)}$ из (3.45^I) удовлетворяет уравнению

$$\Delta f_0^{(N)} - 2\vec{q}_0 \cdot \nabla f_0^{(N)} + \frac{2d(N-1)}{r} f_0^{(N)} = 0. \quad (3.49)$$

Введем функции R_n , аналогичные (3.12)

$$R_n = \frac{2\vec{g}_n \nabla f_0 - (\Delta f_n - 2\vec{g}_0 \nabla f_n + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (f_i R_{n-i} - 2\nabla f_i \vec{g}_{n-i})}{f_0} \quad (3.50)$$

На этом предварительные замечания заканчиваются, и можно сформулировать теорему, аналогичную теореме I предыдущего раздела.

Теорема 2. Построение теории возмущений для кулоновской задачи со взаимодействием (3.42)–(3.43) – чисто алгебраическая задача.

Поправки ϕ_n и f_n содержат конечное число гармоник с полиномиальными по r коэффициентами, которые определяются из рекуррентных соотношений, следующих из уравнений (3.48) и (3.50).

Доказательство. Мы не будем его проводить, ибо схема его очень похожа на доказательство теоремы I. Отметим только некоторые узловые моменты. Поправка f_n находится из уравнения, аналогичного (3.13) и следующего из (3.50)

$$\Delta f_n - 2\vec{g}_0 \nabla f_n + \frac{2\alpha(N-1)}{r} f_n = \sum_{i=0}^{n-1} (2\nabla f_i \vec{g}_{n-i} - f_i R_{n-i}). \quad (3.51)$$

Правая часть этого уравнения разлагается в ряд по функциям типа $f_0^{(N)}$ (см. (3.45²)) с различными n_r и l . Функция R_n находится из требования отсутствия в разложении правой части (3.51) членов с $N_i > N$, где $N_i = n_r^i + l^i$. После того как функция R_n найдена, она подставляется в уравнение

$$\Delta \phi_n - 2\vec{g}_0 \nabla \phi_n + R_n = E_n - Q_n. \quad (3.52)$$

Решение этого уравнения ищется в виде ряда по гармоникам

$$\Phi_n = \sum_{\ell, m} \Phi_{\ell m}^{(n)} Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (3.53)$$

Легко видеть, что это разложение содержит конечное число гармоник с полиномиальными по r коэффициентными функциями $\Phi_{\ell m}^{(n)}(r)$. Коэффициенты $\Phi_{\ell m}^{(n)}$ находятся из очевидных рекуррентных соотношений. Вот таким способом проходит доказательство.

Итак, для возмущенной кулоновской задачи также возникает явление алгебраизации. Однако, поскольку мы знаем, что алгебраизация имеется для возмущенного гармонического осциллятора, нас не должно удивлять подобное явление в кулоновской задаче, ибо мы знаем, что кулоновская задача эквивалентна четырехмерному гармоническому осциллятору (см., напр., [42]).

Перед тем как перейти к рассмотрению конкретных задач, отметим факт, что алгебраизация процедуры построения ТВ для кулоновской задачи отмечалась ранее [43] и использовалась при решении различных задач: как сферически-симметричных (экранированный кулоновский потенциал, потенциал типа "воронки"), так и сферически-несимметричных (эффект Штарка [45], эффект Зеемана [46]). В перечисленных работах рассматривались основное и первые возбужденные уровни. Доказательство алгебраизации в случае основного состояния для произвольного мультипольного взаимодействия было дано в [35], и в этой же работе была рассмотрена задача об атоме водорода в электрическом и магнитном постоянных полях.

В качестве примеров мы рассмотрим атом в постоянном магнитном поле и в постоянных скрещенных полях.

3.2а. Атом водорода в магнитном постоянном поле (эффект Зеемана)

Изучение деформации спектра атома водорода в постоянном магнитном поле — одна из наиболее старых задач квантовой механики. Однако, из-за существенной трехмерности задачи решение ее еще далеко от завершения: на сегодняшний день еще не решена даже полностью задача классификации состояний. Регулярно рассмотрены низшие состояния спектра (см. обзор /47/ и ссылки в нем). В случае слабых полей (о сильных полях речь шла во введении) общее мнение состоит в том, что ситуация описывается линейным по полю членом (см., например, /5/).

В этом разделе мы подробно рассмотрим ситуацию в случае слабого поля для основного и некоторого класса возбужденных состояний в рамках описанного ранее подхода. Будет показано, что для рассматриваемого класса высоковозбужденных состояний квадратичный эффект существенен, сдвиг уровней может быть большим, даже для очень слабых полей, и область, где работает ТВ, резко уменьшается с увеличением возбуждения атома. В дальнейшем будем считать атом бесспиновым.

Как упоминалось ранее, для атома водорода в постоянном магнитном поле до сих пор не решена задача классификации состояний. Поэтому даже значение первой поправки к энергии для квадратичного эффекта Зеемана в общем случае неизвестно. Чтобы подчеркнуть технические трудности, возникающие в этой задаче, обратим внимание на факт, что произвольные матричные элементы переходов между кулоновскими волновыми функциями были вычислены явно только в 1968 году (см. обзор /47/). Однако, существует несколько классов состояний, которые невырождены (и поэтому не перемешиваются). В частности, крайние и предкрайние компоненты кулоновских мультиплетов при ну-

левом радиальном квантовом числе

$$n_r = 0, \quad m = \pm \ell, \quad m = \pm (\ell - 1), \quad (3.54)$$

где m — магнитное квантовое число. Вот этот класс состояний мы и рассмотрим. Разложение энергии имеет вид

$$E = -\alpha^2 + \beta m + E_1 \beta^2 + E_2 \beta^4 + E_3 \beta^6 + \dots, \quad (3.55)$$

где β — магнитное поле в безразмерных единицах, направленное по оси Z . Потенциал возмущения $V_1 = \beta^2(x^2 + y^2)/4$, а $\alpha = 1/(\ell + 1)$. Поставим себе целью найти E_1 и E_2 . Ранее [47] величина E_1 была найдена, поскольку она совпадает со значением соответствующего матричного элемента диагонального перехода.

Предэкспонента для данного класса состояний (3.55)

$$f = f_0 = r^\ell Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad |m| = \ell, \ell - 1, \quad (3.56)$$

и она не меняется при наложении возмущения, т.е. $f_n = 0$ при $n > 0$. В экспоненте произвольная поправка имеет тот же вид, что и в случае основного состояния (см. [46/])^{*}

$$\phi_n = \sum_{m=0}^n R_{nm}(r) P_{2m}(\cos \theta), \quad (3.57)$$

т.е. содержит $(n + 1)$ четных гармоник.

Вычисления достаточно просты, но громоздки. Окончательный ответ дается следующей формулой

$$E_1 = \frac{(\ell + 2)(\ell + 1 - k)}{4\alpha^2}, \quad (3.58)$$

$$-E_2 = \frac{(\ell + 2)}{16\alpha^6} \left\{ \frac{46}{45} \ell^3 + \left(\frac{107}{20} - \frac{185}{108} k \right) \ell^2 + \left(\frac{263}{30} - \frac{27}{4} k + \frac{3}{4} k^2 \right) + \left(\frac{53}{12} - \frac{37}{6} k + \frac{23}{12} k^2 \right) \right\}$$

^{*} Это утверждение справедливо для любого рассматриваемого уровня, поскольку перемешиваются только предэкспоненциальные факторы.

$$E_3 = \frac{(l+2)}{64\alpha^{10}} \left\{ \frac{407}{135} l^5 + \left(\frac{32653}{1080} - \frac{513433}{68040} k \right) l^4 + \left(\frac{64381}{540} - \frac{48470321}{748440} k + \frac{1055}{168} k^2 \right) l^3 + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{31048}{135} - \frac{5110337}{24948} k + \frac{67111}{1512} k^2 - \frac{7}{9} k^3 \right) l^2 + \left(\frac{38789}{180} - \frac{2927576}{10395} k + \frac{5757}{56} k^2 - \frac{347}{36} k^3 \right) l + \frac{5521}{72} - \right.$$

$$\left. - \frac{391819}{2772} k + \frac{4321}{56} k^2 - \frac{241}{18} k^3 \right\} \text{ и } k = \frac{l^2 - m^2}{2l - 1}, \text{ если нормировка потенциала}$$

$V = -2/r$. Мы не привели формул для ϕ_1 и ϕ_2 в силу их громоздкости. Отметим, что коэффициенты при старших степенях R_{2m} не зависят от рассматриваемого состояния. Некоторые явные формулы приведены в /46/ (см. также раздел 3.26).

Проанализируем теперь полученные результаты. В случае, когда $m \gg 1$, поправки имеют вид (с учетом нормировки, описанной выше):

$$E_1 = \frac{l^4}{4} + O(l^3), \quad E_2 = -\frac{23}{360} l^{10} + O(l^9), \quad E_3 = \frac{407}{8640} l^{16} + O(l^{15}). \quad (3.59)$$

Поэтому разложение энергии в ряд по полю при

$$E = -\frac{1}{l^2} \pm B l + \frac{l^4 R^2}{4} - \frac{23}{360} l^{10} B^4 + \frac{407}{8640} l^{16} B^6 + \dots + E_n l^{6n-2} B^{2n} + \dots \quad (3.60)$$

не позволяет детально анализировать ситуацию даже в случае слабых полей. С увеличением l область применимости ТВ уменьшается

$$(B^2)_{ТВ} \lesssim \frac{4}{l^6}, \quad (3.61)$$

поскольку ряд ТВ - асимптотический /49/. Рассмотрение физических следствий подобной ситуации представляет несомненный интерес. В будущем мы планируем провести конкретный расчет высоковозбужденных состояний (3.54) при любых полях с помощью представлений, описанных в разделе 4. Пока отметим только, что, видимо, возможна ситуация, когда сдвиг высоковозбужденных состояний под воздействием малого магнитного поля может симулировать сдвиг низших состояний

под влиянием большого поля.

3.26. Атом водорода в скрещенных полях

Эта задача, также как и эффект Зеемана, — одна из наиболее старых проблем квантовой механики, однако, в отличие от последнего, она практически не исследована /10/. Мы очень кратко рассмотрим ее в случае основного состояния и приведем лишь окончательные результаты. Отметим только, что она представляет интерес в физике полупроводников (экситон в постоянных полях), астрофизике и оптике. В частности, она возникает, когда делается попытка учесть конечность массы ядра в эффекте Зеемана (см., например, /49/).

Потенциал, описывающий бесспиновый атом водорода в постоянных электрическом и магнитном полях, имеет вид

$$V = -\frac{2d}{r} - \mathcal{E}z + B^2(x^2 + y^2), \quad \vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{B}, \quad (3.61a)$$

$$V = -\frac{2d}{r} - \mathcal{E}x + B^2(x^2 + y^2), \quad (3.61b)$$

где электрическое \mathcal{E} и магнитное B поля измеряются в атомных единицах, а поле B направлено по оси Z .

Итак, начнем строить ТВ по \mathcal{E} и B .

$$E = \sum \mathcal{E}^n B^{2k} E_{nk}, \quad (3.62)$$

$$\phi = \sum \mathcal{E}^n B^{2k} \phi_{nk}.$$

Потенциалы возмущения равны

$$V_{10} = -r Y_{10}, \quad V_{01} = \frac{2}{3} r^2 (Y_{20} - Y_{00}), \quad (3.63a)$$

$$V_{10} = -r Y_{11}, \quad V_{01} = \frac{2}{3} r^2 (Y_{20} - Y_{00}), \quad (3.63b)$$

где $Y_{\ell m}$ — сферические гармоники.

Рассмотрим сначала случай параллельных полей. Нетрудно убедиться, что общий вид поправок следующий

$$\phi_{nk} = \sum_{\ell=0}^{\lfloor \frac{n+k}{2} \rfloor} R_{n,k,2k+n-2\ell}(r) Y_{2k+n-2\ell,0}(\theta, \varphi), \quad (3.64)$$

причем

$$R_{n,k,n+2k-2\ell}(r) = \sum_{m=n+2k-2\ell}^{n+2k+1} a_m r^m. \quad (3.65)$$

Опять, так же как и в эффекте Зеемана, полином при старшей гармонике в (3.74) - двучленный, при предстаршей - четырехчленный и т.д. Несложно найти некоторые коэффициенты этих полиномов явно. Например, полином при старшей гармонике имеет вид

$$R_{n,k,n+2k} = \frac{(n+2k)!^2 (n+k)!}{(2n+4k)! k! n!} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{(2n+2k)! (n+k)}{2^{2n+2k} (n+k)! (n+2k)!} \right\} \left(\frac{4}{3} \right)^k \frac{r^{n+2k}}{\alpha^{2n+2k}} + \frac{(2k+n)!^2 (2n+2k)! 2^{-2n}}{(2n+4k)! (n+k)! k! n! (2n+2k-1) 3^n} \frac{r^{n+2k+1}}{\alpha^{2n+2k-1}}. \quad (3.66)$$

Отметим, что при $n = 0$, т.е. $\epsilon = 0$, формула (3.66) описывает эффект Зеемана. В случае $k = 0$, т.е. при $B=0$, эти формулы описывают эффект Штарка.

Когда поля перпендикулярны $\vec{\epsilon} \perp \vec{B}$, ситуация несколько сложнее. Не будем выписывать формул, дающих функциональный вид произвольной поправки - они практически аналогичны (3.64) с небольшими модификациями. Из решения соответствующих рекуррентных соотношений можно найти несколько первых членов в разложении энергии основного состояния ($\alpha = 1$)

$$E = -1 - \frac{9}{8} \epsilon^2 + 2B^2 - \frac{3555}{512} \epsilon^4 - \frac{53}{6} B^4 + \begin{cases} \frac{159}{16} \epsilon^2 B^2 & \text{при } \vec{\epsilon} \parallel \vec{B} \\ \frac{93}{4} \epsilon^2 B^2 & \text{при } \vec{\epsilon} \perp \vec{B}. \end{cases} \quad (3.67)$$

Остановимся несколько подробнее на этой формуле и обсудим перекрестные члены типа $\epsilon^2 B^2$, которые до сих пор не были известны.

В случае параллельных полей все поправки четвертого порядка имеют примерно одинаковую величину, однако в случае перпендикулярных полей коэффициент при перекрестном члене аномально велик. Это означает, что даже при очень малых полях этот член существенен и сужает область применимости ТВ. Отметим, что ряд по V^2 - асимптотический при любом значении \mathcal{E} . Возможно, аномально большое значение перекрестного члена указывает на существование физического явления, предсказываемого в работе /10/, заключающегося в локализации электрона в некоторой области вблизи ядра: это явление должно наблюдаться при больших полях.

3.3. Алгебраическая процедура вычисления матричных элементов переходов. Заключение

Завершая этот раздел, нельзя не обратить внимание на еще одну поразительную возможность, которую открывает обнаруженная нами алгебраизация ТВ: мы можем алгебраическим путем вычислять матричные элементы переходов. Для этого вспомним стандартную ТВ Релея-Шредингера. Первая поправка к энергии - это диагональный матричный элемент, который в данном подходе вычисляется алгебраически. Первая поправка к волновой функции k -го состояния

$$\psi_k^{(1)} = \sum_n' \frac{V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)},$$

а с другой стороны, имеем (см. (2.1), (2.9), (2.23))*)

$$\psi_k^{(1)} = (f_k^{(1)} - \phi_k^{(1)} \cdot f_k^{(0)}) e^{-\phi_k^{(0)}}$$

*) Теперь следим за правильной нормировкой ψ_0 .

Разлагая в ряд по степеням f_0 нулевого приближения $\Phi_k^{(n)} f_k^{(n)} (f_k^{(n)})$ ищется уже в виде искомого разложения по построению (см. (3.23), (3.38), (3.51) и текст далее), получаем искомые матричные элементы как коэффициенты разложения. Эта процедура сильно упрощается, если рассмотреть поправку к основному состоянию, однако в этом случае находятся только матричные элементы переходов между основным и возбужденными состояниями. Преимущества данного метода по сравнению со стандартным, особенно для возмущенной кулоновской задачи, налицо.

Итак, мы продемонстрировали возможности нашего подхода в случаях, когда нулевое приближение — гармонический осциллятор или водородоподобная система. Простота и преимущества метода особенно наглядно видны в случае кулоновской задачи, где построение ТВ стандартными методами — сложная задача, связанная, в частности, со взятием интегралов по непрерывной части спектра и с вычислением нетривиальных сумм по промежуточным состояниям. Эти трудности наглядно подчеркиваются отсутствием до настоящего времени вычислений перекрестных членов в задаче о водородоподобной системе в скрещенных полях. Данный метод имеет большие перспективы, поскольку мы теперь можем рассматривать многочастичные задачи и, в частности, можем попытаться перейти к теоретико-полево-му пределу и наглядно увидеть перенормировки. Есть надежды, что данный метод приведет к созданию альтернативы фейнмановской диаграммной техники. Однако, это пока только надежды.

В заключение обсудим вопрос об алгебраизации нашей процедуры для других точнорешаемых задач. Сначала заметим, что практически все известные мне точнорешаемые задачи обладают тем свойством, что явно отфакторизовывается полином, задающий положения узловых поверхностей. Этот полином обычно дается некоторой

гипергеометрической функцией. Этот процесс факторизации происходит в некоторых специальных координатах. Например, для потенциала Морса $V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$ новые координаты $\xi = e^{-\alpha x}$ (см. [5]). Однако, множитель, оставшийся в волновой функции после вычлениения полинома, не всегда является экспонентой типа (2.1). Такая ситуация с потенциалом

$V(x) = -V_0 / ch^2 \alpha x$. Однако в других известных точнорешаемых задачах этот множитель - экспонента в некоторых координатах. Поэтому может быть сделан вывод, что если точнорешаемая задача допускает представление волновой функции в виде (2.1) и потенциал возмущения полиномиален по отношению к координатам, в которых возможно представление (2.1), то процедура построения ТВ - чисто алгебраическая. Без сомнения, это справедливо для следующих потенциалов

$$V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad \xi = e^{-\alpha x}, \quad (3.79)$$

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}, \quad \xi = r, \quad (3.80)$$

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2, \quad \xi = r^2. \quad (3.81)$$

В формулах (3.79)-(3.81) мы указали также координаты, в которых должна быть полиномиальность возмущения. Видимо, с некоторыми модификациями полиномиальность возмущений будет приводить к алгебраизации и в других точнорешаемых задачах.

На этом мы завершаем рассмотрение задач, в которых нулевым приближением служат точнорешаемые задачи, и переходим к следующему разделу.

4. Теория возмущений и вариационный метод (построение сходящихся процедур)

В предыдущем разделе мы продемонстрировали возможности и преимущества нашего подхода по сравнению со стандартным, основанным на ТВ Релея-Шредингера, в ситуациях, когда стандартный метод может быть реализован. Однако, много более частыми и предпочтительными являются ситуации, когда стандартный метод не может быть реализован; поскольку нулевое приближение является не точнорешаемой задачей. В нашем подходе мы пока еще совсем не пользовались таким его мощным свойством как ненужность знания всего спектра невозмущенной задачи. И в этом разделе мы воспользуемся этим свойством. Оно позволит нам строить процедуры, сходящиеся при любой константе возмущения, выбирая потенциал нулевого приближения почти произвольно. А с другой стороны, оценивать точность вариационных расчетов! Кроме того, у нас в руках окажется критерий "разумности" выбора нулевого приближения (пробных функций) в вариационных вычислениях, основанный на аргументе Дайсона.

Таким образом, в этом разделе мы изложим регулярный метод исследования области сильной связи в квантовой механике. В качестве примеров будет рассмотрено несколько классических задач квантовой механики, являющихся пробным камнем для любого метода.

4.1. О вариационном методе с точки зрения теории возмущений

Итак, мы имеем итерационную процедуру для нахождения собственных чисел оператора Шредингера, не требующую знания всего спектра невозмущенной задачи. Таким образом, у нас в руках ока-

зался такой мощный произвол как выбор потенциала невозмущенной задачи. Этот произвол позволяет почти любым желаемым образом представить исследуемый потенциал V в виде суммы $V_0 + V_1$, а следовательно, дает возможность строить сходящиеся ряды ТВ. Однако, прежде чем обсуждать вопросы построения сходящейся ТВ, установим связь между теорией возмущений и вариационным принципом.

Начнем обсуждение этого вопроса с очевидного высказывания: любая достаточно гладкая функция $\psi_0 \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^k)$ является собственной функцией некоторого состояния в потенциале V_0 , равном

$$V_0 - E_0 = \frac{\Delta \psi_0}{\psi_0}, \quad (4.1)$$

где E_0 - энергия этого состояния. Предположим теперь, что мы хотим найти положение какого-либо уровня в потенциале V с помощью вариационного принципа и построили для этого некоторый класс пробных функций $\psi_0(\lambda)$ ^{x)}. Посмотрим теперь, каким потенциалам $V_0(\lambda)$ соответствуют эти пробные функции, воспользовавшись для этого (4.1). Для этого взглянем на вариационный расчет с точки зрения ТВ [16-17]

$$\begin{aligned} E_{\text{var}} &= \min_{\{\lambda\}} \int \psi_0 H \psi_0 = \min_{\{\lambda\}} \left\{ E_0 + \int \psi_0 (H - H_0) \psi_0 \right\} = \\ &= \min_{\{\lambda\}} (E_0 + E_1), \end{aligned} \quad (4.2)$$

^{x)} Где λ - совокупность параметров, по которым происходит минимизация. Однако, для нижеследующего несущественно, проведена минимизация или нет.

здесь $H = p^2 + V$. $H_0 \psi_0 = E_0 \psi_0$. а $E_1 = \int \psi_0 (V - V_0) \psi_0$ - первая поправка к уровню энергии в случае, когда потенциал возмущения V_1 равен $V - V_0$. Итак, мы получили, что вариационный расчет дает первые два члена ряда ТВ (см. (2.10)), в котором потенциал возмущения равен отклонению исходного потенциала от того, который соответствует пробной функции $\psi_0 \{\lambda\}$ (см. (4.1)). Вычисляя следующие члены в ряду ТВ (2.10) E_2, E_3, E_4, \dots , получаем возможность оценивать точность вариационных расчетов и итерационным способом их улучшить. Кроме того, сравнивая потенциалы V и V_0 , можно видеть, сколь разумно построен класс пробных функций. Что при этом имеется в виду будет разъяснено ниже.

4.2. Как построить сходящуюся теорию возмущения

Перейдем теперь к обсуждению вопроса о сходимости описанной выше процедуры, т.е. когда ряды (2.9), (2.10), (2.23) будут сходиться. Предварительно поясним, почему ряды ТВ обычно расходятся.^{X)} Рассмотрим в качестве примера ангармонический осциллятор $V(x) = x^2 + g x^4$ ($V_0 = x^2$, $V_1 = x^4$) . Когда $g > 0$ (рис. а), в потенциале имеется бесконечный ряд связанных состояний, а при $g < 0$ (рис. б), причем сколь угодно малом, возникает явление туннелирования, т.е. энергия уровней $E(g)$ перестает быть действительной, приобретает мнимую часть. Это означает, что при $g = 0$ функция $E(g)$ имеет особенность, а поскольку ряд ТВ - это разложение в нуле, т.е. непосредственно в особенности, то ряд ТВ имеет нулевой радиус сходимости. В этом

^{X)} Нижеследующее рассуждение обычно называется "аргументом неустойчивости Дайсона".

и заключается объяснение расходимости ТВ. Впервые строгое рассмотрение этого явления на примере ангармонического осциллятора было проведено Вайнштейном [50], который показал для энергии основного состояния, что от точки $g = 0$ начинается разрез, и вычислил скачок на этом разрезе в пределе $g \rightarrow -0$.

Теперь мы понимаем, что одна из причин расходимости ряда ТВ состоит в том, что потенциал возмущения более сингулярен, чем невозмущенный. В этом случае происходит коренная перестройка спектра при варьировании параметра возмущения g : уровень может стать квазистационарным, как это было в только что описанном примере, а может перейти в непрерывный спектр. Поэтому общий рецепт получения сходящихся рядов ТВ звучит следующим образом [14-15]^{x)}:

Сконструируем волновую функцию нулевого приближения таким образом, чтобы потенциал V_0 , ей соответствующий (см. (4.1)), воспроизводил бы как можно больше характерных свойств изучаемого потенциала V . В частности, что особенно важно, чтобы были воспроизведены все сингулярности и асимптотическое поведение исходного потенциала.

На языке волновых функций это означает, что ψ_0 должно содержать максимально много свойств истинной волновой функции ψ : поведение на бесконечности, в нуле, вблизи сингулярностей потенциала, информацию о нулях и т.д. Нетрудно увидеть, что этот рецепт (на языке волновых функций) фактически совпадает с тем, который обычно используется при построении класса пробных функций в нелинейном вариационном методе Рунца.

^{x)} Отметим, что в [25] была построена сходящаяся ТВ для основного состояния ангармонического одномерного осциллятора, в которой в качестве нулевого приближения использовалась волновая функция, имеющая поведение на бесконечности и в нуле, такое же, как и истинная волновая функция.

Вернемся к обсуждению вопроса о сходимости и сформулируем следующую теорему о сходимости, применительно к случаю основного состояния [17]:

Теорема 3. Если первая поправка \vec{y}_1 - ограниченная вектор-функция, т.е. (1) $|\vec{y}_1| \leq a$, и кроме того (2)

$$|\varphi_0^{-2}| \int |\vec{G}(k, x)|^2 dx \leq A, \text{ причем (3) } a, A < 1/8,$$

то ряды (2.9)-(2.10) сходятся.

Доказательство. Для доказательства воспользуемся методом математической индукции. Из условий (1), (2) сразу убеждаемся, что поправки - ограниченные вектор-функции

$$|\vec{y}_n| \leq 2A \sum_{i=1}^{n-1} a_i a_{n-i} \equiv a_n, \quad n \geq 2, \quad (4.3)$$

причем

$$|E_n| \leq \sum_{i=1}^{n-1} a_i a_{n-i}, \quad (4.4)$$

где число a_n ограничивает модуль вектор-функции \vec{y}_n . Для нахождения области сходимости рядов (2.9)-(2.10) вычислим, чему равна сумма ^{x)}

$$S = \sum_{i=1}^{\infty} a_i. \quad (4.5)$$

С помощью (4.3) легко показать, что

$$2AS^2 + a_1 = S \quad (4.6)$$

x) Я благодарен А.Д. Долгову, предложившему этот трюк.

Нужное нам решение (4.6) имеет вид

$$\zeta = \frac{1 - \sqrt{1 - 8Aa_1}}{4A} \quad (4.7)$$

Таким образом, мы построили мажорирующую последовательность для \tilde{y}_n и E_n , которая сходится при

$$8Aa_1 \leq 1, \quad (4.8)$$

и теорема доказана. Совершенно ясно, что утверждение этой теоремы довольно слабое и его можно значительно усилить. Представляется почти очевидным, что для сходимости рядов (2.9)–(2.10) достаточно выполнения условия (I). Стоит также отметить, что аналогичную теорему можно доказать для возбужденных состояний.

4.3. Одномерный случай

Перейдем теперь к рассмотрению одномерных задач и тех, которые к ним сводятся. В качестве примеров рассмотрим основное состояние в потенциалах (А) $V(x) = x^{2n}$, $n = 2, 3, 4$ и (Б)

$$V(x) = m^2 x^2 + g x^4.$$

В одномерном случае уравнение (2.5) превращается в хорошо известное уравнение Риккати, а условия (2.6) или (2.6^I) выполняются тождественно. Легко показать, что решение уравнения (2.11) дается формулой (2.18), которую можно привести к следующему виду [14–17, 20–23, 25–26, 31–34]

$$y_n = \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^x (E_n - Q_n) \psi_0^2(x') dx', \quad (4.9)$$

где a - некоторый параметр.

/A/ Потенциал $V(x) = x^{2n}$.

Пусть в потенциалах (4.11)–(4.12) параметр g равен 1; отметим следующий важный факт: потенциал (4.12) при $g = 1$ воспроизводит поведение исследуемого потенциала на бесконечности. Потенциал возмущения, являющийся разностью между исследуемым потенциалом и потенциалом (4.12), дается формулой

$$V_i^{(1)}(x) = \left[n|x|^{n-1} - 2a|x|^{n+1} \right] - a^2 x^2. \quad (4.13)$$

Подставим теперь (4.11)–(4.12) в (2.15) и (4.9) и получим значения поправок y_n и E_n . В таблице I представлены вычисленные таким способом поправки E_n ($n = 1, 2, 3$) для случая $a = 1$ (см. [14–15]). Видно, что сходимость метода довольно хорошая, особенно для потенциалов x^6 и x^8 . Учет E_3 приводит к точностям лучше процента, даже в наихудшем случае потенциала x^4 .

А теперь проведем минимизацию по параметру a выражения $(E_0 + E_1)$ (см. раздел 4.1). В результате получим вариационное значение энергии основного состояния с пробной функцией (4.11). Вычисляя E_2 , сразу оцениваем точность вариационного расчета, которая оказывается на уровне процентов. После определения поправки E_3 обнаруживаем, что удалось воспроизвести четыре знака после запятой в величине энергии (см. табл. I).

Проведем теперь расчет для первого возбужденного уровня.

Пробную функцию нулевого приближения возьмем в виде

$$\psi_0^{(1)} = x \psi_0^{(0)}, \quad (4.11^1)$$

где Q_n определено в (2.18). Поправки к энергии E_n по-прежнему даются формулой (2.15). В случае возбужденных состояний решение уравнения (2.27¹), имеющее вид (2.30), преобразуется к форме [17]

$$g_n(x) = \left(\frac{f_n}{f_0}\right)' + \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^x (E_n - \tilde{Q}_n) \psi_0^2 dx', \quad (4.10)$$

тогда как деформация многообразия нулей f_n дается формулой (2.31¹) плюс осцилляционная теорема (см. обсуждение на стр.20), причем Q_n определяется с помощью (2.28). Отметим, что $g_n(x)$ не имеет особенностей на действительной оси. Подчеркнем, что когда рассматривается первый возбужденный уровень, формулы (4.9)–(4.10) фактически совпадают с теми, которые приводятся в [23]. Когда решается многомерная сферически-симметричная задача, формулы (4.9)–(5.10) очевидным образом модифицируются. В случае основного состояния они приведены в [25–26, 32].

Рассмотрим примеры (А) и (Б). Одной из простейших функций основного состояния, удовлетворяющих требованиям, сформулированным в разделе 4.2, является

$$\psi_0^{(0)} = \exp \left\{ -\frac{ax^2}{2} - \frac{\sqrt{g}}{n+1} |x|^{n+1} \right\}. \quad (4.11)$$

Эта функция представляет собой волновую функцию основного состояния в потенциале

$$V_0^{(0)} = -\left[\sqrt{g} n |x|^{n-1} - 2a \sqrt{g} |x|^{n+1} \right] + a^2 x^2 + g x^4, \quad E_0^{(0)} = a. \quad (4.12)$$

Потенциал возмущения равен

$$V_1^{(1)} = \left[(n+2)/x \right]^{n-1} - 2a/x \left]^{n+1} - a^2 x^2. \quad (4.13^I)$$

Для этого случая не будем проводить минимизацию по a , а приведем результаты расчета при $a = 1$ (см. таблицу 2). Результаты, наихудшие, как и в случае основного состояния, для потенциала x^4 . Причина этого заключается в "наибольшем" потенциале возмущения по сравнению с другими потенциалами.

(Б) Ангармонический осциллятор

Проблема ангармонического осциллятора (АО) — одна из самых старых в квантовой механике. Последнее время она привлекает все большее внимание (см. напр. [1-4, 12-13, 15, 17, 25, 35, 37, 50]). Наиболее полное и подробное исследование одномерного случая было проведено Бендером и Бу [1-2]. Одной из причин проявляемого повышенного интереса к данной проблеме состоит в том, что АО — это одномерная теория поля [1], которая содержит в себе многие проблемы, присущие реалистическим четырехмерным теоретико-полевым моделям. Поэтому интересно попытаться изучить все эти проблемы на примере этой достаточно простой модели. Кроме того, АО имеет важные применения в атомной и молекулярной физике, а также в физике твердого тела.

В работах [1-2, 37, 50] квазиклассическими методами была подробно исследована структура ряда ТВ по константе связи. Б. Саймоном изучался вопрос об аналитической структуре римановой поверхности энергии как функции константы связи g . Более подробное обсуждение свойств обычной ТВ дано в разделе 3. Отметим, что в [25] была предложена сходящаяся итерационная про-

цедура, которая, как можно показать [15], является частным случаем развиваемого здесь подхода, когда невозмущенный потенциал берется в виде $V_0 = V - \frac{1}{2} V' \sqrt{V}$, а, соответственно, потенциал возмущения равен $V_1 = \frac{1}{2} V' \sqrt{V}$. Другие варианты сходящейся ТВ были предложены в [15, 17, 52]. В изложении будем следовать работе [17], где сходящаяся ТВ построена в рамках развиваемого нами формализма.

В качестве пробной функции нулевого приближения для основного состояния возьмем функцию (4.11) при $n=2$, как и в случае примера (A). Тогда потенциал возмущения равен

$$V_1^{(0)} = m^2 x^2 + 2\sqrt{g} x / (1 - ax^2) - a^2 x^2. \quad (4.14)$$

Разовьем теперь ТВ, подставив (4.11) и (4.14) в (2.15) и (4.9). Для энергии получается следующий ряд

$$E = E_0 + E_1 + \dots = \alpha + \frac{\int_{-\infty}^{\infty} [(m^2 - a^2)x^2 + 2\sqrt{g}x(1 - ax^2)] e^{-ax^2 - \frac{2\sqrt{g}}{3}x^3} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 - \frac{2\sqrt{g}}{3}x^3} dx} + (4.15)$$

+ ...

Легко видеть, что ряд (4.15) содержит много свойств, присущих истинной функции энергии и хотя разложение при $g=0$ содержит не только целые степени g , имеется разрез в плоскости g , идущий от 0 до $-\infty$, причем скачок на этом разрезе при $g \rightarrow -\infty$ экспоненциально мал.

Проведем теперь минимизацию по параметру a , вычислим E_2 и сравним полученные результаты с численным интегрированием

уравнения Шредингера. Можно видеть (табл.3), что точность метода такова, что даже простейшая пробная функция (4.II) позволяет воспроизвести несколько знаков после запятой как в области малых, так и больших значений константы связи g . Формула (4.I5) позволяет исследовать аналитическую структуру энергии как функции константы связи.

На этом закончим рассмотрение одномерных задач и перейдем к многомерным.

4.4. Несколько слов о многомерии.

Двумерный ангармонический осциллятор как пример

В этом разделе мы кратко обсудим многомерные задачи на примере двумерного ангармонического сферически-несимметричного осциллятора. В разделе 2 было показано, что реализация ТВ в многомерном случае эквивалентна решению электростатики с переменной диэлектрической проницаемостью или нахождению функции Грина оператора Лапласа в конформноплоском пространстве. В настоящее время мне известно аналитическое решение электростатики с гауссовой диэлектрической проницаемостью (2.20), а во всех остальных случаях приходится прибегать к численному решению. Однако, когда удастся приблизить исследуемый потенциал сферически-симметричным так, что отклонения от сферичности малы, то можно надеяться, что использование функции Грина (2.18) оправданно и сходимость будет достаточно быстрой. Покажем, как строится сходящаяся ТВ для двумерного ангармонического осциллятора [16].

Итак, мы будем рассматривать основное состояние двумерного сферически-несимметричного осциллятора

$$V = m^2(x^2 + y^2) + g(x^4 + y^4 + 2c x^2 y^2), \quad (4.I6)$$

где m , g , c - параметры. Это сложная задача, которая начала исследоваться только в самое последнее время [12-13, 16, 51], причем энергии уровней находились с помощью вариационного метода [51] и данной ТВ [16].

В качестве волновой функции нулевого приближения возьмем

$$\Psi_0 = \exp\left\{-\frac{a}{2}R^2 - \frac{\sqrt{g}}{3}R^3\right\}, \quad (4.17)$$

где a - параметр. Потенциал, который отвечает этой волновой функции основного состояния, равен

$$V_0 = -3\sqrt{g}R + a^2R^2 + 2a\sqrt{g}R^3 + gR^4. \quad (4.18)$$

Потенциал возмущения, равный разности V и V_0 , имеет вид

$$V_1 = 3\sqrt{g}R + (m^2 - a^2)R^2 - 2a\sqrt{g}R^3 + 2g(c-1)x^2y^2, \quad (4.19)$$

где $R = (x^2 + y^2)^{1/2}$. Следует отметить, что параметр c меняется в области

$$1 \geq c \geq -1, \quad (4.20)$$

поскольку при $c < -1$ потенциал (4.16) не ограничен снизу, а область $c > 1$ может быть трансформирована в область (4.20), так как существует преобразование

$$\bar{x} = \frac{x+y}{\sqrt{2}}, \quad \bar{y} = \frac{x-y}{\sqrt{2}}, \quad \bar{c} = \frac{3-c}{1+c}, \quad \bar{g} = \frac{(1+c)}{2}g, \quad (4.21)$$

открытое Банксом, Бендером и Ву /12-13/, переводящее уравнение Шредингера с потенциалом (4.16) само в себя, причем параметр меняется в области (4.20).

Напишем теперь $(E_0 + E_1)$ и проведем минимизацию по параметру a . Затем с помощью функции Грина (2.18) вычислим величину второй поправки к энергии, которую обозначим E_2^* . С одной стороны, E_2^* отчасти будет характеризовать точность вариационного расчета с пробной функцией (4.17), а с другой стороны, дает вклад в величину поправки E_2 от сферически-симметричных частей потенциала возмущения V_1 . Можно показать с помощью численного расчета, что вклад в E_2 от сферически-несимметричных частей потенциала возмущения V_1 пренебрежимо мал при C , близких к единице,

возрастает с уменьшением C и достигает величины $\sim 0.5 E_2^*$ при $C = -1$. Результаты наших расчетов приведены в табл.4, где они также сравниваются с вариационными /51/. Можно сделать вывод, что даже такая бесхитростная пробная функция как (4.17) приводит к достаточно высоким точностям. Аналогичным образом могут быть приведены расчеты и для возбужденных состояний.

5. Заключение

Итак, мы изложили некоторый нестандартный взгляд на задачу нахождения спектра в нерелятивистской квантовой механике. Наряду с простотой и экономностью, он характеризуется многими преимуществами по сравнению с обычными методами: /1/ в случаях, когда может быть реализована обычная ТВ Релея-Шредингера, наш подход является алгебраическим и позволяет анализировать свойства произвольной поправки; /2/ он дает возможность оценивать точность вариационных расчетов и кроме того, из него естественным образом возникает критерий "разумности" выбора пробных

функций; /3/ поскольку для построения процедуры не требуется знание всего спектра невозмущенной задачи, то появляется произвол в выборе невозмущенной задачи, позволяющий строить сходящиеся ТВ; /4/ процесс вычисления матричных элементов переходов становится алгебраическим.

На многочисленных примерах мы продемонстрировали возможности нашего подхода, с легкостью вычислив различные поправки ТВ, подтвердив старые расчеты и получив новые результаты. Перспективы, которые открываются, очень интересны. Мы можем перейти к полемому пределу из квантовой механики и проанализировать процесс перенормировок, произвести учет ангармонизма в кристаллах, в том числе и сильного ангармонизма, интересной представляется возможность данным методом попытаться рассчитать энергии связанных состояний в задачах многих тел. Возможно, возникнет альтернатива квазиклассическим вычислениям старших порядков ряда ТВ а ля Липатов. Интересными представляются также попытки обобщения подхода на релятивистский случай, на уравнение Дирака [53-54].

Конечно, имеется много трудностей. Практически не известно ни одной сколь-нибудь нетривиальной функции Грина оператора Лапласа в кривом конформно-плоском пространстве, которые необходимы для нетривиальной реализации процедуры. Для сложных задач не совсем просты процедуры построения волновых функций нулевого приближения [55]. Существуют и чисто математические проблемы, связанные с возбужденными состояниями в многомерном случае. Однако, все, что сделано к настоящему времени, позволяет надеяться на благоприятный исход.

Таблица I

Результаты расчетов энергии основного состояния в потенциале χ^{2n}

Потенциал		$V(x) = x^4$	$V(x) = x^6$	$V(x) = x^8$
Приближение				
C	$E_0 = a$	1.	1.	1.
	a_{min}	0.47	0.85	1.14
I	E_1	0.13359	0.598448	0.158419
	$E_0 + E_1$	1.13359	1.068448	1.158409
2	$-E_2$	0.04841	0.007720	0.010936
	$E_0 + E_1 + E_2$	1.08518	1.030728	1.147473
3	$-E_3$	0.01542	0.000304	0.002033
	$E_0 + E_1 + E_2 + E_3$	1.06976	1.060424	1.145440
E точное		1.060362	1.14480246	1.22582010

a_{min} - значение параметра (см. (4.11)) при котором достигается минимум ($E_0 + E_1$). $E_{\text{точное}}$ получен Маркновым и Шестопалом с помощью численного решения Шредингера.

Результаты расчетов энергии первого
возбужденного уровня в потенциале χ^{2n}

Потенциал		χ^4	χ^6	χ^8
Приближение				
0	E_0	3	3	3
1	E_1	0.94939	1.35903	1.87684
	$E_0 + E_1$	3.94939 (4%)	4.35903 (0,5%)	4,87684 (2,5%)
2	$-E_2$	0.10458	0.01927	0.122698
	$E_0 + E_1 + E_2$	3.84482 (1,2%)	4.33976 (0.03%)	4.75414 (0.03%)
$E_{\text{точное}}$		3.7996732	4.338599	4.755375

$E_{\text{точное}}$ получено Мариновым и Шестопалом с помощью численного решения уравнения Шредингера. Проценты, указанные через дробь, характеризуют относительное отклонение полученного результата от точного.

Таблица 3
Энергия основного состояния ангармонического осциллятора

g'	a_{\min}	E_1'	$-\Delta E_2'$	E_2'	$E'_{\text{точное}}$
0.1	0.77	0.561738	0.002569	0.559169	0.559146
0.2	0.77	0.605769	0.003334	0.602485	0.602405
0.3	0.77	0.641838	0.003852	0.637986	0.637992
0.4	0.78	0.672984	0.004233	0.668751	0.668773
0.5	0.79	0.700687	0.004550	0.696137	0.696176
0.6	0.81	0.725803	0.004793	0.721010	0.721039
0.7	0.82	0.748392	0.005035	0.743857	0.743904
0.8	0.83	0.770336	0.005252	0.765084	0.765144
0.9	0.84	0.790411	0.005452	0.784959	0.785032
I	0.86	0.809320	0.005607	0.803713	0.803771
10	1.41	1.51622	0.001150	1.50472	1.50497
50	2.27	2.51864	0.01939	2.49925	2.49971
100	2.82	3.15516	0.02438	3.13078	3.13138
500	4.76	5.36040	0.04154	5.31886	5.31989
1000	5.98	6.74521	0.05230	6.69291	6.69422

Нормировка E и g как в работе /51/ ($E' = E/2$, $g' = g/2$).
 $E'_{\text{точное}}$ из работы /51/

Таблица 4
Энергия основного состояния ангармонического осциллятора (4.16) при $g = 2$.

$m = 0$											
c	-1	-0.8	-0.6	-0.4	-0.2	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
q_{min}	0.11	0.18	0.24	0.30	0.35	0.41	0.46	0.50	0.55	0.59	0.64
$E_0 + E_1$	1.195	1.231	1.264	1.296	1.326	1.355	1.383	1.410	1.436	1.461	1.485
$-E_2$	0.039	0.029	0.021	0.016	0.012	0.009	0.007	0.005	0.004	0.003	0.003
$E_0 + E_1 + E_2$	1.156	1.202	1.243	1.280	1.314	1.346	1.376	1.405	1.432	1.458	1.482
$E_{точн.}$	1.108	1.172	1.221	1.264	1.302	1.336	1.368	1.398	1.426	1.452	1.477

$m = 1$											
c	-1	-0.8	-0.6	-0.4	-0.2	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
q_{min}	0.43	0.48	0.53	0.58	0.63	0.67	0.72	0.76	0.80	0.83	0.87
$E_0 + E_1$	1.498	1.526	1.552	1.578	1.602	1.625	1.648	1.670	1.692	1.712	1.733
$-E_2$	0.024	0.019	0.015	0.012	0.009	0.007	0.006	0.005	0.004	0.003	0.003
$E_0 + E_1 + E_2$	1.474	1.507	1.537	1.566	1.590	1.619	1.642	1.665	1.688	1.709	1.730
$E_{точн.}$	1.444	1.484	1.519	1.551	1.580	1.608	1.639	1.658	1.681	1.703	1.724

Параметр q_{min} реализует минимальное значение $(E_0 + E_1)$. E_2^{**} - часть поправки второго приближения (см. стр.64). $E_{точн.}$ и его поправка из работы /51/.

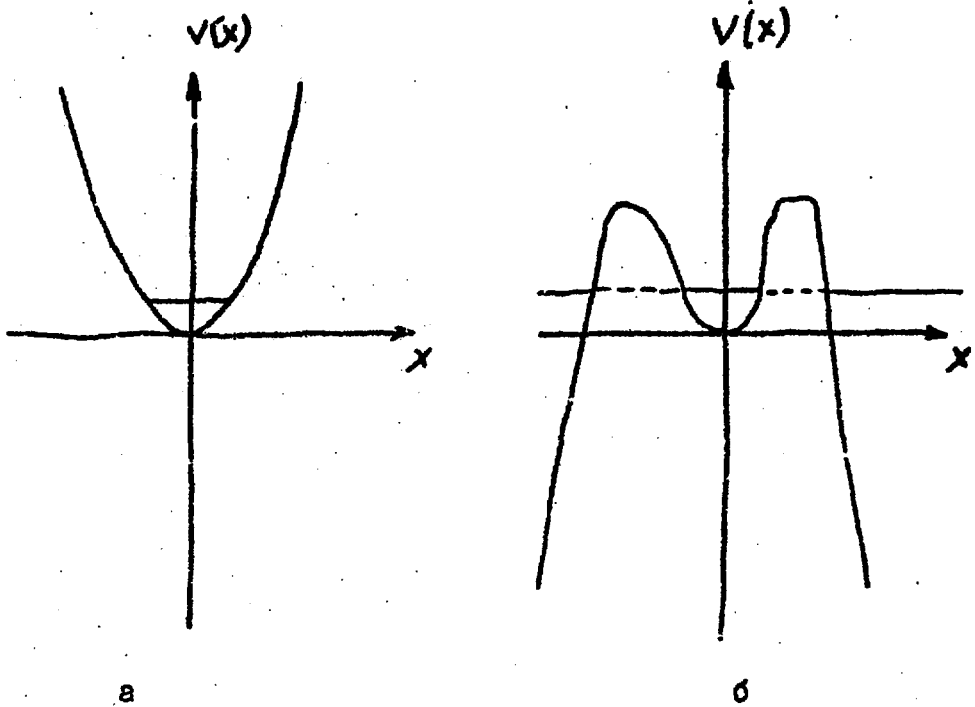


Рис. I. Потенциал ангармонического осциллятора $V(x) = x^2 + gx^4$
 (а) при $g > 0$, (б) при $g < 0$. Линии символически
 указывают положение одного из уровней.

Л и т е р а т у р а

1. Bender C.M., Wu T.T.—Phys.Rev., 1969, v. 184, p.1231—1261
2. Bender C.M., Wu T.T.—Phys.Rev., 1973, v. D7, p.1620—1636
3. Simon B.—Ann. of Phys.(N.Y.), 1970, v. 58, p.79—136
4. Graffi S., Greechi, Simon B.—Phys.Lett., 1970, v.32E, p.631
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, М., Наука, 1974.
6. Hill R.H.—J. of Math.Phys., 1980, v.21(8), p.2182—2192
7. Marinov M.S., Popov V.S.—J. of Phys., 1975, v. A8, p.1575—583
8. Dolgov A.D., Turbiner A.V.—Phys.Lett., 1980, v.77A, p.15
9. Galindo A., Pascual P.—Nuovo Cim., 1976, v.34A, p.155—168
10. Буркова Л.А., Дзялошинский И.Е., Друкарев Г.Ф., Монозон Б.С. КЭТФ, 1976, т. 71, вып. 2, с. 526—530
11. Hirschfelder J.O., Brown W.B., Epstein S.T. Adv.Quantum Chem., 1964, v. 1, p.225—374
12. Banks T., Bender C.M., Wu T.T.—Phys.Rev., 1973, v.8D, p. 3346—3366
13. Banks R., Bender C.M.—Phys.Rev., 1973, v. 8D, p.3366—3378
14. Турбинер А.В.—Письма в КЭТФ, 1979, т. 30, с.379—383
15. Turbiner A.V.—Preprint ITPP-117 (1979); J. of Physics A 1981, v. 14, p.1641—1649
16. Turbiner A.V. Preprint ITPP-139 (1979)
17. Турбинер А.В.—КЭТФ, т. 79, вып. 5 с.1719—1734, 1980
18. Au C.K., Aharonov Y.—Phys.Rev., 1979, v.20A, p.2245—2250
19. Зельдович Я.Б.—КЭТФ, 1960, т. 39, вып. 3, с.776—780
20. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., Наука 1971.

21. Поликанов В.С.- ТМФ 1975, т. 24, стр.230-235
22. Поликанов В.С.-ЖЭТФ 1967, т. 52, с.1326-1331
23. Aharonov Y., Au C.K.-Phys.Rev.Lett., 1979, v.42, p.1582-1584
24. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики, т.1 М.: Гостехиздат, 1945
25. Долгов А.Д., Попов В.С.-ЖЭТФ, 1978, т.75, с.2010-2026
26. Зельдович Я.Б.-ЖЭТФ, 1956, т. 31, с.1101-1103
27. Найфе А.Х. Методы возмущений, 1976, М.: Мир
28. Bijl A. Physica, 1940, v. 7, p.869-886
29. Penrose O., Onsager L.-Phys.Rev., 1956, v.104, p.576-583
30. Богояльбов Н.Н., Зубарев Д.Н.-ЖЭТФ 1955, т.28, вып.2, с.129-139
31. Price P.J.-Proc.Phys.Soc.London 1954, v. 67, p.333-385
32. Киржниц Д.А. Оптика и спектроскопия 1958, т.5, с.486-489
33. Киржниц Д.А. Полевые методы теории многих частиц, М., Атомиздат, 1963
34. Пекар В.С.-ТМФ, 1971, т.9, с.440-444
35. Пекар А.В.-письма в ЖЭТФ, 1981, т.33, вып.3, с.181-185
36. Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, т.2, М.: Наука, 1974
37. Hikami S., Brezin E.-J.of Physics A., v. 12, p.759-770, 1979
38. Frivman V. Preprint TECHNION-PH-80-37 (1980)
39. Dolgov A.D., Popov V.S.-Phys.Lett., 1979, v.86A, p.185-191
Долгов, А.Д., Елецкий В.Л., Попов В.С. - ЖЭТФ 1980, т.79, в.5, с. 1704-1718
40. Флюгге З. Задачи по квантовой механике, т.1, 1974, М.: Мир
41. Липатов Л.Н.-ЖЭТФ 1977, т. 72, вып.2, с.411-427
42. Chen A.C.-Phys.Rev., 1980, v.22A, p.333-335

43. Au C.K., Aharonov Y.-Phys.Rev., 1980, v. 22, p.328-331
44. Privman V.-Phys.Lett., 1981, v. 81A, p.326-330
Вайнберг В.Н., Попов В.С.: Препринт ИТЭФ-171 (1980)
45. Alliluev S.P., Eletsky V.L., Popov V.S.-Phys.Lett., 1979,
v. 73A, p. 103-109;
Phys.Lett., 1980, v. 78A, p. 43-49
Privman A.V. Preprint TECHNION-PH-80-99 (1980)
46. Turbiner A.V. Preprint ИТЭФ-99, 1980
47. Garstang R.H.-Rept. in Progress in Physics, 1977, v.40,
No. 2, p.105-155
48. Avron J. et al.-Phys.Rev.Lett., 1979, v. 43, p.691-694
49. Avron J. Preprint TECHNION-79-91(1979)
50. Вайнштейн А.И. Препринт ИЯФ, Новосибирск, 1964
51. Nice F.T., McMillen D., Montroll E.W.-Phys.Reports, 1978,
v.43, No. 7, p.306-335
52. Halliday I.G., Suranyi P. Phys.Lett., 1979, v.85B, p.421-
-423
53. Михайлов А.И., Поликанов В.С.-ЭТФ, 1968, т.54, вып.1,
с.175-182
54. Au C.K., Rogers G.W.-Phys.Rev., 1980, v. 20A, p.1820-1826
55. Gerschenson M.E., Turbiner A.V. Preprint ИТЭФ-57 (1981).

А.В.Турбинер

Квантовая механика: новый взгляд на старую теорию возмущений.
Лекция, прочитанная на школе физиков ИТЭФ, февраль 1981

Редактор И.Н.Ломакина

Корректор О.Ю.Ольховникова

Работа поступила в ОНТИ 18.01.82

Подписано к печати 4.02.82 Т05545 Формат 60x90 1/16
 Offset печ. Усл.-печ.л.4,5. Уч.-изд.л.3,4. Тираж 290 экз.
 Заказ 24 Индекс 3624 Цена 50 коп.

Отпечатано в ИТЭФ, И17259, Москва, Б.Черемушкинская, 25

50 К О П

ИНДЕКС 3624