

~~Л В Э~~



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

4-98-30

На правах рукописи
УДК 530.145.6; 539.128.2

Ф-466

ДИНЕЙХАН
Минал

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
В ОСЦИЛЛЯТОРНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна 1998

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Одной из основных проблем нерелятивистской квантовой механики является задача вычисления собственных значений и собственных функций заданного гамильтониана, т.е. решение уравнения Шредингера (УШ) для различных потенциалов. Однако точные решения УШ известны только для очень узкого класса потенциалов, таких, как потенциал гармонического осциллятора, кулоновский потенциал и некоторые другие. Аналитические решения УШ для большинства интересных с физической точки зрения потенциалов неизвестны. Поэтому при исследовании реальных физических систем приходится прибегать к приближенным методам вычисления собственных значений и собственных функций заданного гамильтониана.

С развитием компьютерной техники большое значение приобрели численные методы решения задач квантовой механики, и в этом направлении достигнуты большие успехи. Однако важное место на практике по-прежнему отводится аналитическим методам, поскольку они позволяют исследовать качественные закономерности, присущие данной системе, и являются базой для создания алгоритмов численных расчетов.

Вкратце остановимся на основных аналитических методах, применяемых в случае связанных состояний, уделяя особое внимание их недостаткам, подразумевая достоинства хорошо известными.

1) *Теория возмущений Рэлея-Шредингера.* Этот подход является одним из наиболее известных и широко используемых. В этом подходе разложение по теории возмущений (ТВ) проводится по константе связи. Особенность состоит в использовании всего спектра невозмущенной задачи и всех матричных элементов, что вынуждает выбирать в качестве нулевого приближения точно решаемые задачи. Получаемые ряды в большинстве случаев расходятся и для применения методов суммирования необходимо вычислять поправки высоких порядков, что обычно является весьма трудоемким процессом.

2) *Модифицированная теория возмущений.* Наиболее популярным представителем этого метода является логарифмическая ТВ. В этом подходе, в отличие от теории Рэлея-Шредингера, используется решение невозмущенной задачи только для рассматриваемого состояния. Однако данный формализм, допуская простые рекуррентные формулы для основного состояния, становится очень громоздким и мало пригодным для вы-

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова Объединённого института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

Доктор физико-математических наук,
профессор

В.Г. Багров

Доктор физико-математических наук,
профессор

Л.Д. Блохинцев

Доктор физико-математических наук,
Чл.-корр. РАН

Л.И. Пономарёв

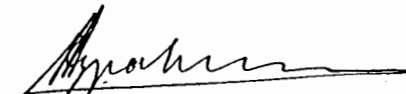
Ведущая организация: ФИРАН им. П.Н.Лебедева, г.Москва

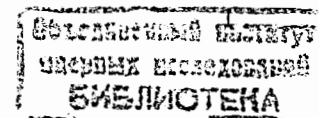
Защита диссертации состоится "____" _____ 1998 г. на заседании диссертационного совета Д047.01.01 при Лаборатории теоретической физики Объединённого института ядерных исследований, г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "____" _____ 1998 г.

Учёный секретарь совета
кандидат физико-математических наук


В.И.Журавлёв



числения поправок высокого порядка даже в случае первых возбужденных уровней.

3) *Квазиклассическое приближение.* В этом подходе, получившем название метода Вентцеля-Крамерс-Бриллюэна (ВКБ-приближения), проводится разложение по постоянной Планка. В общем случае применимость этого метода оправдана только для высоковозбужденных состояний. Исследование низколежащих уровней требует учёта поправок высокого порядка по \hbar и сопряжено с большими трудностями.

4) *$1/N$ -разложение.* Для изучения спектроскопии связанных состояний был предложен и интенсивно развивался метод $1/N$ -разложения. С точки зрения техники вычислений, данный метод является логарифмической ТВ по малому параметру $1/N$, а потому не лишен и присущих ей недостатков. Кроме того, хотя квазиклассическая природа такого подхода и его дополнительность ВКБ-приближению достаточно ясны, до сих пор его явная полуклассическая трактовка в виде \hbar -разложения не была дана.

5) *Вариационный принцип и его различные модификации.* Вариационный подход – единственный инструмент для решения сколько-нибудь сложных многомерных задач, в частности задач атомной физики. Основным его недостатком является отсутствие оценки точности получающихся результатов.

Таким образом, можно утверждать, что построение удобной процедуры нахождения решений квантово-механических уравнений для связанных состояний по-прежнему остается актуальной задачей.

Цель диссертации состоит в развитии нового подхода к исследованию связанных состояний в квантово-механических системах и применении этого подхода к описанию поведения двух и трехтельных систем. Акцент делается на изучении аксиально симметричных систем, математическое исследование которых представляет наибольшую сложность.

Научная новизна и практическая ценность.

Новым результатом является разработка непертурбативного метода (метод осцилляторного представления (ОП)) для аналитического вычисления спектра и волновых функций связанных состояний в малочастичных квантово-механических системах. Идея ОП состоит в следующем. В радиальном УШ делается замена переменных таким образом, чтобы преобразованная волновая функция имела, во-первых, гауссовскую асимптотику на бесконечности и, во-вторых, была конечна и

имела максимум в нуле. Далее оказывается, что преобразованное УШ можно отождествить с УШ для основного состояния в некотором фиктивном вспомогательном пространстве некоторой размерности. При этом орбитальные или азимутальные квантовые числа поглощаются размерностью вспомогательного пространства.

Полученный гамильтониан в этом вспомогательном пространстве представляется в "нормальной форме", т.е. координаты и импульсы выражаются через операторы рождения и уничтожения, и гамильтониан записывается в форме $H = H_0 + H_I + \epsilon_0$, причем H_0 является гамильтонианом свободного осциллятора, а гамильтониан взаимодействия H_I представляется в нормальной форме относительно операторов рождения и уничтожения и не содержит линейных и квадратичных слагаемых, а ϵ_0 является энергией основного состояния в нулевом приближении. Оказывается, что величина ϵ_0 с высокой точностью определяет энергию основного состояния исходной задачи. Поправки могут быть вычислены по ТВ с помощью гамильтониана взаимодействия.

Множество квантовых систем (атом во внешнем поле, деформированные атомные ядра, металлические кластеры и т.д.) описываются "составными" потенциалами, являющимися суммой потенциалов, для которых асимптотики волновых функций на больших расстояниях различны. Оказывается, что если провести замену переменных таким образом, чтобы размерность вспомогательного пространства соответствовала промежуточной асимптотике, и считать эту размерность вариационным параметром, то удается вычислить уровни энергии в режиме слабой, сильной и, что существенно, промежуточной связи. Таким образом, данный метод кардинально упрощает вычисление энергетического спектра в режиме сильной и промежуточной связи. Детально исследованы различные режимы по константе связи для одномерного и трехмерного ангармонических осцилляторов.

Разработана новая схема вычисления энергетического спектра трехтельной кулоновской системы с полным моментом J . Установлены границы стабильности трехтельной кулоновской системы с единичными зарядами в зависимости от масс частиц. В частности, расчет показал, что система (pe^+e^-) является неустойчивой. Впервые определено значение критической массы для кулоновских систем (pe^-C^+) , (De^-e^+) , $(A^+A^-e^+)$ и (pB^-e^+) с полным моментом $J = 0, 1$. Установлено, что при возрастании величины полного орбитального момента J область стабильности трехтельной кулоновской системы сужается, т.е. может существо-

вать такое значение полного момента J_c , при котором все трехтелные кулоновские системы являются несвязанными.

Впервые получена зависимость энергии связи мезомолекул ($H\mu N_Z$), состоящих из изотопов водорода ($H = p, d, t$) и ядра N_Z с зарядом $Z = 2, 3, 4, \dots$ и с массой $M_Z = 2Zm_p$, от заряда ядра Z .

Аналитически определен энергетический спектр двухэлектронной квантовой точки (КТ). Впервые из синглет-триплетного и триплет-триплетного энергетического перехода определен размер двухэлектронной квантовой точки при любых значениях напряженности магнитного поля. Установлено, что размер КТ, определенный из синглет-триплетного перехода, при сильных магнитных полях в основном определяется спиновым взаимодействием между электронами и отличается от результатов, полученных с модифицированными кулоновскими потенциалами.

Апробация работы. Материалы диссертации неоднократно докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ и Теоретического отдела Института молекулярной физики РНЦ "Курчатовский институт", а также в ФИРАН, НИИЯФ МГУ, ИТФ (Киев, Украина), ИЯФ (Алма-Ата, Казахстан), ТГУ (Ташкент, Узбекистан). Материалы диссертации были представлены и докладывались на конференциях: Sacharov Memorial Lectures in Physics, Moscow 1991. Few-Body Problems in Physics: Kharkov-92; Алма-ата-93; Amesterdam-94; Penisola-95. Progress in current Few-Body problems, Dubna 1997. Critical Stability of Quantum Few-Body Systems, ETC, Trento 1997. 8th International Conference on Symmetry Methods in Physics, Dubna 1997.

На защиту выдвигаются следующие результаты.

1. Разработан пертурбативный метод (метод осцилляторного представления) для аналитического вычисления спектра и волновых функций связанных состояний в малочастичных квантово-механических системах.

Метод ОП позволяет единым образом описывать основное и возбужденные состояния для широкого класса сферически и аксиально симметричных потенциалов, допускающих существование связанных состояний. ОП дает возможность единообразно описывать режимы слабой, сильной и промежуточной связи в случаях, когда взаимодействие описывается суммой потенциалов различного типа (кулон плюс осциллятор и т.д.). Метод обладает высокой точностью нулевого приближения (с

ошибкой менее одного процента для спектра) и содержит регулярный алгоритм вычисления поправок к этому приближению.

2. Метод применен для решения ряда актуальных задач квантовой механики связанных состояний.

- На примере ряда модельных потенциалов (степенной, логарифмический, кулоновский, потенциал Юкавы, молекулярные потенциалы и др.) продемонстрирована универсальность метода и апробирована точность вычислений.
- Детально исследованы различные режимы по константе связи для одномерного и трехмерного ангармонических осцилляторов, кулоновского и степенного потенциалов, кулоновского и юкавского потенциалов и т.д.
- Подробно рассмотрена задача об атоме водорода во внешних электрическом и магнитном полях. Уровни энергии атома и их ширины рассчитаны для произвольной напряженности электрического и магнитного поля.
- Вычислен энергетический спектр трехтельной кулоновской системы с полным моментом $J = 0, 1$. Установлены границы стабильности трехтельной кулоновской системы частиц с единичными зарядами в зависимости от масс частиц. Показано, что при увеличении полного орбитального момента J область стабильности трехтельной кулоновской системы сужается. Расчет показал, что система (pe^+e^-) является нестабильной. Для систем (pe^-C^+) , (De^-e^+) , $(A^+A^-e^+)$ и (pB^-e^+) с полным моментом $J = 0, 1$ вычислено значение критической массы.
- Вычислен спектр атома водорода с обобщенным потенциалом Ван дер Ваальса для любых значений параметра несферичности $0 \leq \beta \leq 2$.
- Вычислены энергии основных состояний мезомолекул ($H\mu N_Z$), состоящих из изотопов водорода ($H = p, d, t$) и ядра N_Z с зарядом $Z = 2, 3, 4, \dots$ и с массой $M_Z = 2Zm_p$. Получена зависимость энергии связи мезомолекул от заряда ядра Z .

- Рассмотрена двухэлектронная квантовая точка (КТ) в двух- и трехмерном пространстве в магнитном поле произвольной напряженности. Вычислены спектр и намагниченность КТ. Определен размер КТ из синглет-триплетного и триплет-триплетного переходов.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 18 работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы. Она содержит 210 страниц машинописного текста, 30 таблиц и 10 рисунков. Список литературы включает 226 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении ставится задача исследования квантово-механических систем в основном и возбужденных состояниях в рамках аналитических методов и обосновывается её актуальность. Обрисовывается современная ситуация в данной области и формулируются конкретные проблемы. Кратко излагается содержание диссертации.

Первая глава посвящена изложению основной идеи ОП и техники вычисления энергетического спектра квантово-механических систем.

В §1.1 представлена основная идея ОП. Этот подход основан на методах квантовой теории скалярного поля. Одно из существенных отличий квантовой теории поля (КТП) от квантовой механики состоит в том, что в КТП квантованное поле, представляющее набор бесконечного числа осцилляторов, сохраняет при взаимодействии свою осцилляторную природу, в то время как в квантовой механике поведение собственных функций для большинства потенциалов сильно отличается от гауссовского поведения осцилляторной волновой функции. Первый шаг состоит в том, что необходимо в исходном уравнении Шредингера провести замену переменных таким образом, чтобы преобразованное уравнение обладало решениями, имеющими гауссовскую асимптотику. Далее можно воспользоваться представлениями квантовой теории поля (операторы рождения и уничтожения, упорядочение и т.д.). В квантовой теории скалярного поля в формирование основного состояния основной вклад дают так называемые диаграммы "кактусного" типа. Эти диаграммы содержат основную расходимость и их можно учесть перенормировкой массы скалярной частицы и энергии вакуума. В формализме КТП эта задача решается путем введения понятия нормального произведения, если ис-

пользовать представление полевых операторов через операторы рождения и уничтожения. Отсюда следует, что требование, чтобы гамильтониан взаимодействия, во-первых, содержал полевые операторы в степени выше второй и, во-вторых, был записан в форме нормального произведения, эффективно приводит к учету вклада диаграмм Фейнмана "кактусного" типа в формирование основного состояния системы, или вакуума.

Эта идея применяется к решению модифицированного уравнения Шредингера. Прежде всего необходимо выразить гамильтониан системы через операторы рождения a^+ и уничтожения a осцилляторного базиса. Возникает вопрос, как наилучшим образом определить частоту этого осциллятора? На языке гамильтонова формализма квантовой механики эта задача формулируется следующим образом. Пусть гамильтониан системы задан. Из гамильтониана системы выделим чисто осцилляторную часть с некоторой, пока неизвестной, частотой ω и представим этот гамильтониан в форме $H_0 = \omega a^+ a$, а оставшуюся часть, т.е. гамильтониан взаимодействия, представим в форме нормального произведения по (a^+, a) и потребуем, чтобы этот гамильтониан взаимодействия не содержал слагаемых, линейных и квадратичных по каноническим переменным. Это условие определяет частоту осциллятора ω и называется *условием осцилляторного представления*.

§1.2 посвящён изучению осциллятора в d -мерном пространстве. В подразделе 1.2.1 определен d -мерный осциллятор и его канонические переменные выражены через операторы рождения и уничтожения. В 1.2.2 различные потенциалы представлены в нормальной форме. В 1.2.3 получено нормально упорядоченное представление гамильтониана и изложены детали вывода уравнения для частоты осциллятора, исходя из условия осцилляторного представления. В подразделе 1.2.4 приведен рецепт вычисления поправок к спектру и волновой функции, связанных с гамильтонианом взаимодействия. В 1.2.5 метод ОП сформулирован для произвольных потенциалов, допускающих существование связанного состояния.

В §1.3 ОП применен к вычислению энергетического спектра и волновой функции радиального УШ в трёхмерном пространстве. В подразделе 1.3.1 рассмотрено УШ со сферически симметричным потенциалом. Оно записывается стандартным образом:

$$\left[-\frac{1}{2r} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 r + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] \psi_{nl}(r) = E_{nl} \psi_{nl}(r). \quad (1)$$

Пусть потенциал $V(r)$ допускает существование связанного состояния и асимптотическое поведение волновой функции основного состояния на больших расстояниях имеет вид

$$\psi_{nl}(r) \rightarrow e^{-r^\alpha},$$

где α – некоторая константа. В 1.3.2 проведена замена переменных таким образом, чтобы преобразованная волновая функция на больших расстояниях имела гауссовское асимптотическое поведение. Такая замена имеет вид

$$r = q^{2\rho}, \quad \rho = \frac{1}{\alpha}. \quad (2)$$

В 1.3.3 сделано другое преобразование для устранения сингулярности в нуле:

$$r \cdot \Psi(r) \Rightarrow \Psi(q) = q^{2\rho\ell} \Phi(q^2) \quad (3)$$

В 1.3.4 сформулирована задача нахождения спектра следующим образом. После замены (2) и (3) для модифицированного УШ имеем из (1)

$$H\Phi(q^2) = \left[\frac{1}{2}P^2 + W(q^2, E) \right] \Phi(q^2) = \varepsilon(E)\Phi(q^2), \quad (4)$$

где $q_j \in R^d$, $d = 2 + 2\rho + 4 \cdot \rho\ell$, и введено обозначение

$$\begin{aligned} W(q^2, E) &= 4\rho^2 q^{2(2\rho-1)} [V(q^2) - E], \\ \varepsilon(E) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, задача вычисления спектра уравнения (1) свелась к вычислению энергии основного состояния гамильтониана H в пространстве R^d . Для этого выделим чисто осцилляторную часть

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2) + \left[W(q^2) - \frac{\omega^2}{2} q^2 \right], \quad (6)$$

где ω является пока произвольным параметром. Канонические переменные осциллятора (p, q) выражаются через операторы рождения a_j^\dagger и уничтожения a_j в следующем виде:

$$q_j = \frac{a_j + a_j^\dagger}{\sqrt{2\omega}}, \quad p_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \frac{a_j - a_j^\dagger}{2i}, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}. \quad (7)$$

Подставим (7) в (6) и, проведя нормальное упорядочение операторов a_j^\dagger и a_j , получим:

$$\frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2) = \omega \sum_j a_j^\dagger a_j + \frac{d}{2}\omega = \omega(a^+ a) + \frac{d}{2}\omega, \quad (8)$$

$$W(q) - \frac{\omega^2}{2} q^2 = \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \widetilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) : e^{i(kq)} : - \frac{\omega^2}{2} \left(: q^2 : + \frac{d}{2\omega} \right).$$

Потребуем, чтобы гамильтониан взаимодействия, представленный в нормально упорядоченной форме, не содержал слагаемых, квадратичных по каноническим переменным (*условие осцилляторного представления*), поскольку предполагается, что квадратичные члены определяют осцилляторный характер взаимодействия и полностью включены в свободный гамильтониан $\omega(a^+ a)$. Это требование позволяет получить уравнение на частоту осциллятора ω :

$$\omega^2 + \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \widetilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) \frac{k^2}{d} = 0. \quad (9)$$

Используя эти соотношения, перепишем гамильтониан (6) в виде:

$$H = H_0 + H_I + \varepsilon_0, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \omega(a^+ a), \\ H_I &= \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \widetilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) : e^{i(kq)} : \\ \varepsilon_0 &= \frac{d\omega}{4} + \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \widetilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $e_2^z = e^z - 1 - z - z^2/2$ и $: * : -$ символ нормального упорядочения. Такую запись полного гамильтониана будем называть "правильной формой гамильтониана". Из (9) видно, что уравнение для ω , полученное из условия осцилляторного представления, совпадает с уравнением, определяющим минимум энергии ε_0 (11) по ω , т.е.

$$\varepsilon_0 = \min_\omega \left\{ \frac{d\omega}{4} + \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \widetilde{W}_d(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega}\right) \right\}. \quad (12)$$

В точке минимума по ω (или, иначе говоря, на решениях уравнения (9)) ϵ_0 дает нулевое приближение для энергии основного состояния. Поправки могут быть вычислены с помощью гамильтониана взаимодействия. Подраздел 1.3.5 посвящён вычислению энергии основного состояния в нулевом и втором порядке ТВ по гамильтониану взаимодействия. В 1.3.6 радиальные возбуждения определены как высшие осцилляторные состояния и приведены основные формулы для спектра радиальных возбуждений. В 1.3.7 доказано, что энергия основного состояния E_0 в нулевом приближении является оценкой сверху. В 1.3.8 показано, что в общем случае параметр d может принимать любые положительные значения.

В §1.4 рассмотрены системы, описываемые аксиально симметричными потенциалами. В 1.4.1 сформулирована задача вычисления энергетического спектра гамильтониана с аксиально симметричным потенциалом. В 1.4.2 изучено представление гамильтониана с аксиально симметричным потенциалом в правильной форме и получены аналитические выражения для спектра.

§1.5 посвящён изложению деталей вычисления матричных элементов и спектра в ОП. В 1.5.1 получены основные соотношения для операторов рождения и уничтожения. В 1.5.2 продемонстрированы детали вычисления на примере определения нормировочных коэффициентов волновых функций радиальных возбуждений. В 1.5.3 схематизированы детали вычисления поправок, связанных с гамильтонианом взаимодействия, для орбитального и радиального возбуждений. Эти формулы широко используются в дальнейшем для конкретных случаев. Наконец, в 1.5.4 перечислены основные выводы главы.

Во второй главе представлено обобщение ОП на случай больших возмущений для "составных" потенциалов. В §2.1 изложена основная идея учета больших возмущений в ОП. Асимптотическое поведение волновой функции на больших расстояниях отражает характер системы. Поэтому при переходе от одного режима взаимодействия к другому необходимо изменить асимптотическое поведение волновой функции соответственно изменению константы взаимодействия. Исходя из этого, введен новый параметр, который обеспечивает переключение от одного режима взаимодействия к другому. В 2.1.1 сравниваются различные подходы к исследованию ангармонического потенциала. В 2.1.1.1 рассмотрен одномерный ангармонический потенциал. Вычислен энергетический спектр основного состояния в нулевом и первом исчезающем приближении ОП. Результаты приведены в Таблице 1. В 2.1.1.2 рассмотрен трехмерный

ангармонический осциллятор. В 2.1.2 рассмотрен потенциал воронки $V(r) = -\frac{1}{r} + g \cdot r^\nu$. Аналитически определен энергетический спектр основного и возбужденного состояний в нулевом приближении ОП.

λ	α	E		
		$E^{(0)}$	$E^{(2)}$	$E^{\text{ex.}}$
.02	2.02	1.015	1.015	
.1	2.07	1.065	1.065	
.2	2.12	1.119	1.118	1.118
.5	2.18	1.243	1.242	
1.	2.23	1.394	1.393	
1.5	2.25	1.511	1.510	
2.	2.27	1.610	1.609	1.608
5.	2.31	2.022	2.020	
10.	2.32	2.454	2.452	
20.	2.34	3.016	3.014	3.010
100.	2.36	5.009	5.008	

Таблица 1. Энергия основного состояния одномерного ангармонического осциллятора как функция параметра λ . $E^{(0)}$ и $E^{(2)}$ – энергии в нулевом и втором порядках, а $E^{\text{ex.}}$ – точное значение.

В 2.1.3 изучен потенциал $V(r) = -\frac{1}{r} + B \cdot \frac{e^{-cr}}{r}$. При различных значениях параметров B и c вычислены энергетические спектры основного и возбужденного состояний.

§2.2 посвящён вычислению энергетического спектра модельных потенциалов. Степенной потенциал рассмотрен в подразделе 2.2.1, логарифмический – в 2.2.2, молекулярный – в 2.2.3 и, наконец, кварковый потенциал – в 2.2.4. Результаты приведены в Таблице 2. В 2.2.5 обсуждается точность метода. Установлено, что вторые поправки для случаев ангармонического и степенного потенциалов составляют менее одного процента относительно нулевого приближения. Полученные результаты суммированы в 2.2.6.

Третья глава посвящена изучению атома водорода во внешних полях. В §3.1 рассмотрен атом водорода без внешних полей. В 3.1.1 изучено УШ для электрона в поле ядра с зарядом Z и получена стандартная формула Бальмера для энергетического спектра. В 3.1.2 рассмотрена радиальная волновая функция дискретного спектра, а в 3.1.3 получена формула для среднего значения любой степени радиуса r^α . В 3.1.4 получено аналитическое выражение матричного элемента дипольного перехода из 1S состояния в возбужденное состояние с произвольными n и ℓ для любого

типа потенциала.

Таблица 2. Энергетические спектры для различных потенциалов в нулевом приближении. Численные результаты - в скобках.

		$V(r) = -2^{1.7}/r^{0.2};$ $2m = 1$	$-2^8/r^{0.8};$ $2m = 1$	$2^{3.5}r;$ $2m = 1$	$\ln r;$ $m = 1$
$n = 0$	$l = 0$	-2.686 (-2.686)	-1.2186 (-1.218)	9.353 (9.35243)	1.045 (1.0443)
	$l = 1$	-2.345 (-2.345)	-0.5004 (-0.500)	13.445	1.641 (1.643)
	$l = 2$	-2.156 (-2.156)	-0.2947 (-0.295)	16.993	2.014 (2.015)
$n = 1$	$l = 0$	-2.253 (-2.253)	-0.462 (-0.462)	16.355 (16.3518)	1.848 (1.8474)
	$l = 1$	-2.101 (-2.101)	-0.281 (-0.281)	19.540	2.151 (2.151)
	$l = 2$	-1.990 (-1.990)	-0.195 (-0.195)	22.521	2.388 (2.388)
$n = 2$	$l = 0$	-2.044 (-2.044)	-0.265 (-0.265)	22.084 (22.08224)	2.290 (2.290)
	$l = 1$	-1.951 (-1.951)	-0.187 (-0.187)	24.833	2.491 (2.491)
	$l = 2$	-1.875 (-1.875)	-0.142 (-0.142)	27.478	2.663 (2.663)

В 3.1.5 изучено кулоновское взаимодействие с учетом экранировки заряда и определен энергетический спектр как функция параметра экранировки. В 3.1.6 определена критическая длина экранировки для состояний с различными орбитальными возбуждениями.

В §3.2 рассмотрен атом водорода во внешнем электрическом поле. Вычисление проводилось в параболической системе координат. В 3.2.1 изученно УШ для атома водорода во внешнем электрическом поле и кратко обсуждена проблема суммирования ряда ТВ по напряженности поля. В 3.2.2 рассмотрен случай слабого электрического поля, и вычислен энергетический спектр с учётом поправки

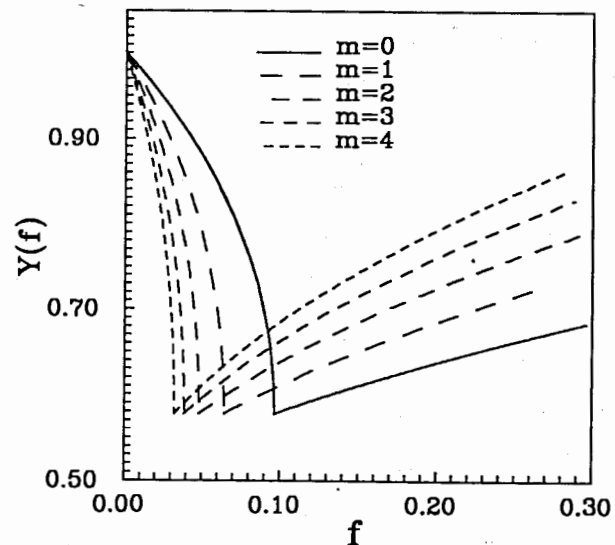


Рис.1 Зависимость частоты осциллятора $\Omega(f) = \text{const } Y(f)$ от параметра f , пропорционального напряженности магнитного поля. Здесь $m = 0, 1, 2, \dots$ - азимутальное квантовое число.

второго порядка. В 3.2.3 рассмотрен эффект Штарка в сильных полях и получено выражение для уровней энергии. В 3.2.4 аналитически вычислены критические значения внешнего поля и уровни энергии на классическом пороге ионизации. Зависимости частот осциллятора от внешнего поля представлены на Рис.1, откуда видно, что при проговом значении внешнего электрического поля характер зависимости резко изменяется. В 3.2.5 определены ширины уровней для слабых внешних полей. В 3.2.6 вычислен переходный матричный элемент в параболической системе координат. В 3.2.7 обсуждаются полученные результаты.

§3.3 посвящён рассмотрению атома водорода во внешнем магнитном поле. В 3.3.1 и 3.3.2 осцилляторное представление применено к вычислению энергетического спектра эффекта Зеемана. В 3.3.3 изучен квадратичный эффект Зеемана и вычислен спектр и сдвиг уровней. Определен матричный элемент перехода $1S \rightarrow nL$. В 3.3.4 вычислен спектр атома водорода для основного и возбужденного состояний при любых значениях напряженности магнитного поля.

Четвёртая глава посвящена рассмотрению кулоновской трехтельной системы. В §4.1 проанализирована задача трех тел с кулоновским взаимодействием. В §4.2 рассматривается трехтельный гамильтониан с кулоновским взаимодействием и полным угловым моментом J . Формулируется задача вычисления спектра трехтельной системы в ОП.

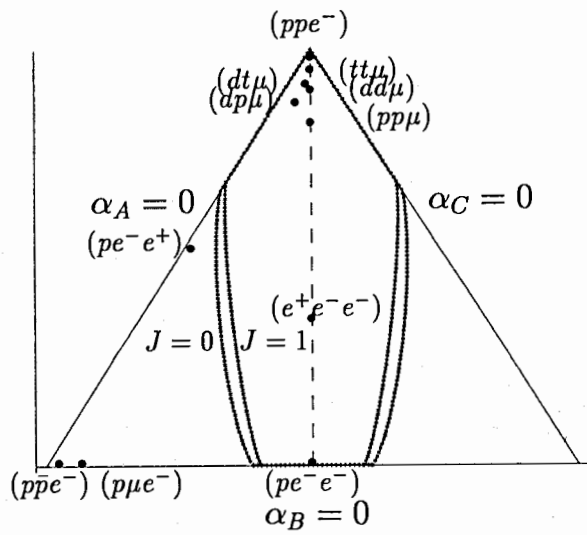


Рис.2

Треугольник стабильности. Граница стабильности трехтельной кулоновской системы с полным моментом $J=0,1$.

В 4.2.1 гамильтониан трехтельной системы представляется в нормальной форме. §4.3 посвящён вычислению энергии трехтельной кулоновской системы. В подразделе 4.3.1 вычислена энергия основного состояния трехтельной кулоновской системы, а в 4.3.2 определена энергия связи для $J = 1$. Для определения точности нулевого приближения в 4.3.3 вычислены энергии связи хорошо известных трехтельных систем. §4.4 посвящён установлению границы стабильности трехтельной кулоновской системы с единичными зарядами в зависимости от масс частиц. В 4.4.1 это сделано для трехтельной системы в основном состоянии, а в 4.4.2 — в состоянии с моментом $J = 1$. Результаты представлены на Рис.2.

В §4.5 вычислены энергии основных состояний мезомолекул ($H\mu N_z$), состоящих из изотопов водорода (p, d, t) и ядра N_z с зарядом $Z = 2, 3, 4, \dots$ и с массой $M_z = 2Zm_p$. В 4.5.1 вычислена энергия связи мезомолекулы, а в 4.5.2 рассмотрена стабильность мезомолекул и получена зависимость энергии связи мезомолекул от заряда ядра. В 4.5.3 представлены краткие выводы.

В пятой главе рассмотрена квантовая точка. В §5.1 проанализированы супермаленькие системы с линейными размерами порядка 10–

1000 Å, состоящие из нескольких электронов. §5.2 посвящен изучению гамильтониана квантовой точки (КТ), находящейся во внешнем магнитном поле. В §5.3 рассмотрена двухэлектронная КТ. В §5.4 вычислен энергетический спектр двухэлектронной КТ. В подразделе 5.4.1 вычислены собственные значения гамильтониана системы центра масс. В 5.4.2 получено модифицированное УШ для гамильтониана относительного движения и изложены детали вычисления спектра. В 5.4.3 рассмотрена двумерная КТ и впервые получены аналитические выражения для её спектра в состояниях с $n_r = 0, 1$:

$$E_{0m}^d = \hbar\omega_0 \left\{ \frac{1}{2}mt + (1 + |m|)x^2 \sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2} + g^* [1 - (-1)^m] \frac{t m^*}{4 m_e} + \frac{3 \ell_0 x}{2 a^* \sqrt{2}} \left[1 + \frac{1}{4}t^2 \right]^{\frac{1}{4}} \frac{\Gamma(1/2 + |m|)}{\Gamma(1 + |m|)} \right\} \quad (13)$$

и

$$E_{1m}^d = \hbar\omega_0 \left\{ \frac{1}{2}mt + (3 + |m|)x^2 \sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2} + g^* [1 - (-1)^m] \frac{t m^*}{4 m_e} + \frac{3 \ell_0 x}{2 a^* \sqrt{2}} \left[1 + \frac{1}{4}t^2 \right]^{\frac{1}{4}} \frac{\Gamma(1/2 + |m|)}{\Gamma(1 + |m|)} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{1}{1 + |m|} \right) \right\},$$

где $t = \omega_c/\omega_0$, ω_c — частота Лормора, ω_0 — частота конфинмента и ℓ_0/a^* — размер КТ, а параметр x равен

$$x = \sqrt{\frac{\sigma t + \sqrt{(\sigma^2 + \frac{21}{4})t^2 + 21}}{7\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}}}$$

Полученное выражение (14) определяет зависимость энергетического спектра от внешних магнитных полей и линейного размера КТ. В 5.4.4 изучены энергетические переходы между уровнями. Из условия синглет-триплетного перехода между уровнями m и $m-1$ для размера КТ имеем:

$$\frac{\ell}{a^*} \Big|_{n=0} = \frac{4\sqrt{2}}{3x} \frac{\Gamma(2 + |m|)}{\Gamma(1/2 + |m|)} \frac{t}{[1 + t^2/4]^{1/4}} \left[\frac{x^2}{2} \sqrt{1 + \frac{4}{t^2}} - \frac{1}{2}\sigma \right], \quad (14)$$

где использовано обозначение $\sigma = 1 - (-1)^m g^* \frac{m^*}{m_e}$. При сильных внешних полях, т.е. при $t \rightarrow \infty$, в низшем порядке по g^* имеем

$$\frac{\ell_0}{a^*} \Big|_{n=0} = \frac{8}{3} \frac{\Gamma(2 + |m|)}{\Gamma(1/2 + |m|)} \left[\left(\frac{\omega_0}{\omega_c} \right)^{3/2} + \frac{3}{10} (-1)^m g^* \frac{m^*}{m_e} \left(\frac{\omega_c}{\omega_0} \right)^{1/2} \right] \quad (15)$$

Из (15) видно, что при сильных магнитных полях основной вклад в линейный размер КТ дает спиновое взаимодействие. В подразделе 5.4.5 рассмотрена двухэлектронная КТ в трехмерном пространстве. В 5.4.6 суммированы основные результаты главы.

В заключении перечисляются основные результаты, выдвигаемые на защиту.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *On Bound States in the QFT*. Sacharov Memorial Lectures in Physics, Proceed. Mos. v.2 p.963-969 (1991)
2. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *The Screened Coulomb Potential in the Oscillator Representation*. ЯФ, 56, с.89(1993).
3. М. Динейхан, Г.В. Ефимов: *Об устойчивости трехтельной кулоновской системы в осцилляторном представлении*. ЯФ, 57, с.220-232(1994).
4. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *The Oscillator Representation and the Stability of Three-body Coulomb Systems*. Few-Body Systems 16, p.59-90(1994)
5. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *Mesic molecules of light nuclei in the oscillator representation*. Jour. Mod. Phys. Lett. A9, p.2083(1994).
6. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *Anharmonic potential in the oscillator representation*. Preprint JINR, E4-94-75, Dubna (1994).
7. M.Dineykhаn, G.V.Efimov: *Spherically symmetric potentials in the oscillator representation*. ЯФ, 58, с.1614(1995).
8. М.Динейхан Г.В. Ефимов: *Квантовая механика связанных состояний в осцилляторном представлении*. ЭЧАЯ, т26, с.651-719 (1995).

9. M.Dineykhаn G.V.Efimov: *The Schrödinger equation for the Bound State Systems in the Oscillator Representation*. Reports on Mathemat. Phys. 36 p.287-307(1995).
10. M.Dineykhаn G.V.Efimov: *Zeeman Effect in the Oscillator Representation*. ЯФ 59, с.862(1996)
11. M.Dineykhаn G.V.Efimov G. Ganbold and S.N.Nedelko: *Oscillator Representation in Quantum Physics* Lecture Notes in Physics, m 26 Springer-Verlag, (1995).
12. M.Dineykhаn G.V.Efimov: *The stability of three-body Coulomb systems with J = 1 in the oscillator representation*. Few-Body Systems 21, p.63(1996)
13. M. Dineykhаn: *Oscillator representation method in the theory of a hydrogen atom in an external field*. Preprint JINR, E4-96-92, Dubna(1996).
14. M. Dineykhаn: *Oscillator representation and generalized van der Waals Hamiltonian*. Mod. Phys. Lett. A12, p.1193(1997).
15. M. Dineykhаn: *Azially Symmetric Potentials in the Oscillator representation*. Zeitschrift Für Physic D41, p.77-87(1997).
16. M.Dineykhаn, R. G. Nazmitdinov: *Two Electron Quantum Dot in Magnetic Field*. Phys. Rev. B20, p.13707(1997).
17. М. Динейхан: *Эффект Штарка в сильном поле в методе осцилляторного представления*. Препринт ОИЯИ Р4-97-173, Дубна 1997.
18. M.Dineykhаn, R. G. Nazmitdinov: *On analytical solutions to the problem of the Coulomb and confining potentials*. Preprint JINR, E4-97-283 Dubna 1997.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 февраля 1998 года.

Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 27.02.98

Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,49

Тираж 100. Заказ 50507

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области