ЖЭТФ, 2004, том 125, вып. 6, стр. 1385–1392

ДВЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЕ ЧАСТИЦЫ ВО ВНЕШНЕМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Ю. Н. Овчинников[*]

Max-Planck Institute für Physik Komplexer Systeme
D-01187, Dresden, Germany

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 2 октября 2003 г.

Исследовано решение уравнения Шредингера для двух взаимодействующих частиц во внешнем потенциале. Предполагается, что во внешнем потенциале для одной частицы существует мелкий уровень. Показано, что отталкивание приводит к переводу одной из частиц в непрерывный спектр при достижении порогового значения взаимодействия. Для мелкого уровня пороговое значение взаимодействия не зависит от глубины уровня.

PACS: 03.65.Ge

1. ВВЕДЕНИЕ

Точный учет взаимодействия частиц в твердом теле невозможен и для его учета используются различные приближения, позволяющие выделить «главные члены» с последующим учетом остатка [1–3]. Внесение примеси в металл приводит к перераспределению электронной плотности и, следовательно, делает необходимым учет условия электронейтральности. Новые физические явления возникают, если примесь достаточно сильна и может привести к образованию локализованного состояния. В качестве первого этапа исследования этой проблемы рассмотрим задачу о движении двух взаимодействующих частиц во внешнем потенциале, таком что для одной частицы существует мелкий уровень. Взаимодействие предполагается отталкивающим. Без взаимодействия уровень может быть заполнен двумя частицами (электронами) с противоположным спином.

Взаимодействие приводит к тому, что одна из частиц находится на большем расстоянии от центра, чем другая. Здесь возникает разница между точным решением и приближением Хартри–Фока. Уравнения Хартри–Фока симметричны относительно замены $1 \leftrightarrow 2$, и теория возмущений по взаимодействию порождает две одинаковые одночастичные функции. По этой причине в уравнениях Хартри–Фока имеется точка бифуркации, выше которой существуют две различные функции одночастичного приближения. И такое состояние имеет энергию ниже, чем решение, составленное из одинаковых одночастичных функций. Существует критическое значение взаимодействия, выше которого уровень будет занят только одной частицей, а вторая уйдет в непрерывный спектр. Это критическое значение может быть найдено в приближении Хартри–Фока. Вблизи порога поправочные члены к приближению Хартри–Фока малы и могут быть найдены по теории возмущений.

2. ФУНКЦИИ РАССЕЯНИЯ В ПОТЕНЦИАЛЕ С МЕЛКИМ УРОВНЕМ

Предположим, что $U(\mathbf{r})$ есть короткодействующий потенциал, в котором существует мелкий локализованный уровень с энергией $E_0 < 0$. Положим

$$\sqrt{2m|E_0|} = \kappa. \tag{1}$$

Поскольку уровень мелкий, радиус локализованного состояния κ^{-1} много больше эффектив-

[*]E-mail: yuri@fisica.cib.na.cnr.it

ного радиуса a потенциала $U(\mathbf{r})$. Результаты не зависят от явного вида потенциала $U(\mathbf{r})$, пока локализованный уровень может рассматриваться как мелкий. Поэтому для простоты мы продемонстрируем выводы на примере потенциала $U(\mathbf{r})$ в простейшей форме:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{если } |\mathbf{r}| < a, \\ 0, & \text{если } |\mathbf{r}| > a. \end{cases} \tag{2}$$

Локализованное состояние (основное состояние) ψ_0 уравнения Шредингера можно представить в виде

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_0}{\rho}, \tag{3}$$

где

$$|\mathbf{r}| = \rho,$$

$$\chi_0 = B \begin{cases} \exp(-\kappa\rho), & \rho > a, \\ e^{-\kappa a} \dfrac{\sin(\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}\rho)}{\sin(\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}a)}, & \rho < a. \end{cases} \tag{4}$$

Нормировочный коэффициент B определяется формулой

$$B^{-2} = e^{-2\kappa a} \left\{ \frac{1}{2\kappa} + \frac{a}{2\sin^2\left(\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}a\right)} - \right. \\ \left. - \frac{\operatorname{ctg}\left(\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}a\right)}{2\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}} \right\} \tag{5}$$

и в рассматриваемом приближении (не зависящем от явной формы потенциала)

$$B = \sqrt{2\kappa}. \tag{6}$$

Энергия E_0 локализованного состояния есть решение уравнения

$$\operatorname{tg}\left(\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}a\right) = -\frac{1}{\kappa}\sqrt{2m(U_0-|E_0|)}. \tag{7}$$

Из уравнения (7) при выполнении условия $\kappa a \ll 1$ находим важное соотношение

$$\sqrt{2mU_0}\, a = \frac{\pi}{2} + \frac{2\kappa a}{\pi} + \ldots \tag{8}$$

Волновая функция непрерывного спектра в s-состоянии может быть представлена в виде

$$\psi_E = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\rho} \chi_E, \tag{9}$$

где

$$\chi_E = \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \sin\left(\sqrt{2m(U_0+E)}\rho\right) \dfrac{\sin(\sqrt{2mE}a+\delta_E)}{\sin(\sqrt{2m(U_0+E)}a)}, & \rho < a \\ \sin\left(\sqrt{2mE}\rho + \delta_E\right), & \rho > a, \end{cases} \tag{10}$$

где L — размер сферы, на границе которой ставится граничное условие, а δ_E — фаза рассеяния. Фаза рассеяния удовлетворяет уравнению

$$\operatorname{tg}\left(\sqrt{2mE}a + \delta_E\right) = \\ = \sqrt{\frac{E}{U_0+E}} \operatorname{tg}\left(\sqrt{2m(U_0+E)}a\right). \tag{11}$$

Из уравнений (8), (11) следует, что в области малых энергий, $E \ll U_0$, фаза δ_E удовлетворяет уравнению

$$\sin\delta_E = \left(\frac{2mE}{2mE+\kappa^2}\right)^{1/2}, \quad \delta_{E=0} = \pi. \tag{12}$$

Выражение (12) для фазы рассеяния при малых энергиях является общим и не зависит от явного вида короткодействующего потенциала $U(r)$ [4].

При ненулевом значении углового момента функции рассеяния $\psi^{(l,M)}$ могут быть выбраны в виде

$$\psi_E^{(l,M)} = Y_l^M \chi_l(\rho)/\rho. \tag{13}$$

В области $\rho > a$ функция $\chi_l(\rho)$ удовлетворяет условию

$$\chi_l(\rho) \sim \sqrt{\rho}\left\{ J_{l+1/2}\left(\sqrt{2mE}\,\rho\right) + \right. \\ \left. + (-1)^l \operatorname{tg}\delta_E^{(l)} J_{-(l+1/2)}\left(\sqrt{2mE}\,\rho\right)\right\}, \tag{14}$$

где $\delta_E^{(l)}$ — фаза рассеяния с моментом l и энергией E, J_ν — функция Бесселя. При малых энергиях все фазы рассеяния с $l \neq 0$ малы и ими можно пренебречь. В этом случае

$$\chi_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{L}} \left(\sqrt{2mE}\,\rho\right)^{1/2} \times \\ \times J_{l+1/2}\left(\sqrt{2mE}\,\rho\right), \quad l > 0. \quad (15)$$

Без взаимодействия на одном уровне можно поместить две частицы с противоположными спинами. Взаимодействие приведет к появлению корреляций между частицами. Задача состоит в определении порогового значения потенциала взаимодействия $V(r_1 - r_2)$, при котором минимум энергии достигается на состоянии с одной из частиц в непрерывном спектре. Для выявления существенных моментов задачи воспользуемся теорией возмущений по потенциалу взаимодействия $V(r_1 - r_2)$. После этого будет использована теория возмущений по отклонению потенциала от порогового значения. В качестве нулевого приближения в этом случае можно использовать уравнения Хартри–Фока.

3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ПО ПОТЕНЦИАЛУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Запишем оператор $\hat{L}$ системы двух взаимодействующих частиц в виде

$$\hat{L} = \hat{H}_0 + V(r_1 - r_2) + 2|E_0|, \quad (16)$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан нулевого приближения,

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2m}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) + U(r_1) + U(r_2), \quad (17)$$

$$\hat{L}_0 = \hat{H}_0 + 2|E_0|,$$

Δ_{r_1} — лапласиан.

Функция

$$\tilde{\psi}_0(r_1, r_2) = \psi_0(r_1)\psi_0(r_2) \quad (18)$$

— нулевая мода оператора $\hat{L}_0$:

$$\hat{L}_0\tilde{\psi}_0 = 0. \quad (19)$$

По теории возмущений функция основного состояния $\tilde{\psi}$ двух частиц и энергия E представимы в виде ряда по степеням потенциала взаимодействия $V(r_1 - r_2)$:

$$\tilde{\psi} = \tilde{\psi}_0 + \tilde{\psi}_1 + \tilde{\psi}_2 + \tilde{\psi}_3 + \ldots, \quad (20)$$

$$E = -2|E_0| + E_1 + E_2 + E_3 + \ldots$$

Из формул (16), (20) находим

$$\begin{aligned} &\hat{L}_0\tilde{\psi}_1 + V\tilde{\psi}_0 - E_1\tilde{\psi}_0 = 0, \\ &\hat{L}_0\tilde{\psi}_2 + (V - E_1)\tilde{\psi}_1 - E_2\tilde{\psi}_0 = 0, \\ &\hat{L}_0\tilde{\psi}_3 + (V - E_1)\tilde{\psi}_2 - E_2\tilde{\psi}_1 - E_3\tilde{\psi}_0 = 0, \\ &\hat{L}_0\tilde{\psi}_4 + (V - E_1)\tilde{\psi}_3 - E_2\tilde{\psi}_2 - \\ &\qquad - E_3\tilde{\psi}_1 - E_4\tilde{\psi}_0 = 0, \ldots \end{aligned} \quad (21)$$

и так далее.

Условие разрешимости системы уравнений (21) определяет значение энергий E_i:

$$\begin{aligned} E_1 &= \int d^3r_1 d^3r_2\, \tilde{\psi}_0 V \tilde{\psi}_0, \\ E_2 &= \int d^3r_1 d^3r_2\, \tilde{\psi}_0 V \tilde{\psi}_1, \\ E_3 &= \int d^3r_1 d^3r_2\, \tilde{\psi}_0 V \tilde{\psi}_2, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \quad (22)$$

На подпространстве, ортогональном к нулевой моде, оператор $\hat{L}_0$ имеет обратный оператор $(\hat{L}_0^p)^{-1}$. Этот оператор представим в виде

$$\left(\hat{L}_0^p\right)^{-1} = \frac{\psi_0(r_1)\psi_0(r_1')\psi_\nu(r_2)\psi_\nu^*(r_2')}{E_\nu + |E_0|} + \\ + \frac{\psi_\nu(r_1)\psi_\nu^*(r_1')\psi_0(r_2)\psi_0(r_2')}{E_\nu + |E_0|} + \\ + \frac{\psi_\nu(r_1)\psi_\nu^*(r_1')\psi_\mu(r_2)\psi_\mu^*(r_2')}{E_\nu + E_\mu + 2|E_0|}. \quad (23)$$

В уравнении (23) индексы «ν», «μ» означают три переменных: энергию E и индексы углового момента l, M —

$$\nu = \{E, l, M\}, \quad (24)$$

энергии $E_{\nu,\mu} \geq 0$. Сумма по состояниям непрерывного спектра заменяется на интеграл по энергии

$$\sum \to \frac{L}{\pi} d\sqrt{2mE}, \quad (25)$$

а по индексам l, M выполняется суммирование. В формуле (20) можно выполнить частичное суммирование. В результате получим

$$\tilde{\psi} = \tilde{\psi}_0 - (\hat{L}_0^p)^{-1}\hat{R}\tilde{\psi}_0, \quad (26)$$

где оператор $\hat{R}$ дается выражением

$$
\begin{gathered}
\hat{R} = V - V[1 + (\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)]^{-1}(\hat{L}_0^p)^{-1}V - \\
-E_2 V(\hat{L}_0^p)^{-1}\Big\{1 - \Big[(V-E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1} + (\hat{L}_0^p)^{-1}(V-E_1)\Big] + \\
+ \Big[(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1} + \\
+ (V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-2}(V - E_1) + \\
+ (\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)\ \Big] - \\
- \Big[(V-E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V-E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V-E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1} + \\
+ (V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-2}(V - E_1) + \\
+ (V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-2}(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1) + \\
+ (\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1) \times \\
\times\ (\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)\Big]\Big\}\,(\hat{L}_0^p)^{-1}V + \ldots \qquad (27)
\end{gathered}
$$

Отметим, что оператор $(\hat{L}_0^p)^{-1}(V - E_1)$ не положительный. У него есть отрицательные собственные значения E_-, такие что

$$
|E_-| \geq E_1/|E_0|. \qquad (28)
$$

По этой причине теория возмущений по потенциалу взаимодействия может быть использована во всяком случае лишь при условии

$$
E_1 < |E_0|. \qquad (29)
$$

Общая форма решения для основного состояния $\tilde{\psi}$ может быть записана в виде

$$
\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \tilde{\psi}(\rho_1, \rho_2, z), \qquad (30)
$$

где

$$
|\mathbf{r}_{1,2}| = \rho_{1,2}, \quad z = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{\rho_1 \rho_2}. \qquad (31)
$$

Для больших значений величин $\rho_{1,2}$ число существенных гармоник велико. Но в области $\rho_{1,2} \gg \kappa^{-1}$ выживает только одна гармоника с угловым моментом $l = 0$, поскольку асимптотика на больших расстояниях связана с особенностями в фазе рассеяния. Тем не менее в общем случае приближение с учетом только состояний с $l = 0$ в непрерывном спектре не может быть использовано для вычисления поправок к энергии в формуле (22). Энергия состояния может быть восстановлена из асимптотического разложения волновой функции.

4. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ В АСИМПТОТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ

В асимптотической области $\rho_{1,2} \geq \kappa^{-1}$ для крайнего слева оператора $(\hat{L}_0^p)^{-1}$ может быть использовано приближение, учитывающее лишь состояния с $l = 0$. В этом приближении поправка $\tilde{\psi}_1$ первого порядка равна

$$
\begin{gathered}
\tilde{\psi}_1 = -\frac{2\pi}{\kappa}\ E_1 \Bigg\{ \frac{\kappa e^{-\kappa\rho_1}}{4\pi^3 \rho_1 \rho_2} \int_0^\infty \frac{d\sqrt{2mE}}{E + |E_0|} \times \\
\times \sin\delta_E \sin\left(\sqrt{2mE}\rho_2 + \delta_E\right) + \\
+ \frac{\kappa e^{-\kappa\rho_2}}{4\pi^3 \rho_1 \rho_2} \int_0^\infty \frac{d\sqrt{2mE}}{E + |E_0|} \sin\delta_E \times \\
\times \sin\left(\sqrt{2mE}\rho_1 + \delta_E\right) + \frac{1}{4\pi^4 \rho_1 \rho_2} \times \\
\times \int_0^\infty \frac{d\sqrt{2mE_\nu}\, d\sqrt{2mE_\mu}}{E_\nu + E_\mu + 2|E_0|} \sin\delta_{E_\nu} \sin\delta_{E_\mu} \times \\
\times \sin\left(\sqrt{2mE_\nu}\rho_1 + \delta_{E_\nu}\right) \times \\
\times \sin\left(\sqrt{2mE_\mu}\rho_2 + \delta_{E_\mu}\right) \Bigg\}. \qquad (32)
\end{gathered}
$$

Фазы δ_E в уравнении (32) определяются формулой (12). Первые два интеграла в формуле (32) могут быть вычислены сравнительно просто при произвольных значениях $\rho_{1,2}$. В асимптотической области из уравнения (32) находим

$$
\tilde{\psi}_1 = -\frac{mE_1}{2\pi\kappa} \frac{e^{-\kappa(\rho_1+\rho_2)}}{\rho_1 \rho_2} \left[\frac{1}{2} - \kappa \max(\rho_1, \rho_2)\right]. \qquad (33)
$$

Из формулы (21) находим поправку $\tilde{\psi}_2$ второго порядка к волновой функции

$$
\tilde{\psi}_2 = -E_1\ (\hat{L}_0^p)^{-2} V \tilde{\psi}_0 + (\hat{L}_0^p)^{-1} V (\hat{L}_0^p)^{-1} V \psi_0. \qquad (34)
$$

Отметим, что оператор $(\hat{L}_0^p)^{-2}$ создает при больших значениях ρ члены вида $(\kappa\rho_{1,2})^2 \times \exp(-\kappa(\rho_1 + \rho_2))$. Эти члены определяют перенормировку величины κ. Из формул (23), (34) находим

$$\tilde{\psi}_2 = -\frac{\kappa e^{-\kappa(\rho_1+\rho_2)}}{2\pi\rho_1\rho_2}\frac{m^2E_1^2}{2\kappa^4}\left(\frac{1}{2}-\kappa^2\max(\rho_1^2,\rho_2^2)\right) - \frac{2\pi}{\kappa}E_2\left\{\frac{\kappa e^{-\kappa\rho_1}}{4\pi^3\rho_1\rho_2}\int\limits_0^\infty d\sqrt{2mE}\frac{\sin\delta_E\sin\left(\sqrt{2mE}\rho_2+\delta_E\right)}{E+|E_0|}+\right.$$
$$+\frac{\kappa e^{-\kappa\rho_2}}{4\pi^3\rho_1\rho_2}\int\limits_0^\infty d\sqrt{2mE}\frac{\sin\delta_E\sin\left(\sqrt{2mE}\rho_1+\delta_E\right)}{E+|E_0|}+\frac{1}{4\pi^4\rho_1\rho_2}\iint\limits_0^\infty d\sqrt{2mE_\nu}d\sqrt{2mE_\mu}\times$$
$$\left.\times\frac{\sin\delta_{E_\nu}\sin\delta_{E_\mu}\sin\left(\sqrt{2mE_\nu}\rho_1+\delta_{E_\nu}\right)\sin\left(\sqrt{2mE_\mu}\rho_2+\delta_{E_\mu}\right)}{E_\nu+E_\mu+2|E_0|}\right\}. \quad (35)$$

В формулах (32), (35) величины E_1, E_2 — точные поправки первого и второго порядков к энергии с учетом всех гармоник. В асимптотической области $\rho_{1,2} \gg \kappa^{-1}$ находим из уравнения (35) поправку $\tilde{\psi}_2$ к волновой функции:

$$\tilde{\psi}_2 = \frac{\kappa e^{-\kappa(\rho_1+\rho_2)}}{2\pi\rho_1\rho_2}\left\{-\frac{m^2E_1^2}{2\kappa^4}\left(\frac{1}{2}-\kappa^2\max(\rho_1^2,\rho_2^2)\right)-\right.$$
$$\left.-\frac{mE_2}{\kappa^2}(1-\kappa\max(\rho_1,\rho_2))\right\}. \quad (36)$$

Таким образом, во втором порядке теории возмущений волновая функция $\tilde{\psi}$ в асимптотической области $\rho_{1,2} \gg \kappa^{-1}$ определяется выражением

$$\tilde{\psi} = \frac{\kappa e^{-\kappa(\rho_1+\rho_2)}}{2\pi\rho_1\rho_2}\left\{1-\frac{mE_1}{2\kappa^2}-\frac{m^2E_1^2}{4\kappa^4}-\frac{mE_2}{\kappa^2}+\right.$$
$$+\left(\frac{mE_1}{\kappa^2}\kappa\max(\rho_1,\rho_2)+\right.$$
$$\left.\left.+\frac{mE_2}{\kappa^2}\kappa\max(\rho_1,\rho_2)+\frac{m^2E_1^2}{2\kappa^4}\kappa^2\max(\rho_1^2,\rho_2^2)\right)\right\}. \quad (37)$$

Из уравнения (37) следует, что величина κ частицы, ближайшей к центру, не меняется, величина κ частицы, более удаленной от центра, перенормируется и становится равной $\tilde{\kappa}$. Величина $\tilde{\kappa}$ находится из уравнения (37) и равна

$$\tilde{\kappa} = \kappa\left\{1-\frac{mE_1}{\kappa^2}-\frac{mE_2}{\kappa^2}-\frac{m^2E_1^2}{2\kappa^4}\right\}. \quad (38)$$

На больших расстояниях частицы не взаимодействуют и, следовательно, выполняется уравнение

$$E_1+E_2+E_3+\ldots = \frac{1}{2m}(\kappa^2-\tilde{\kappa}^2). \quad (39)$$

Поправка E_1 первого порядка к энергии определяется формулами (3), (4), (22) и равна

$$E_1 = \pi^2\kappa^2 I_0, \quad (40)$$

где

$$I_0 = \int\limits_0^\infty d\rho\,\rho V(\rho). \quad (41)$$

Для получения поправки к энергии второго порядка E_2 волновая функция $\tilde{\psi}_1$ должна быть найдена на расстояниях $\rho_{1,2} \sim R_{int}$, где R_{int} — радиус действия потенциала взаимодействия $V(r)$. На расстояниях $\rho_{1,2} \geq R_{int}$ функция $\tilde{\psi}_1$ с учетом только состояний с $l = 0$ равна

$$\tilde{\psi}_1 = -\frac{\pi m\kappa I_0}{2\rho_1\rho_2}\left\{\exp\Big(-\kappa(\rho_1+\rho_2)\Big)\Big(1-\kappa(\rho_1+\rho_2)\Big)+\right.$$
$$+\frac{1}{2\pi^2}\iint\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dx\,dy\,xy(-1+xy+ix+iy)}{(x^2+1)(y^2+1)(x^2+y^2+2)}\times$$
$$\left.\times\exp(i\kappa x\rho_1+i\kappa y\rho_2)\right\}. \quad (42)$$

На больших расстояниях, $\rho_{1,2} \gg \kappa^{-1}$, уравнение (42) воспроизводит формулу (33). В области $R_{int} < \rho_{1,2} \ll \kappa^{-1}$ последний член в правой части формулы (42) имеет логарифмическую особенность. В этой области находим

$$\iint\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dx\,dy(-1+xy+ix+iy)}{(x^2+1)(y^2+1)(x^2+y^2+2)}\times$$
$$\times\exp\Big(i\kappa(x\rho_1+y\rho_2)\Big) =$$
$$= -\pi-\frac{\pi^2}{2}+\pi K_0\left(\kappa\sqrt{2(\rho_1^2+\rho_2^2)}\right), \quad (43)$$

где K_0 — функция Бесселя. Окончательно, функция $\tilde{\psi}_1$ в области $R_{int} < \rho_{1,2} \ll \kappa^{-1}$ определяется выражением

$$\tilde{\psi}_1 = -\frac{m\kappa I_0}{4\rho_1\rho_2}\left\{\frac{3\pi}{2}-1+K_0\left(\kappa\sqrt{2(\rho_1^2+\rho_2^2)}\right)\right\}. \quad (44)$$

Коэффициент перед логарифмической особенностью численно мал, и, следовательно, формула (44) позволяет получить поправку к энергии второго порядка с высокой точностью:

$$E_2 = -\frac{\pi^3 m\kappa^2 I_0^2}{2}\left\{\left(\frac{3\pi}{2}-1\right)+\ln\left(\frac{1}{\kappa R_{int}}\right)+ \right.$$
$$+\frac{2}{\pi^2 I_0}\iint\limits_0^\infty d\rho_1\, d\rho_2 \int\limits_{-1}^{1} dz\, V\left(\sqrt{\rho_1^2+\rho_2^2+2\rho_1\rho_2 z}\right)\times$$
$$\left.\times \ln\left(\frac{\sqrt{2}R_{int}}{\sqrt{\rho_1^2+\rho_2^2}}\right)\right\}, \quad (45)$$

где R_{int} — характерный радиус взаимодействия двух частиц.

Отталкивание частиц приводит к уменьшению параметра $\tilde{\kappa}$ в волновой функции частицы, находящейся дальше от центра, чем другая. Это явление, по-видимому, сохраняется во всех порядках теории возмущений. В теории есть два масштаба. Один из них связан с логарифмической особенностью и может быть определен как

$$mI_0^{(1)} \approx \frac{2}{\pi}\frac{1}{\ln(1/\kappa R_{int})}. \quad (46)$$

Второй масштаб определяется формулой (28):

$$mI_0^{(2)} = \frac{1}{2\pi^2}. \quad (47)$$

Первый масштаб меньше второго лишь при выполнении жесткого условия

$$\ln\left(\frac{1}{\kappa R_{int}}\right) > 4\pi. \quad (48)$$

Увеличение взаимодействия приводит к выталкиванию второй частицы в делокализованное состояние. Вблизи порога величина $\tilde{\kappa}$ стремится к нулю. В результате возникает теория возмущений, стартующая с сильно асимметричных одночастичных функций.

5. ПОРОГОВОЕ ЗНАЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ПЕРЕВОДА ВТОРОЙ ЧАСТИЦЫ В ДЕЛОКАЛИЗОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ

В качестве нулевого приближения для определения порогового значения взаимодействия мы воспользуемся уравнениями Хартри–Фока

$$\begin{gathered}\left\{-\frac{1}{2m}\Delta_{r_1}+U(r_1)+\int V(r_1-r_3)\hat{\psi}_2^2(r_3)\,d^3r_3\right\}\times\\ \times\hat{\psi}_1(r_1) = -|E_1|\hat{\psi}_1(r_1),\\ \left\{-\frac{1}{2m}\Delta_{r_2}+U(r_2)+\int V(r_2-r_3)\hat{\psi}_1^2(r_3)\,d^3r_3\right\}\times\\ \times\hat{\psi}_2(r_2) = -|E_2|\hat{\psi}_2(r_2).\end{gathered} \quad (49)$$

Система уравнений (49) симметрична относительно замены $\hat{\psi}_1 \leftrightarrow \hat{\psi}_2$. По этой причине существует решение, такое что

$$\hat{\psi}_1 = \hat{\psi}_2. \quad (50)$$

По теории возмущений только это решение и можно получить. В этом месте существует разница между приближением Хартри–Фока и точным решением. В точном решении в первых двух порядках теории возмущений меняется параметр κ только одной частицы. Это означает, что в уравнениях Хартри–Фока существует точка бифуркации, выше которой возникает несимметричное решение. И это решение имеет меньшую энергию, чем симметричное.

Мы ограничимся исследованием области по взаимодействию, в которой $|E_2| \to 0$. В приближении Хартри–Фока оператор $\hat{L}_0$ равен

$$\hat{L}_0 = -\frac{1}{2m}(\Delta_{r_1}+\Delta_{r_2})+U(r_1)+U(r_2)+$$
$$+\int V(r_1-r_3)\hat{\psi}_2^2(r_3)\,d^3r_3+$$
$$+\int V(r_2-r_3)\hat{\psi}_1^2(r_3)\,d^3r_3+|E_1|+|E_2|. \quad (51)$$

Точное решение уравнения Шредингера записывается в виде

$$\left\{\hat{L}_0+\left[V(r_1-r_2)-\int V(r_1-r_3)\hat{\psi}_2^2(r_3)\,d^3r_3-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\int V(r_2-r_3)\hat{\psi}_1^2(r_3)\,d^3r_3\right]\right\}\psi-\delta E\psi = 0, \quad (52)$$

где

$$\begin{gathered}\psi = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2)+\delta\psi,\\ E = -|E_1|-|E_2|+\delta E.\end{gathered} \quad (53)$$

На подпространстве, ортогональном к функции $\{\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\}$, оператор $\hat{L}_0^p$ имеет обратный:

$$(\hat{L}_0^p)^{-1} = \frac{\hat{\psi}_1(r_1)\hat{\psi}_1(r_1')\hat{\tilde{\psi}}_\nu(r_2)\hat{\tilde{\psi}}^*{}_\nu(r_2')}{E_\nu + |E_2|} + \\ + \frac{\hat{\psi}_\nu(r_1)\hat{\psi}_\nu^*(r_1')\hat{\psi}_2(r_2)\hat{\psi}_2(r_2')}{E_\nu + |E_1|} + \\ + \frac{\psi_\nu(r_1)\psi_\nu^*(r_1')\hat{\tilde{\psi}}_\mu(r_2)\hat{\tilde{\psi}}^*{}_\mu(r_2')}{E_\nu + E_\mu + |E_1| + |E_2|}. \quad (54)$$

В выражении (54) функции $\hat{\psi}_1$, $\hat{\psi}_2$ — решения системы уравнений (49). Функции непрерывного спектра $\hat{\psi}_\nu(r_1)$, $\hat{\psi}_\mu(r_2)$ — решения этой же системы уравнений с заменой $-|E_1| \to E_\nu$, $-|E_2| \to E_\mu$ и с заменой функций $\hat{\psi}_1$, $\hat{\psi}_2$, стоящих за фигурными скобками, соответственно на $\hat{\psi}_\nu(r_1)$ и $\hat{\tilde{\psi}}_\mu(r_1)$.

Поскольку $|E_2| \to 0$, для функции $\hat{\psi}_1$ и энергии E_1 можно воспользоваться нулевым приближением и положить

$$\hat{\psi}_1(r_1) = \psi_0(r_1), \quad E_1 = E_0, \quad (55)$$

где функция ψ_0 определена формулами (3), (4), а энергия E_0 — формулой (7).

Потенциал $\hat{V}(\rho_2)$ для второй частицы в этом же приближении есть

$$\hat{V}(\rho_2) = U_0(\rho_2) + \frac{B^2 e^{-2\kappa\rho_2}}{4\rho_2} \times \\ \times \int_0^\infty d\rho_1\, \rho_1 V(\rho_1) \ln\left(\frac{\rho_1+\rho_2}{\rho_1-\rho_2}\right)^2. \quad (56)$$

Как и прежде, положим

$$\hat{\tilde{\psi}}(r_2) = \frac{\hat{\tilde{\chi}}^{(l)}(\rho_2)}{\rho_2} Y_l^M. \quad (57)$$

Функция $\hat{\tilde{\chi}}^{(l)}(\rho_2)$ есть решение уравнения

$$\hat{\tilde{\chi}}'' + 2m\left[-\hat{V}(\rho_2) - \frac{l(l+1)}{\rho_2^2} + E\right]\hat{\tilde{\chi}} = 0. \quad (58)$$

Вблизи порога энергия E_2 локализованного состояния стремится к нулю. И в этом случае уравнение (58) сводится к более простому:

$$\hat{\tilde{\chi}}_2'' + \\ +2m\left[-U_0(\rho_2) - |E_2| - \frac{\pi^2 B^2}{4} I_0 \delta(\rho - a)\right]\hat{\tilde{\chi}}_2 = 0. \quad (59)$$

Уравнение (59) легко решается, и в результате находим

$$\sqrt{2m|E_2|} = \kappa_2, \quad (60)$$

$$\sqrt{2m|E_2|} = \kappa - \frac{\pi^2 m B^2 I_0}{2},$$

$$\hat{\tilde{\chi}}_2 = \sqrt{2\kappa_2}\exp(-\kappa_2\rho_2), \quad \rho_2 > a.$$

Из уравнения (60) следует пороговое значение взаимодействия:

$$\pi^2 m I_0 = 1. \quad (61)$$

Отметим, что в теории возмущений амплитуда рассеяния f на малых энергиях определяется формулой [4]

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2}\int V(r) r^2\, dr,$$

и тем самым существует запас по взаимодействию при определении порога выталкивания, прежде чем возникнет необходимость замены борновского приближения на точную амплитуду рассеяния.

При малых энергиях в непрерывном спектре (при $l = 0$) решение уравнения (58) есть

$$\hat{\tilde{\chi}} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{2mE}\rho_2 + \tilde{\delta}_E\right), \quad (62)$$

где фаза рассеяния δ_E есть решение уравнения

$$\operatorname{tg}\left(\sqrt{2mE}a + \tilde{\delta}_E\right) = -\frac{\sqrt{2mE}}{ma\,(E + \kappa_2/ma)}, \quad (63)$$

$$\delta_{E=0} = \pi.$$

Из уравнения (63) находим

$$\sin\tilde{\delta}_E = \left(\frac{mE}{mE + \kappa_2^2/2}.\right)^{1/2} \quad (64)$$

6. ПОПРАВКА К ПРИБЛИЖЕНИЮ ХАРТРИ–ФОКА

Поправка первого порядка $\delta E^{(1)}$ к приближению Хартри–Фока может быть получена с помощью уравнений (3), (4), (52), (55), (60):

$$\delta E^{(1)} = -\int d^3r_1 d^3r_2 V(r_1 - r_2)\frac{\kappa\kappa_2}{4\pi^2 r_1^2 r_2^2} = \\ = -\pi^2 I_0 \kappa\kappa_2. \quad (65)$$

Эта поправка мала, и наша цель теперь — показать, что на больших расстояниях, $\rho_1 \gg \kappa^{-1}$, $\rho_2 \gg \kappa_2^{-1}$, поправка к волновой функции также мала. Поправка первого порядка $\psi^{(1)}$ к волновой функции определяется выражением

$$\psi^{(1)}(r_1,r_2) = \\ = -\int d^3r_1' d^3r_2' \frac{\psi_\nu(r_1)\psi_\nu^*(r_1')\hat{\tilde{\psi}}_\mu(r_2)\hat{\tilde{\psi}}^*{}_\mu(r_2')}{E_\nu + E_\mu + |E_1| + |E_2|} \times \\ \times V(r_1' - r_2')\psi_0(r_1')\hat{\tilde{\psi}}{}_2(r_2'). \quad (66)$$

В области $r_1 \gg \kappa^{-1}$, $r_2 \gg \kappa_2^{-1}$ существенны только состояния непрерывного спектра с $l = 0$. В этой области из уравнения (66) находим

$$\psi^{(1)}(r_1,r_2) = \frac{\delta E^{(1)}}{2\pi^3\sqrt{\kappa\kappa_2}\ \rho_1\rho_2} \times \\ \times \iint\limits_0^\infty \frac{d\sqrt{2mE_\nu}\ d\sqrt{2mE_\mu}}{E_\nu + E_\mu + |E_1| + |E_2|} \times \\ \times \sin\delta_{E\nu} \sin\left(\sqrt{2mE_\nu}\rho_1 + \delta_{E\nu}\right) \sin\tilde{\delta}_{E\mu} \times \\ \times \sin\left(\sqrt{2mE_\mu}\ \rho_2 + \tilde{\delta}_{E\mu}\right). \quad (67)$$

Используя выражение для фаз $\delta_{E\nu}$, $\tilde{\delta}_{E\mu}$ (12), (64), приведем выражение (67) для функции $\psi^{(1)}$ к виду

$$\psi^{(1)}(r_1,r_2) = \frac{m\delta E^{(1)}}{4\pi^2\rho_1\rho_2\sqrt{\kappa\kappa_2}} \times \\ \times \iint\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dx\,dy\,xy(xy + i\kappa y + i\kappa_2 x - \kappa\kappa_2)}{(x^2+\kappa^2)(y^2+\kappa_2^2)(x^2+y^2+\kappa^2+\kappa_2^2)} \times \\ \times \exp(i\kappa\rho_1 + i\kappa_2\rho_2). \quad (68)$$

В асимптотической области, $\rho_1 \gg \kappa^1$, $\rho_2 \gg \kappa_2^{-1}$, волновая функция $\psi^{(1)}$ дается выражением, следующим из формулы (68):

$$\psi^{(1)}(r_1,r_2) = \frac{m\delta E^{(1)} e^{-\kappa\rho_1 - \kappa_2\rho_2}}{2\pi\kappa\rho_1\rho_2} \times \\ \times \left(\frac{\kappa_2}{\kappa}\right)^{1/2} \left(\kappa\rho_1 - \frac{1}{2}\right). \quad (69)$$

Из формулы (69) следует, что в рассматриваемом приближении слабо перенормируется только величина κ. Величина κ_2 остается без изменений, и все поправки малы по параметру κ_2/κ, стремящемуся к нулю.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано уравнение Шредингера для двух взаимодействующих частиц во внешнем потенциале. Внешний потенциал предполагается таким, что для одной частицы существует лишь один мелкий уровень. Отталкивание между частицами приводит к переходу второй частицы в непрерывный спектр, когда взаимодействие достигает порогового значения. Пороговое значение взаимодействия не зависит от глубины уровня, пока этот уровень мелкий. Вблизи порога одна из частиц расположена от центра на расстояниях много больших, чем другая, и в этом случае может быть использовано приближение Хартри–Фока. Найдены поправки к приближению Хартри–Фока. Они малы по параметру $\kappa_2/\kappa \to 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Миннауки РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge, University Press (1964).

2. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).

3. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).

4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматгиз, Москва (1963).