

# Новый вариационный метод в задаче о спектре элементарных возбуждений в кристалле с краевой дислокацией

И. М. Дубровский

*Институт металлофизики НАН Украины, Украина, 252142, г. Киев-142, пр. Вернадского, 36*

Статья поступила в редакцию 23 мая 1997 г., после переработки 28 июля 1997 г.

Предложен новый метод приближенного вычисления собственных значений и функций основного и близких к нему состояний, основанный на сочетании прямого вариационного метода и теории возмущений. Он применяется к уравнению Шредингера с потенциалом, пропорциональным дилатации, создаваемой краевой дислокацией. Полученная энергия основного состояния ниже, чем вычисленная ранее в других работах. Рассчитана энергия наинизшего состояния с собственной функцией, нечетной по азимутальному углу. Выказано предположение, что спектр вблизи точки сгущения может быть описан только статистически.

Запропоновано новий метод наближеного обчислення власних значень та функцій основного та близьких до нього станів, побудований на поєднанні прямого варіаційного методу та теорії збурень. Його застосовано до рівняння Шредингера з потенціалом, пропорційним діляції, створюваної крайовою дислокацією. Одержана енергія основного стану нижча, ніж обчислена раніше в інших роботах. Обчислено енергію найнижчого стану з непарною по азимутальному куту власною функцією. Висловлено припущення, що спектр поблизу точки згущення можливо описати тільки статистично.

PACS: 71.55.-i, 67.72.Bb

1. Обычно при применении вариационного метода вычисления спектра уравнения Шредингера выбирают вид функции основного состояния, зависящий от нескольких вариационных параметров, и минимизируют среднее от гамильтониана на этой функции по параметрам. Функции, соответствующие возбужденным состояниям, должны еще удовлетворять условиям ортогональности. Поэтому иногда стараются выбрать сразу систему ортогональных функций, из которых одна, не имеющая узловых поверхностей, будет функцией основного состояния. Если эта система функций неполная, то она может дать только некоторую последовательность собственных значений, а не весь спектр в каком-то интервале. Результаты зависят от того, насколько удачно выбран вид пробной функции, и отсутствует метод оценки точности. Пробные функции не являются

приближением истинных собственных функций, и использовать их для приближенного вычисления, например, вероятностей переходов между стационарными состояниями нельзя.

Предлагаемый подход избавлен от некоторых из перечисленных выше недостатков вариационного метода, поскольку в нем сочетаются вариационный метод и теория возмущений. Представим исходный гамильтониан  $\hat{H}$  в виде

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_0(\{\alpha_i\}) + \hat{H}_1(\{\alpha_i\}), \quad (1)$$

где  $\{\alpha_i\}$  — некоторая совокупность параметров;  $\hat{H}_0$  — гамильтониан, спектр и собственные функции которого можно найти, например, путем разделения переменных. Если  $\hat{H}$  коммутирует с некоторым оператором  $A$ , то желательно выбрать  $\hat{H}_0$  так, чтобы он тоже коммутировал с  $A$ . Значения параметров  $\{\alpha_i\}$  определяются в ходе

вариационной процедуры. В остальном разбиение (1) произвольно, и нельзя указать никаких общих критериев его выбора, хотя, как станет ясно далее, от этого выбора зависит близость полученных результатов к точным значениям основного и низковозбужденных собственных значений  $\hat{H}$ . Систему собственных функций  $H_0$  используем как пробные функции обычной вариационной процедуры. Минимизируем по параметрам  $\{\alpha_i\}$  среднее значение  $\hat{H}$  в основном состоянии  $H_0$  и получаем приближенное значение для наименьшего собственного значения  $\hat{H}$  и совокупность значений  $\{\alpha_i\}_{\min}$ . Можно предположить, что средние значения  $\hat{H}$  на функциях возбужденных состояний  $H_0$  при значениях  $\{\alpha_i\}_{\min}$  представляют приближение для соответствующих собственных значений  $\hat{H}$ . Это приближение можно оценить, если обратиться к теории возмущений Рэлея–Шредингера, в которой полученные собственные значения — первое приближение по возмущению  $H_1$  при значениях  $\{\alpha_i\}_{\min}$ . Оценить качество приближения можно, вычислив значения параметров разложения теории возмущений  $\langle n|H_1|m\rangle/(E_n - E_m)$ . Тогда очевидно, что сходимость рядов теории возмущений может оказаться разной для различных собственных значений, так как  $H_1$ , вообще говоря, не пропорционален малому параметру. Так, например, если спектр  $H_0$  состоит из дискретной и непрерывной частей, граница между которыми — точка сгущения дискретных значений, то для значений близких к этой точке теория возмущений неприменима. Если удастся выбрать разбиение (1) так, чтобы по крайней мере для основного состояния параметры разложения были меньше единицы, то с помощью теории возмущений можно не только оценить точность полученного значения, но и улучшить его. Действительно, поправка второго приближения для энергии основного состояния всегда отрицательна, поэтому второе приближение даст меньшее, а значит более точное значение. Вообще говоря, следовало бы определять  $\{\alpha_i\}_{\min}$  из условия минимума выражения для энергии основного состояния во втором приближении теории возмущений. Это соответствовало бы использованию в качестве пробных функций вариационной процедуры функции первого приближения по  $H_1$ . Можно показать, что улучшение (т.е. понижение) значения энергии основного состояния по сравнению с полученным при описанной выше процедуре имеет величину порядка четвертой степени параметра разложения

теории возмущений. Можно вообще не прибегать к минимизации энергии основного состояния, определив из каких-либо иных соображений значения параметров  $\{\alpha_i\}$  разбиения (1) таким образом, чтобы параметры теории возмущений были меньше единицы. Параметры  $\{\alpha_i\}_{\min}$  являются просто наилучшим выбором параметров разбиения, при котором ряды теории возмущений сходятся наилучшим образом (при данном выборе способа разбиения (1)). Если  $H$  коммутирует с каким-либо оператором  $A$ , то спектр  $H$  можно разделить на подсистемы уровней, каждая из которых соответствует одному собственному значению  $A$ . Во всех подсистемах имеются свои состояния с минимальным собственным значением  $\hat{H}$ , которое можно определить тем же способом при дополнительном требовании, чтобы функции были собственными функциями  $A$  при определенном собственном значении. Значения  $\{\alpha_i\}_{\min}^A$  при этом для разных подсистем могут быть различными, но необходимо, чтобы  $A$  коммутировал и с  $H_0$ . Возбужденные состояния в каждой подсистеме могут быть определены с помощью теории возмущений при значениях  $\{\alpha_i\}_{\min}^A$ , определенных для основного состояния, пока соответствующие параметры теории возмущений достаточно малы.

2. Проиллюстрируем возможности этого метода на примере уравнения

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} - \frac{\cos \varphi}{\rho} \psi = \epsilon \psi. \quad (2)$$

К такому уравнению в безразмерных полярных координатах, не содержащему параметров, приводятся многие задачи физики кристаллов, содержащих краевую дислокацию (см. [1–3]). Плотность отрицательных значений  $\epsilon$  вблизи нуля квазиклассически оценивалась в [1], энергия основного состояния обычным вариационным методом получена в [2], лучшее (т.е. меньшее) значение для нее, а также некоторая система близких уровней тем же методом вычислены в [3]. Гамильтониан в (2) коммутирует с оператором замены знака  $\varphi$ , поэтому уровни разделяются на две подсистемы, соответствующие четным и нечетным относительно  $\varphi$  функциям. В [3] рассмотрены только уровни, соответствующие четным функциям.

Обычно в задачах, решаемых с помощью теории возмущений, гамильтониан естественно распадается на нулевой, для которого задача на собственные значения легко решается, и

возмущение, пропорциональное малому параметру. Параметры разложения теории возмущений пропорциональны этому малому параметру и потому также малы. В случае уравнения (2) такого естественного разделения нет, поэтому теория возмущений к нему не применялась. Выберем

$$\hat{H}_0 = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{q \cos \varphi}{2\rho^2} + \frac{\alpha_1}{4\rho^2} - \frac{\alpha_2}{\rho}. \quad (3)$$

Здесь  $q$ ,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — вариационные параметры. Отметим, что  $H_0$  содержит потенциал, пропорциональный  $\rho^{-2}$ , и поэтому имеет собственные функции, удовлетворяющие обычным условиям непрерывности и интегрируемости, только если  $2q > \alpha_1$ , т.е. если знак этого потенциала изменяется в зависимости от  $\varphi$ . Далее будет показано, что гамильтониан  $H_0$  имеет спектр, состоящий из дискретной и непрерывной частей, как и  $\hat{H}$ . Кроме того, он имеет похожую угловую зависимость потенциала. В задаче на собственные значения для  $H_0$  переменные разделяются, и полная система собственных функций может быть выражена через известные трансцендентные функции. Трудно сформулировать еще какие-либо соображения, определяющие выбор  $H_0$  в виде (3). Вероятно, это не единственно возможный выбор, а может быть, и не наилучший. Окончательно пригодность такого выбора разбиения  $H$  проверяется вычислением параметров разложения теории возмущений. Переменные в уравнении  $H_0 \Psi = \varepsilon^{(0)} \Psi$  разделяются, и уравнение для функции  $\Phi(\varphi)$  имеет вид

$$\frac{d^2 \Phi}{dz^2} + (a - 2q \cos 2z) \Phi = 0. \quad (4)$$

Здесь произведена замена переменных  $\varphi = 2z + \pi$ , чтобы придать выражению (4) вид канонического уравнения Матье (см. [4]). Условию периодичности по  $\varphi$  с периодом  $2\pi$  удовлетворяют функции Матье с четным индексом  $ce_{2m}(z, q)$  и  $se_{2m}(z, q)$ . Они образуют полную систему функций на отрезке  $-\pi/2 \leq z \leq \pi/2$ . Константа разделения  $a$  при каждом  $q$  принимает бесконечное множество дискретных значений в зависимости от индекса и четности функций. Не имеет нулей функция  $ce_0(z, q)$ , поэтому именно она относится к основному состоянию. Решение радиального уравнения известно (см. [5]). Функция основного состояния имеет вид

$$\Psi_{00} = A_{00} \pi^{-1/2} ce_0(z, q) \exp(-\beta \rho) \rho^\gamma, \quad (5)$$

где  $\beta$  и  $\gamma$  — определенные функции  $q$ ,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ ;  $A_{00}$  — нормировочная константа. Среднее значение полного гамильтониана из уравнения (2) на функции  $\Psi_{00}$ , которое нужно минимизировать, после выполнения интегрирования по  $z$  можно представить следующим образом:

$$\varepsilon_{00} = A_{00}^2 \int_0^\infty \exp(-\beta \rho) \rho^{\gamma+1} \left[ \left( -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{C_0^2}{4\rho^2} - \frac{C_0^2 - a_0}{2q\rho} \right) \exp(-\beta \rho) \rho^\gamma \right] d\rho. \quad (6)$$

Здесь  $a_0(q) < 0$  — собственное значение уравнения (4) при  $\Phi = ce_0(z, q)$ ;

$$C_0^2 = -\frac{2}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} ce_0(z, q) \frac{d^2}{dz^2} ce_0(z, q) dz = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left[ \frac{d}{dz} ce_0(z, q) \right]^2 dz. \quad (7)$$

Последний член в подынтегральном операторе вычисляется путем умножения уравнения (4) при  $\Phi = ce_0(z, q)$  на  $ce_0(z, q)$  и интегрирования по  $z$ . Вместо минимизации по  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  можно воспользоваться тем, что при любом  $q > 0$  минимум  $\varepsilon_{00}$  доставляется собственной функцией подынтегрального оператора. Тогда получим

$$\beta(q) = \frac{C_0^2 - a_0}{2q(C_0 + 1)}, \quad \gamma(q) = \frac{C_0}{2}, \quad \varepsilon_{00}(q) = -\beta^2. \quad (8)$$

Остается минимизировать  $\varepsilon_{00}(q)$  по  $q$  численным табулированием по [6]. Для вычисления  $C_0^2$  при этом используется разложение  $ce_0(z, q)$  в ряд Фурье, коэффициенты которого приведены в [6]. Получаем

$$q_{\min} = 4 \pm 0,05, \quad \varepsilon_{00}^{(0)} = -0,1053, \quad C_0/2 = 0,6466. \quad (9)$$

Собственные функции и собственные значения гамильтониана  $H_0$  классифицируются по трем квантовым числам: радиальному  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\sigma = 0, 1$ , определяющему четность функции относительно замены знака  $z$  (собственное значение оператора замены знака  $(-1)^\sigma$ ), и  $m$  — индексу функции Матье, который принимает все

четные значения начиная с нуля при  $\sigma = 0$  и с двух при  $\sigma = 1$ . Они имеют вид

$$|n\sigma m\rangle = \frac{A_{n\sigma m}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\rho \sqrt{-\varepsilon_{n\sigma m}^{(0)}}\right) \rho^\mu \times \\ \times F\left(-n, 2\mu + 1, 2\rho \sqrt{-\varepsilon_{n\sigma m}^{(0)}}\right) \left[\delta_{\sigma 0} c e_m + \delta_{\sigma 1} s e_m\right], \\ \mu(\sigma, m) = \frac{1}{2} \left(\delta_{\sigma 0} a_m + \delta_{\sigma 1} b_m + \alpha_1\right)^{1/2}, \\ \varepsilon_{n\sigma m}^{(0)} = -\frac{\alpha_2^2}{(2\mu + 2n + 1)^2}, \\ A_{n\sigma m} = \frac{(2 \sqrt{-\varepsilon_{n\sigma m}^{(0)}})^{\mu+1}}{\Gamma(2\mu + 1)} \left(\frac{\Gamma(2\mu + n + 1)}{n! (2\mu + n + 1)}\right)^{1/2}. \quad (10)$$

Здесь  $F(-n, 2\mu + 1, 2\rho \sqrt{-\varepsilon_{n\sigma m}^{(0)}})$  — вырожденная гипергеометрическая функция;  $A_{n\sigma m}$  — нормировочная постоянная радиальной функции (вычисление ее, как и других подобных интегралов, встречающихся при вычислении матричных элементов, см. в [7]);  $\delta_{ik}$  — символ Кронекера. Как принято в [4], собственные значения для функций Матье обозначаются  $a_m$  для четных и  $b_m$  для нечетных, при полученном выше значении  $q$  все они, кроме  $a_0$ , положительны. Сопоставляя (10) с (5) при учете (8), получаем

$$\alpha_1 = C_0^2 - a_0 = 5,9529; \quad \alpha_2 = \frac{\alpha_1}{2q} = 0,7441. \quad (11)$$

Поправка первого приближения теории возмущений к энергии основного состояния при этом равна нулю. Усреднение полного гамильтониана  $\hat{H}$  на функциях (10) дает значения энергий возбужденных состояний в первом приближении теории возмущений, отличные от  $\varepsilon_{n\sigma m}^{(0)}$ . Эти значения имеют смысл только для тех возбужденных состояний, для которых теория возмущений применима.

Вычислим наибольший член второго приближения теории возмущений для энергии основного состояния:

$$\hat{H}_1 = -\frac{q_{\min} \cos 2z}{2\rho^2} - \frac{C_0^2 - a_0}{4\rho^2} + \frac{C_0^2 - a_0}{2q_{\min}\rho} + \frac{\cos 2z}{\rho}. \quad (12)$$

Матричные элементы  $\hat{H}_1$  на функциях основного состояния и других с  $m = 0$  равны нулю, ближайшим состоянием, при котором матричный элемент не равен нулю, оказывается  $|002\rangle$ . При этом

$$\langle 000|\hat{H}_1|002\rangle = 0,0336, \quad \frac{\langle 000|\hat{H}_1|002\rangle}{\varepsilon_{000} - \varepsilon_{002}} = -0,4264, \\ \varepsilon_{000}^{(2)} = -0,1196. \quad (13)$$

Таким образом, полученное значение энергии основного состояния оказывается ниже, чем наилучшее, полученное в [3] ( $-0,1111$ ). Относительное понижение составляет более 8%. Другой, имеющий физическое значение, результат — наименьший показатель степени при  $\rho$ , когда  $\rho \rightarrow 0$ , — в [3] равен 0,75, а в рассматриваемом методе  $\mu_{00} = 0,6466$ .

Аналогично можно вычислить энергию и показатель степени для нижайшего нечетного состояния:

$$q_{\min} = 25, \quad \alpha_1 = 34,9688, \quad \alpha_2 = 0,6994, \quad \mu_{012} = 1,8476, \\ \left| \frac{\langle 210|\hat{H}_1|014\rangle}{\varepsilon_{012} - \varepsilon_{014}} \right| = 0,458, \quad \varepsilon_{012}^{(2)} = -0,0252. \quad (14)$$

**3.** Приведенный пример показывает, что новый метод позволяет получить лучшие и более полные результаты, чем обычная вариационная процедура. Результаты для собственных значений могут быть еще улучшены, если вычислять и другие члены второго порядка теории возмущений. Вместе с тем, для тех уровней, для которых теория возмущений применима, собственные функции первого приближения теории возмущений можно считать приближенным выражением истинных собственных функций. Это значит, что с их помощью можно вычислять матричные элементы других операторов с такой же точностью, как и собственные значения.

Ограничения применимости теории возмущений основным и низковозбужденными состояниями в случае, когда спектр имеет точку сгущения, имеет, возможно, принципиальное значение. Если переменные в задаче на собственные значения для гамильтониана  $\hat{H}$  разделяются, то вблизи точки сгущения эта задача может быть рассмотрена методом ВКБ [8], которым можно обосновать переход к классической интегрируемой задаче. При этом точке сгущения собственных значений соответствует сепаратриса, разделяющая области финитного и инфинитного движений соответствующей классической частицы. Если переменные разделяются только в гамильтониане  $\hat{H}_0$ , то добавление  $\hat{H}_1$  соответствует разрушению всех интегралов движения, кроме энергии. При этом метод ВКБ становится неприменимым, и не

известны методы, которые позволили бы вычислить собственные значения  $\varepsilon(n)$ , где  $n$  — номер уровня, отсчитанный от основного состояния в порядке возрастания при больших  $n$ . В классической механике разрушение интегралов движения приводит к хаотизации движения частицы, в первую очередь, вблизи сепаратрисы [9]. Можно предполагать, что в задаче на собственные значения этому соответствует отсутствие алгоритма вычисления  $\varepsilon(n)$  при больших  $n$ . Спектр при этом можно описывать только статистическими понятиями, такими, например, как плотность состояний. Для рассмотренного в разд. 2 уравнения подобное описание было использовано в работе [1].

1. И. М. Лифшиц, Х. И. Пушкар, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 456 (1970).
2. В. М. Набутовский, Б. Я. Шапиро, *Письма в ЖЭТФ* **26**, 624 (1977).
3. В. А. Слюсарев, К. А. Чишко, *ФММ* **58**, 877 (1984).
4. *Справочник по специальным функциям*, М. А. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), Наука, Москва (1979).
5. В. Л. Бонч-Бруевич, *ФТТ* **3**, 47 (1961).
6. *Таблицы для вычисления функций Матье*, Вычислительный центр АН СССР, Москва (1967).

7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматгиз, Москва (1963).
8. Н. Фреман, П. У. Фреман, *ВКБ-приближение*, Мир, Москва (1967).
9. Г. М. Заславский, *Стохастичность динамических систем*, Наука, Москва (1984).

## A new variation method in the problem on the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal

I. M. Dubrovskii

A new method based on the combination of direct variation method and perturbation theory is proposed to calculate approximately the eigenvalues and the functions of the ground state and states close to it. The new method is applied to the Schrodinger equation with a potential proportional to the dilatation produced by an edge dislocation. The energy ground state obtained is lower than that calculated earlier in other works. The energy of the lowest state with the eigenfunction odd in the azimuthal angle is obtained. It is supposed that the description of the spectrum close to the point of condensation may be only statistical.