



**Новиков В.Г., Овечкин А.А.**

Роль резонансных  
состояний при  
выдавливании дискретных  
уровней в непрерывный  
спектр

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Новиков В.Г., Овечкин А.А. Роль резонансных состояний при выдавливании дискретных уровней в непрерывный спектр // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2009. № 31. 22 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2009-31>

О р д е н а   Л е н и н а  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
им. М.В. Келдыша  
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

В.Г. Новиков, А.А. Овечкин

РОЛЬ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ПРИ ВЫДАВЛИВАНИИ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙ  
В НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР

Москва

# РОЛЬ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ ВЫДАВЛИВАНИИ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙ В НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР

*В.Г. Новиков, А.А. Овечкин*

Препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН

В работе на примере простого модельного потенциала рассмотрены основные свойства резонансных состояний в непрерывном спектре: условия появления резонансов, скачок фазы волновой функции, вклад резонансов в плотность состояний и зависимость плотности резонансных состояний от параметров потенциала. Показано, что в области перехода электрона из дискретного в непрерывный спектр вклад резонанса в плотность состояний близок к вкладу соответствующего дискретного уровня. Это приводит к выводу о плавном поведении термодинамических величин при ионизации давлением.

## THE ROLE OF RESONANT STATES IN THE PROCESS OF MERGING BOUND STATES INTO CONTINUUM

*V.G. Novikov, A.A. Ovechkin*

Preprint of The Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS

The main properties of resonant states in continuum such as conditions of the appearance, the jump of the phase of wave function, the contribution of resonances to the density of states and dependence of the density of resonant states over the potential parameters are considered. It was demonstrated that in the region of the electron transition from discrete spectrum to continuum the contribution of resonance in the density of states is similar to the contribution on of corresponding bound level. It results in a conclusion about smooth behaviour of thermodynamic quantities during pressure ionization.

## Содержание

Введение	4
1. Качественное описание резонансов	5
2. Резонансные состояния на примере простого модельного потенциала	7
1. Условия появления резонанса . . . . .	7
2. Скачок фазы волновой функции . . . . .	10
3. Плотность состояний с учётом резонансов . . . . .	14
3. Влияние резонансных состояний на электронную плотность	20
Список литературы	22

## Введение

При расчётах самосогласованного потенциала в моделях среднего атома большое значение имеет описание ионизации давлением — выдавливания дискретных уровней энергии электрона в непрерывный спектр. Существуют разные подходы для описания этого процесса. В одних моделях состояния электронов в сферической атомной ячейке (объём ячейки определяется плотностью вещества так, что  $\frac{4}{3}\pi r_0^3 \rho = M$ ,  $r_0$  — радиус ячейки,  $M$  — масса атома) делят на три группы: состояния дискретного, непрерывного спектра и промежуточные состояния, описываемые с помощью энергетических зон [1]. При этом граничные условия для волновых функций ставят при  $r = r_0$  и не интересуются поведением этих функций за пределами ячейки. В других моделях (см., например, [2]) состояния электронов делят на состояния дискретного и непрерывного спектра и решают уравнение Шрёдингера (или уравнение Дирака) формально во всём пространстве (граничные условия ставят при  $r \rightarrow \infty$ ). Как было указано в [2] и позднее в [3], в последнем случае для правильного описания ионизации давлением необходим учёт резонансных состояний в непрерывном спектре.

Брэйт-вигнеровские резонансы, или квазистационарные состояния, образуются при исчезновении уровня энергии из дискретного спектра при наличии потенциального барьера, связанного с центробежной энергией. В [3] резонансы рассматриваются как состояния с комплексной энергией  $\tilde{\varepsilon}_{nl} = \varepsilon_{nl} - i\Gamma$ ,  $\varepsilon_{nl} > 0$ . Величина  $\Gamma$  обратна времени жизни состояния и определяет ширину резонанса. Значение энергии  $\tilde{\varepsilon}_{nl}$  находится из равенства нулю функции Йоста:

$$f_l(Q_{nl}) = 0,$$

где  $Q_{nl}^2 = 2\tilde{\varepsilon}_{nl}$ . Функция Йоста  $f_l(k)$  определена для комплексных значений  $k$  как

$$f_l(k) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{(kr)^l}{(2l-1)!!} f_l(k, r),$$

где  $f_l(k, r)$  удовлетворяет уравнению Шрёдингера с граничным условием  $f_l(k, r) \approx i^l e^{-ikr}$  при  $r \rightarrow \infty$ .

В [3] показано, что плотность свободных электронов и их вклад в термодинамические свойства вещества содержат сумму вкладов от отдельных резонансов. Как и в [2], в работе [3] отмечается, что ионизация давлением не приводит к резким изменениям термодинамических величин, и обсуждаются существующие доказательства этого утверждения. В моделях среднего атома, не рассматривающих зонную структуру спектра, непрерывность свойств вещества с изменением температуры и плотности достигается благодаря учёту резонансов, что позднее было подтверждено в численных расчётах [4].

В [3] также указано, что наличие резонанса связано с резким изменением фазы волновой функции на величину  $\pi$  в узком интервале энергий электрона.

## 1. Качественное описание резонансов

Рассмотрим более подробно модель, в которой все электроны атома делятся на две группы: электроны дискретного и непрерывного спектра. Характерный вид эффективной потенциальной энергии

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \quad (1)$$

электрона с орбитальным квантовым числом  $l$  в сферически-симметричном потенциале  $V(r) = -U(r)$  показан на рис.1 (здесь и далее используются атомные единицы  $\hbar = m = e = 1$ ).

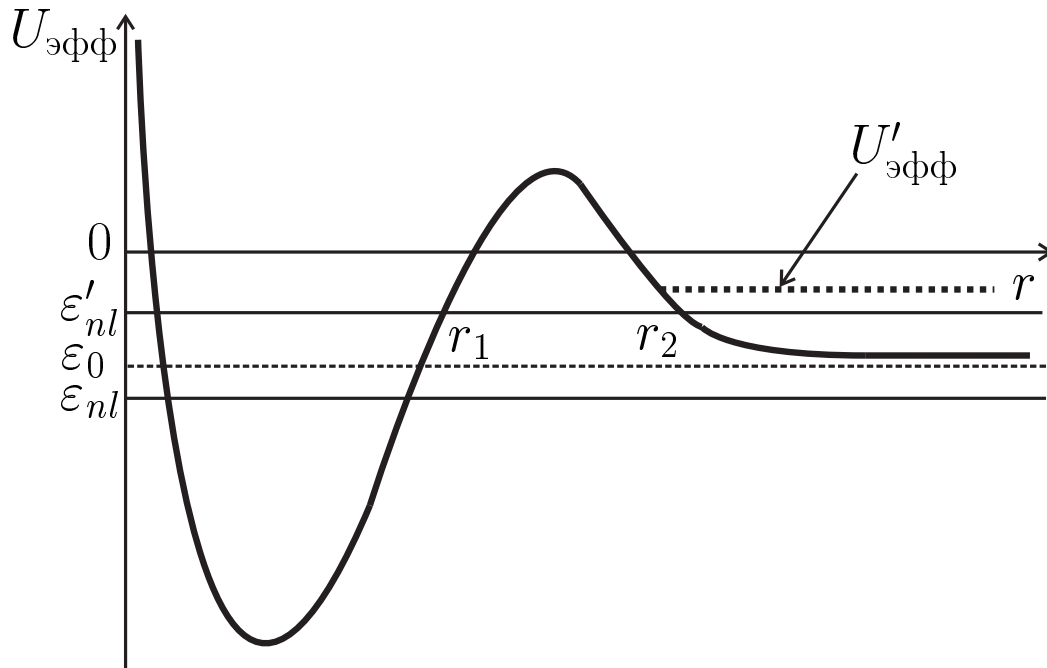


Рис. 1. Эффективная потенциальная энергия электрона в атомной ячейке

Величина  $\varepsilon_0$  на рисунке определяет асимптотическое (при  $r \rightarrow \infty$ ) значение потенциальной энергии. Состояния с энергией большей  $\varepsilon_0$  принадлежат непрерывному спектру; при энергии меньшей  $\varepsilon_0$  могут существовать состояния дискретного спектра.

Плотность электронов определяется по волновым функциям:

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \left( \sum_{nl} N(\varepsilon_{nl}) R_{nl}^2(r) + \sum_l \int_{\varepsilon_0}^{\infty} N(\varepsilon) R_{\varepsilon l}^2(r) d\varepsilon \right), \quad (2)$$

где  $R_{nl}(r)$  и  $R_{\varepsilon l}(r)$  — радиальные части волновых функций дискретного и непрерывного спектра соответственно,  $N(\varepsilon) = \frac{2(2l+1)}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{\theta}\right)}$ ,  $\varepsilon_{nl}$  — энер-

гия дискретного уровня с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным числом  $l$ ,  $\mu$  — химический потенциал,  $\theta$  — температура.

Качественно появление резонансов, представляющих собой узкие и резкие максимумы плотности состояний

$$w(\varepsilon) = \int_0^{r_0} R_{\varepsilon l}^2(r) dr \quad (3)$$

в непрерывном спектре, можно объяснить следующим образом.

Пусть для потенциальной энергии (1) существует дискретный уровень с энергией  $\varepsilon_{nl}$ , близкой к  $\varepsilon_0$  ( $\varepsilon_{nl} < \varepsilon_0$ ). При небольшом изменении параметров потенциала (например, при уменьшении глубины ямы) этот уровень исчезает из дискретного спектра. Переопределим потенциал, начиная с некоторого значения радиуса  $r$ , так, чтобы увеличилось асимптотическое значение потенциальной энергии (см.  $U'_{\text{эфф}}(r)$  на рис.1). В введённом таким образом фиктивном потенциале вновь появится состояние дискретного спектра с энергией  $\varepsilon'_{nl}$  ( $\varepsilon'_{nl} > \varepsilon_0$ ).

Рассмотрим состояния непрерывного спектра с энергией  $\varepsilon > \varepsilon_0$  в потенциале  $V_{\text{эфф}}(r) = -U_{\text{эфф}}(r)$ . Волновая функция с энергией  $\varepsilon = \varepsilon'_{nl}$  в интервале значений  $r \in (r_1, r_2)$  под барьером, наличие которого связано с центробежной энергией, ведёт себя как волновая функция дискретного спектра, т.е. экспоненциально затухает, так как при  $r < r_2$  она соответствует дискретному состоянию в потенциале  $V'_{\text{эфф}}(r) = -U'_{\text{эфф}}(r)$  и "не знает", что барьер заканчивается при  $r = r_2$ . Поэтому после выхода из-под барьера (при  $r > r_2$ ) амплитуда осцилляций волновой функции с энергией  $\varepsilon'_{nl}$  много меньше амплитуды этой же функции при  $r < r_1$ . Амплитуда осцилляций волновых функций с энергиями, отличными от  $\varepsilon'_{nl}$ , мало меняется после выхода из-под барьера, так как для таких волновых функций нет экспоненциального спада амплитуды.

Вместе с тем все волновые функции непрерывного спектра нормированы так, что при  $r \rightarrow \infty$

$$R_{\varepsilon l}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin(kr + \varphi_0), \quad (4)$$

где  $k = \sqrt{2(\varepsilon - \varepsilon_0)}$ ,  $\varphi_0$  — сдвиг фазы. Поэтому волновые функции с близкими значениями энергии имеют близкие значения амплитуды при  $r > r_2$ . Значит, величина волновой функции в пределах ячейки, а следовательно, и плотность

состояний (3), при  $\varepsilon = \varepsilon'_{nl}$  будет иметь резкий максимум. Это и означает появление резонанса.

## 2. Резонансные состояния на примере простого модельного потенциала

### 1. Условия появления резонанса

Возникновение и свойства резонансов можно проследить на примере простого модельного потенциала (рис.2), приближённо описывающего эффективную потенциальную энергию электрона в атоме

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & 0 < r < a, \\ U_1, & a < r < b, \\ 0, & b < r. \end{cases} \quad (5)$$

При этом будем считать  $r_0 = b = r_2$ . Пусть также для простоты  $a = r_1 = 1$ .

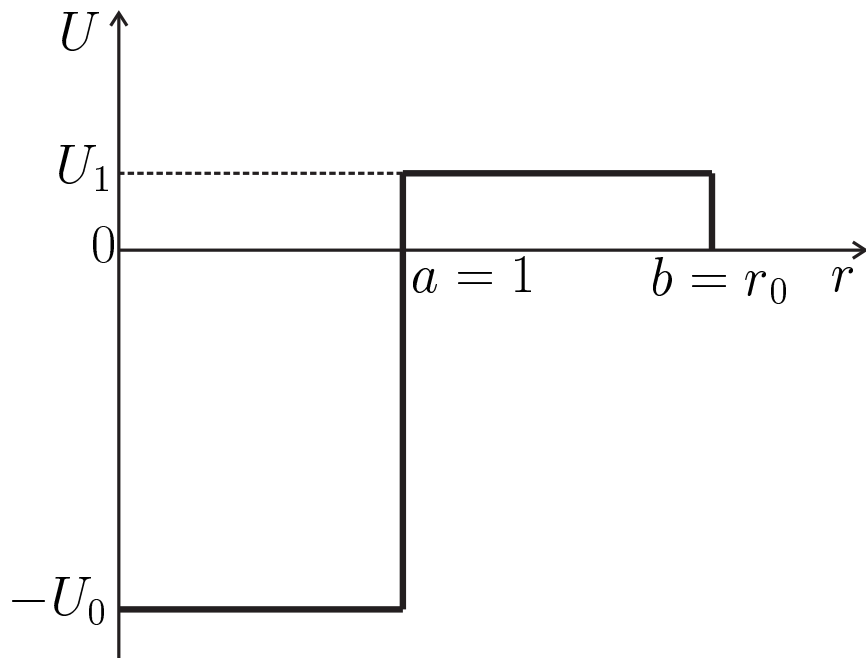


Рис. 2. Вид модельной потенциальной энергии

Решение уравнения Шрёдингера

$$R'' + 2(E - U(r))R = 0$$



с граничным условием  $R(0) = 0$  и условием нормировки (4) при  $0 < \varepsilon < U_1$  имеет вид

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \cdot \begin{cases} K \sin(\varkappa r), & 0 < r < 1; \\ K(A e^{-pr} + B e^{pr}), & 1 < r < b; \\ \sin(kr + \varphi_0), & r > b. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь

$$k = \sqrt{2\varepsilon}, \quad p(\varepsilon) = \sqrt{2(U_1 - \varepsilon)}, \quad \varkappa(\varepsilon) = \sqrt{2(U_0 + \varepsilon)}, \quad \varepsilon = E, \quad (7)$$

$$A = \frac{1}{2p} e^p (p \sin \varkappa - \varkappa \cos \varkappa), \quad B = \frac{1}{2p} e^{-p} (p \sin \varkappa + \varkappa \cos \varkappa), \quad (8)$$

$$K = \left( \frac{1}{k^2} (p \sin \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) + \varkappa \cos \varkappa \operatorname{ch}(p(b-1)))^2 + \left( \sin \varkappa \operatorname{ch}(p(b-1)) + \frac{\varkappa}{p} \cos \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (9)$$

Сдвиг фазы  $\varphi_0$  определяется по формулам

$$\begin{aligned} \sin \varphi_0 &= K \left( \sin \varkappa \left( \cos(kb) \operatorname{ch}(p(b-1)) - \frac{p}{k} \sin(kb) \operatorname{sh}(p(b-1)) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \cos \varkappa \left( \frac{\varkappa}{p} \cos(kb) \operatorname{sh}(p(b-1)) - \frac{\varkappa}{k} \sin kb \operatorname{ch}(p(b-1)) \right) \right), \\ \cos \varphi_0 &= K \left( \sin \varkappa \left( \frac{p}{\varkappa} \cos(kb) \operatorname{sh}(p(b-1)) + \sin(kb) \operatorname{ch}(p(b-1)) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \cos \varkappa \left( \frac{\varkappa}{k} \cos(kb) \operatorname{ch}(p(b-1)) + \frac{\varkappa}{p} \sin kb \operatorname{sh}(p(b-1)) \right) \right). \end{aligned}$$

Величина  $K$  равна отношению амплитуд осцилляций волновой функции при  $r < 1$  и при  $r > b$ . При малых  $k$  ( $k \ll \sqrt{U_1}$ ,  $k \ll \sqrt{U_0}$ )  $K \sim k \sim \sqrt{\varepsilon} \rightarrow 0$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , если величина  $p \sin \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) + \varkappa \cos \varkappa \operatorname{ch}(p(b-1)) \neq 0$ . Но если в непрерывном спектре существует такое значение  $\varepsilon_r$ , при котором

$$p \sin \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) + \varkappa \cos \varkappa \operatorname{ch}(p(b-1)) = 0, \quad (10)$$

то

$$K(\varepsilon_r) = \frac{\operatorname{ch}(p(b-1))}{|\sin \varkappa|}. \quad (11)$$

В случае высокого и широкого барьера, при

$$\exp(\sqrt{U_1}(b-1)) \gg 1, \quad (12)$$

значение  $K(\varepsilon_r) \gg 1$ , т.е. вблизи  $\varepsilon = \varepsilon_r$  возникает резкий максимум плотности состояний.

Преобразуем выражение в левой части (10), считая выполненным условие (12):

$$\begin{aligned} & \operatorname{ch}(p(b-1))(p \sin \kappa \operatorname{th}(p(b-1)) + \kappa \cos \kappa) \approx \\ & \approx \frac{1}{2} e^{p(b-1)}(p \sin \kappa(1 - 2e^{-2p(b-1)}) + \kappa \cos \kappa) = \\ & = \frac{1}{2} e^{p(b-1)}(p \sin \kappa + \kappa \cos \kappa) - p \sin \kappa e^{-p(b-1)} \approx \frac{1}{2} e^{p(b-1)} (p \sin \kappa + \kappa \cos \kappa). \end{aligned}$$

Тогда вместо условия (10) можно приближённо написать

$$p \sin \kappa + \kappa \cos \kappa = 0. \quad (13)$$

Условие появления резонанса (13) для высокого и широкого барьера совпадает с условием  $B = 0$  в (8), т.е. отсутствием возрастающей экспоненты под барьером.

Условие существования дискретного уровня для потенциальной энергии (5) можно записать в виде:

$$g(\varepsilon, U_0, U_1, b) = \frac{p \sin \kappa \operatorname{th}(p(b-1)) + \kappa \cos \kappa}{\sin \kappa + \frac{\kappa}{p} \cos \kappa \operatorname{th}(p(b-1))} = -k = -\sqrt{2\varepsilon}, \quad (14)$$

где  $p = \sqrt{2(U_1 + \varepsilon)}$ ,  $\kappa = \sqrt{2(U_0 - \varepsilon)}$ ,  $\varepsilon = -E$ . Поэтому условие (10) при  $\varepsilon = 0$  совпадает с условием исчезновения (или появления) связанного состояния, т.е. резонанс возникает при выдавливании дискретного уровня в непрерывный спектр.

Уравнение (14) определяет в неявном виде зависимость энергии дискретного уровня от параметров потенциала:  $\varepsilon(U_0, U_1, b)$ . Определим, как должны меняться параметры потенциала, чтобы дискретный уровень перешёл в непрерывный спектр. Для этого найдём знаки производных  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0}$ ,  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_1}$ ,  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial b}$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Условие  $\varepsilon \rightarrow 0$  в (14) означает, что выполнено равенство

$$p(0) \sin \kappa(0) \operatorname{th}(p(0)(b-1)) + \kappa(0) \cos \kappa(0) = 0. \quad (15)$$

Продифференцируем (14) по  $U_0$ :

$$-\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0} = \frac{\partial g}{\partial U_0}. \quad (16)$$

В правой части (16) стоит ограниченная при  $\varepsilon \rightarrow 0$  величина. Следовательно, при  $\varepsilon \rightarrow 0$   $\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0} \rightarrow 0$ . Поэтому в производной  $\frac{\partial g}{\partial U_0}$  можно положить  $\varepsilon = 0$ ,

$\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0} = 0$ . Тогда с учётом (15) получаем

$$-\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} = -\text{ch}^2(p(b-1)) \left( \frac{p}{\varkappa^2} \text{th}(p(b-1)) (p \text{th}(p(b-1)) + 1) + 1 \right) < 0,$$

т.е.  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_0} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} > 0$ . Таким образом, выдавливание дискретного уровня происходит за счёт уменьшения  $U_0$  (уменьшения глубины ямы). Дифференцируя (14) по  $U_1$  и  $b$ , получим

$$-\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial U_1} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} = \left( \frac{\text{sh}(2p(b-1))}{2p} + b - 1 \right) > 0,$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial b} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} = p^2 > 0.$$

Как легко видеть, производные  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial U_1} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} < 0$  и  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial b} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} < 0$ , и, следовательно, выдавливание дискретного уровня происходит за счёт увеличения значений  $p$  и  $b$  (увеличения высоты и ширины барьера).

## 2. Скачок фазы волновой функции

Для модельной потенциальной энергии (5) волновая функция дискретного спектра с квантовым числом  $n$  имеет  $n - 1$  нулей, расположенных в пределах ячейки при  $r < b$ . Отвечающая ей резонансная волновая функция в непрерывном спектре также имеет  $n - 1$  нулей в этой ячейке и, соответственно,  $n$  максимумов. При этом знак волновой функции выбран таким образом, что в  $n$ -м максимуме он равен  $(-1)^{n-1}$ . После выхода из-под барьера при  $r = b$  волновая функция (6) сшивается с синусоидальным решением, поэтому её знак в  $(n + 1)$ -м максимуме определяется знаком производной  $R'(b)$ . Как следует из (6), при  $1 < r < b$  решением уравнения Шрёдингера является функция  $R(r) = C(\varepsilon) \left( \sin \varkappa \text{ch}(p(r-1)) + \frac{\varkappa}{p} \cos \varkappa \text{sh}(p(r-1)) \right)$ , где  $C(\varepsilon) \geq 0$ , причём  $C(0) = 0$ , если условие (15) не выполняется, и  $C(0) = \infty$  в противном случае. Поэтому

$$R'(b) = C(\varepsilon) f(\varepsilon) = C(\varepsilon) (p \sin \varkappa \text{sh}(p(b-1)) + \varkappa \cos \varkappa \text{ch}(p(b-1))). \quad (17)$$

При параметрах потенциала, удовлетворяющих условию (15), дискретный уровень переходит в непрерывный спектр. Пусть параметры потенциала немного изменились по сравнению с (15) так, что в непрерывном спектре

существует резонанс при энергии  $\varepsilon = \varepsilon_r$ :

$$p(\varepsilon_r) \sin \kappa(\varepsilon_r) \operatorname{sh}(p(\varepsilon_r)(b-1)) + \kappa(\varepsilon_r) \cos \kappa(\varepsilon_r) \operatorname{ch}(p(\varepsilon_r)(b-1)) = 0. \quad (18)$$

Очевидно, что при достаточно больших энергиях, как следует из квазиклассического приближения, знак волновой функции в  $(n+1)$ -м максимуме противоположен знаку этой же функции в  $n$ -м максимуме. При  $\varepsilon = \varepsilon_r$ , как следует из (18), производная волновой функции на границе ячейки  $r = b$  обращается в ноль.

Убедимся в том, что при энергиях  $\varepsilon < \varepsilon_r$  волновая функция в  $n$ -м и  $(n+1)$ -м максимумах имеет одинаковые знаки, а значит, при  $\varepsilon = \varepsilon_r$  величина  $R'(b)$  меняет знак. Для этого рассмотрим знак  $R'(b)$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , который определяется знаком  $f(\varepsilon)$  в (17) при  $\varepsilon = 0$ . В момент исчезновения состояния в дискретном спектре  $f(\varepsilon)|_{\varepsilon=0} = 0$ . При этом, как следует из уравнения (15),

$$\operatorname{ctg} \kappa = -\frac{p}{\kappa} \operatorname{th}(p(b-1)),$$

т.е.  $\operatorname{ctg} \kappa < 0$  и угол  $\kappa$  на единичной окружности лежит во 2 или в 4 четверти. Пусть выдавливание уровня происходит за счёт уменьшения глубины ямы, что соответствует уменьшению  $\kappa$ . Рассмотрим сначала случай, когда  $\kappa$  лежит во 2 четверти ( $\sin \kappa > 0$ ,  $\cos \kappa < 0$ ), что отвечает выдавливанию уровня с нечётным квантовым числом  $n$  (волновая функция в  $n$ -м максимуме положительна). При уменьшении  $\kappa$  (рис.3)  $\sin \kappa$  увеличивается,  $\cos \kappa$  увеличивается (уменьшается по модулю). Поэтому, если  $p \sin \kappa_n \operatorname{sh}(p(b-1)) + \kappa_n \cos \kappa_n \operatorname{ch}(p(b-1)) = 0$ , то с уменьшением  $\kappa$  выражение  $p \sin \kappa \operatorname{sh}(p(b-1)) + \kappa \cos \kappa \operatorname{ch}(p(b-1))$  станет больше 0, и волновая функция в  $(n+1)$ -м максимуме положительна, как и в  $n$ -м. В случае чётного  $n$  ( $\kappa$  лежит в 4 четверти) волновая функция в  $n$ -м и  $(n+1)$ -м максимумах отрицательна. Аналогично можно убедиться, что если выдавливание уровня с квантовым числом  $n$  происходит за счёт увеличения высоты или ширины барьера, то при  $\varepsilon \rightarrow 0$  волновая функция в  $n$ -м и  $(n+1)$ -м максимумах имеет одинаковые знаки.

Таким образом, при энергиях ниже центра резонанса волновая функция в  $n$ -м и  $(n+1)$ -м максимумах имеет одинаковые знаки, а при энергиях выше центра резонанса — разные знаки. Это означает, что после выхода из-под барьера фазы волновых функций с  $\varepsilon < \varepsilon_r$  и  $\varepsilon > \varepsilon_r$  будут отличаться примерно на  $\pi$ . Как известно, наличие связанного состояния приводит к скачку фазы волновой функции также на  $\pi$ . Это свойство сохраняется и для резонансов в непрерывном спектре, только здесь имеет место не скачок, а резкое изменение фазы на  $\pi$  в узком интервале энергий. Как видно из рис.4, волновая функция с близкой к резонансной энергией  $\varepsilon = 0.54672$  в 4-м и 5-м максимумах имеет разные знаки (её энергия чуть выше  $\varepsilon_r$ ), а фаза после выхода

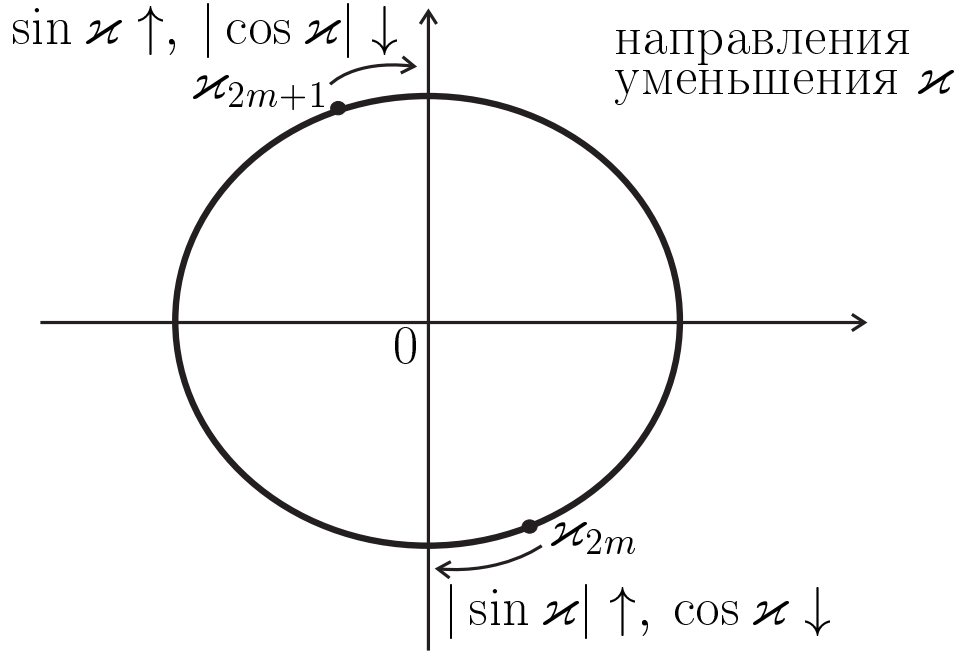


Рис. 3. Изменение слагаемых в формуле (17) при уменьшении глубины потенциальной ямы

из-под барьера имеет промежуточное значение между фазами изображённых на рисунке функций с энергиями ниже и выше центра резонанса.

Определим условный центр резонанса как значение энергии, при которой волновая функция меняет знак в первом максимуме после выхода из-под барьера. В случае потенциальной энергии (5) положение этой точки определяется уравнением (18). Скачок фазы волновой функции играет важную роль для обнаружения и локализации резонансов в численных расчётах.

Для электронов с орбитальным квантовым числом  $l = 0$  отсутствует центробежная энергия в (1) и, как следствие, отсутствует потенциальный барьер. Резонансы, возникающие при выдавливании таких электронов в непрерывный спектр, связаны с виртуальными уровнями энергии. Для модельной потенциальной энергии (5) отсутствие потенциального барьера отвечает предельному случаю  $b = 1$ . Решение уравнения Шрёдингера в этом случае имеет вид

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \cdot \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\sin^2 \varkappa + \frac{\varkappa^2}{k^2} \cos^2 \varkappa}} \sin(\varkappa r), & 0 < r < 1; \\ \sin(kr + \varphi_0), & r > 1, \end{cases} \quad (19)$$

где  $k = \sqrt{2\varepsilon}$ ,  $\varkappa = \sqrt{2(U_0 + \varepsilon)}$ ,  $\varphi_0$  – сдвиг фазы волновой функции. При  $\varepsilon \rightarrow 0$  ( $\varepsilon \ll U_0$ ) амплитуда осцилляций волновой функции при  $r < 1$  ведёт

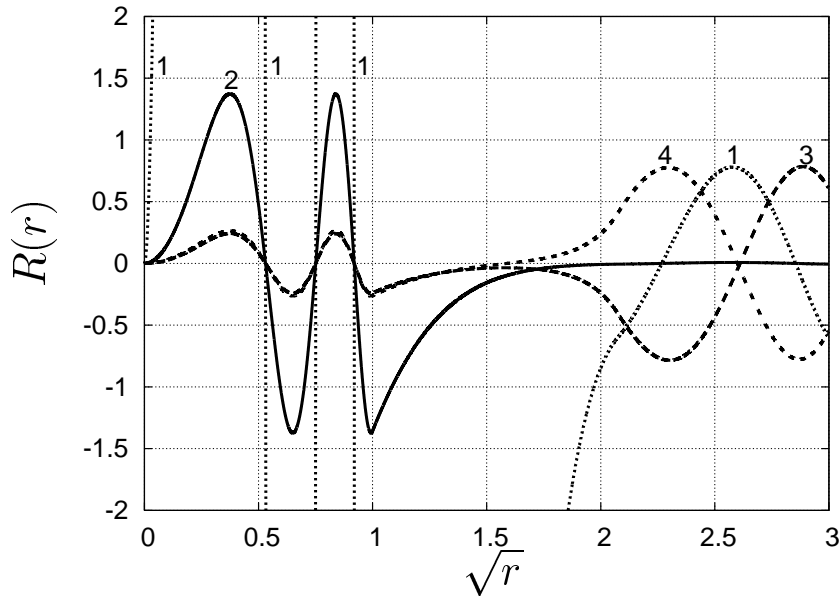


Рис. 4. Волновые функции непрерывного спектра с различными значениями энергий: 1) — с близкой к резонансной энергией  $\varepsilon = 0.54672$ , 2) — то же, но волновая функция уменьшена в 100 раз, 3)  $\varepsilon = 0.535$  ( $\varepsilon < \varepsilon_r$ ), 4)  $\varepsilon = 0.558$  ( $\varepsilon > \varepsilon_r$ ). Параметры потенциала:  $\varkappa = \frac{7\pi}{2} + \frac{\pi}{30}$ ,  $U_0 = \frac{\varkappa^2}{2}$ ,  $U_1 = 3\frac{\varkappa^2 \operatorname{ctg}^2 \varkappa}{2}$ ,  $b = 4.3$

себя как  $\sqrt{k} \sim \varepsilon^{\frac{1}{4}}$ , если  $\cos \varkappa \neq 0$ , и как  $\frac{1}{\sqrt{k}} \sim \frac{1}{\varepsilon^{\frac{1}{4}}}$ , если

$$\cos \varkappa = 0 \left( \varkappa_n = \frac{\pi}{2} + \pi (n - 1), n = 1, 2, \dots \right). \quad (20)$$

Условие появления резонанса (20) совпадает с условием выдавливания дискретного уровня с квантовым числом  $n$  в непрерывный спектр. Как и при наличии потенциального барьера, после исчезновения дискретного уровня в непрерывном спектре существует энергия  $\varepsilon_r$ , при которой производная волновой функции на границе ячейки (при  $r = 1$ ) обращается в ноль. Значение  $\varepsilon_r$  определяется условием

$$\cos \varkappa = \cos \sqrt{2(U_0 + \varepsilon)} = 0. \quad (21)$$

Но при выполнении условия (21) амплитуды осцилляций волновой функции при  $r < 1$  и при  $r > 1$  совпадают, и сшивка двух синусоидальных решений происходит вблизи максимума волновой функции. Поэтому в данном случае нельзя говорить о скачке фазы волновой функции, так как нет таких значений энергии, при которых волновая функция в двух последовательных максимумах имеет одинаковые знаки.

### 3. Плотность состояний с учётом резонансов

Плотность электронов нормирована условием электронной нейтральности ячейки (уравнением для определения химического потенциала):

$$4\pi \int_0^{r_0} r^2 \rho(r) dr = \sum_{nl} N(\varepsilon_{nl}) w_{nl} + \int_{\varepsilon_0}^{\infty} N(\varepsilon) w(\varepsilon) d\varepsilon = Z, \quad (22)$$

где  $w_{nl} = \int_0^{r_0} R_{nl}^2(r) dr$ ,  $w(\varepsilon)$  — плотность состояний электронов непрерывного спектра, которая определяется по формуле (3). Рассмотрим процесс перехода электрона из дискретного в непрерывный спектр. При приближении энергии дискретного уровня к границе непрерывного спектра величина  $w_{nl}$  уменьшается, обращаясь в ноль в момент исчезновения дискретного уровня. В то же время в непрерывном спектре появляется резонанс, и плотность состояний  $w(\varepsilon)$  во втором слагаемом правой части условия (22) увеличивается. Значения энергии дискретного уровня  $\varepsilon_{nl}$  и резонансной энергии  $\varepsilon'_{nl}$  в области перехода электрона из дискретного в непрерывный спектр близки между собой. Поэтому, если интеграл от плотности состояний по области резонансных энергий равен единице:

$$\int_{\text{рез}} w(\varepsilon) d\varepsilon \approx 1, \quad (23)$$

то резонанс даёт такой же вклад в плотность электронов, как и соответствующий дискретный уровень. Значит, при выполнении условия (23) плотность электронов и химический потенциал не испытывают скачка при выдавливании дискретного уровня в непрерывный спектр.

Покажем на примере модельной потенциальной энергии (5), как выполняется условие (23). Будем рассматривать глубокую потенциальную яму:

$$\frac{U_1}{U_0} \ll 1 \quad \left( \frac{p}{\varkappa} \ll 1 \right), \quad (24)$$

что, как правило, выполняется для реальных атомных потенциалов. В этом случае из уравнения (18) следует приближённое условие

$$\varkappa_n = \frac{\pi}{2} + \pi(n-1), \quad n = 1, 2, \dots \quad (25)$$

Будем также считать выполненным неравенство (12). С учётом (12) и (25)

$$w(\varepsilon) = \int_0^b R^2(r) dr \approx \frac{1}{\pi k} \left( 1 + \frac{1}{p} \right) K^2(\varepsilon). \quad (26)$$

При получении (26) можно считать  $p = p(\varepsilon_r)$ , что позволяет использовать условие (18). Раскладывая  $K^2(\varepsilon)$  вблизи  $\varepsilon = \varepsilon_r$ , получим:

$$\begin{aligned}
 & p(\varepsilon) \sin \varkappa(\varepsilon) \operatorname{sh}(p(\varepsilon)(b-1)) + \varkappa(\varepsilon) \cos \varkappa(\varepsilon) \operatorname{ch}(p(\varepsilon)(b-1)) \approx \\
 & \quad \approx -C (\varepsilon - \varepsilon_r) \sin \varkappa \operatorname{ch}(p(b-1)), \\
 C = 1 + & \frac{\operatorname{th}(p(b-1))}{p} \left(1 + \frac{p^2}{\varkappa^2}\right) + \frac{b-1}{\operatorname{ch}^2(p(b-1))} + \frac{p^2}{\varkappa^2} \operatorname{th}^2(p(b-1)) \approx \frac{1}{p} + 1; \\
 & \sin \varkappa(\varepsilon) \operatorname{ch}(p(\varepsilon)(b-1)) + \frac{\varkappa(\varepsilon)}{p(\varepsilon)} \cos \varkappa(\varepsilon) \operatorname{sh}(p(\varepsilon)(b-1)) \approx \\
 \approx & \frac{\sin \varkappa}{\operatorname{ch}(p(b-1))} - \frac{\varepsilon - \varepsilon_r}{p} \sin \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) \left( \left(1 + \frac{p^2}{\varkappa^2}\right) \left(1 + \frac{\operatorname{th}(p(b-1))}{p}\right) + \right. \\
 & \left. + \frac{b-1}{\operatorname{ch}^2(p(b-1))} \right) \approx \frac{\sin \varkappa}{\operatorname{ch}(p(b-1))} - \frac{\varepsilon - \varepsilon_r}{p} \sin \varkappa \operatorname{sh}(p(b-1)) \left(1 + \frac{1}{p}\right); \\
 K^2(\varepsilon) \approx & \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{2\varepsilon} \operatorname{ch}^2(p(b-1)) \left(1 + \frac{1}{p}\right)^2 - \right. \\
 & \left. - \frac{2(\varepsilon - \varepsilon_r)}{p} \left(1 + \frac{1}{p}\right) \operatorname{th}(p(b-1)) + \frac{1}{\operatorname{ch}^2(p(b-1))} \right)^{-1} \approx \\
 \approx & \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{2\varepsilon} \operatorname{ch}^2(p(b-1)) \left(1 + \frac{1}{p}\right)^2 + \frac{1}{\operatorname{ch}^2(p(b-1))} \right)^{-1}. \quad (27)
 \end{aligned}$$

Здесь  $p = p(\varepsilon_r)$ ,  $\varkappa = \varkappa(\varepsilon_r)$  и учтено, что  $\sin^2 \varkappa \approx 1$ .

При получении (27) мы пренебрегли линейным по разности  $\varepsilon - \varepsilon_r$  слагаемым  $\frac{2(\varepsilon - \varepsilon_r)}{p} \left(1 + \frac{1}{p}\right) \operatorname{th}(p(b-1))$  по сравнению с величиной  $\frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{2\varepsilon} \operatorname{ch}^2(p(b-1)) \left(1 + \frac{1}{p}\right)^2$ , квадратичной по  $\varepsilon - \varepsilon_r$ . Отношение линейного слагаемого к квадратичному

$$\frac{4\varepsilon \operatorname{th}(p(b-1))}{p \left(1 + \frac{1}{p}\right) (\varepsilon - \varepsilon_r) \operatorname{ch}^2(p(b-1))} = \frac{2\sqrt{2}a \varepsilon \operatorname{th}(p(b-1))}{p (\varepsilon - \varepsilon_r)} \approx \frac{2\sqrt{2}a \varepsilon}{p (\varepsilon - \varepsilon_r)}, \quad (28)$$

где

$$a = \frac{\sqrt{2}}{\left(1 + \frac{1}{p}\right) \operatorname{ch}^2(p(b-1))}.$$



Выражение (28) становится равным единице при  $\varepsilon - \varepsilon_r = \Delta\varepsilon = \frac{2\sqrt{2}a \varepsilon_r}{p - 2\sqrt{2}a} \approx \frac{2\sqrt{2}a \varepsilon_r}{p}$ . Таким образом, разложение (27) не работает в окрестности точки  $\varepsilon_r$  при  $|\varepsilon - \varepsilon_r| < \Delta\varepsilon$ . Но величина  $\Delta\varepsilon$  мала по сравнению с шириной резонанса (см. далее (33), (38)), если  $\varepsilon_r \ll U_1$ , что будем предполагать выполненным. Поэтому при интегрировании плотности состояний по всей области резонанса разложение (27) оправдано.

С учётом (26) и (27) интеграл от плотности состояний принимает вид:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty w(\varepsilon) d\varepsilon &= \frac{a}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{\varepsilon} + a^2 \right)} = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x} \left( \frac{(x - x_0)^2}{x} + 1 \right)} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{t^2 dt}{(t^2 - t_0^2)^2 + t^2}, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $x_0 = t_0^2 = \frac{\varepsilon_r}{a^2}$ . Как известно, интеграл в (29) можно вычислить следующим образом. Имеем

$$\int_0^\infty w(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\pi} \int_0^{t_0} \frac{\left(1 - \frac{t_0^2}{t^2}\right) dt}{t^2 - 2t_0^2 + 1 + \frac{t_0^4}{t^2}} + \frac{1}{\pi} \int_{t_0}^\infty \frac{\left(1 - \frac{t_0^2}{t^2}\right) dt}{t^2 - 2t_0^2 + 1 + \frac{t_0^4}{t^2}} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\left(1 + \frac{t_0^2}{t^2}\right) dt}{t^2 - 2t_0^2 + 1 + \frac{t_0^4}{t^2}}. \quad (30)$$

С помощью замены переменных  $u = t + \frac{t_0^2}{t}$  убеждаемся, что два первых интеграла в (30) взаимно уничтожаются. Третий интеграл путём замены  $u = t - \frac{t_0^2}{t}$  приводится к виду

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{du}{1 + u^2} = 1.$$

Таким образом,  $\int_0^\infty w(\varepsilon) d\varepsilon = 1$ , что и требовалось доказать.

Оценим характерную ширину резонанса. Как следует из (26) и (27),

$$w(\varepsilon) \approx \frac{a}{\pi \sqrt{\varepsilon} \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{\varepsilon} + a^2 \right)}. \quad (31)$$

Ширину резонанса найдём из условий:  $w(\varepsilon_r - (\delta\varepsilon)_1) = w(\varepsilon_r + (\delta\varepsilon)_2) = \frac{w(\varepsilon_r)}{2}$ ,  $\delta\varepsilon = (\delta\varepsilon)_1 + (\delta\varepsilon)_2$ . При

$$\varepsilon_r \gg a^2 \left( \varepsilon_r \gg U_1 e^{-4p(b-1)} \right) \quad (32)$$

получим

$$(\delta\varepsilon)_1 = (\delta\varepsilon)_2 = a \sqrt{\varepsilon_r}, \quad \delta\varepsilon = 2a \sqrt{\varepsilon_r}. \quad (33)$$

При выполнении условия (32) ширина резонанса  $\delta\varepsilon$  связана с плотностью состояний в центре резонанса соотношением, справедливым для профиля Лоренца:

$$w(\varepsilon_r) = \frac{1}{\pi a \sqrt{\varepsilon_r}} = \frac{2}{\pi \delta\varepsilon}. \quad (34)$$

Выражение (31) при  $\varepsilon_r \gg a^2$  можно приближённо заменить на

$$w(\varepsilon) \approx \frac{a}{\pi \sqrt{\varepsilon_r} \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{\varepsilon_r} + a^2 \right)}, \quad (35)$$

что даёт лоренцевский профиль. В справедливости приближения (35) при условии (32) можно убедиться, проинтегрировав плотность состояний (35) по энергии, что даёт

$$\int_0^{\infty} \frac{a d\varepsilon}{\pi \sqrt{\varepsilon_r} \left( \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2}{\varepsilon_r} + a^2 \right)} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{\sqrt{\varepsilon_r}}{a} \right) \right) \approx 1, \text{ если } \varepsilon_r \gg a^2. \quad (36)$$

В другом предельном случае

$$\varepsilon_r \ll a^2 \left( \varepsilon_r \ll U_1 e^{-4p(b-1)} \right) \quad (37)$$

имеем

$$\delta\varepsilon_1 = \varepsilon_r \left( 1 - \left( \frac{\varepsilon_r}{2a^2} \right)^2 \right) \approx \varepsilon_r, \quad (\delta\varepsilon)_2 = 3\varepsilon_r, \quad \delta\varepsilon = 4\varepsilon_r. \quad (38)$$

В этом случае плотность состояний в резонансе не описывается формулой Лоренца. Резонанс получается более узким, чем резонанс лоренцевского типа той же высоты. Кроме того, область энергий  $\varepsilon$ , дающая основной вклад в интеграл (23),  $\varepsilon \sim a^2 \gg \delta\varepsilon$ .

Точка максимума плотности состояний в резонансе, вообще говоря, не совпадает с точкой, где происходит скачок фазы волновой функции. Покажем это, считая выполненным условие (12). В этом случае функция  $\frac{2}{\pi k} K^2(\varepsilon)$

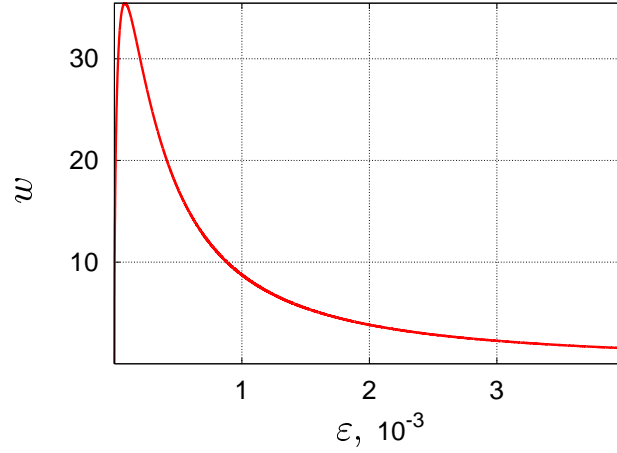


Рис. 5. Плотность состояний в резонансе до выдавливания дискретного уровня в непрерывный спектр

имеет резкий максимум при  $\varepsilon = \varepsilon_r$ . Запишем волновую функцию (6) в пределах ячейки в виде  $R(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} K \tilde{R}(r)$ . Пусть разность  $U_1 - \varepsilon_r$  не мала по сравнению с  $U_1$ . Тогда величина  $\int_0^b \tilde{R}^2(r) dr$  плавно зависит от  $\varepsilon$  в окрестности  $\varepsilon = \varepsilon_r$ . Поэтому в выражении (3) для  $w(\varepsilon)$  вблизи точки  $\varepsilon = \varepsilon_r$  функцию  $\int_0^b \tilde{R}^2(r) dr$  можно приближённо считать постоянной, равной своему значению при  $\varepsilon = \varepsilon_r$ . Найдём знак производной  $w'(\varepsilon_r)$ . Раскладывая  $w(\varepsilon)$  вблизи  $\varepsilon_r$  до линейных по  $\varepsilon - \varepsilon_r$  слагаемых, получим, что

$$w(\varepsilon) \sim 1 + (\varepsilon - \varepsilon_r) \left( \frac{1}{p} \left( 1 + \frac{1}{p} \right) \text{sh}(2p(b-1)) - \frac{1}{2\varepsilon_r} \right).$$

Поэтому при  $\varepsilon_r > (\varepsilon_r)_{cr} = \frac{p^2}{2(p+1) \text{sh}(2p(b-1))} \approx \frac{p^2}{p+1} e^{-2p(b-1)}$  имеем  $w'(\varepsilon_r) > 0$ , т.е. максимум резонанса смещён в сторону  $\varepsilon > \varepsilon_r$ , и наоборот, при  $\varepsilon_r < (\varepsilon_r)_{cr}$  максимум электронной плотности находится левее точки  $\varepsilon_r$ .

На рис.5 показана плотность состояний в непрерывном спектре на интервале энергий  $\varepsilon \in (0; 0.004)$  при параметрах потенциальной энергии

$$\varkappa = \varkappa_0 = \frac{7\pi}{2} + \frac{\pi}{30}, \quad U_1 = 1.001\tilde{U}_1 = 1.001 \frac{\varkappa_0^2 \text{ctg}^2 \varkappa_0}{2} = 0.68, \quad b = 4.3. \quad (39)$$

Из рисунка видно зарождение резонанса перед исчезновением уровня из дискретного спектра. Интеграл от плотности состояний по области резонанса на рис.5 равен 0.03.

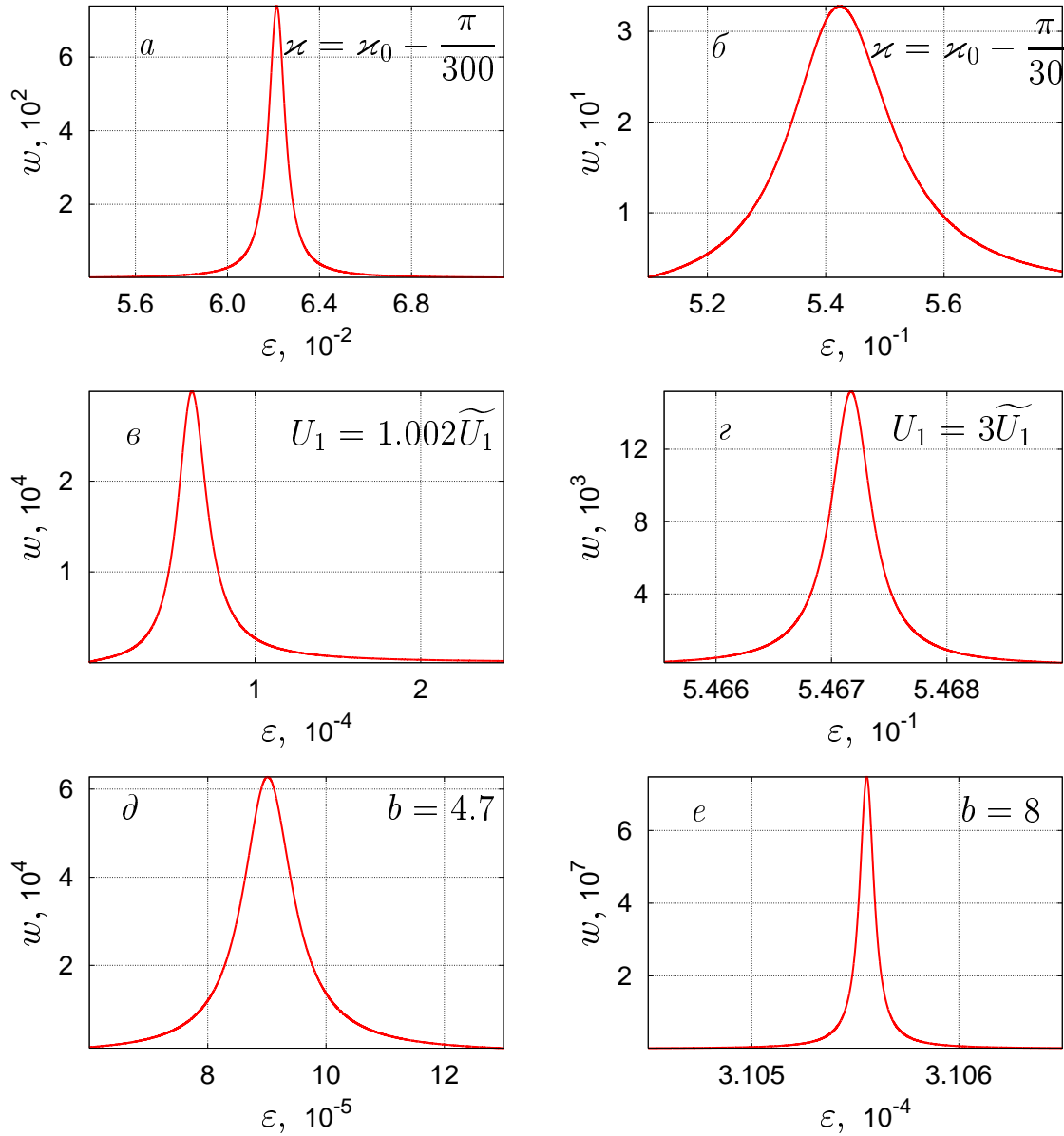


Рис. 6. Плотность резонансных состояний после выдавливания уровня из дискретного спектра: *a), б)* — за счёт уменьшения глубины потенциальной ямы, *в), г)* — за счёт увеличения высоты потенциального барьера, *д), е)* — за счёт увеличения ширины барьера. Параметры потенциальной энергии, не указанные на рисунках, такие же, как в (39)

На рис.6 изображена плотность резонансных состояний для шести различных потенциалов. Так, резонансы  $a), б)$  демонстрируют выдавливание дискретного уровня за счёт уменьшения глубины потенциальной ямы (высота и ширина барьера такие же, как в (39)). Резонансы  $в), г)$  возникают при выдавливании уровня за счёт увеличения высоты барьера, а резонансы  $д), е)$  — за счёт увеличения ширины барьера. Интегралы от  $w(\varepsilon)$  для всех резонансов на рис.6 близки к единице. Как видно из рисунка, при изменении указанных параметров потенциала происходит сдвиг положения резонанса вверх по энергии, а уменьшение глубины потенциальной ямы приводит к уширению и последующему растворению резонанса в непрерывном спектре. Реальная картина выдавливания дискретных уровней в непрерывный спектр является более сложной, так как в процессе ионизации давлением при увеличении плотности вещества меняются все параметры потенциала.

### 3. Влияние резонансных состояний на электронную плотность

Как показано в п.3, можно ожидать, что учёт резонансов даёт плавное поведение химического потенциала, электронной плотности и других величин при выдавливании электронов в непрерывный спектр. На рис.7 показан пример численного расчёта, демонстрирующий влияние резонансов на плотность электронов. Из рисунка видно, что при исчезновении из дискретного спектра уровня  $4f_{7/2}$  плотность связанных и свободных электронов, каждая в отдельности, сильно изменились, в то время как суммарная электронная плотность почти не изменилась. Учёт резонансов проводился следующим образом. После вычисления дискретного спектра в самосогласованном потенциале вводился новый, фиктивный потенциал, как это описано в п.2. В переопределённом потенциале находились дополнительные дискретные уровни энергии, служащие начальным приближением при нахождении резонанса. Для нахождения центра резонанса — значения  $\varepsilon_r$  — использовался метод деления пополам: если при энергии  $\varepsilon$  волновая функция в  $(n-l)$ -м и  $(n-l+1)$ -м максимумах имеет одинаковые знаки, то  $\varepsilon < \varepsilon_r$ , если разные знаки, то  $\varepsilon > \varepsilon_r$ . При интегрировании плотности состояний по области резонансных энергий ( $\varepsilon_1 < \varepsilon < \varepsilon_2$ ) удобно сделать замену переменных:

$$\ln \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_r}{\varepsilon - \varepsilon_r} = u \Rightarrow \int_{\varepsilon_r}^{\varepsilon_2} w(\varepsilon) d\varepsilon = w(\varepsilon_0)(\varepsilon_2 - \varepsilon_r) \int_0^{\infty} g(u) du, \quad \varepsilon > \varepsilon_r, \quad (40)$$

$$\ln \frac{\varepsilon_r - \varepsilon_1}{\varepsilon_r - \varepsilon} = u \Rightarrow \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_r} w(\varepsilon) d\varepsilon = w(\varepsilon_0)(\varepsilon_r - \varepsilon_1) \int_0^{\infty} g(u) du, \quad \varepsilon < \varepsilon_r, \quad (41)$$

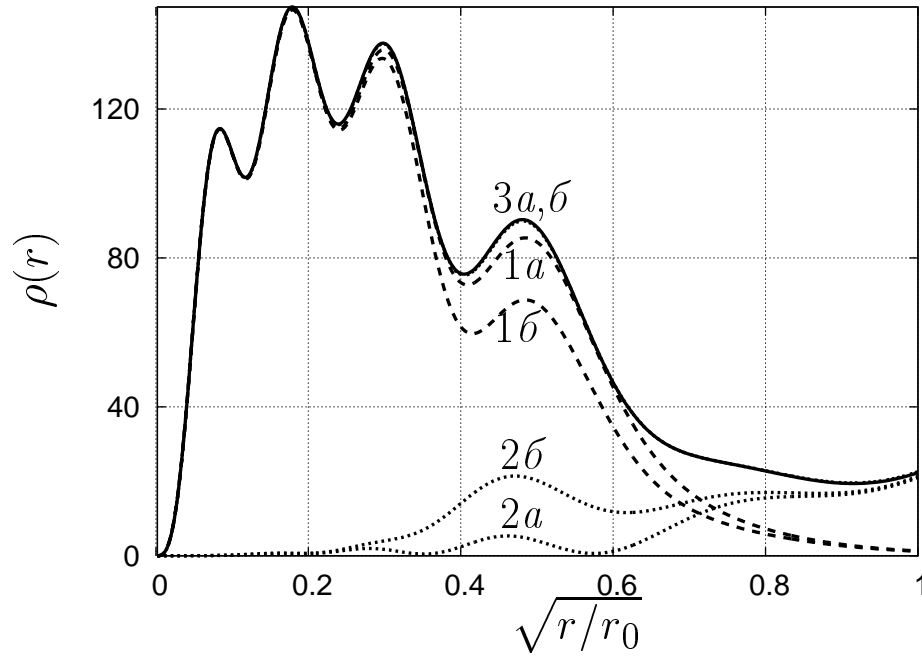


Рис. 7. Электронная плотность для золота при  $T = 1$  эВ,  $\rho = 125$  г/см<sup>3</sup>:  $1a, 1b$  — плотность связанных электронов,  $2a, 2b$  — плотность свободных электронов,  $3a, 3b$  — суммарная плотность; с индексом  $a$  — до выдавливания дискретного уровня, с индексом  $b$  — после выдавливания дискретного уровня

где в первом случае  $g(u) = \frac{1}{w(\varepsilon_r)} w(\varepsilon_r + (\varepsilon_2 - \varepsilon_r) e^{-u}) e^{-u}$ , а во втором —  $g(u) = \frac{1}{w(\varepsilon_r)} w(\varepsilon_r - (\varepsilon_r - \varepsilon_1) e^{-u}) e^{-u}$ . Интегрирование в (40), (41) проводится на сетке, равномерной по  $u$ . Функция  $g(u)$  не имеет резкого максимума, в отличие от  $w(\varepsilon)$ , и убывает при больших  $u$  как  $e^{-u}$ .

## Список литературы

- [1] Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантостатистические модели высокотемпературной плазмы. Методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физико-математическая литература, 2000.
- [2] Liberman D.A. Self-consistent field model for condensed matter. Phys.Rev.B, 1979, v.20, p.4981-4989.
- [3] More R.M. Pressure ionization, resonances, and the continuity of bound and free states. Advances in atomic and molecular physics, 1985, v.21, p.305-356.
- [4] Bar-Shalom A., Oreg J., Klapisch M. Eosta - an improved EOS quantum mechanical model in the STA opacity code. Journal of Quatitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2006, v.99, p.35 - 54.
- [5] Novikov V.G., Grushin A.S., Ovechkin A.A. Quasizones and resonances in the selfconsistent field models of dense plasma, in Physics of Extreme States of Matter-2009, Chernogolovka, 2009, p.157-159.