ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

4-98-11

На правах рукописи
УДК 530.145.61

Ч-121

ЧАБАНОВ
Владимир Михайлович

КАЧЕСТВЕННАЯ ТЕОРИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ В ПОДХОДЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Специальность: 01.04.16 — физика ядра
и элементарных частиц

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1998

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

Научный руководитель

доктор физико-математических наук, профессор Б.Н.Захарьев

Официальные оппоненты

доктор физико-математических наук, профессор Р.Н. Фаустов
доктор физико-математических наук, профессор А.И. Титов

Ведущая организация НИИЯФ МГУ

Защита диссертации состоится 1998 г. на заседании диссертационного совета К 047.01.01 при Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований по адресу: г. Дубна, Московская область, ЛТФ ОИЯИ

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан 1998 г.

Ученый секретарь
специализированного совета
доктор физико-математических наук

А.Е. Дорохов

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Квантовую механику можно условно разделить на две части: прямую и обратную задачи. Под прямой задачей подразумевают просто решение уравнения Шредингера при заданных потенциалах. Обратная же задача состоит в определении потенциала по спектральным данным. Известно, однако, что обратной задачей занимались в основном математики, а физики, в силу ряда причин – трудности численного восстановления потенциалов по данным рассеяния, переопределеннсть этих данных для систем со многими степенями свободы, некорректность самой постановки обратной задачи и т. д., – не уделяли обратной задаче того внимания, которая она заслуживает. Тем не менее, в самом формализме обратной задачи заложена возможность по аналитическим замкнутым, точным формулам (точно решаемые модели) осуществлять преобразования потенциалов, приводящие к наперед заданному изменению спектральных параметров. Аналогичные преобразования получаются и в подходе суперсимметрии в квантовой механике. Важным моментом здесь является то, что такие точно решаемые модели позволяют аппроксимировать (сколь угодно точно) любую заданную систему. Эти модели как-бы связывают мостиками непрерывных переходов старые известные модели прямой задачи, которые составляют неизмеримо малую долю всех возможных объектов. С помощью компьютерной "визуализации" точных моделей обратной задачи со всевозможными вариациями спектральных параметров (квантовый "дизайн"), которые служат входными данными, можно выявить глубокие общие связи и их физический смысл, скрытые в математическом формализме, и далеко не очевидные при обычной рутинной работе с формулами. Это позволяет по-новому взглянуть на фундаментальную сторону квантовой теории какой является связь между взаимодействиями и наблюдаемыми спектральными характеристиками.

Итак, одним из актуальных моментов здесь является то обстоятельство, что изучение точных моделей обратной задачи обновляет наше качественное представление о квантовом мире. Кроме того, наши результаты могут пригодиться и в таких прикладных областях, как технология сверхрешеток (создание потенциалов нужного "профиля"), лазеры, "квантовые" проволочки (quantum wires) и т.д. В ядерной физике, где уравнение Шредингера служит хорошим при-

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

ближением, также находит свое применение теория преобразований квантовых систем с априори заданными изменениями спектров. Вообще говоря, ядерные системы, как и всякие системы со многими степенями свободы, требуют много усилий и времени для своего расчета. И, хотя на настоящее время существует много полезных моделей и способов описания ядерной структуры, несомненно и то, что, в силу громоздкости конкретных расчетных программ, имеется дефицит качественного понимания процессов, происходящих в ядре. Настоящая диссертация, конечно, не претендует в полной мере на разрешение этой проблемы. Однако на простых моделях мы уже сейчас открываем некоторые явления в их предельно простой форме, которые на этом уровне не "искажены" множеством поправок, неизбежно вносимыми рассмотрением реальных систем. За основу мы берем метод приближенной связи каналов Фешбаха – один из универсальных способов описания квантовых систем со многими степенями свободы. И, хотя мы не занимаемся расчетом тех или иных ядер, а изучаем особенности описывающей эти ядра системы дифференциальных уравнений (многоканальное уравнение Шредингера) как таковой, мы делаем первые шаги (и в дальнейшем намечаем их продолжить) к пониманию специфики многоканальных процессов.

Цель работы. Целью настоящей диссертации является выработка правил преобразований одно- и многоканальных квантовых систем с наперед заданными изменениями спектральных свойств.

Научная новизна и практическая ценность. На основе формализма квантовомеханической обратной задачи и суперсимметрии (компьютерная визуализация точных моделей) получены простые и **универсальные** правила качественного конструирования квантовых систем с заранее заданными спектральными характеристиками. Одним из достоинств этих результатов является тот факт, что они верны и в общем случае: системы с произвольным числом связанных состояний, каналов, разные исходные системы (осциллятор, кулоновский потенциал, прямоугольная яма и т. д.). Детали преобразований потенциалов при направленных спектральных сдвигах удалось свести к комбинации простых и универсальных составляющих ("кирпичики" или блоки спектральных преобразований), имеющих прозрачный физический смысл. Кроме того, удалось увязать в единую картину ряд явлений, имеющих, на первый взгляд, совершенно разную природу. Так, операция удаления избранного уровня из спектра исходной системы может трактоваться как предельный случай сдвига (на бесконечность) в конфигурационном пространстве области, где концентрируется основная часть волновой функции частицы и т.д.

Аналогичные исследования проведены и для многоканальных систем. В диссертации выяснены особенности преобразования таких систем при выборочной вариации спектральных весовых векторов (параметров, характеризующих поведение мультиканальной волновой функции на краю системы). Дано обобщение на многоканальный случай безотражательных потенциалов солитонного типа. Эти результаты могут оказаться полезными в том числе и при рассмотрении задач по рассеянию частиц со спином на мишени, изучении специфики поведения элементов s–матрицы для закрытых каналов, которые нельзя получить из эксперимента, но они важны – ведь для восстановления потенциалов нужна **вся** матрица. Для преобразований многоканальных систем с предписанными изменениями спектров можно использовать, кроме формализма обратной задачи, также и преобразования суперсимметрии (Дарбу), многоканальное обобщение которых дано в настоящей диссертации. Эти преобразования дают ряд новых моделей по сравнению с подходом обратной задачи, что открывает новые перспективы для продолжения исследований в области многоканального квантового "дизайна".

На защиту выносятся следующие результаты.

- Найдены правила преобразования потенциалов исходных систем при выборочном удалении из дискретного спектра произвольного уровня, без изменения положения других уровней, или при порождении на заданном месте нового уровня связанного состояния.

- Установлены алгоритмы сдвига локализации отдельных состояний в пространстве и на энергетической шкале, с помощью вспомогательных потенциальных ям – "переносчиков" избранных состояний.

- Выяснены качественные аспекты управления скоростями распадов отдельных квазистационарных состояний (резонансов), пронося квазисвязанные состояния сквозь потенциальные барьеры, изменяя тем самым ширины резонансов.

- Сформулированы аналогичные правила управления переходами между дискретными состояниями, меняя величины интегралов перекрытия.

- Выявлены некоторые эвристические аспекты аппроксимации произвольных потенциальных ям безотражательными потенциалами солитонного типа).

- Открыт эффект "переворота" потенциалов (изменение знака исходного потенциала) при преобразовании суперсимметрии. На примере некоторых модельных периодических потенциалов продемонстрированы преобразования, порождающие уровень связанного состояния и нарушающие периодичность исходного потенциала, но сохраняющие неизменной зонную структуру.

- Открыт эффект "аннигиляции" при сближении (вырождении) соседних уровней связанных состояний.

- Изучены преобразования многоканальных систем при выборочной вариации спектральных весовых векторов (параметров, характеризующих поведение мультиканальной волновой функции на краю системы).

- Построены многоканальные квантовые системы, имеющие связанные состояния и не дающие отраженных волн при любых энергиях непрерывного спектра. Дано объяснение появлению в $V_{ij}(x)$ потенциальных барьеров, которые не портят прозрачности. Удивительно, что они даже необходимы для полной проницаемости.

- Обобщено на многоканальный случай преобразование суперсимметрии с изложением соответствующих алгоритмов. По сравнению с подходом обратной задачи это преобразование дает более широкий класс моделей. В диссертации приведен, в частности, пример абсолютно прозрачной 2-х канальной системы на всей оси без связанных состояний, которую невозможно построить в рамках формализма обратной задачи.

Апробация работы.

Результаты, вошедшие в диссертацию докладывались на семинарах ЛТФ ОИЯИ, во многих научных центрах нашей страны и за рубежом (МФТИ, МИФИ, МГУ, Тв.ГУ, ФИАН, Курчат. центр, ИФВЭ, университет в Зигене и т. д.), на ряде международных конференций – конференция "Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory", оз. Балатон, Венгрия, 1996, международная конференция по мат. физике в Брисбэне, Австралия, 1997, междисциплинарная конференция по обратной задаче в Экс-ле-Бэн'е, Франция, 1996 и т.д.

Публикации.

Содержание диссертации основывается на работах [1-10].

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, семи разделов, объединенных в две части, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации 67 страниц машинописного текста, включая 21 рисунок и список литературы из 43 пунктов.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы, кратко изложена суть проблематики, затронутой в диссертации и описаны основные результаты работы.

В первой части диссертации изучаются преобразования потенциалов в одномерном уравнении Шредингера, приводящие к заранее заданным изменениям спектров.

В первом разделе рассматриваются точно решаемые модели обратной задачи. На основе анализа этих моделей получены алгоритмы преобразований исходных потенциалов с удалением и/или порождением выбранных точек спектра системы, сдвигом области локализации волновой функции выбранного состояния в конфигурационном пространстве. Описываются методы наперед заданного изменения ширин резонансов и интенсивностей переходов между энергетическими уровнями.

В подразделе 1.1 дается введение (на полусхематическом уровне) в формализм обратной задачи как обобщенной на случай специального бесконечномерного гильбертова пространства процедуры переортонормировки Грама-Шмидта. По своей формальной структуре, обратная задача задает рецепт перехода $\overset{\circ}{V} \to V$ от произвольной модельной системы к системе с наперед заданными спектральными

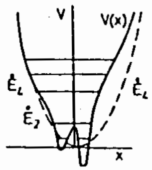

Рис. 1(а)

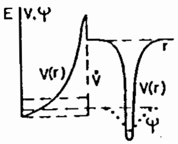

Рис. 1(б)

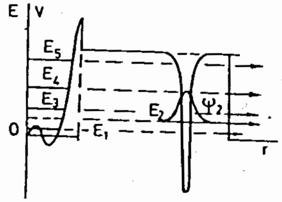

Рис. 1(в)

данными, что и реализует технически восстановление потенциала по спектральным данным. Вводится понятие нормировочных констант (спектральных весовых факторов), характеризующих поведение волновых функций связанных состояний на краю системы и вместе с уровнями энергий однозначно задающими потенциал системы. Показывается, что при изменении конечного числа спектральных параметров уравнения обратной задачи дают точные решения для нового потенциала в терминах известных решений для старой системы (точно решаемые модели).

В подразделе 1.2 на основе формул обратной задачи получены трансформированные потенциалы при уничтожении (порождении) уровня энергии связанного состояния без изменения остального спектра. Полученные результаты можно трактовать следующим образом – см. Рис. 1 (а). При удалении из спектра выбранного уровня все вышележащие уровни теряют по одному узлу, или по пол-колебания волновой функции. Это достигается сужением потенциальной ямы в области (по шкале ординат), где располагаются эти состояния. Но, чтобы удержать на месте состояния, лежащие ниже уничтожаемого, которые при сужении ямы должны были бы подняться, в нижней части потенциальной ямы тонко подбирается такой "рельеф", локальные минимумы которого (притягивающие ямы) располагаются на местах максимумов модуля функции состояния, ближайшего снизу к уничтожаемому состоянию. При порождении же уровней действуют правила, во многом обратные упомянутым выше. В подразделе 1.3 рассматриваются трансформации потенциалов, сдвигающие области концентрации волновых функций избранных состояний в пространстве за счет вариации спектральных весовых факторов (нормировочных констант), характеризующих поведение волновых функций

на краю системы. Это достигается за счет образования специфической потенциальной ямы, имеющей на Рис.1 (б) вид "сосульки", форма которой такова, что в ней создаются благоприятные условия для стоячей полуволны избранного состояния, а для всех других происходит самогашение за счет интерференции квантовых волн. При этом в остальной части потенциала амплитуда волновой функции состояния мала (в пределе равна нулю). Тем самым, удается объяснить **дискретную** процедуру удаления уровней как предел **нерерывного** процесса изменения локализации избранного сотояния в пространстве при вариации нормировочного фактора.

В подразделе 1.4 делаются предсказания о способах наперед заданного изменения ширин резонансов – Рис1 (в). С помощью ямы, аналогичной изображенной на Рис. 1 (б), где концентрируется плотность вероятности обнаружить частицу избранного квазистабильного сотояния, можно проносить это состояние к краю (запирающего) барьера, увеличивая тем самым ширину распада этого резонанса.

В подразделе 1.5 описываются эвристические алгоритмы направленного (т. е. заранее заданного) изменения скоростей переходов (напр. радиационных) между выбранными энергетическими уровнями, "разводя" в пространстве выбранные собственные состояния, и, тем самым, меняя интегралы перекрытия этих состояний.

Во втором разделе показывается, что алгоритмы аппроксимации известных потенциалов по нижней части дискретного спектра абсолютно прозрачными солитонообразными потенциалами имеют много общего с алгоритмами преобразований потенциалов с априори заданными изменениями спектральных данных.

В третьем разделе рассматривается задача порождения связанного состояния в нижней запрещенной зоне периодического потенциала при условии сохранения зонной структуры. Делается это при помощи преобразования Дарбу (суперсимметрии) на примере двух модельных периодических систем, – "гребенки Дирака" $V_0(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_0\delta(x-na)$, и $V_0(x) = v_n\cos(\pi x)^{2n}$. В подразделе 3.1 приводится краткое изложение преобразования Дарбу (суперсимметрии), показывается на точных формулах, что это преобразование добавляет к спектру системы уровень связанного состояния (в нижней запрещенной полосе) и не смещает границы энергетических лакун.

Выражение для преобразованного потенциала имеет вид:

$$V_1(x) = -V_0(x) + 2\epsilon + 2\left\{\frac{[\psi^-(x)]'}{\psi^-(x)}\right\}^2, \tag{1}$$

где $\psi^-(x)$ есть решение исходной системы при энергии порождаемого состояния. Из этого выражения видно, что при преобразовании Дарбу меняется знак потенциала (член $-V_0(x)$): "гребенка" потенциальных барьеров (или ям) "переворачивается", и этот переворот не компенсируется дополнительными поправками к потенциалу. В подразделе 3.2 показаны соответствующие графические результаты (формула (1)).

В четвертом разделе описывается явление эффективной аннигиляции (уничтожение) связанных состояний при их сближении (вырождении). В подразделе 4.1 показаны симметричные преобразования потенциальных ям, осуществляющие этот процесс - Рис. 2. При сближении соседних энергетических уровней, их волновые функции должны, оставаясь ортогональными, быть все более и более похожими друг на друга. Это достигается резким уменьшением амплитуды (в пределе исчезновением) волновых функций дублета в средней части ямы, и ее концентрацией по краям. Делается это с помощью специфического сужения исходной потенциальной ямы и созданием потенциальных ям, имеющих на Рис. 2 вид сосулек (уже упомянутых выше), в которых концентрируется волновые функции и уносятся в пределе полного вырождения на бесконечность (или впрессовываются в стенки).

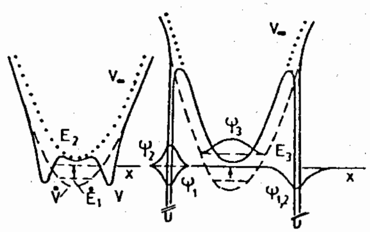

Рис. 2 Сближение (вырождение) уровней E_1 и E_2

В подразделе 4.2 приводятся как основные формулы сдвига уровней, не нарушающих симметрию потенциала на конечном отрезке, так и их обобщение на случай всей оси и непрерывного спектра.

В подразделе 4.3 рассматриваются случаи несимметрической деформации потенциалов при вырождении уровней связанных состояний, когда поведение волновой функции фиксируется на одном краю интервала нормировочной константой (производной на краю интервала). Показывается, что при вырождении уровней с разными граничными условиями также имеет место эффективная аннигиляция одного из них.

Вторая часть диссертации посвящена изучению преобразований многоканальных квантовых систем с априори заданными изменениями спектров. Такие ситемы описываются уравнениями вида

$$-\psi_i''(x) + \textstyle\sum_j V_{ij}(x)\psi_j(x) = E_i\psi_i(x), \tag{2}$$

где $E_i = E - \epsilon_i$ – энергии в каналах, а ϵ_i – значения порогов непрерывного спектра в отдельных каналах. Эти уравнения служат матричным обобщением одномерного уравнения Шредингера. В начале второй части дается краткое обобщение формализма обратной задачи для многоканального случая, на котором основываются приводимые далее результаты.

В пятом разделе изучается поведение волновых функций связанных состояний при изменении парциальных компонент спектральных весовых векторов для систем на конечном отрезке (приведенные ширины в терминах теории R-матрицы). Приведены соответствующие иллюстрации. Отмечается важная особенность поведения многоканальных волновых функций, состоящая в том, что увеличение по модулю парциальной приведенной ширины в выбранном канале приводит к концентрации волновой функции в этом канале – Рис.3

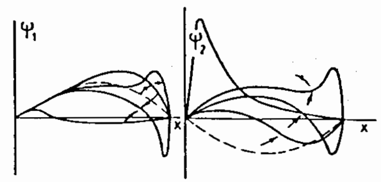

Рис. 3 Изменение $\psi_2'(0)$ - парциальной компоненты спектрального весового вектора, отвечающей второму каналу (при $\psi_1'(0) = const$)

В шестом разделе дается обобщение на многоканальный случай известных одноканальных потенциалов солитонного типа. Один пример безотражательных многоканальных матриц взаимодействия показан на Рис. 4. Неожиданной особенностью здесь является появление отталкивательных членов в матричном элементе $V_{11}(x)$. Этому явлению дается следующее объяснение. Рассмотрим волну (решение Йоста) в двухканальной системе (Рис. 4), падающую на барьер в $V_{11}(x)$ при энергии, лежащей, например, между двумя порогами (второй канал закрыт). Наличие барьера приводит к отражению этой волны. Однако, часть волны за счет связи каналов переходит во второй канал, где и "запирается" в соответствующей потенциальной яме. После этого, опять же за счет связи $V_{12}(x)$, она возвращается в первый канал, распадаясь в обе стороны. И две волны – распадная из второго канала и отраженная от барьера – уничтожают друг друга, так как имеют одинаковую амплитуду и противоположные фазы, что достигается в формализме обратной задачи тонким подбором соответствующей формы потенциалов.

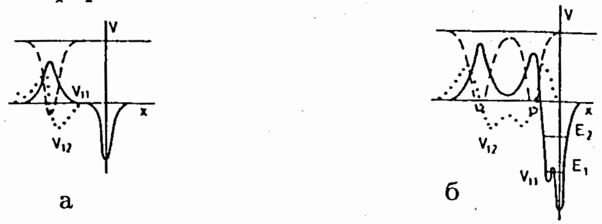

Рис. 4 Безотражательные двухканальные матрицы взаимодействия с одним (а) и двумя (б) связанными состояниями

В седьмом разделе обобщается на многоканальный случай преобразование суперсимметрии (Дарбу). В рамках этого подхода получается следующая формула для преобразованного гамильтониана

$$\hat{H}_+ = \hat{H}_- - 2\hat{W}'(x), \tag{3}$$

где $\hat{W}(x)$ ("суперпотенциал" в терминах суперсимметричной квантовой механики) имеет вид:

$$\hat{W}(x) = \hat{\Psi}'(x)\hat{\Psi}(x)^{-1}, \tag{4}$$

где $\hat{\Psi}(x)$ – матричное решение (2) с исходным гамильтонианом $\hat{H}_-$, которое берется при наперед заданной фиксированной энергии ϵ – параметре, который задает конкретный вид преобразования. Эти выражения по форме совпадают с таковыми в одноканальном случае. Но отличием, привносимым многоканальным подходом, является то

обстоятельство, что теперь нужно специально позаботиться о эрмитовости $\hat{W}(x)$, чего, как это показано в диссертации, можно достичь надлежащим выбором $\hat{\Psi}(x)$. Кроме того, важен порядок сомножителей в (4), так как в многоканальном случае мы работаем уже не со скалярными функциями, а с матричными. Выражение для решений (2) с новым гамильтонианом (3) при любых значениях энергии $E \neq \epsilon$ имеет вид:

$$\hat{\psi}_+(x,E) = (-\frac{d}{dx} + \hat{W}(x))\hat{\psi}_-(x,E), \tag{5}$$

где $\hat{\psi}_-(x,E)$ есть решения для старого потенциала. Аналогичное выражение есть и в одноканальном случае. Но при энергии ϵ решения уже следующие. Первые M линейно независимых решений (всего их 2 M, где M – число каналов), символически объединенные в матрицу $\hat{\Psi}_+(x,\epsilon)$ имеют вид:

$$\hat{\Psi}_+(x,\epsilon) = \{\hat{\Psi}(x)^{-1}\}^T, \tag{6}$$

а остальные линейно независимые решения записываются так:

$$\hat{\Psi}^{\#}_+(x,\epsilon) \;=\; \{\hat{\Psi}(x)^{-1}\}^T \int^x \{\hat{\Psi}(y)\}^T \hat{\Psi}(y) dy. \tag{7}$$

Используя эти формулы, показано, что в случае 2-х канальной системы на всей оси преобразование суперсимметрии может дать (в зависимости от выбора $\hat{\Psi}(x)$) нетривиальные безотражательные матрицы взаимодействия либо **без** связанных состояний (этого нельзя было добиться в рамках формализма обратной задачи), либо сразу с **двумя** вырожденными связанными состояниями при энергии ϵ. Далее, при помощи (6) и (7), получены формулы для матричных потенциалов, полученных после 2-х кратного преобразования суперсимметрии:

$$\hat{\hat{V}}(x) \;= -2\frac{d}{dx}(c\ \hat{\Psi}(x)^{-1}\{1 + c\int^x [\hat{\Psi}(y)]^T \hat{\Psi}(y) dy\}^{-1}[\hat{\Psi}(x)^{-1}]^T). \tag{8}$$

Показано, что при соответствующем выборе $\hat{\Psi}(x)$, двухкратное преобразование суперсимметрии дает те же формулы, что и в подходе обратной задачи.

В заключении сформулированы полученные в диссертации результаты, выносимые на защиту.

Литература

[1] Захарьев Б.Н., Нехамкин Л.И., Чабанов В.М. Сообщение ОИЯИ Р4-92-496, Дубна, 1992

[2] Захарьев Б. Н., Чабанов В. М. *Качественная теория управления спектами, рассеянием, распадами.*, ЭЧАЯ, **25**, с. 1561, 1994.

[3] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. Phys.Rev.A**49**,N5, R3159, 1994

[4] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. Phys.Lett.B**319**, 13-15, 1993.

[5] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. Phys.Rev. A**50**, 3948, 1994.

[6] Chabanov V.M. et al. Phys.Rev. A**52**, R3389, 1995; Proc. Conf. "New Frontiers", 1995, Monteroduni, Hadronic Press, 1996.

[7] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. in *Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory*, Vol. 488 of *Lecture Notes in Physics*, Eds. B. Apagyi, G. Endrédi, P. Lévay, pp. 30-44 (Springer-Verlag, Heidelberg, 1996)

[8] Chabanov V.M., Zakhariev B.N., и Sofianos S.A. Ann.Physik **6**, 136, 1997

[9] Chabanov V.M., et al in *Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory*, Vol. 488 of *Lecture Notes in Physics*, Eds. B. Apagyi, G. Endrédi, P. Lévay, pp. 197-203 (Springer-Verlag, Heidelberg, 1996)

[10] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. *New situation in quantum mechanics (wonderful potentials from the inverse problem)*, topical review, Inverse Problems, **13**, R47, 1997.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 января 1998 года.