

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

P2-92-48

И.В. Луценко*, А. Дж. Магакян, А. Н. Сисакян,
В. М. Тер-Антонян*

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ
В МОДЕЛИ ХАРТМАНА

*Ереванский государственный университет, г. Ереван

1992

Кластеризация квантовых состояний
в модели Хартмана

Предсказан и объяснен эффект кластеризации квантовых состояний в модели Хартмана.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод Г.Г.Сандуковской

Lutsenko I.V. et al.

P2-92-48

Clusterisation of Quantum States
in the Hartmann Model

The effect of clusterisation of quantum states in the Hartmann is predicted and explained.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

В работе [1] был предложен подход, в рамках которого классические и квантовые смеси характеризуются парой параметров $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$ — средней концентрацией признака и степенью неоднородности. Параметры $\bar{\beta}$ и \mathcal{L} в общем случае могут изменяться в пределах $\bar{\beta} \in [0, 1]$ и $\mathcal{L} = [0, 1 - \bar{\beta}]$, и потому каждая пара $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$ определяет точку на специальной диаграмме состояний — прямоугольном треугольнике с единичными катетами.

Метод неоднородности привлекателен в двух отношениях. Во-первых, он визуализирует информацию о смеси, сводя все дело к размещению и передвижению точек на диаграмме состояний. Во-вторых, он универсален, т.е. применим к смесям совершенно различной конкретной природы.

В этой статье метод неоднородности используется для исследования важного класса квантовых смесей — межбазисных разложений. Межбазисное разложение определяется как соотношение

$$\Psi_b = \sum_a W_{ab} \Phi_a, \quad (1)$$

в котором Ψ_b и Φ_a — собственные функции некомутирующих эрмитовых операторов \hat{b} и \hat{a} , соответствующие собственным значениям b и a . Подчеркнем, что базису $\{\Psi_b\}$ соответствует не одна смесь, а пакет смесей, нумеруемых индексом b , и, следовательно, не одна точка, а множество точек на диаграмме состояний. Примером межбазисного разложения служит ряд Клебша — Гордана [2], разложение Парка — Таргера [3], а также другие аналогичные разложения из теории атома водорода [4] и изотропного осциллятора [5]. Полезность межбазисных разложений состоит в том, что они дают практически единственный систематический метод вычисления встречающихся в приложениях матричных элементов операторов по смешанным базисам.

Обычно матрица W_{ab} — это сложное выражение, и в такой ситуации естественно прибегнуть к наглядным рецептам метода неоднородности. Сказанное относится и к той конкретной модели, которую мы собираемся исследовать в этой статье.

Рассмотрим предложенную впервые Хартманом [6] нерелятивистскую квантовую модель с потенциалом

$$V = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\Lambda}{r^2 \sin^2(\theta)}.$$

Здесь α и Λ — неотрицательные постоянные, а θ — угол между осью Z и радиус-вектором

СОБЛАЗНИТЕЛЬНАЯ
БИБЛИОТЕКА

частицы. В этой модели есть два базиса - полные наборы решений уравнения Шредингера в параболических и в сферических координатах. Эти базисы исследовались в работах [7, 8], а также - с несколькими иными позиций - в работах [9, 10].

В работе [11] было показано, что матрица $W_{ab}(\Lambda)$ для соответствующего межбазисного разложения выражается через обобщенную гипергеометрическую функцию ${}_3F_2$ и в пределе $\Lambda = 0$ переходит в известную матрицу Тартера [3]. Основываясь на этом результате, можно прийти к выводу, что матрица $W_{ab}(\Lambda)$ получается из матрицы $W_{ab}(\Lambda = 0)$ с помощью подстановок

$$n \rightarrow n + \delta_m, \quad l \rightarrow l + \delta_m, \quad |m| \rightarrow |m| + \delta_m,$$

в которых n, l и m - главное, орбитальное и магнитное квантовые числа из теории атома водорода, а $\delta_m = \sqrt{m^2 + 2\Lambda} - |m|$. Таким образом, в модели Хартмана матрица W_{ab} имеет вид

$$W_{n_1 n_2}^{l m}(\Lambda) = \sqrt{\frac{(2l+1+2\delta_m)\Gamma(l+|m|+1+2\delta_m)\Gamma(n_1+|m|+1+\delta_m)\Gamma(n_2+|m|+1+\delta_m)}{n_1!n_2!(l-|m|)!(n-l-1)!\Gamma(n+l+1+2\delta_m)}} \frac{(n-|m|-1)!}{\Gamma(|m|+1+\delta_m)} {}_3F_2 \left\{ \begin{array}{c} -l+|m|, l+|m|+1+2\delta_m, -n_1 \\ |m|+1+\delta_m, |m|+1-n \end{array} \middle| 1 \right\}. \quad (2)$$

Соответственно, суммирование в (2) ведется по целым значениям l от $|m|$ до $n-1$. Индексы n_1 и n_2 - параболические квантовые числа атома водорода [12].

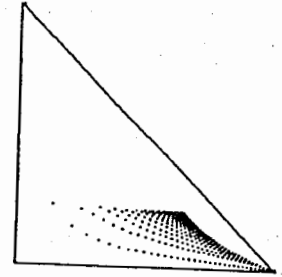
Согласно работе [1] $\bar{\beta} = \bar{a}/a_M$, где $\bar{a} = \sum_a a |W_{ab}|^2$ и через a_M обозначено максимальное значение величины a в сумме (1). Критерий неоднородности дается выражением [1]:

$$\mathcal{L}_b = \sum_{a=a_0}^{[\bar{a}]} \left(1 - \frac{a}{\bar{a}}\right) |W_{ab}|^2. \quad (3)$$

Суммирование в (3) ведется по a от минимального значения a_0 до $[\bar{a}]$, т.е. целой части от \bar{a} .

В модели Хартмана величины $\bar{\beta}$ и \mathcal{L} невозможно вычислить аналитически. Некоторые результаты численных расчетов представлены нами на рисунках 1 - 5. Рисунок 1 дает общее представление о картине неоднородности смеси.

Рис. 1. Атом водорода, $n = 35$.



Выведенная на этом рисунке фигура - это своеобразный портрет случайного вырождения, присущего атому водорода. Расчеты показывают, что в общих чертах эта картина не меняется с ростом n ; увеличивается лишь средняя плотность точек в ней. Сравнение рисунков 2, 3 и 4 дает представление о процессах, происходящих в пакетах смесей с $n = 10$ при изменении параметра Λ .

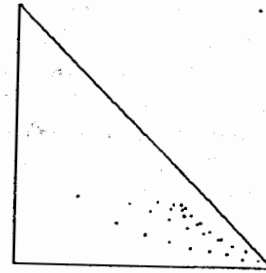


Рис. 2. Атом водорода, $n = 10$.

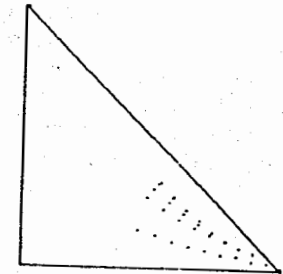


Рис. 3. Модель Хартмана, $n = 10, \Lambda = 100$. Организуются $|m|$ -кластеры. Замечен поворот $|m|$ -кластеров.

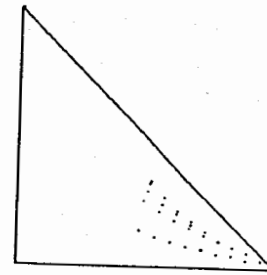


Рис. 4. Модель Хартмана, $n = 10, \Lambda = 500$. Поворот кластеров выражен сильнее, чем на предыдущем рисунке.

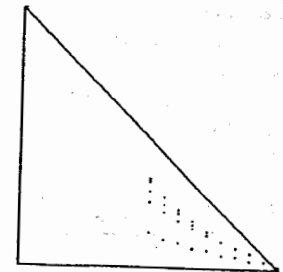


Рис. 5. Модель Хартмана, $n = 10, \Lambda = \infty$. $|m|$ -кластеры переходят в эквидистантно расположенные $\bar{\beta}$ -кластеры.

На этих рисунках изображены картины неоднородности, относящиеся к значениям параметра $\Lambda = 0, 100$ и 500 . Довольно четко вырисовываются три процесса: группировка смесей в кластеры, поворот всех кластеров против часовой стрелки и выпрямление кластеров. Как показывает численный анализ, каждому кластеру соответствует определенное значение $|m|$.

Выясним картину неоднородности в пределе $\Lambda = \infty$. Обозначив матрицу (2) в этом пределе через $W_{ab}^{(\nu)}$ (здесь $a = l - |m|$, $b = n_2$, $\nu = n_1 + n_2$), имеем

$$W_{ab}^{(\nu)} = \frac{2^a}{2^{\frac{\nu}{2}}} \sqrt{\frac{(\nu - a)! b!}{(\nu - b)! a! (b - a)!}} F\left(-a, \nu - a + 1, b - a + 1, \frac{1}{2}\right). \quad (4)$$

Последняя формула позволяет установить окончательный вид картины неоднородности в пределе $\Lambda = \infty$. Для частного случая пакета смесей с $n = 10$ соответствующая информация нанесена на рисунок 5. Из этого рисунка мы видим следующее: (а) все $|m|$ -кластеры выпрямляются и ориентируются в вертикальном направлении, т.е. переходят в кластеры с данными значениями $\bar{\beta}$; (б) расположение $\bar{\beta}$ -кластеров эквидистантно и при фиксированном n зависит лишь от значений, принимаемых величиной $|m|$; (с) при $m = 0$, независимо от значений n , самый левый $\bar{\beta}$ -кластер занимает положение $\bar{\beta} = 1/2$, самому правому (одноточечному) кластеру соответствует значение $|m| = n - 1$; (д) расстояние между соседними $\bar{\beta}$ -кластерами не зависит от $|m|$ и меняется с изменением n (последнее, конечно, не видно на рисунке 5, а следует из сравнения рисунков, относящихся к разным n и к $\Lambda = \infty$, которые мы здесь ради краткости не приводим).

Из свойства эквидистантности следует, что $\bar{\beta}$ является линейной функцией от $|m|$, которая при $m = 0$ и $|m| = n - 1$ равна $1/2$ и 1 соответственно. Все это говорит о том, что

$$\bar{\beta} = \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2(n-1)}. \quad (5)$$

Итак, в модели Хартмана в пределе $\Lambda = \infty$ происходит $\bar{\beta}$ -кластеризация состояний неоднородности.

Формула (5) получена нами из анализа поведения точек на диаграмме состояний, и в этом смысле она носит феноменологический характер. Для выяснения того, что она отражает с позиции теории, воспользуемся следующим представлением для матриц вращений Вигнера [2]:

$$d_{MM'}^j\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{\xi_{MM'}}{p! \sqrt{2^{p+q}}} \sqrt{\frac{(s+p+q)!(s+p)!}{s!(s+q)!}} F\left(-s, s+p+q+1, p+1, \frac{1}{2}\right), \quad (6)$$

в котором $p = |M - M'|$, $q = |M + M'|$, $s = j - (p+q)/2$, а фактор $\xi_{MM'}$ равен единице при $M' \geq M$ и равен $(-1)^{M'-M}$ при $M' < M$. Сравнивая (4) с (6) видим, что

$$W_{ab}^{(\nu)} = \xi_{ab} d_{\frac{\nu}{2}-a, \frac{\nu}{2}-b}^{\frac{\nu}{2}}\left(\frac{\pi}{2}\right).$$

Это представление для матрицы $W_{ab}^{(\nu)}$ полезно тем, что позволяет воспользоваться соотношением

$$d_{MM'}^j\left(\frac{\pi}{2}\right) = (-1)^{j-M'} d_{-M, M'}^j\left(\frac{\pi}{2}\right)$$

и придти к свойству симметрии для матрицы $W_{ab}^{(\nu)}$:

$$W_{ab}^{(\nu)} = (-1)^b W_{\nu-a, b}^{(\nu)}. \quad (7)$$

Как отсюда видно, матрица $|W_{ab}^{(\nu)}|^2$ инвариантна относительно преобразования $a \rightarrow \nu - a$. Это значит, что матрица $|W_{ab}^{(\nu)}|^2$, если ее рассматривать как функцию от концентрации $\beta^{(a)} = a/\nu$, определена на отрезке $[0, 1]$ и симметрична относительно середины этого отрезка. Отсюда следует, что $\bar{\beta}^{(a)} = 1/2$, т.е. $\bar{a} = \nu/2 = (n - |m| - 1)/2$, и потому $\bar{\beta} = \bar{l}/(n-1) = (\bar{a} + |m|)/(n-1)$, что равноценно формуле (5).

Итак, представленные на рисунках процессы и формула (5) являются следствием постепенного выхода системы в режим асимптотической ($\Lambda = \infty$) симметрии (6).

Закончим статью следующим соображением общего характера. Привлечение метода неоднородности к исследованию статистической информации, заложенной в межбазисных разложениях, ценно не только в силу наглядности этого метода. Метод неоднородности - это также инструмент, с помощью которого предсказываются новые результаты. Типичным примером, подтверждающим эвристическую ценность метода неоднородности, служит формула (5). Действительно, вряд ли иначе могла возникнуть сама идея об исследовании необычного для модели Хартмана предела $\Lambda \rightarrow \infty$. Межбазисные разложения, в свою очередь, являются незаменимым полигоном для испытания возможностей метода неоднородности, т.к. именно здесь реализуются одновременно два замечательных свойства: (а) работа ведется не с одной смесью, а сразу с пакетом смесей; (б) смеси снабжены собственным механизмом (в нашей задаче - за счет параметра Λ), способным менять состояние их неоднородности. Как первое, так и второе сильно повышает информативную емкость исследуемой задачи.

Мы благодарны С.И.Виницкому за полезные обсуждения затронутых в этой статье вопросов.

Литература

- [1] И.Луценко, В.Тер-Антонян. ОИЯИ, P2-90-109, Дубна, 1990.
- [2] Д.Варшалович, А.Москалев, В.Херсонский. Квантовая теория углового момента. Ленинград, Наука, 1975.
- [3] D.Park. *Zs.Phys.*, 159,155,1960;
C.Tarter. *J.Math.Phys.*, 11,3192,1970.
- [4] L.Mardoyan, G.Pogosyan, A.Sissakian, V.Ter-Antonyan. *J.Phys A* 16, 711,1983.
- [5] G.Pogosyan, Ya.Smorodinsky, V.Ter-Antonyan. *J.Phys.*, A14,769,1981.
- [6] H.Hartman. *Theor.Chem.Acta* 24,201,1972.
- [7] H.Hartman. *Int.I.of Quant.Chem.* 18,125,1980.
- [8] C.Gerry. *Phys.Lett. A* 118,445,1982.
- [9] M.Kibler, P.Winternitz. *J.Phys.*, A20,4097,1987.
- [10] C.Quisne. *J.Phys.*, A21,3093,1988.
- [11] И.Луценко, Г.Погосян, А.Сисакян, В.Тер-Антонян. *ТМФ*, 83,419,1990.
- [12] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, изд-во Наука, М., 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел

7 февраля 1992 года.