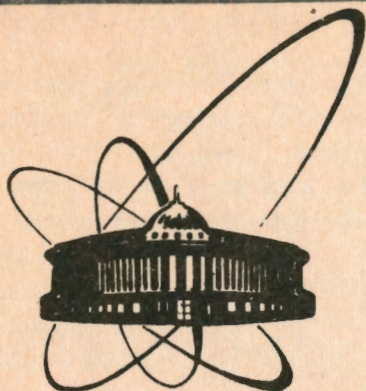


92-514



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P2-92-514

А.Н.Сисакян, В.М.Тер-Антонян*, С.В.Тер-Антонян*

ДВУХЦЕНТРОВЫЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Направлено в журнал «Physics Letters A»

*Ереванский государственный университет

1992

Двухцентровый квантовый осциллятор

Предложена точно решаемая модель двухцентрового квантового осциллятора. Определена зависимость энергетических уровней и волновых функций этой системы от расстояния между центрами.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод Г.Г.Сандуковской

Sissakian A.N., Ter-Antonyan V.M., Ter-Antonyan S.V.

P2-92-514

Two-Center Quantum Oscillator

The exactly solvable model of the two-center quantum oscillator is proposed. The dependence of the energy levels and wave functions of this system on the distance between the centers is determined.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992

Введение. Двухцентровые модели имеют широкую область применений. Они используются в квантовой теории поля (моделирование спонтанного нарушения дискретной симметрии), в квантовой механике (физика двухуровневых систем), в физике высоких энергий (осцилляции нейтральных каонов), в квантовой химии (расщепление двухатомных молекул).

Двухцентровые потенциалы обычно не поддаются точному анализу, т.к. решения соответствующего им уравнения Шредингера не выражаются через известные специальные функции. Вместо этого приходится иметь дело с многочленными рекуррентными соотношениями, из которых невозможно получить замкнутого выражения для волновых функций, а следовательно, невозможно вывести точных уравнений, определяющих спектр энергий.

В настоящей работе предложена модель двухцентрового квантового осциллятора, которая в указанном выше смысле решается точно. Эта модель описывается потенциалом

$$V(x_0, x) = m\omega^2|x^2 - x_0^2|/2, \quad (1)$$

где x_0 изменяется в пределах $0 \leq x < \infty$. Точки $x = \pm x_0$ представляют собой два центра притяжения, отделенных барьером с параметрами $(2x_0, m\omega^2 x_0^2/2)$. Таким образом модель полностью регулируется одним параметром x_0 . Рост параметра x_0 не только увеличивает высоту барьера, но и одновременно отдаляет центры друг от друга. В этом отношении обсуждаемая модель отличается от моделей, в которых двухцентровость реализуется за счет включения в игру добавочного дельтаобразного взаимодействия [1].

Наша цель заключается в выяснении зависимости энергетических уровней и волновых функций двухцентрового квантового осциллятора от параметра x_0 .

Волновые функции. Введем следующие вспомогательные величины: $\eta = (2m\omega/\hbar)^{1/2}x$, $\eta_0 = (2m\omega/\hbar)^{1/2}x_0$, $\varepsilon = E/\hbar\omega$, $\lambda = -\eta_0^2/4 - \varepsilon$, $\mu = \eta_0^2/4 - \varepsilon$. Уравнение Шредингера вне и внутри барьера трансформируется в этих обозначениях в уравнения для функций параболического цилиндра [2]

$$\Psi''_{out} - (\eta^2/4 + \lambda)\Psi_{out} = 0, \quad (2a)$$

$$\Psi''_{in} + (\eta^2/4 - \mu)\Psi_{in} = 0. \quad (2б)$$



Второе уравнение получается из первого заменой $\lambda \rightarrow -i\mu, \eta \rightarrow \eta e^{i\pi/4}$. Согласно [2], фундаментальные решения этих уравнений с данной четностью даются следующими выражениями:

$$y_1(\lambda, \eta) = e^{-\eta^2/4} F(1/4 + \lambda/2; 1/2; \eta^2/2), \quad (3a)$$

$$y_2(\lambda, \eta) = \eta e^{-\eta^2/4} F(3/4 + \lambda/2; 3/2; \eta^2/2), \quad (3b)$$

$$\bar{y}_1(\mu, \eta) = e^{-i\eta^2/4} F(1/4 - i\mu/2; 1/2; i\eta^2/2), \quad (4a)$$

$$\bar{y}_2(\mu, \eta) = \eta e^{-i\eta^2/4} F(3/4 - i\mu/2; 3/2; i\eta^2/2). \quad (4b)$$

Внутри барьера нет никаких граничных условий, и потому там волновые функции имеют вид

$$\Psi_{in}^{(\pm)}(\mu, \eta) = a_{in}^{(\pm)} \bar{y}_k(\mu, \eta). \quad (5)$$

Здесь $a_{in}^{(\pm)}$ - нормировочные константы, а значения $k = 0$ и $k = 1$ относятся к четным и нечетным решениям. Вне барьера должно соблюдаться граничное условие

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} \Psi_{out}(\lambda, \mu) = 0,$$

Функции (3a) и (3b) не удовлетворяют этому условию, однако их линейная комбинация

$$U(\lambda, \eta) = \alpha y_1(\lambda, \eta) \oplus \beta y_2(\lambda, \eta), \quad (6)$$

в которой

$$\alpha = \Gamma(1/4 - \lambda/2) \frac{\cos \pi(1/4 + \lambda/2)}{\pi^{1/2} 2^{\lambda/2} \Gamma(1/4)},$$

$$\beta = \Gamma(3/4 - \lambda/2) \frac{\sin \pi(1/4 + \lambda/2)}{\pi^{1/2} 2^{\lambda/2 - 1/4}}$$

имеет нужное поведение [2]

$$U(\lambda, \eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} e^{-\eta^2/4} \eta^{-\lambda-1/2}.$$

Из функций (6) можно построить четные ($k = 0$) и нечетные ($k = 1$) решения вне барьера:

$$\Psi_{out}^{(\pm)}(\lambda, \eta) = a_{out}^{(\pm)} U(\lambda, |\eta|) (\text{sgn} \eta)^k. \quad (7)$$

Таким образом, внутри и вне барьера волновые функции с данной четностью даются выражениями (5) и (7).

Уровни энергии. Энергетический спектр двухцентрового квантового осциллятора получается сшивкой логарифмических производных решений (5) и (7) в точке $\eta = \eta_0$:

$$\left(\frac{U'(\lambda, \eta)}{U(\lambda, \eta)} \right)_{\eta=\eta_0} = \left(\frac{\bar{y}'_1(\mu, \eta)}{\bar{y}_1(\mu, \eta)} \right)_{\eta=\eta_0},$$

$$\left(\frac{U'(\lambda, \eta)}{U(\lambda, \eta)} \right)_{\eta=\eta_0} = \left(\frac{\bar{y}'_2(\mu, \eta)}{\bar{y}_2(\mu, \eta)} \right)_{\eta=\eta_0}.$$

Первое из этих уравнений относится к четным, а второе - к нечетным уровням. Численный анализ этих уравнений приводит к указанной на рисунке 1 зависимости энергетических уровней от параметра η_0 .

При $\eta_0 = 0$ уровни энергии, как и должно быть, совпадают с уровнями энергии линейного осциллятора. Включение параметра η_0 приводит уровни в движение. Находясь над барьером, они сначала слегка опускаются, а затем начинают расти, но не столь быстро, как высота барьера. С некоторого значения η_0 (своего для каждого уровня) высота барьера настигает уровень и обходит его. С этого "момента" уровень захватывается ямой. Описанная часть графика качественно повторяет поведение термов двухатомных молекул при изменении расстояния между атомами [3]. Дальнейшее увеличение η_0 приводит к конденсации уровней в ямах, их росту и попарному слиянию. При $\eta_0 \geq 6$ мы практически вместо шести начальных уровней имеем три двухкратно вырожденных уровня.

Вблизи центров $\eta = \pm\eta_0$ потенциал (1) трансформируется в две однородные ямы: $V(x_0, x) \cong \eta_0 |\eta \pm \eta_0|/2$. При $\eta_0 \gg 1$ эти ямы достаточно глубоки, и в них захватываются несколько слившихся уровней. Ввиду однородности ям слившиеся уровни должны вести себя при $\eta_0 \gg 1$ как $\epsilon_n \cong n^{2/3} \eta_0^{2/3}$, где число n нумерует слившиеся уровни. Отметим также, что численный анализ условия квантования Бора-Зоммерфельда для потенциала (1) убедил нас в том, что квазиклассическое приближение точно воспроизводит приведенную выше картину энергетических уровней (исключение составляют весьма малые окрестности вокруг точек поворота).

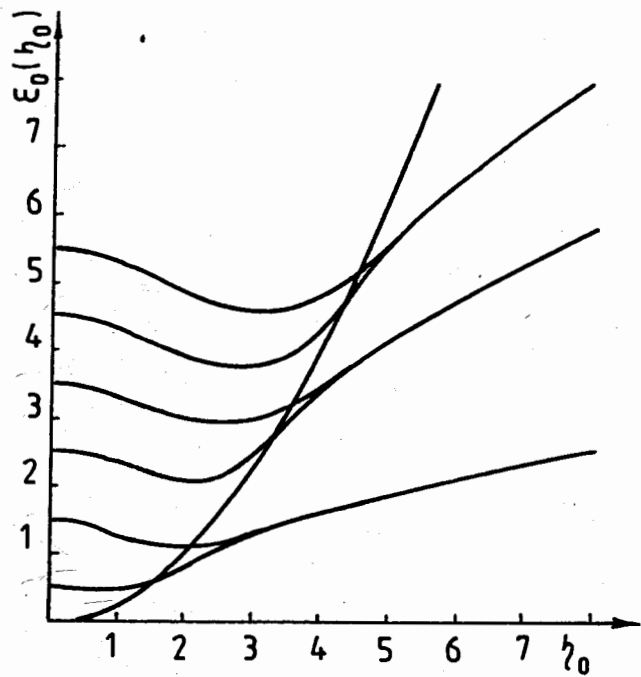


Рис.1. График зависимости высоты барьера и первых шести уровней энергии от параметра η_0 .

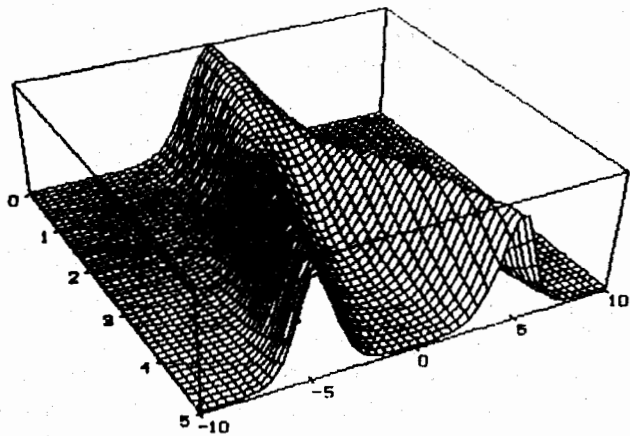


Рис.2. График зависимости волновой функции нулевого уровня от η и η_0 . Здесь $-10 \leq \eta \leq 10$, $0 \leq \eta_0 \leq 5$.

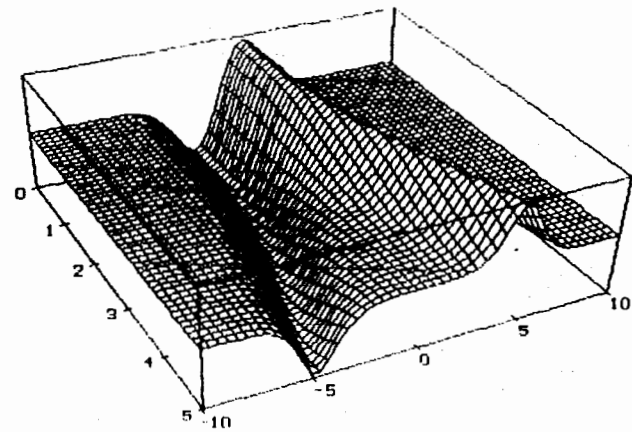


Рис.3. График зависимости волновой функции первого уровня от η и η_0 . Здесь, как и выше, $-10 \leq \eta \leq 10$, $0 \leq \eta_0 \leq 5$.

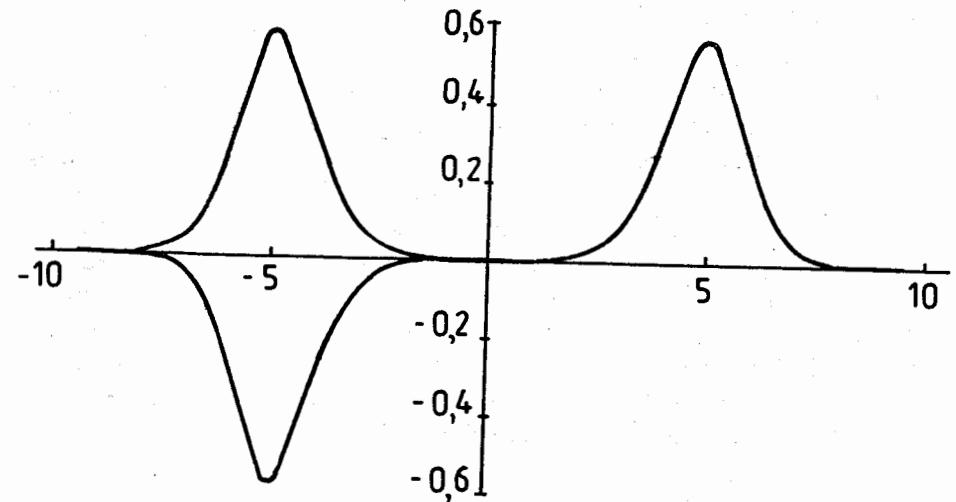


Рис.4. График зависимости волновых функций первых двух уровней от переменной η при $\eta_0 = 5$.

Спонтанное нарушение симметрии. Условие непрерывности волновой функции в точке $\eta = \eta_0$ приводит к следующей связи:

$$a_{in}^{(\pm)} = \frac{U(\lambda, \eta_0)}{\bar{y}_k(\mu, \eta_0)} a_{out}^{(\pm)}.$$

Константы $a_{out}^{(\pm)}$ определяются из условия нормировки и имеют вид

$$a_{out}^{(\pm)} = 2^{-1/2} \left\{ \left| \frac{U(\lambda, \eta_0)}{\bar{y}_k(\mu, \eta_0)} \right|^2 \int_0^{\eta_0} |\bar{y}_k(\mu, \eta)|^2 d\eta + \int_{\eta_0}^{\infty} |U(\lambda, \eta)|^2 d\eta \right\}^{-1/2}.$$

Эти формулы вместе с формулами (3), (4), (5) и (7) полностью определяют поведение волновых функций от переменной η и параметра η_0 . Следующие два графика дают представление об указанных зависимостях (рис.2,3).

Мы видим, что по мере роста параметра η_0 волновые функции первых двух уровней постепенно локализируются вне барьера и при $\eta_0 \geq 6$ вокруг центров $\eta = \pm\eta_0$ образуются две изолированные друг от друга ямы. Одновременное изображение передних профилей двух последних графиков дано на рисунке 4.

Из него видно, что модули волновых функций нулевого и первого уровней совпадают уже при $\eta_0 = 5$. Однако было бы наивно думать, что в пределе $\eta_0 = \infty$ именно эти волновые функции будут описывать двукратно вырожденный уровень, образованный слиянием первых двух уровней. На самом деле, в указанном пределе система расщепляется на две изолированные подсистемы: частица, захватившись одним из центров, уже не может вернуться ко второму. Говоря иначе, в пределе $\eta_0 = \infty$ реализуется спонтанное нарушение симметрии: на смену волновым функциям $\Psi^+(\eta)$ и $\Psi^-(\eta)$ "мгновенно" приходят волновые функции $\Psi_L = (\Psi^+ - \Psi^-)/2^{1/2}$ и $\Psi_R = (\Psi^+ + \Psi^-)/2^{1/2}$, описывающие состояние частицы в левой и правой яме. Следя за поведением системы в обратном порядке, т.е. от $\eta_0 = \infty$ до $\eta_0 = 0$, мы обнаруживаем, что точку $\eta_0 = \infty$ можно интерпретировать как предельную точку бифуркации, т.к. в ней происходит расщепление уровня и перестройка симметрии. Как убеждают вычисления, этот сценарий повторяется и для других, более высоких, уровней энергии и соответствующих им волновых функций.

Мы благодарны И.В.Луценко и Л.Г.Мардоян за интересные обсуждения.

Литература

1. M.Avakian, G.Pogosyan, A.Sissakian, V.Ter-Antonyan. Phys.Lett. A124, 233, 1987.
2. Handbook of Mathematical Functions. Ed. by Abramowitz and A.Stegan. (Dover, 1965).
- 3.L.D.Landau, E.M.Lifshitz. Quantum Mechanics. Nauka, Moscow, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 декабря 1992 года.