объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-88-662

Л.Г.Заставенко, Б.Н.Захарьев

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ О ДВИЖЕНИИ ПО ПЕРЕМЕННОЙ *a*, НУМЕРУЮЩЕЙ КАНАЛЫ

Направлено в журнал "Physical Review A: General Physics"

1988

Введение

Уравнения движения для многих сложных квантовых систем удобно сводить к связанным одномерным уравнениям Шредингера с потенциальной матрицей $V_{\alpha,\alpha'}(x)$ и "каналовыми функциями" Ψ_α. Здесь индексы α представляют собой переменные, сопряженные к пространственным переменным исходной многомерной волновой функции, от которых удалось "избавиться" с помощью обобщенного преобразования Фурье (оставив единственную- x). Выигрыш в вычислительной простоте (дискретность значений α, возможность ограничиться конечным их числом) сопровождается, однако, потерей физической прозрачности формализма. Нам труднее представить себе закономерности поведения каналовых функций в зависимости от α, чем форму волновой функции в обычном пространстве.

В данной работе показано, что наглядность поведения функций в α-пространстве может быть в значительной степени восстановлена. Можно представить себе движение по α : колебания, стоячие волны, вызывающие резонансы рассеяния, распространение пакетов в нестационарной постановке задачи. Ключевым моментом здесь является "выделение" оператора кинетической энергии α-движения из матрицы взаимодействия $V_{\alpha,\beta}$. В результате мы получаем привычный гамильтониан и по новой переменной. Если к тому же выбрать модельную потенциальную матрицу, допускающую разделение координат x и α, то можно получить в чистом виде каналовую составляющую волновой функции и спектра (связанных состояний и резонансов).

Такой же подход неожиданно оказался возможным и к совсем другим задачам : о движении частицы в периодическом поле. Они рассмотрены в конце работы.

Модель, допускающая разделение переменных x и α

Сначала нужно уточнить, что мы будем понимать под термином "Каналы". При описании сложных многомерных, многочастичных квантовых систем бывает удобно разлагать волновую функцию $\Psi(x,\xi)$, зависящую от нескольких переменных по известным базисным функциям $\Phi_\alpha(\xi)$, где ξ

обозначает все переменные системы, кроме одной "x", специально выделенной (разложение по каналам α):

$$\Psi(x,\xi) = \sum_\alpha \Psi_\alpha(x)\Phi_\alpha(\xi) . \qquad (1)$$

Подставляя (1) в уравнение Шредингера и проецируя последнее на разные базисные функции $\Phi(\xi)$, получим систему одномерных связанных уравнений Шредингера для коэффициентов Ψ_α разложения (1):

$$-d^2/dx^2\Psi_\alpha(x) + \sum V_{\alpha\beta}(x)\Psi_\alpha(x) = (E - \varepsilon_\alpha)\Psi_\alpha(x) . \qquad (2)$$

В системе (2) волны могут двигаться как по пространственной переменной x, так и переходить из одного канала α в другие каналы β. Решать одномерные системы типа (2) на ЭВМ обычно бывает проще, чем исходное дифференциальное уравнение Шредингера в частных производных для $\Psi(x,\xi)$. Уже сейчас существенная доля работ в ядерной физике связана с решением многоканальных систем, а в будущем тенденция перехода к таким расчетам только усилится.

В то же время физическая интуиция относительно влияния матрицы взаимодействия $V_{\alpha\beta}(x)$ на наблюдаемые развита пока очень слабо. Системы (2) остаются как бы "черными ящиками": приходится закладывать исходные данные в ЭВМ и получать из нее численные результаты, практически не представляя себе качественно связь $V_{\alpha\beta}(x)$ со спектральными параметрами или данными рассеяния.

Заглянуть в черный ящик позволяют точно решаемые модели. Простейшие из них - это δ-образные и постоянные матрицы взаимодействия. Класс таких решаемых моделей образуют матрицы баргмановского типа (см. книгу Б.Н.Захарьева и А.А.Сузько [1], гл.5).

В данной работе рассматривается новый подход к построению точно решаемых моделей, связанных с разделением движения по пространственной "x" и каналовой "α" переменным.

Как теперь стало ясно, трудность перенесения наших привычных представлений о движении квантовых волн в x-пространстве на движение по α состоит в отсутствии в многоканальном операторе Шредингера оператора кинетической энергии $\hat T_{ch}$ перемещения по каналам. Поскольку переменная α дискретная, построим такой оператор как конечно-разностный аналог производной второго порядка по α (с шагом Δ):

$$\hat T_{ch}\Psi_\alpha = - \frac{\Psi_{\alpha+1} - 2\Psi_\alpha + \Psi_{\alpha-1}}{\Delta^2} . \qquad (3)$$

Оказывается, можно считать, что $\hat T_{ch}$ содержится в матрице взаимодействия $V_{\alpha\beta}$. Выделим его, прибавляя и вычитая соответствующие члены в (2) и включая ε_α в потенциальную сумму:

$$- d^2/dx^2\Psi_\alpha(x) - (\Psi_{\alpha+1} - 2\Psi_\alpha + \Psi_{\alpha-1})/\Delta^2 + \sum_\beta \tilde V_{\alpha\beta}(x)\Psi_\beta(x) = E\,\Psi_\alpha(x), \qquad (4)$$

где новая эффективная матрица взаимодействия $\tilde V_{\alpha\beta}(x)$ имеет вид:

$$\tilde V_{\alpha\beta}(x) = V_{\alpha\beta}(x) + (\delta_{\alpha+1,\beta} - 2\delta_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha-1,\beta}) / \Delta^2 + \delta_{\alpha\beta}\varepsilon_\alpha . \qquad (5)$$

Воспользуемся теперь свободой выбора матрицы $V_{\alpha\beta}(x)$, и построим простые точно решаемые модели, в которых бы отделялось движение по каналовой переменной α. Можно, например, специальным подбором $V_{\alpha\beta}(x)$ получить $\tilde V_{\alpha\beta}(x)$ в виде прямоугольной ямы:

$$\tilde V_{\alpha\beta}(x) = \delta_{\alpha\beta}V_0 \ ; \text{ при } \ 0 < x < R; \ 0 < \alpha,\beta < M \qquad (6)$$

с дополнительным граничным условием, отвечающим не только запирающей бесконечной яме, но и R-матричной теории рассеяния:

$$\Psi_\alpha(x) = 0 \ ; \text{ при } x \le 0, \ x \ge R, \ \alpha \le 0, \ \alpha > M . \qquad (7)$$

Здесь выбором конечного числа M мы ограничили количество связанных каналов.

Для того, чтобы выполнялось условие прямоугольности (6), матрица взаимодействия должна быть тридиагональной (см.(5),(6)):

$$V_{\alpha\beta}(x) = \delta_{\alpha\beta}V_0 - (\delta_{\alpha+1,\beta} - 2\delta_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha-1,\beta})/\Delta^2 - \delta_{\alpha\beta}\varepsilon_\alpha . \qquad (8)$$

Из этой формулы следует важный качественный вывод: ширина ямы $L = M\Delta$ по переменной α тем уже, чем сильнее связь каналов (в выражение для L шаг Δ входит в виде множителя, а в потенциале (8) он стоит в знаменателе и в квадрате).

В двумерном дифференциально-разностном уравнении (4) с матрицей взаимодействия из (8) и граничными условиями (7) разделяются переменные x и α $(\Psi_\alpha(x) = \Psi_n(x)\chi_{\alpha m})$:

$$- d^2/dx^2\Psi_n(x) + V_0\Psi_n(x) = \varepsilon_n\Psi_n(x); \qquad \Psi_n(0) = 0, \ \Psi_n(R) = 0, \qquad (9)$$

$$- (\chi_{\alpha+1,m} - 2\chi_{\alpha m} + \chi_{\alpha-1,m}) = \Delta^2\lambda_m\chi_{\alpha m}; \qquad \chi_{om} = 0, \ \chi_{M+1,m} = 0. \qquad (10)$$

Уравнение (9) имеет обычный спектр бесконечной прямоугольной ямы: $\varepsilon_n = V_0 + n^2\pi^2/R^2$, а разностная задача (10) на собственные значения в прямоугольной яме по переменной α имеет M уровней энергии:

$$\lambda_m = [1 - \cos(\pi m/M)]/\Delta^2,$$

которые лишь при $m \ll M$ близки к уровням соответствующей задачи с непрерывной α :

$$\lambda_m \xrightarrow{m \ll M} m^2\pi^2/L^2, \text{где } L = M\Delta^2.$$

Полный спектр системы представляет собой суперпозицию уровней энергии движения по переменным x и α:

$$E_{nm} = \varepsilon_n + \lambda_m . \qquad (11)$$

Меняя ширины ям R и L, можно сжимать и растягивать "лестницы" уровней ε_n и λ_m ; например, увеличивая L , мы получим над каждым уровнем колебаний по x "полосу" возбуждений колебаний по α. Напомним, кстати, специфику конечно-разностного спектра прямоугольной ямы. В отличие от дифференциальной задачи,с ростом энергии возбуждения расстояние между уровнями увеличивается лишь до $m = M/2$, а выше уровни начинают сгущаться (спектр симметричен относительно своей середины).

В R-матричной теории рассеяния указанным уровням соответствуют резонансы (только там обычно используют несколько иные граничные условия на собственные функции,- см. книгу Лейна и Томаса [2]). Идею о возможности возникновения резонансов, отвечающих α-колебаниям, впервые высказал А.Базь[3], он же сделал попытку построить точно решаемую модель с такими колебаниями. Однако предложенная им матрица взаимодействия не допускала разделения переменных x и α,и в гамильтониане не выделялся оператор кинетической энергии α-движения (см.[3]). Это мешало ясности физической картины. Ряд работ,посвященных α-резонансам,был выполнен Симоновым и др. [4] (cc-coupled channel-резонансы). В этих работах также не разделялись переменные. В одной из рассмотренных в [4] моделей диагональные матричные элементы матрицы взаимодействия полагались равными нулю, а оставлялись лишь связи каналов (они выбирались постоянными), но это не устраняло колебаний по x: волны по x так же хорошо отражаются от ступенек в недиагональных матричных элементах, как и в диагональных. Так что с педагогической точки зрения предпочтительнее вводить понятие "каналовых" резонансов, разделяя переменные конфигурационного и каналового пространств.

Ясно, что на случай каналовой переменной обобщаются и другие точно решаемые модели, помимо прямоугольной ямы (см.[1]). Можно рассмотреть также случаи многих каналовых переменных ,континуума каналов, нелокальной связи по α (например,сепарабельных по α матриц взаимодействия). В дальнейшем мы предполагаем рассмотреть и реакции с перераспределением частиц.

Выше было показано, как из потенциальной матрицы $V_{\alpha\beta}$ выделяется оператор второй разностной производной (с тридиагональной матрицей). Разностным производным более высокого порядка (4-го,6-го и т.д.) отвечают матрицы с бо́льшим числом диагоналей (5, 7 и т.д.). Если оператору (кинетической энергии) второго порядка отвечают два линейно-независимых решения, например, волны, бегущие в противоположных направлениях, то оператору четвертого порядка - уже четыре независимых волны (например, $\exp(\pm ik_1 n);\exp(\pm ik_2 n)$ для "свободного движения", причем связь волновых чисел k_1, k_2 с энергией E иная, чем в случае обычного уравнения Шредингера, см.[1]). Аналогично для 6-го порядка - шесть волн и т.д. Так что

потенциальной матрице общего вида со всеми M отличными от нуля диагоналями, соответствует сложная система волн, распространяющихся по "каналовому измерению". Для матриц, зависящих от x, переменные α и x не разделяются и происходит смешивание колебаний по α и x.

Еще одним наглядным модельным примером участия связи каналов в формировании спектра системы может служить разностный (по x: $x_n = n\cdot\Delta$) аналог многоканальных уравнений (2):

$$-[\Psi_\alpha(n+1) - 2\Psi_\alpha(n) + \Psi_\alpha(n-1)]/\Delta^2 + \sum_\beta V_{\alpha\beta}(n)\Psi_\beta(n) = (E - \varepsilon_\alpha)\Psi_\alpha(n) \qquad (2')$$

Если поставить однородные граничные условия $\Psi_\alpha(0) = 0; \Psi_\alpha(N+1) = 0$, то получим M×N однородных алгебраических уравнений на MxN неизвестных $\Psi_\alpha(n)$; $\alpha = 1,2, \ldots M$; $n = 1,2,\ldots N$, имеющих решения при NxM собственных значениях энергии (то есть спектр формируется из N колебательных состояний по x_n и M - по α. Удобство этой модели со всеми дискретными переменными, принимающими конечное число значений, состоит в возможности пересчитать точки спектра (связанные состояния и резонансы) и увидеть, как их общее число зависит от числа каналов.

Движение из канала в канал в специальном случае одинаковых каналов непосредственно связано с хорошо известным явлением снятия вырождения за счет включения связи между каналами. Действительно, пусть имеется M несвязанных уравнений Шредингера с одинаковыми потенциальными ямами и, следовательно, с одинаковыми уровнями. Если рассматривать эти уравнения как единую систему, то уровни ее спектра будут M-кратно вырождены. Включив же связь каналов (вводя недиагональные элементы в потенциальную матрицу), мы расщепим уровни, что можно интерпретировать как появление полосы колебательных возбуждений по каналовой переменной α.

Задача Блоха (полосатый спектр)

С точки зрения предложенного подхода, оказывается, можно рассмотреть и движение частицы в периодическом внешнем потенциале. Введем эквивалентную задачу о движении в двумерной (α,x)-полосе. Для этого запишем сначала уравнение для движения частицы на одном из периодических интервалов (обозначим его номером $\alpha = 0, \pm1, \pm2\ldots$):

$$-d^2/dx^2\,\Psi_\alpha(x) + V(x)\Psi_\alpha(x) = E\,\Psi_\alpha(x);\ 0 \le x \le R; \qquad (12)$$

$$\Psi_\alpha(x) = \exp(i\gamma)\,\Psi_{\alpha+1}(x); \qquad (13)$$

$$\Psi_\alpha(0) = \exp(i\gamma)\Psi_\alpha(R);\ \Psi'_\alpha(0) = \exp(i\gamma)\Psi'_\alpha(R). \qquad (14)$$

Прибавим и вычтем теперь в левой части уравнения Шредингера (12) разностный оператор кинетической энергии типа (3)

$$-d^2/dx^2\Psi_\alpha(x) + \hat{T}_{ch}\Psi_\alpha(x) + [\Psi_{\alpha+1}(x) - 2\Psi_\alpha(x) + \Psi_{\alpha-1}(x)]/\Delta^2 + V(x)\Psi_\alpha(x) = E\Psi_\alpha(x),$$

которое перепишем, заменяя $\Psi_{\alpha+1}$ на Ψ_α с помощью формулы (13):

$$-d^2/dx^2\Psi_\alpha(x) + \hat{T}_{ch}\Psi_\alpha(x) + \tilde{V}(x)\Psi_\alpha(x) = E\Psi_\alpha(x), \qquad (15)$$

где новый эффективный потенциал $\tilde{V}$ имеет вид:

$$\tilde{V}(x) = V(x) + [\exp(-i\gamma) - 2 + \exp(i\gamma)]/\Delta^2. \qquad (16)$$

Уравнение (15) допускает разделение переменных x и α. В результате получаем две одномерных задачи: одну - Штурма-Лиувилля на конечном отрезке длиной R с однородными граничными условиями(14), а другую для свободного движения по дискретной переменной α, описываемого разностным уравнением второго порядка: ($\Psi_{\alpha n\varepsilon}(x) = \Psi_n(x)\chi_{\alpha\varepsilon}$);

$$-d^2/dx^2\Psi_n(x) + \tilde{V}(x)\Psi_n(x) = \varepsilon_n\Psi_n(x) \qquad (17)$$

$$\Psi_n(0) = \exp(i\gamma)\Psi_n(R), \quad \Psi_n'(0) = \exp(i\gamma)\Psi_n'(R)$$

$$-(\chi_{\alpha+1,\lambda} - 2\chi_{\alpha\lambda} + \chi_{\alpha-1,\lambda})/\Delta^2 = \lambda\chi_{\alpha\lambda}, \quad \lambda = (1-\cos\gamma)/\Delta^2. \qquad (18)$$

Спектр задачи (17) с граничными условиями, отвечающими (14), похож на дискретный спектр бесконечной прямоугольной ямы, а (18) представляет собой разностный аналог уравнения Шредингера для свободного движения. Такому уравнению соответствует непрерывный спектр, но лишь на ограниченном интервале (разрешенная энергетическая полоса).

Хотя предложенный способ изложения задачи Блока эквивалентен по физической сути обычному ее описанию, но педагогически предпочтительнее разделить для вида движения вдоль одной оси x: колебания внутри одного периода и "движение по периодам", чтобы они не путались, и сопоставить каждому более простые уравнения.

Потенциал, меняющийся периодически со временем.

Обратимся теперь к нестационарной задаче:

$$i\,d/dt\,\Psi(x,t) = [-d^2/dx^2 + V(x,t)]\Psi(x,t), \qquad (20)$$

где V меняется со временем периодически с периодом T :

$$V(x,t) = V(x,t+T). \qquad (20')$$

Рассмотрим установившийся режим, когда волновая функция в разные периоды, но в одной и той же точке отличается лишь на фазовый множитель:

$$\Psi(x,t) = \exp(\pm i\gamma)\Psi(x,t\pm T). \qquad (21)$$

Введем новую переменную α, нумерующую периоды, и рассмотрим движение волн в трехмерном пространстве (x,t,α) - задачу,

эквивалентную исходной (20),(20'). Пусть по x движение ограничено бесконечными потенциальными стенками в точках x = 0; R, а по t зададим однородное граничное условие, соответствующее (21):

$$\Psi_\alpha(x,t) = \exp(\pm i\gamma)\Psi_{\alpha\pm1}(x,t). \qquad (22)$$

Как и в предыдущем параграфе, можно отделить свободное движение по переменной α (см(17):

$$\Psi_\alpha(x,t) = \Psi(x,t)\chi_\alpha \qquad (23)$$

и отдельно решить задачу на собственные значения в прямоугольнике $0 \le x \le R;\ 0 \le t \le T$:

$$[-i\,d/dt - d^2/dx^2 + V(x,t) + 2(\cos\gamma - 1)/\Delta^2]\Psi_n(x,t) = \varepsilon_n\Psi_n(x,t).$$

Заключение

Один из авторов (Б.З.) выражает благодарность И.Роттер за дискуссии, стимулировавшие появление идеи данной работы, о природе резонансов в многоканальных системах, а так же В.И.Загребаеву, обратившему наше внимание на возможность применения представления о движении по переменной каналов α к проблеме трения при столкновении тяжелых ионов[6].

Литература

1. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. Энергоатомиздат М, 1985.
2. Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях М.ИЛ, 1960.
3. Базь А.И. ЖЭТФ, 70, 397, 1976.
   Базь А.И., Жуков М.В. ЯФ, 16, 60; 958, 1972.
   Базь А.И., Данилин Б.В. ЯФ, 29, 1489, 1979.
4. Badalyan A.M., Kok L.P., Polikarpov M.I., Simonov Yu.A. Resonances in Coupled Channels in Nuclear and Particle Physics. Univ. Groningen. 1981.
5. Rotter I. et al. ЭЧАЯ 1988; Phys. Rev. C32, p.1742, 1985
6. Загребаев В.И.. Сб. Элементарные процессы при столкновении атомных и молекулярных частиц. Изд. ЧГУ. Чебоксары 1987.
7. Heller E.J., Yamani H.A.-Phys. Rev. A9, N 3, p.1201-1209

Рукопись поступила в издательский отдел
6 сентября 1988 года.