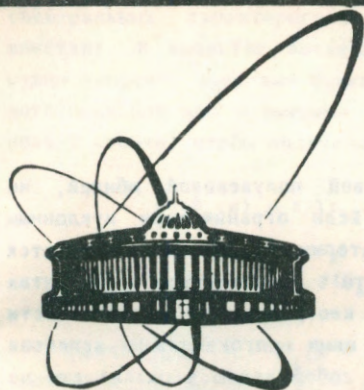


89-287



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-89-287



Б.Н.Захарьев, Е.Б.Плеханов

ИЛЛЮСТРАЦИИ ИЗ КОЛЛЕКЦИИ
"КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА В КАРТИНКАХ"

Направлено в Оргкомитет Международной
конференции "Few Body XII", Ванкувер, Канада,
июль 1989 г.

1989

1. ВВОДНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Квантовая механика уже отметила свой полувековой юбилей, но интенсивность ее развития не убывает. Если ограничиться нуклонным уровнем структуры, то большая часть материи вокруг нас поддается нерелятивистскому описанию, так что перспективы развития квантово-механического подхода практически неограниченные. В особенности это касается многочастичных и связанных с ними многоканальных аспектов теории. То, что уже выяснено, представляет собой каплю в океане еще не освоенного, хотя уже раскрытые закономерности привели к фантастическим прикладным результатам.

Лавинообразное накопление информации в области квантовой физики требует новых форм ее усвоения. Примером отклика на такое требование может служить "Книга картинок из квантовой механики" Бранда и Дамена^[1]. Можно предложить много других поучительных иллюстраций квантовых закономерностей (один из авторов данной работы сам еще раньше намеревался написать подобную книгу, правда, с иными картинками). Ряд интересных квантовых картинок мы уже помещали в книгах^[2,3]. Знакомство с новыми такими примерами - эффективная форма развития нашей физической интуиции.

В этой работе мы предпримем еще один шаг, публикуя новые материалы, проясняющие качественные аспекты поведения квантовых систем. Поможет нам здесь формализм обратной задачи, дающий различные классы точно решаемых моделей^[3]. Чтобы облегчить усвоение закономерностей, отраженных в отобранных иллюстрациях, они сопровождаются нашими комментариями.

2. СВЯЗ ДАННЫХ РАССЕЯНИЯ И / ИЛИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ С ПОТЕНЦИАЛАМИ

Подход обратной задачи замечателен тем, что позволяет посмотреть с другой стороны на связь сил с физическими характеристиками систем, в которых они действуют. Появляется возможность конструировать системы с требуемыми свойствами, если только не выходить за рамки допустимых спектральных параметров и данных рассеяния.

Возьмем бесконечную прямоугольную потенциальную яму с шириной "а" и посмотрим, как она будет деформироваться при изменениях ее

спектральных характеристик: уровней энергии E_λ и нормировочных констант. В качестве последних можно выбрать числа γ_λ , на которые нужно умножить волновые функции $\phi(E_\lambda, x)$, обращающиеся в нуль у стенок потенциальной ямы и имеющие модуль производной, равный 1, например, у правой стенки, чтобы полученная функция была нормирована на единицу:

$$\phi'(E_\lambda, a) = \pm 1; \quad \phi(E_\lambda, 0) = \phi(E_\lambda, a) = 0; \quad (1)$$

$$\psi_\lambda(x) = \gamma_\lambda \phi(E_\lambda, x); \quad \int_0^a |\psi_\lambda(x)|^2 dx = 1.$$

Величины $\gamma_\lambda = -\psi_\lambda(x=a)$ являются амплитудами приведенных ширин состояний с энергией E_λ и представляют собой важные спектральные характеристики. Могут быть, правда, и другие способы определения приведенных ширин (см., например,^[3]).

Набор $(E_\lambda, \gamma_\lambda)$ полностью задает форму потенциала, в данном случае $V(0 \leq x \leq a) = \text{const} = 0$. Рассмотрим, как форма потенциала зависит от вариаций этих параметров (рис.1)^[4].

Будем в бесконечном наборе $(E_\lambda, \gamma_\lambda)$ менять только одну нормировку γ_1 основного состояния. Потребуем, чтобы $\psi_1(x)$ круче спадала по модулю у стенки $x = a$. Ряд таких собственных функций изображен на рис.1б^[4]. Соответствующие потенциалы см. на рис.1а. Качественно можно объяснить, почему именно так отреагировала форма потенциала на увеличение крутизны функции $\psi_1(x)$ вблизи $x = a$. Это ускорение роста $\psi_1(x)$ при удалении от $x = a$ должно быть скомпенсировано более быстрым переходом к спадающему, чтобы волновая функция основного состояния осталась нормированной на 1. Как раз углубление потенциала вблизи $x = a$ и обеспечивает такое поведение $\psi_1(x)$ (чем глубже дно потенциала под данным уровнем, тем выше локальная частота осцилляций соответствующей собственной функции). Но дальше нужно заставить функцию, не меняя знака -узлы у основного состояния запрещены -спуститься к нулю в точке $x = a$. Это достигается отталкивающей частью добавки к исходному потенциалу в левой части ямы: под барьером функция существенно меньше невозмущенной. В то же время отталкивающая и притягивающая части возмущения потенциала взаимно компенсируют свое влияние на уровни энергии: в яме с искаженным дном они остаются такими же, как и в бесконечной прямоугольной яме. Волновые функции возбужденных состояний подстраиваются под новую форму потенциала, но так, чтобы $\psi'_\lambda(a)$ оставались неизменными, см. рис.1в, где изображена вторая собственная функция (при разных значениях параметра γ_1 функции у правого края сливаются в одну линию). Неожиданным оказалось сохранение и величин $\psi'_\lambda(0)$ (слияние $\psi_2(x)$ с разными γ_1 и у левого края ямы на рис.1в,

то же оказывается верным и для более высоких возбужденных состояний, как видно из формулы (2.58) книги^[31]. По-видимому, здесь проявляется некоторая дополнительная симметрия используемой баргмановской модели.

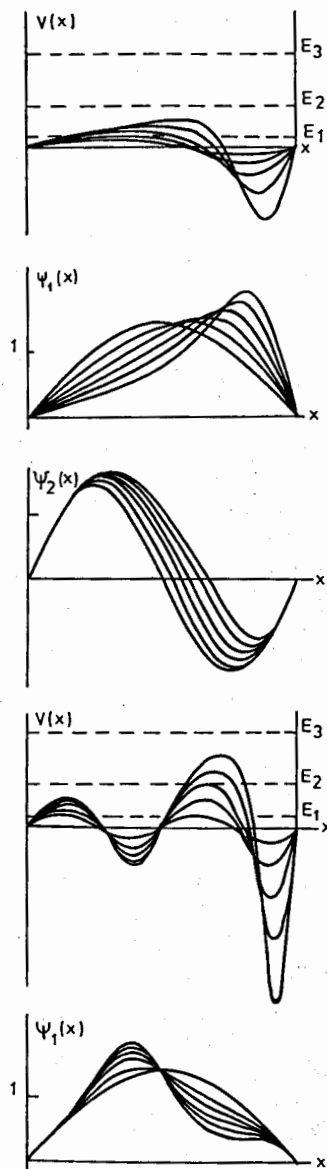


Рис.1. Изменение формы потенциала (рис. а, г, ж) и собственных волновых функций $\psi_\lambda(x)$ (рис. б, в, д, е) при вариации γ_λ - значений производных ψ'_λ у стенки бесконечной ямы (а-д) или в ее центре (ж)^[4]. а) Деформация дна бесконечной прямоугольной ямы при увеличении наклона функции $\psi_1(x)$ основного состояния у правой стенки. Все уровни E_λ и $\gamma_{\lambda \neq 1}$ остаются неизменными. б) волновые функции ψ_1 основных состояний, отвечающих потенциалам на рис.1а.

в) Волновые функции ψ_2 первых возбужденных состояний в потенциалах, изображенных на рис.1а.

г) Деформация потенциала при изменении производной γ_2 собственной функции ψ_2 у правого края ямы (уровни энергии E_λ и $\gamma_{\lambda \neq 2}$ не меняются).

д) Волновые функции ψ_1 основных состояний, отвечающих потенциалам на рис.1г.

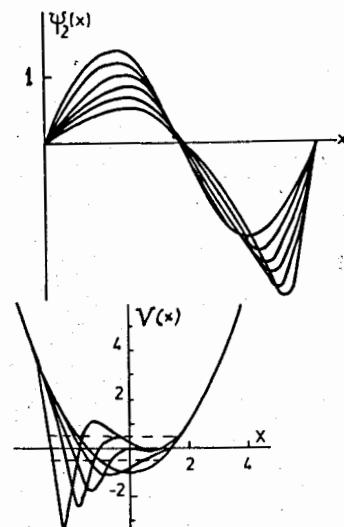


Рис.1

е) Волновые функции ψ_2 первых возбужденных состояний, отвечающих потенциалам на рис.1г.

ж) Деформация осцилляторной ямы при изменении производной функции основного состояния в точке $x = 0$.

Посмотрим теперь, как реагируют потенциал и функции на вариации нормировочной константы γ_2 второго состояния, см. рис.1г, д, е^[4]. Как и в случае вариации γ_1 , потенциал углубляется у правого края ямы с ростом γ_2 (рис.1г), но сильнее, чем на рис.1а. Последнее объясняется тем, что требуется более мощное возмущение потенциала, чтобы деформировать функцию состояния с большей энергией. Для компенсации этого сильного притяжения необходим и более высокий отталкивающий барьер, возникающий слева от углубления. Небольшое углубление и барьер в левой половине ямы нужны, по-видимому, для того, чтобы функция $\psi_1(x)$ (рис.1д) успела закончить колебание и пришла к левой стенке с нулевым значением (и почему-то с неизменным наклоном). Не ясно еще, почему функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ при всех значениях γ_2 проходят через одну точку в центре ямы.

интересно сопоставить серию спектрально- эквивалентных потенциалов для бесконечной прямоугольной ямы (на рис.1а) с такой же серией для осциллятора (рис.1ж)^[5]. Только в последнем случае меняется производная собственной функции не на краю ямы, а в ее центре.

Возьмем теперь для γ_1 значение, отвечающее наиболее возмущенному потенциалу на рис.1а, и будем увеличивать γ_2 . Возмущение прямоугольной потенциальной ямы получается (см. рис.2б) как "сложение" возмущений потенциала, изображенных на рис.1а и 1г. Если же менять не γ_2 , а γ_3 , то получим потенциалы рисунка 2г: на максимальное возмущение на рис.1а накладываются колебания большей частоты (из-за вариации спектрального параметра более высокого уровня).

интересно, не позволит ли лучше понять рассмотренное выше "сложение" возмущений теория Колкунова^[6], устанавливающая связь теории

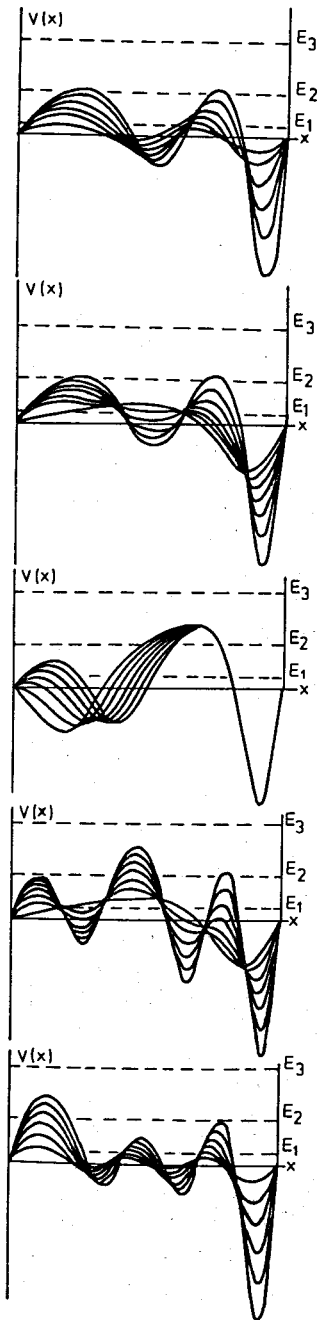


Рис.2. Деформация бесконечной прямоугольной потенциальной ямы при одновременном изменении нескольких параметров γ_λ (двух на рис.а-г и трех на рис.д) [4].

а) Величина γ_1 зафиксирована отличной от невозмущенной, а γ_2 варьируется.

б) Величина γ_1 зафиксирована равной тому значению, которое отвечает максимальной деформации ямы на рис.1а, а γ_2 увеличивается.

в) Зафиксирована γ_2 , как у одного из потенциалов на рис.1г, а γ_1 уменьшается.

г) Зафиксирована γ_1 , как у потенциала с максимальной деформацией на рис.1а, а увеличивается γ_3 .

д) Увеличиваются вместе $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$.

относительности с квантовой механикой (оказывается, как константа скорости света c , так и постоянная Планка \hbar задают кривизны пространств Лобачевского со специфическими правилами сложения скоростей и фаз).

Посмотрим теперь, как меняется потенциал при сдвигах положений уровней. На рис.3а показана деформация дна потенциальной ямы, когда уровень основного состояния поднимается к первому возбужденному. Видно формирование у стенок двух симметричных углублений, отделенных растущим центральным барьером. Рис.3б демонстрирует деформацию волновой функции основного состояния: она постепенно расщепляется на два состояния в отдельных ямках.

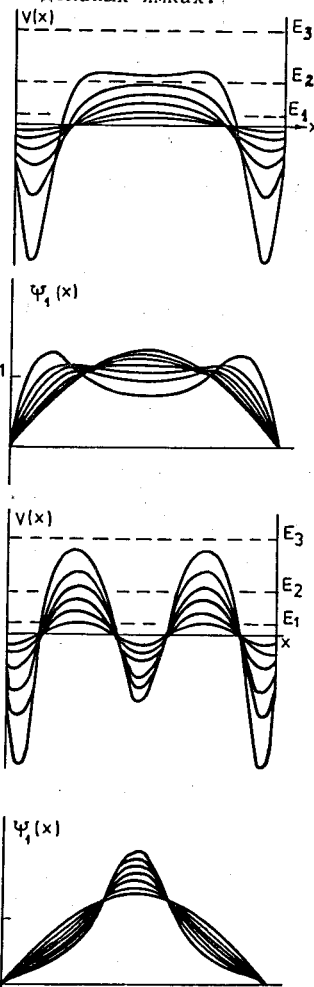


Рис.3. Изменение формы прямоугольной потенциальной ямы (а,в) и волновых функций (б,г) при сдвигах положений энергетических уровней E_λ [4].

а) Деформация потенциала при подъеме уровня основного состояния E_1 к первому возбужденному E_2 (ср.с рис. 4).

б) Изменение собственной функции ψ_1 при $E_1 \rightarrow E_2$. Связь собственных значений и нормировочных констант в симметричной яме приводит к одновременному изменению производных при $x = a$ (ср.с рис.4).

в) Деформация потенциала при $E_2 \rightarrow E_3$. Вид соответствующих волновых функций не показан, но о нем можно судить, рассматривая вторую и третью собственные функции на рис.6.

г) Функции основного состояния, отвечающие потенциалам, изображенным на рис. 3в. При дальнейшем сближении уровней 2 и 3 в первой функции появляются три максимума (ср. с рис.6).

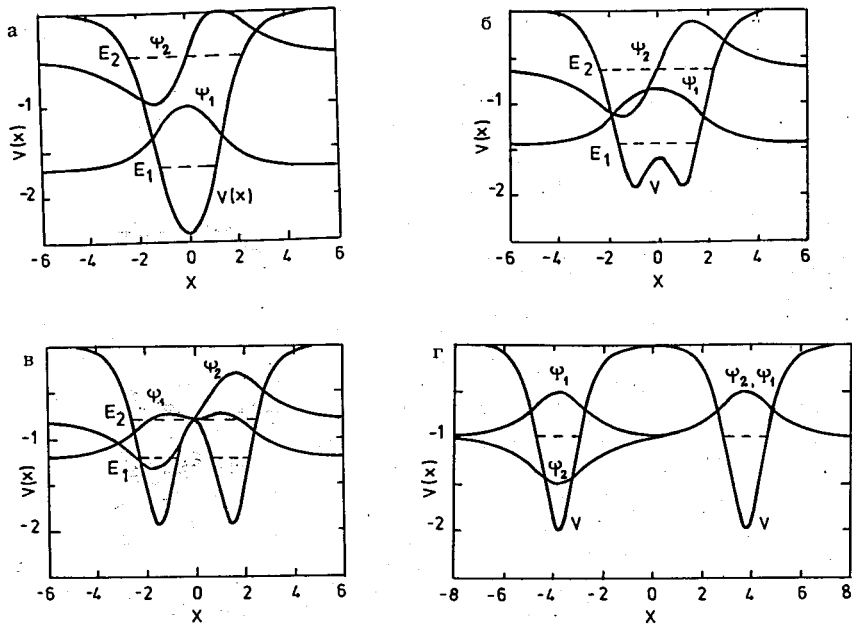


Рис.4. а-г. Изменение формы прозрачной потенциальной ямы при сближении уровней двух ее связанных состояний. Штриховыми линиями показаны волновые функции^[7].

Отметим еще, что форма симметричного (относительно центра) потенциала, как на рис.3а, полностью определяется его уровнями энергии без нормировочных констант γ_1 (см.^[3], с.40-43). Поэтому вместе со сдвигом уровня меняется и нормировка γ_1 , как видно из рис.3б.

Аналогичную картину можно ожидать и при сдвиге второго уровня к первому. Только ямки у стенок должны быть глубже, а барьер между ними выше, чтобы больше отдалить пару нижних уровней от остальных невозмущенных.

Еще одной иллюстрацией универсального свойства раздвоения симметричной потенциальной ямы при сближении двух уровней служит рис.5 с серией потенциалов, получающихся из осцилляторного при подъеме первого уровня ко второму.

Если сближать не первый уровень со вторым, а двигать второй к третьему, то на первоначально плоском дне прямоугольной ямы появляются три углубления: рис.3в, сравните со случаем сближения трех уровней в прозрачном потенциале на рис.6. Обратите внимание на то, что волновая функция второго уровня в средней ямке стремится к нулю.

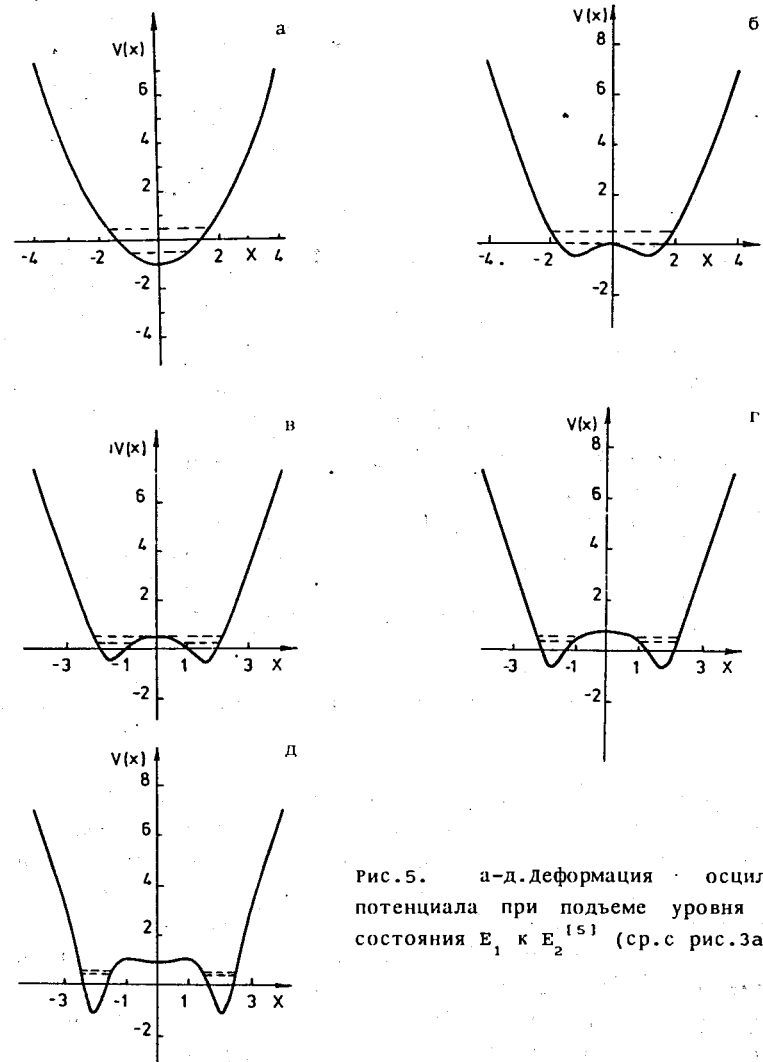


Рис.5. а-д. Деформация осцилляторного потенциала при подъеме уровня основного состояния E_1 к E_2 ^[5] (ср. с рис.3а).

Обратите внимание на то, как сказывается возмущение спектральных параметров на форме потенциалов и функций для различных типов потенциалов: с вертикальными бесконечными стенками (рис.1-3), со стенками, растущими как квадрат расстояния (рис.5), для потенциалов, исчезающих на больших расстояниях (рис.4-6). Качественно много общего, но сказывается сила запирающей стенки.

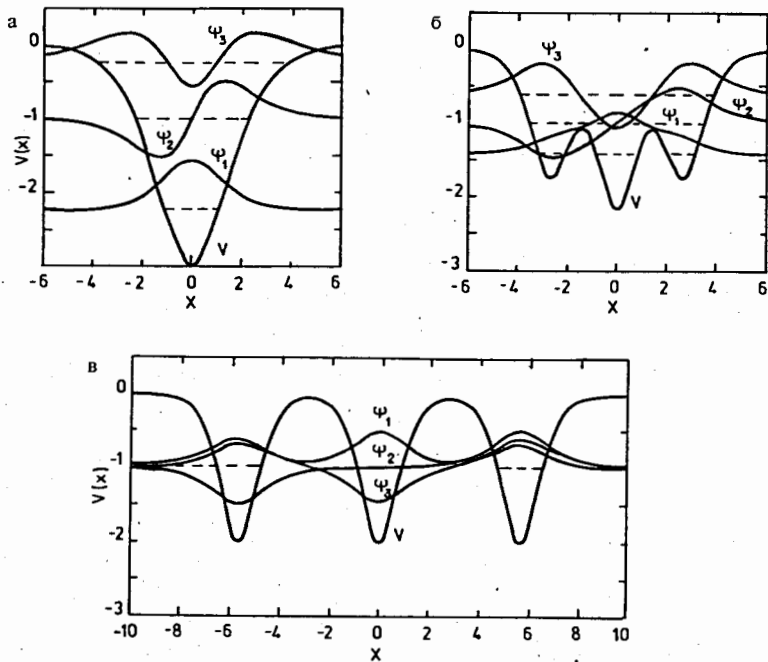


Рис.6.а-в. Изменение формы прозрачной потенциальной ямы при сближении трех уровней. Штриховыми линиями показаны уровни^[7].

2.1. ЗАПИРАНИЕ ВОЛН В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ

Перейдем теперь к рассмотрению связанных состояний, погруженных в непрерывный спектр. Сравним одноканальную^[9] (рис.7) и двухканальную систему^[9] (рис.8). При подъеме связанного состояния из области отрицательных энергий в область $E > 0$ в одноканальном случае (рис.7) в потенциале появляются медленно затухающие (как $\sin(kr)/r$) осцилляции, удерживающие волновую функцию от "вытекания"^[8].

Связь каналов позволяет осуществлять удержание волны в области непрерывного спектра и с короткодействующей (экспоненциально спадающей - рис.8б,в)^[8] матрицей взаимодействия. Это оказывается возможным при хотя бы одном закрытом канале (энергия выше нижнего $E_1 = 0$, но ниже верхнего $E_2 = 0$ порога открывания каналов). И только когда энергия связанного состояния оказывается выше наивысшего порога (рис.8г,д), в матрице взаимодействия появляются затухающие (как $\sin(kr)/r$) осцилляции.

В приложениях, рис.14,15, показаны матрицы взаимодействия $V_{\alpha\beta}(r)$, отвечающие связанному состоянию в континууме при той же энергии, что и

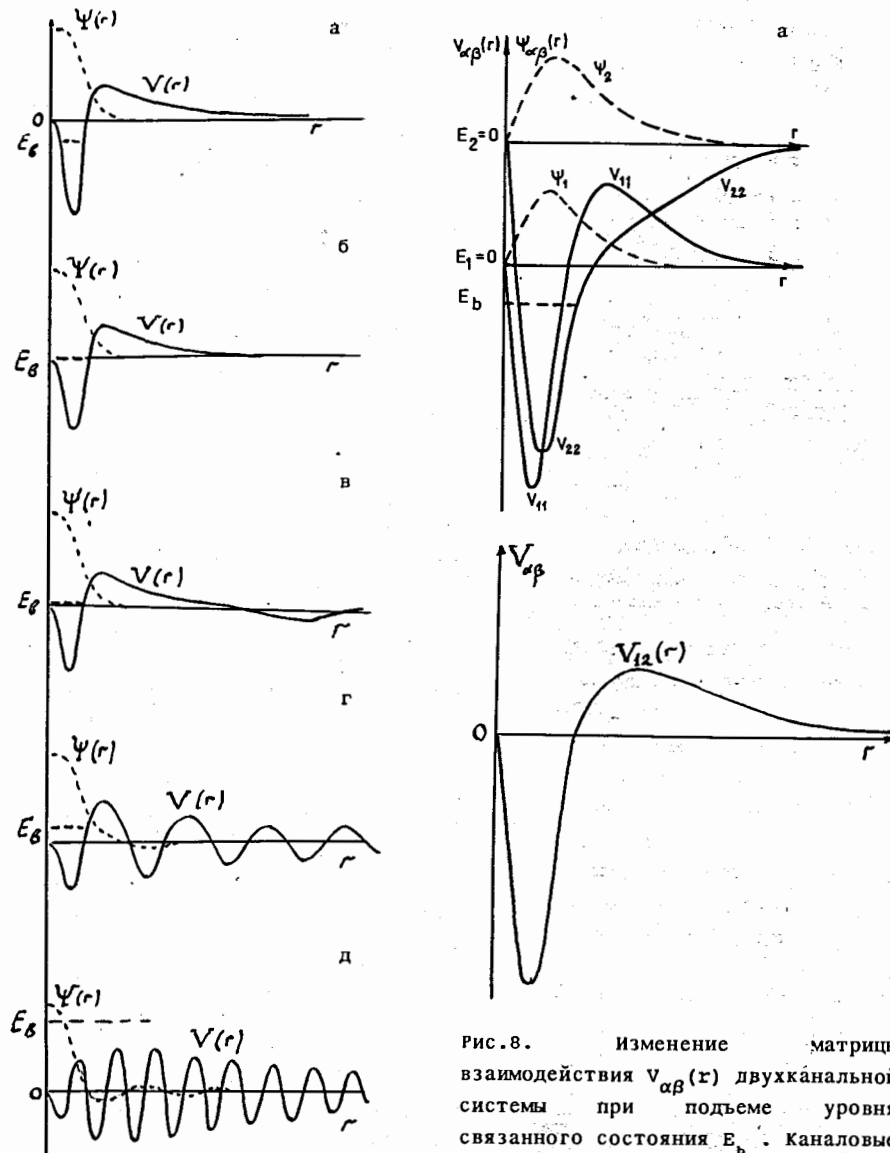


Рис.7.Деформация потенциала при подъеме связанного состояния из области отрицательных энергий в область непрерывного спектра^[8].

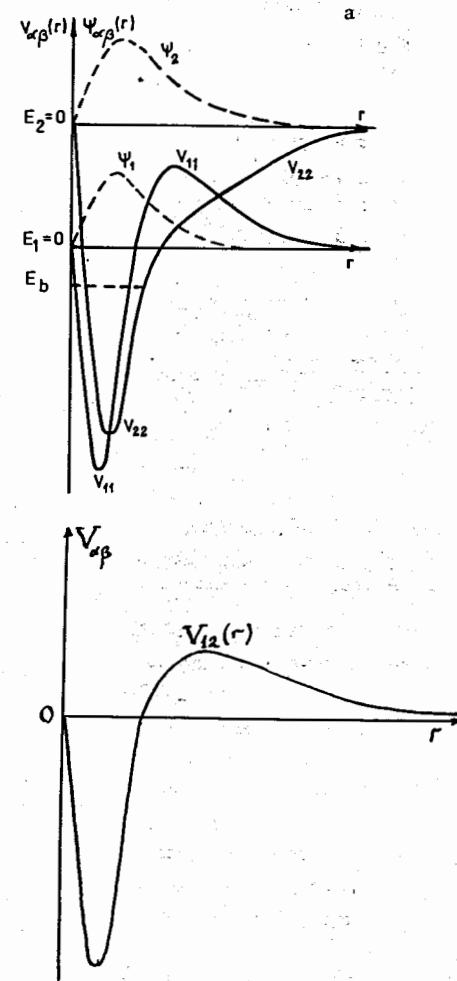


Рис.8. Изменение матрицы взаимодействия $V_{\alpha\beta}(r)$ двухканальной системы при подъеме уровня связанного состояния E_b . Каналовые волновые функции ψ_1 и ψ_2 показаны штриховыми линиями.

а) Уровень E_b расположен ниже нижнего порога непрерывного спектра (обычное связанное состояние).

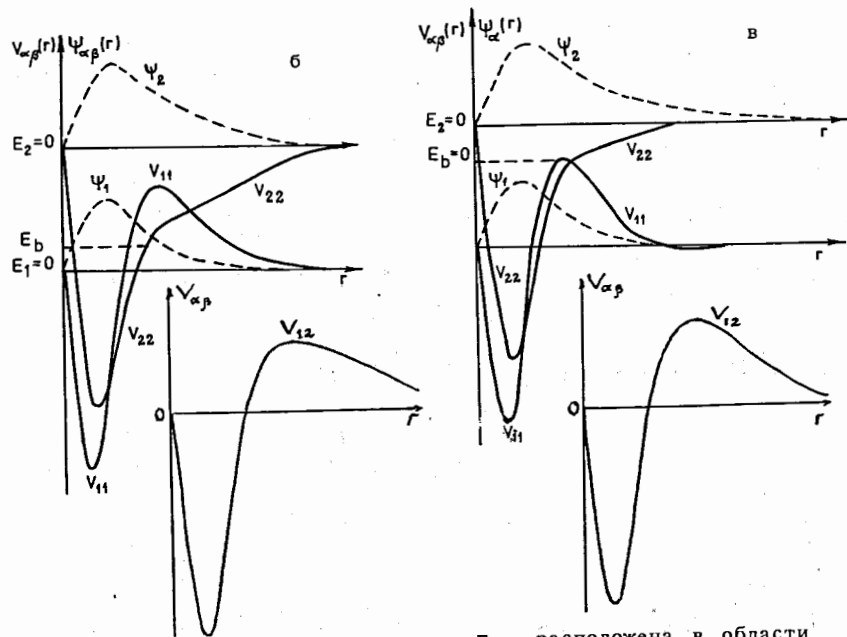
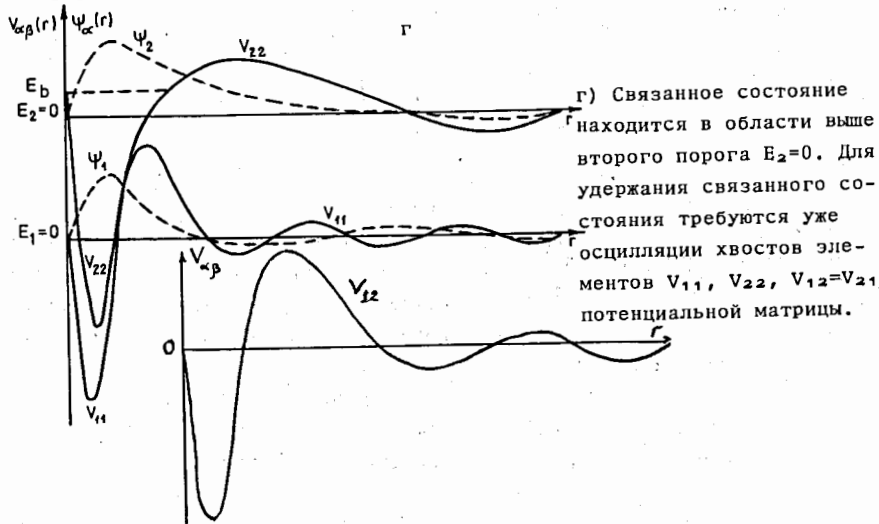
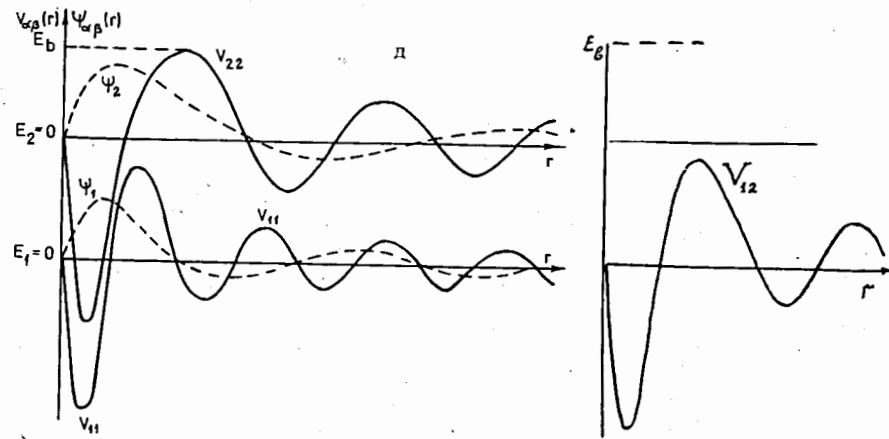


Рис.8б) Энергия связанного состояния E_b расположена в области непрерывного спектра первого канала (первый канал открыт, а второй закрыт). Экспоненциально спадающая при больших r матрица взаимодействия полностью удерживает волны от вытекания из области взаимодействия.

в) То же, что и на рис.6, только E_b приподнят ближе к порогу непрерывного спектра второго канала $E_2 = 0$.



г) Связанное состояние находится в области выше второго порога $E_2=0$. Для удержания связанного состояния требуются уже осцилляции хвостов элементов $V_{11}, V_{22}, V_{12}=V_{21}$ потенциальной матрицы.



д) То же, что и на рис.г, только связанное состояние поднято еще выше, из-за чего осцилляции $V_{\alpha\beta}$ усиливаются.

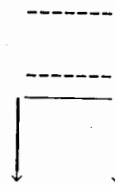
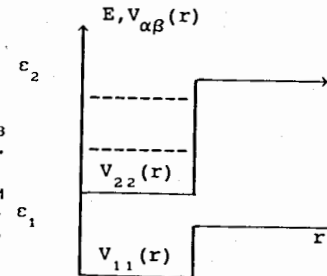


Рис.9. Полное надбарьерное отражение от бесконечных потенциальных ступенек приводит к связанным состояниям, расположенным выше вершины барьера. Для барьеров конечной высоты эти связанные состояния переходят в резонансные. Форма вершины барьера для этого несущественна.

Рис.10. При отсутствии связи каналов состояния, отвечающие уровням закрытого канала, являются одновременно и связанными состояниями, погруженными в непрерывный спектр открытого канала. При включении $V_{12}(x)$ они становятся резонансами.



на рис.8в, но с измененной нормировочной константой для функции второго канала. Это лишний пример роли нормировочных множителей (связи их вариаций с формой потенциальной матрицы).

Упомянем здесь еще такие простые примеры связанных состояний в непрерывном спектре: I. Резонансы над прямоугольным барьером переходят в пределе бесконечного увеличения высоты барьера в связанные состояния (см. рис.9). II. В двухканальной задаче с разными порогами ϵ_1, ϵ_2 , при которых открываются отдельные каналы, если устремить к нулю недиагональные элементы $V_{12}(x) = V_{21}(x)$ матрицы взаимодействия, то связанные состояния в потенциальной яме $V_{22}(x)$ канала с более высоким

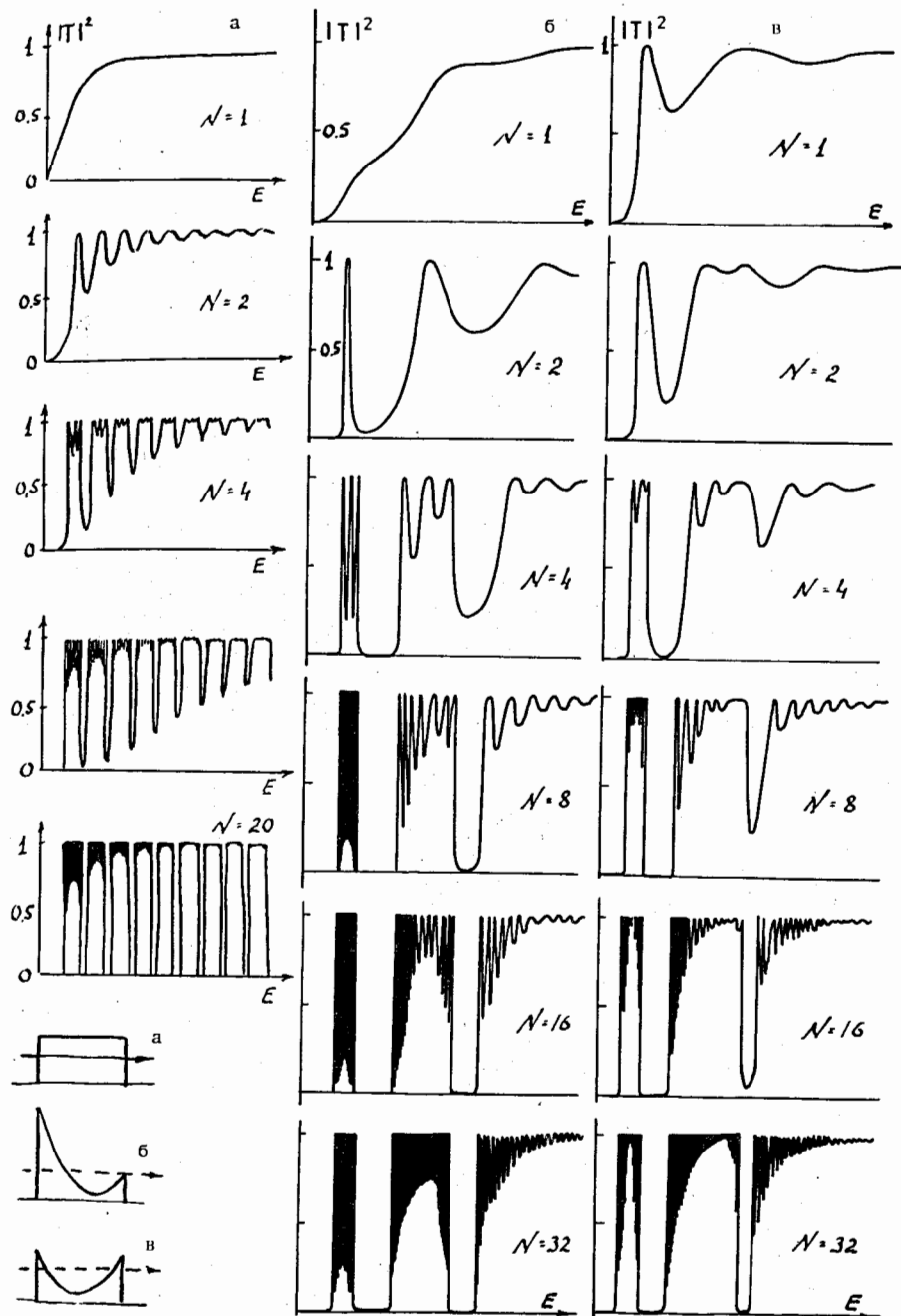


Рис. 11

порогом, расположенные между пороговыми значениями энергии ϵ_1 и ϵ_2 , становятся связанными состояниями в непрерывном спектре первого открытого канала (см. рис. 10).

2.2. РЕЗОНАНСНОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ СКВОЗЬ СИСТЕМУ БАРЬЕРОВ

Приведем еще несколько иллюстраций, связанных с резонансным туннелированием. (Простое объяснение удивительного, на первый взгляд, факта, что система нескольких высоких барьеров может оказаться прозрачной, дается в [3], с.36). На рис.11а представлена энергетическая зависимость коэффициентов пропускания для систем с разным числом прямоугольных барьеров. Видно, как постепенно формируются полосы разрешенного движения одномерной кристаллической решетки. На рис.11б, в та же картина получена для систем барьеров другой формы [10].

2.3. О РЕШЕНИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ В КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В работе [11] дается глубокий и наглядный анализ накопления погрешностей при решении обыкновенных дифференциальных уравнений. Мы приводим здесь пару иллюстраций оттуда, которые полезно иметь в виду тем, кто имеет дело с численным решением уравнений Шредингера.

На рис.12 представлены погрешности, накапливающиеся при решении дифференциального уравнения в конечно-разностном приближении на фиксированном интервале интегрирования в зависимости от величины шага h разностного дифференцирования. Чем меньше h , тем меньше погрешность разностной аппроксимации (штриховая линия идет в начало координат). Ошибка же округления возрастает с уменьшением h , так как растет число

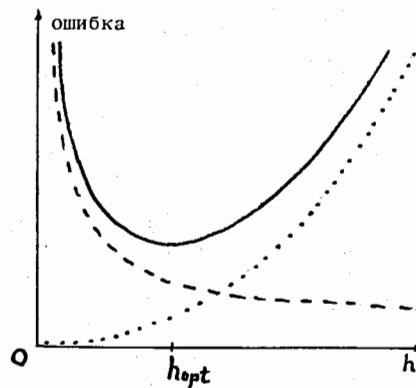


Рис.12 [11]. Максимальная ошибка (сплошная линия), ошибка конечно-разностного приближения (штриховая линия) и ошибка округления (пунктир), накапливающиеся на заданном отрезке численного интегрирования дифференциального уравнения в зависимости от величины шага h разностной аппроксимации.

шагов на выбранном интервале. Сплошная кривая суммарной погрешности имеет минимум, отвечающий оптимальному выбору шага h .

На рис.13 представлены результаты расчетов^[11] с разными значениями h на двух разных ЭВМ (CDC CYBER с округлением в 14-м знаке и микрокомпьютере с 7-ю знаками).

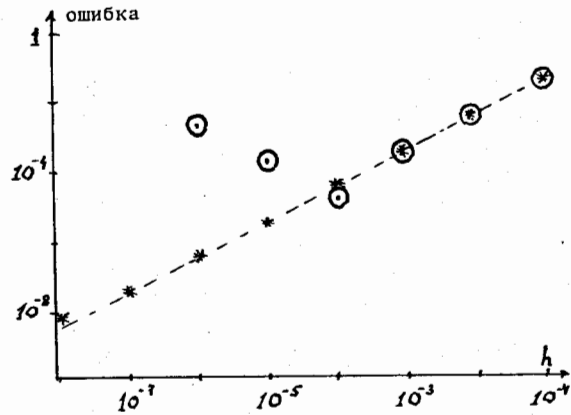


рис.13^[11]. численно найденные зависимости полных погрешностей решения дифференциального уравнения от величины шага h разностной аппроксимации. Минимум ошибки при округлении в 14-м знаке (звездочки) вблизи $h = 10^{-6}$, а при округлении в 7-м знаке (кружки) - $h \approx 10^{-4}$.

Мы видим, что даже простейший метод Эйлера дает возможность повышать точность расчетов, только нужно заботиться о выборе оптимального h .

ПРИЛОЖЕНИЕ

Покажем, как меняется матрица взаимодействия $V_{\alpha\beta}(r)$ со связанным состоянием в непрерывном спектре при изменении нормировочного вектора (c_1, c_2) (значений производных каналов функций Ψ_1, Ψ_2 в нуле). При $c_1 = -1; c_2 = 0,1$ влияние закрытого канала ослабляется - см. рис.14 (сравните с рис.8в, где $c_1 = c_2 = 1$). На рис.15 $c_1 = 1; c_2 = 2$.

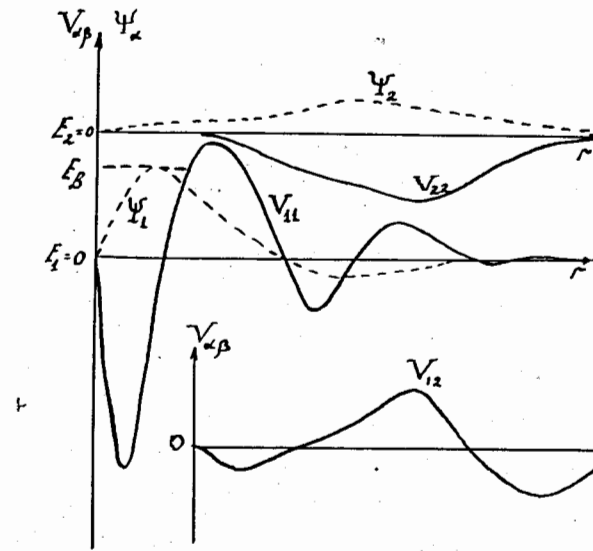


рис.14. Матрица взаимодействия двухканальной системы со связанным состоянием в континууме и с производной в нуле функции второго канала, уменьшенной в 10 раз по сравнению с рис.8в. Обращает на себя внимание появление осцилляций в V_{11} , хотя он остается короткодействующим.

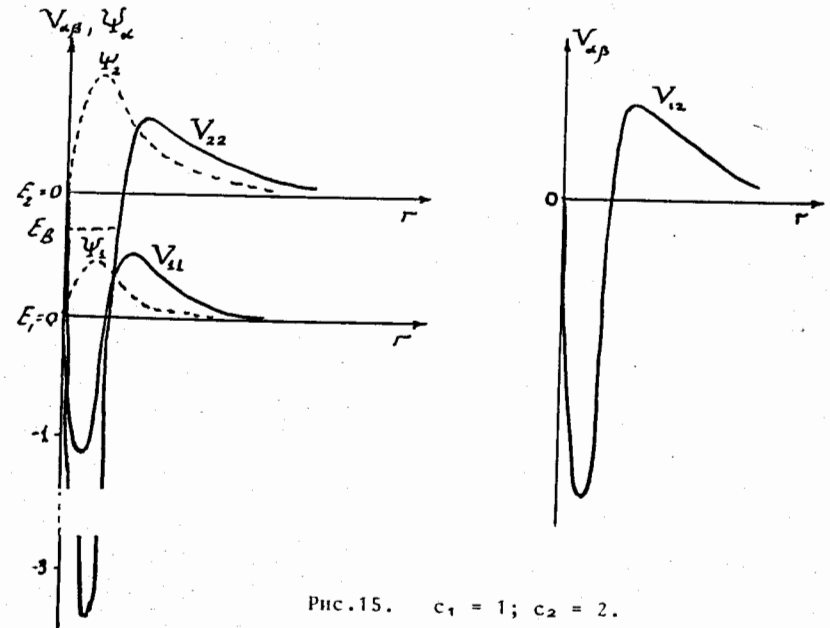


рис.15. $c_1 = 1; c_2 = 2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brand S., Dahmen H.D. The Picture Book of Quantum Mechanics. John Wiley, New York, 1985.
2. Жигунов В.П., Захарьев Б.Н. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. Атомиздат, М., 1974.
3. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. Энергоатомиздат, М., 1985.
4. Poschel J., Trubowitz E. Inverse Spectral Theory. Acad. Press, Boston, 1987.
5. Sukumar C.V. J. Phys. A: Math. Gen. 18, p.2917, 1985.
6. Колкунов В.А. ЯФ, 16, N 6, с.1296, 1969.
7. Thaker H.B., Quigg C., Rosner J.L. Phys. Rev. D21, p.234, 1980.
8. Stillinger F.H., Herrick D.R. Phys. Rev. A11, p.446, 1975.
9. Захарьев Б.Н., Пивоварчик В.Н., Сузько А.А. В сб.: Теория квантовых систем с сильным взаимодействием. КалГУ, Калинин. 1985, с.69-81.
10. Kovalsky J.M., Fry J.L. J. Math. Phys. 28 (10), p.2407, 1987.
11. May R., Noye J. In: Computational Techniques for Differential Equations. North-Holland, 1984, p.1-94.

Купонный документ

26 апреля 1989 года.