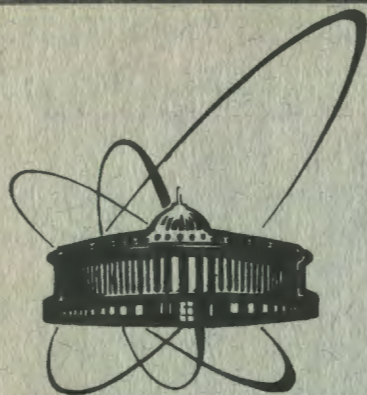


91-98



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P4-91-98

Б. Н. Захарьев

НЕОБЫЧНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1991

"Главная задача математики наших дней состоит в достижении гармонии между континуальным и дискретным, включении их в единое математическое целое и удалении из них всего неясного."

Ф. Т. Белл.

"Развитие теории дискретных и непрерывных задач происходило часто независимо и несинхронно; иногда проходили десятилетия, прежде чем осознавались отдельные звенья продолжавшейся цепи аналогий... И поныне поиски аналогий между этими задачами являются источником новых исследований."

М. Г. Крейн, И. С. Кац.

I ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением серии публикаций [1-5] по исследованиям новых качественных закономерностей различных квантовых систем (иллюстрации из коллекции "квантовая механика в картинках", помогающих укреплять и корректировать квантовую интуицию).

В работе [1] приводились простые примеры спускавшихся сверху в разрешенную зону участков запрещенной зоны (играющих роль эффективных потенциальных барьеров, "подвешенных" к верхней границе разрешенной зоны, - см. рис.1б). Во втором разделе приведены результаты численных расчетов энергетической зависимости коэффициента проницаемости для таких перевернутых и обычных потенциальных барьеров в разрешенной зоне (полосе проводимости в плоскости: $\{E, x\}$). Имеется симметрия проницаемости таких (нижних и верхних) барьеров.

Уточняется качественное поведение волновых функций связанного состояния над непрерывным спектром разрешенной зоны (полосы проводимости) в "опрокинутой яме" [1]. В отличие от обычных связанных состояний имеются дополнительные "несущие" колебания как в разрешенных, так и в запрещенных областях, "модулированные" привычными стоячими волнами и затухающими экспонентами, соответственно.

В приводимых иллюстрациях используются решения разностных аналогов уравнения Шредингера (с дискретной

переменной). Дискретные координаты удобны для аппроксимаций, но часто отвечают и физической сути исследуемых объектов : решетки кристаллов или дискретных квантовых чисел α , нумерующих каналы [4]. Например, в многоканальном подходе α могут нумеровать возбужденные состояния внутреннего движения Φ_α при разложении полной волновой функции в обобщенный ряд Фурье: по дискретному набору базисных функций Φ_α . При этом полезно взглянуть на предмет исследования с разных сторон, в разных представлениях: как в конфигурационном пространстве, так и в пространстве квантовых чисел α , -на решетке каналов, - (для разнообразных базисных наборов), - при этом удается увидеть что-то, что было скрыто при рассмотрении в исходном представлении.

Для лучшего понимания специфики движения волн по решеткам дискретных переменных приводится сравнение механизмов образования связанных состояний на потенциальном склоне при непрерывной x и дискретной x_n (см. рис. 4) переменной. В случае непрерывной координаты локализация волновой функции (квадратичная ее интегрируемость) может быть вызвана быстро нарастающей крутизной потенциального склона ($V \rightarrow -\infty$ при $x \rightarrow \infty$). А для одномерного разностного уравнения Шредингера достаточно самого малого наклона потенциала внешнего поля на ограниченном пространственном отрезке для заперения волн в связанных состояниях (из-за наличия конечной верхней границы разрешенной зоны происходит конфинмент волн между двумя запрещенными зонами). Последнее обстоятельство может оказаться важным при движении волн в пространстве дискретных каналов переменных, где наклон "зоны проводимости" вызывается возрастающей энергией ϵ_n возбуждения базисных подсистем. Интерференция волн, бьющихся между запрещенными зонами, может помогать или затруднять (гасить) движение внутри наклонной разрешенной зоны ("волноводе").

Точно решаемые модели движения волн в поле потенциалов в виде линейного склона (однородное внешнее поле) с возмущениями рассматривались в [7,8,9]. Оказывается, что соответствующая задача с дискретной пространственной переменной может быть точно решена с помощью старых добрых функций Бесселя $J_\alpha(z)$, выступающих в новом амплуа: с индексом α , в качестве дискретной пространственной (!) координаты.

Здесь мы обсудим один квантовый механизм удержания волн

на потенциальном склоне от "скатывания с горы" вниз, проливающий дополнительный свет на специфику движения в дискретных пространствах каналов [4]. Будет продемонстрирован удивительный факт, что в качестве волновых функций точно решаемой модели записания волны на склоне могут служить старые добрые функции Бесселя J_α (рассматриваемые как волновые функции от дискретной пространственной координаты, роль которой играет индекс α - см. также [8]).

В качестве дискретной переменной x_n может служить и проекция K момента на ось симметрии ядра (молекулы) неаксиальной формы. Нарушение аксиальности приводит к несохранению квантового числа K . Смешивание состояний, например, соседних значений K , и $K \pm 1$, описывается конечно-разностным уравнением Шредингера (КРУШ) с потенциалом, "зависящим от скорости" [5], для которого можно предложить точно решаемые модели баргмановского типа [5].

2. ДВИЖЕНИЕ ВОЛН СКВОЗЬ БАРЬЕРЫ НА РЕШЕТКАХ И В "ОПРОКИНУТЫХ" ЯМАХ

Нам не попадались в литературе ни аналитически решаемые модели, ни численные расчеты по отражению и прохождению волн через барьеры для КРУШ ($\Delta = x_{n+1} - x_n$ - шаг разностного дифференцирования, $m = 1$):

$$- [\Psi(n+1) - 2\Psi(n) + \Psi(n-1)] / 2\Delta^2 - V(n)\Psi(n) = E\Psi(n), \quad (1)$$

где первый член есть разностная вторая производная - оператор кинетической энергии, или в несколько иной форме

$$[\Psi(n+1) + \Psi(n-1)] / 2 - \Delta^2 V(n)\Psi(n) = (1 - E\Delta^2)\Psi(n), \quad (1')$$

где средний член второй разностной производной вместе с потенциальным членом перенесен вправо и обе стороны равенства умножены на $-\Delta^2$. Поэтому мы выполнили такие расчеты для простейшего случая прямоугольного барьера.

Уравнению (1) с дискретной переменной соответствует полоса непрерывного спектра конечной ширины, ограниченная сверху энергией $E = E_{\max} = 2 / \Delta^2$.

Включение на конечном участке $n = 0, 1, \dots, N$ прямоугольного потенциала $V = \pm V_0$ приводит к локальному параллельному сдвигу (вверх-вниз) разрешенной полосы в плоскости (E, x) . В результате в полосе "проводимости"

появляется потенциальный барьер: обычный (поднимающийся из нижней запретной зоны) или спускающийся сверху, см. рис.1а,б.

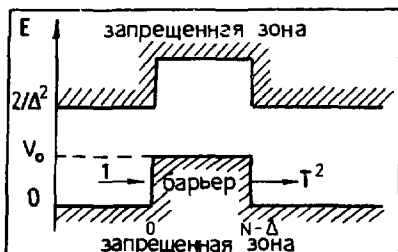
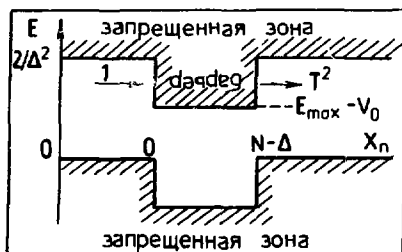


Рис.1. а) Обычный потенциальный барьер в полосе непрерывного спектра (при энергии E ниже V_0 волны должны туннелировать сквозь барьер).



б) Опрокинутый потенциальный барьер (туннелирование при E выше $E_{\max} - V_0$).

В чистом виде (без ямы) верхний барьер можно получить, вшивая в решетку дискретных значений x_n участок конечной длины с большим шагом $\Delta_1 > \Delta$, что приведет к локальному сужению разрешенной зоны на этом участке: $E_{\max} < E_{\max}$ и появлению эффективного опрокинутого "потенциального" барьера при невозмущенной нижней границе зоны проводимости [1]. Общий случай переменного шага разностного дифференцирования Δ в КРУШ эквивалентен переменному коэффициенту при второй производной. Он определяет локальную ширину разрешенной зоны, а форма потенциала задает форму нижней его границы.

В отличие от случая уравнения Шредингера с непрерывной координатой x , свободные решения на решетках обладают симметрией по энергии относительно середины полосы проводимости. С этим же связана и симметрия решений относительно замены обычного потенциального барьера на "барьер, свисающий" из верхней запрещенной зоны [1]. Действительно, КРУШ не меняется, если произвести "отражение" [10]:

$$(1 - E \Delta^2) \longrightarrow -(1 - E \Delta^2);$$

$$V(n) \longrightarrow E_{\max} - V(n) \quad (2)$$

относительно середины $E_{\text{ср}} = 1 / \Delta^2$ полосы проводимости и одновременно поменять знаки:

$$\Psi(n) \longrightarrow (-1)^n \Psi(n). \quad (3)$$

Отметим связанную с этим разницу в поведении волновой функции внутри верхнего и нижнего барьеров (и вообще, в верхней и нижней запрещенных зонах). В первом случае экспоненциальное затухание сопровождается осцилляциями ("несущая частота" - изменение знака функции в каждой следующей точке; сравните волновые функции разностной задачи для нижних и верхних связанных состояний в прямоугольной яме [5], рис. 3.15). Напомним также, что движение в верхней части разрешенной зоны отвечает эффективно отрицательной массе (дырочному состоянию - как в недозаполненной ядерной или атомной оболочке). Результаты расчетов представлены на рис.2.

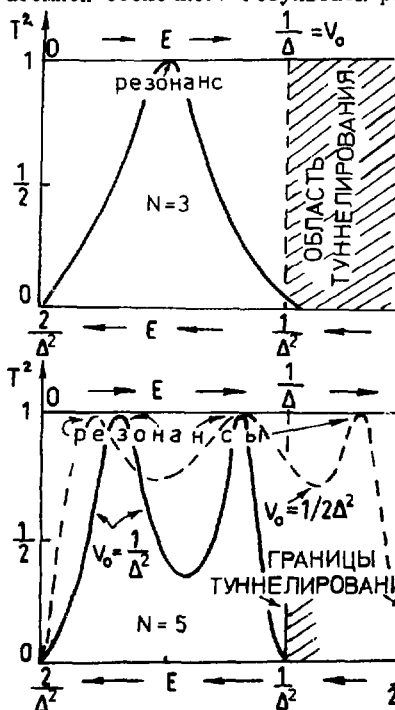


Рис. 2 Энергетическая зависимость коэффициента прохождения T^2 через барьер. Верхняя энергетическая шкала для обычного, а нижняя - для опрокинутого барьера (участка верхней запрещенной зоны, вдвинутого в зону проводимости. а) Ширина барьера 3Δ , высота $1/\Delta^2$.

- б) Ширина - 5Δ ,
 ————— высота - $1/\Delta^2$;
 - - - - - высота - $1/(2\Delta^2)$.

С увеличением ширины барьера увеличивается число резонансов в коэффициенте проницаемости при энергиях, отвечающих условиям образования стоячих волн в области барьера (один - при $N = 3$, два - при $N = 5$; $V_0 = 1/\Delta^2$); то же при уменьшении высоты барьера (три - при $V_0 = 1/2\Delta^2$; $N = 5$).

"Несущие" осцилляции имеют и в волновой функции связанного состояния в опрокинутой яме (сдвинутого в верхнюю запрещенную зону участка разрешенной зоны) - см. рис 3.

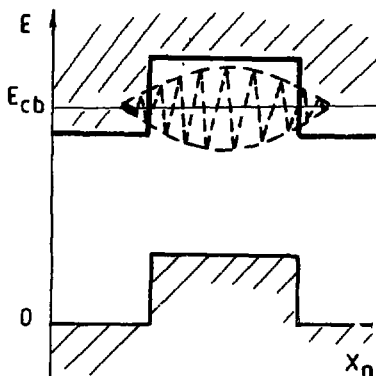


Рис. 3. Связанное состояние (в "перевернутой вверх дном яме") над непрерывным спектром разрешенной зоны. Сравни с функциями связанных состояний в прямоугольной яме (рис. 3.15 в [5] или fig. 3.17 - в английском издании [5]). Обгибающая функции верхнего связанного состояния подобна функции основного связанного состояния в обычной, неперевернутой яме.

В следующей работе будут рассмотрены верхние и нижние барьеры в коэффициентах уравнений высшего порядка.

Одномерное "уравнение Шредингера" высшего порядка имеет не одну волну бегущую в одном направлении (и одну в обратном: $\exp[\pm ikx]$ - в случае свободного движения), а несколько волн. Между этими волнами происходят переходы, если коэффициенты уравнения не постоянны. Например, если какой-то из коэффициентов имеет форму прямоугольного барьера, то посылая на него одну волну (специальным выбором граничных условий), мы получим несколько волн отраженных и несколько - прошедших. Исследуя проницаемость таких барьеров в различных коэффициентах, можно надеяться преобрести интуицию, которая поможет понимать и общий случай переменных коэффициентов. Полезно провести параллели с многоканальной задачей, где также в области постоянной матрицы зацепления каналов имеются несколько независимых волн. Здесь, как и там, естественно ожидать эффектов типа усиления проницаемости [5] и нарушения симметрии прохождения волн через барьеры в противоположных

направлениях. Возможно, на этом пути удастся лучше понять свойства нелокальных потенциалов (пока достаточно хорошо изучены лишь простейшие из них - сепарабельные [11]). Ведь в разностном приближении нелокальному потенциалу соответствует матрица взаимодействия, что в свою очередь отвечает конечно-разностному уравнению высшего порядка.

3. ПРАВИЛА ДВИЖЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕ ДИСКРЕТНЫХ КАНАЛОВЫХ ПЕРЕМЕННЫХ α

Замечательной особенностью движения на решетках является верхняя граница по энергии (разрешенная зона конечной ширины) для решений без экспоненциального роста и убывания. При постоянном $V(x) \equiv \text{const}$ разрешенная зона представляет собой горизонтальную полосу в плоскости (E, x) - см. рис. 4, так что неограниченное движение вдоль всей оси возможно лишь при значениях энергии на конечном отрезке. Если потенциал линейно зависит от x : $V(x) = -cx$, то разрешенная зона располагается наклонно, как показано на рис. и при любой фиксированной энергии волны оказываются запертыми между запрещенными зонами.

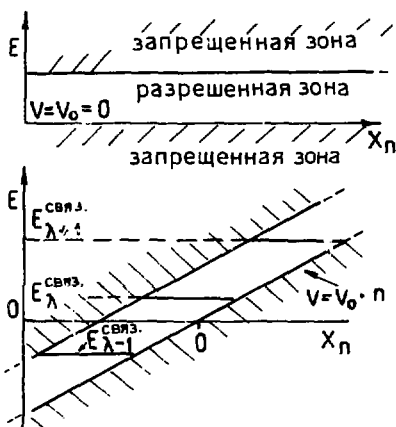


Рис. 4. Наклонное расположение границ разрешенной зоны. Вместе с потенциальным склоном наклоняется и верхняя граница разрешенной зоны. При фиксированных энергиях $E_{св}$ физические решения (связанные состояния) должны затухать в обе стороны при углублении в запретные зоны.

Несколько неожиданно оказывается, что решения КРУШ с линейным потенциалом есть ни что иное, как функции Бесселя $J_\alpha(z)$, рассматриваемые, правда, не как функции от своего аргумента z , пробегавшего непрерывные значения, а как функции от дискретного индекса α (см. [12], рис. 9.3 на стр. 181, а также [13], рис. 109, 110). Действительно, рекуррентная

связь (см. формулу 9.1.27 в [12]) функций Бесселя:

$$J_{\alpha+1}(z) + J_{\alpha-1}(z) = (2\alpha/z) J_{\alpha}(z) \quad (4)$$

переписанная в несколько иной форме (прибавили и вычли $2J_{\alpha}$, разделили обе стороны равенства на $2\Delta^2 = 2$, - сравни с (1))

$$\begin{aligned} & -(J_{\alpha+1}(z) - 2J_{\alpha}(z) + J_{\alpha-1}(z))/2\Delta^2 - (\alpha/z) J_{\alpha}(z) = \\ & = J_{\alpha}(z), \quad (4') \end{aligned}$$

это КРУШ, в котором роль дискретной координаты конфигурационного пространства играет индекс α (как $x_n = n \Delta$ и n в уравнении (1)), а шаг разностного дифференцирования равен единице ($\Delta = 1$), $E = 1$ и потенциал линейно зависит от α : $V(\alpha) = \alpha/z$.

Для примера на рис. 5 и 6 показаны функции Бесселя $J_{\alpha}(z)$ как функции от α при разных фиксированных значениях z . Рисунки взяты из [12] (рис. 9.3) и [13] (рис. 96-98). Из непрерывной функции от α нужно только выбирать дискретные точки, отвечающие целому шагу $\Delta = 1$ (при этом сами α могут принимать целые или нецелые значения, но с целым шагом). Из этих рисунков видно, что функции Бесселя $J_{\alpha}(z)$ являются решениями КРУШ, отвечающими граничному (асимптотическому при больших α) условию затухания в подбарьерную область (правая нижняя запретная зона начинается в точке поворота α , где $V(\alpha) = E = 1$, верхняя левая запретная зона не показана).

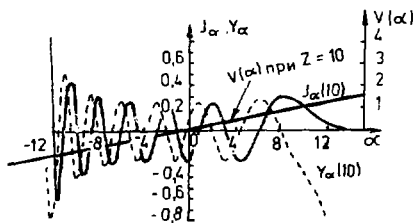


Рис. 5. Функции Бесселя в зависимости от дискретного индекса α . Физическому асимптотическому условию затухания вправо, - под гору $V(\alpha)$, - отвечает только J_{α} . Из непрерывной кривой нужно выбирать дискретные точки.

Для целых значений α , благодаря соотношению, связывающему значения функций с разными знаками α :

$$J_{-\alpha}(z) = (-1)^{\alpha} J_{\alpha}(z) \quad (5)$$

функция Бесселя экспоненциально спадает и в левой верхней запретной зоне, только со сменой знаков в каждой следующей

точке (такое затухание влево, правда, не видно явно на рис. 5, так как из континуума значений J_α нужно выделить лишь отвечающие целым значениям α). То есть имеем квадратичную суммируемость J_α с целыми α . Следовательно:

функции Бесселя с целыми индексами α являются волновыми функциями связанных состояний на линейном потенциальном склоне.

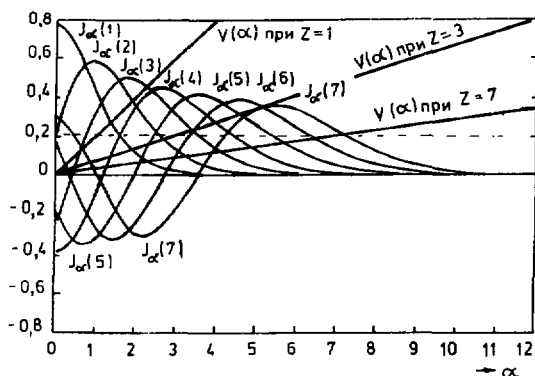
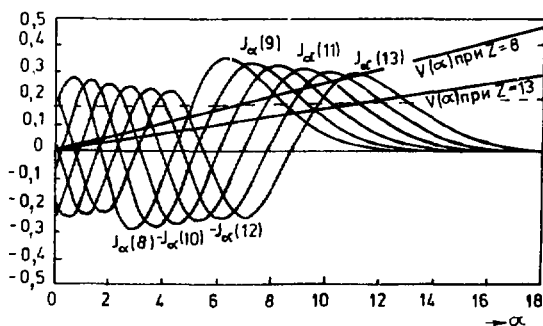


Рис. 6. Функции Бесселя J_α при разных значениях z . Показаны потенциалы $V(\alpha)$ для некоторых значений z . С ростом z крутизна $V(\alpha)$ убывает и волны все дальше проникают направо. Запретная зона начи-



нается при α , где $V(\alpha) = E=1$ (---штриховая). Левые верхние запретные зоны $V(\alpha) + 2$ на рисунках не показаны. Шкалы энергий справа.

Сдвигу шкалы α на единицу отвечает такой же сдвиг потенциального склона, что эквивалентно сдвигу по энергии на $1/2$. Значит этой величине равно расстояние между уровнями связанных состояний. Получается эквидистантный спектр связанных состояний (для непрерывной координаты это получалось в осцилляторной яме $V(x) = C x^2$, где, правда, спектр полуограничен снизу). Эти состояния, как помогла установить С. И. Сердюкова, образуют полный и ортонормированный на всей оси α набор.

В силу линейной зависимости потенциальной энергии $V(\alpha)$ от α сдвиг по координате на 1 соответствует сдвигу по энергии на промежуток между уровнями, так что соотношения ортогональности и полноты связанных состояний имеют эквивалентную форму :

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=+\infty} J_{\alpha+m}(z) J_{\alpha}(z) = \delta_{m0} \quad ,$$

В случае нецелых α функции Бесселя являются нефизическими решениями разностного уравнения Шредингера, растущими в левой-верхней запретной зоне и отвечающими континууму значений энергии между уровнями связанных состояний. Влево они растут, раскачиваясь, что видно на рис. 5. С ростом z функции $J_{\alpha}(z)$ как бы сдвигаются все дальше вправо, что соответствует более пологому потенциальному склону $V(z) = \alpha/z$. То, что колебания функций на рис. 5, 6 учащаются при сдвиге по оси α влево, соответствует росту кинетической энергии при спуске с потенциальной горы .

Пример линейно независимого нефизического решения - функции Бесселя второго рода Y_{α} - , растущего под барьером вправо (вглубь потенциальной горы), показан на рис 5.

С уменьшением крутизны потенциального склона $V_{\alpha} = 2\alpha/z$ возрастает плотность уровней. В пределе $z \rightarrow \alpha$ разрешенная зона располагается горизонтально и уровни сливаются в непрерывную полосу состояний свободного движения по оси α .

Первым на функции Бесселя, как на решения уравнения Шредингера, обратил внимание Меррифилд [6]. Затем их рассматривали Галлинар и Маттиз [6], но только для бесконечных потенциальных ям. Они использовали функции Бесселя для построения решений с другими граничными условиями: рассматривалась бесконечная яма $V(\alpha) = |\alpha|$ (с сшиванием решений в точке $\alpha = 0$) и ее половина, когда в точке $\alpha = 0$ ставилась бесконечная потенциальная стенка). Похоже, что они не подозревали о связанных состояниях на потенциальном склоне без дополнительных потенциальных стенок.

Возникает вопрос о связи функций Бесселя (рис. 5, 6) от дискретной переменной α с функцией Эйри $\Phi(x)$ (рис. 7) от непрерывной переменной x :

$$-\Phi''(x) + x\Phi(x) = (E=0)\Phi(x) \equiv 0 \quad (6)$$

(одна является как бы дискретным аналогом другой). Обе функции являются решениями уравнения Шредингера (разностного и дифференциального) с линейным потенциалом. При отсутствии потенциала оба уравнения имеют решения в виде одних и тех же функций (\sin , \cos , $\exp \dots$) только от дискретных или непрерывных аргументов, а в случае линейного наклонного потенциала

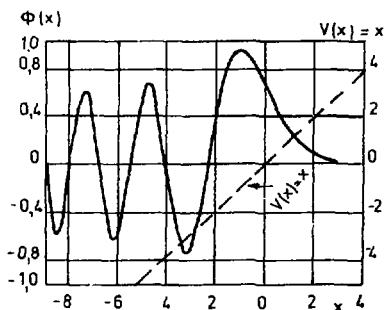


Рис. 7 Функция Эйри - решение уравнения Шредингера [8] с линейным наклонным потенциалом (сравните с ее дискретным аналогом J_α на рис., где совмещены все функции дискретной переменной α с целым шагом).

Ограниченность модели Бесселевых функций состоит в том, что фиксирована ширина шага КРУШ ($4; 4'$). Но функции Бесселя можно использовать для построения потенциалов баргмановского типа в виде добавочного члена к линейному потенциалу α/z . В случае непрерывной координаты с исходными функциями Эйри подобные потенциалы давали связанные состояния в непрерывном спектре [9]. В конечно-разностной задаче с исходными функциями Бесселя должны получаться добавочные связанные состояния к имеющемуся дискретному спектру. Можно также строить точно-решаемые модели со сдвигом исходных уровней уровней, и с областями сгущения и разрежения уровней. Таким образом можно аппроксимировать сложную форму каналовых волноводов, исходя из линейной наклонной полосы.

Представляет интерес рассмотрение и других специальных функций: насколько они могут служить физическими разностными моделями. Связь ортогональных полиномов с теорией рассеяния рассматривал Кейз [10].

Для запираания волны в связанном состоянии достаточно конечного наклонного участка внешнего потенциального поля как это показано на Рис 8

Рассмотренные выше решения имеют много общего с решениями дифференциального уравнения Шредингера с периодическим полем и с включенным однородным электрическим полем, где так же наклоняются разрешенные и запрещенные зоны,

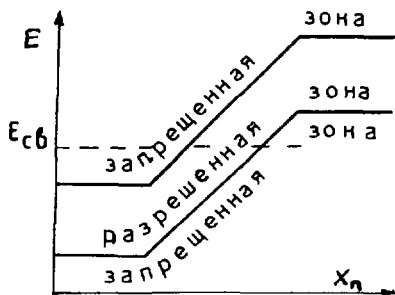


Рис. 8. Пример запираия стоячей волны на ограниченном участке потенциального склона. Связанное состояние оказалось между полосами непрерывного спектра, отвечающими неограниченному движению влево и вправо.

а роль дискретной переменной играет номер периода. Последние решения рассматривались Кричевером [7].

Полезно сравнить поведение классической частицы и квантовой волны на потенциальном склоне с рассмотренными решениями разностного уравнения (Бесселя). Классический шарик с наклонной горы скатывается со все возрастающей скоростью. Решение дифференциального уравнения Шредингера для линейного склона есть функция Эйри (амплитуда колебаний убывает на бесконечности по закону $x^{-1/4}$), а при быстро нарастающей крутизне потенциала, например $V = -Cx^4$ (см. также [17]), волновая функция убывает на бесконечности так быстро, что решение оказывается квадратично интегрируемым: возможны связанные состояния на склоне потенциальной горы (волна за конечное время успевает долететь до бесконечности [17] и отразиться от нее, так что образуются стоячие волны).

Наличие верхней запретной зоны при движении по дискретной каналовой переменной накладывает ограничения на пути распространения волн в пространстве $\{x, \alpha\}$. Если волны, обходящиеся между запретными зонами, гасят сами себя при многократных отражениях от запретных зон, то это должно мешать возбуждению системы. При определенных наклонах зон могут создаваться благоприятные условия для возбуждения. Так что при связях между каналами, меняющимися с x , волны будут преимущественно выбирать наиболее проницаемые траектории в пространстве $\{x, \alpha\}$. Интересно, что нечто подобное имеет место в уравнениях движения в многоканальной форме. Когда мы рассматриваем рассеяние двух сложных систем (например, ядер) друг на друге, мы часто разлагаем волновую функцию $\Psi(x, \xi)$ всей системы по состояниям $\Phi_\alpha(\xi)$ внутреннего возбуждения (x - расстояние между сталкивающимися объектами, а ξ - набор координат их внутреннего движения):

$$\Psi(x, \xi) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(x) \Phi_{\alpha}(\xi) \quad (7)$$

Для канальных функций - коэффициентов $\Psi_{\alpha}(x)$ - получается из уравнения Шредингера система связанных одномерных уравнений Шредингера:

$$-\Psi_{\alpha}''(x) + \sum_{\beta} V_{\alpha\beta}(x) \Psi_{\beta}(x) = (E - \epsilon_{\alpha}) \Psi_{\alpha}(x), \quad (8)$$

которую можно рассматривать [4] как уравнение движения по дискретной переменной α (будем для простоты полагать, что единственной переменной ξ отвечает одна переменная α) и непрерывной переменной x . Матрицу взаимодействия $V_{\alpha\beta}(x)$ можно рассматривать при фиксированном x в пространстве дискретной переменной α , нумерующей каналы, как разностный оператор кинетической энергии движения по α и потенциал (нелокальный по α) одновременно [4]. Член с ϵ_{α} можно рассматривать, как добавку к потенциальной энергии (монотонно возрастающих с α энергий внутренних возбуждений). Эта добавка как и в рассмотренной выше задаче с линейным потенциалом наклоняет разрешенную зону в плоскости (E, α) . Повидимому, точно-решаемые многоканальные модели [5] могли бы послужить иллюстрацией того, как параметры модели влияют на заселенность пространства $\{\alpha; x\}$ - насколько правомерно понятие о "волноводах". Интересно также, не поможет ли представление о волноводах в пространстве каналов понять движение по "траекториям" в пространстве $\{x, \alpha\}$ при столкновении ядер (движение компактным пакетом, а не размазанно по всему пространству $\{x, \alpha\}$, - см. [14, 15]).

Двух- (и более) мерное пространство каналов. Увеличение размерности пространства каналов переводит к некоторым новым качественным моментам. Например, в двумерном случае имеем два индекса α, β . Разрешенная полоса становится разрешенным слоем, в котором ограничено поперечное движение, но не вдоль слоя (лишняя степень свободы). Можно ожидать здесь нового понимания коллективной проницаемости потенциальных барьеров (обход барьеров как функций от расстояния между центрами масс ядер, по путям в дискретных пространствах каналов).

НЕАКСИАЛЬНЫЕ ЯДРА, МОЛЕКУЛЫ

Мы уже видели, что введение потенциала $V(n)$ в уравнение (1) искривляет границы запретных зон в плоскости (E, n) по

форме потенциала : ширина разрешенной зоны при всех n остается постоянной (рис. 1.). Хотя мы рассмотрели только случай прямоугольного $V(n)$, но очевидно, что то же будет и для ступенчатого (кусочно - постоянного) потенциала, а значит и в общем случае.

Переменный шаг Δ разностного дифференцирования в КРУШ эквивалентен переменному коэффициенту при второй производной. Он определяет локальную ширину разрешенной зоны, а форма потенциала задает форму нижней его границы. Если бы зависимость от n появилась не только на диагонали матрицы разностного гамильтониана, но и на соседних с диагональю линиях, это соответствовало бы переменному коэффициенту при операторе кинетической энергии

$$V_1(n) (-\Psi(n+1) + 2\Psi(n) - \Psi(n-1)) - \Delta^2 + V(n) \Psi(n) = E \Psi(n) \quad (9)$$

(что эквивалентно введению потенциала, зависящего от скорости, см. [5] стр. 49-50). Две функции $V(n)$ и $V_1(n)$ уже могут регулировать ширину разрешенной зоны в зависимости от n . В частности, уравнением типа (9) описывается распределение по различным значениям проекции момента K на ось жестко связанную с вращающимся неаксиальным ядром или молекулой [22] (тогда K играет роль координаты n в уравнении (9)). Можно было бы предложить (чего раньше, кажется, не делалось) точно-решаемые модели (конечно-разностные, баргмановского типа) для собственных значений и функций таких распределений по K .

* * *

Решения баргмановского типа в поле периодическом на одной полуоси и постоянном на другой. Соответствующая обратная задача решалась Робертсом [18]. Из двух линейно-независимых решений блоховского типа на полуоси, где действует периодическое поле, (блоховских "синусов", "косинусов" и т.п.) можно построить такую их линейную комбинацию, которая гладко сшивается вместе со своей первой производной с выбранным решением на другой полуоси с постоянным потенциалом. Например, если данная энергия E отвечает полосе разрешенного движения на периодической полуоси, а на другой полуоси $V - E < 0$, сшиваем с экспоненциально затухающим решением. Из таких решений также можно строить потенциалы баргмановского типа.

О потенциалах баргмановского типа в периодическом поле говорилось в работе [11]; позднее нам стала известна работа Трлифая [19] на эту тему. Для построения таких потенциалов могут понадобиться невозмущенные решения в запрещенной зоне (решение соответствующей задачи Хилла см. в [20] стр. 269-273).

Новое изложение теории специальных функций, в частности, с дискретными переменными см. в [21].

Исследования, результаты которых изложены в данной работе, были стимулированы беседами с Загребяевым В.И., Загребновым В.А., Заставенко Л.Г., Зноилом М., Марковским Б., Могильнером А.И., Приезжевым В.Б., Сердюковой С.И., Смородинским Я.А., Широковым А.М., Широковым М.И., Куземским А.Л., Плехановым Е.Б., Ушверидзе А.Г., Чувильским Ю.М., за что автор им весьма признателен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Захарьев Б.Н. Уравнение Шредингера на решетках и в периодическом поле (для пешеходов). Препринт ОИЯИ Р4-90-46, Дубна 1990.
2. Захарьев Б.Н., Костов Н., Плеханов Е.Б. Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции). ЭЧАЯ, т. 21, N4, 1990; Захарьев Б.Н., Плеханов Е.Б. Иллюстрации из коллекции "Квантовая механика в картинках", Препринт ОИЯИ Р4-89-2876 1989.
3. Захарьев Б.Н., Ольховский В.С., Шилев В.М. Сюрпризы квантового туннелирования. Препринт ОИЯИ, 3-4-89-289, Дубна 1989; Труды международного симпозиума "Order, Disorder and Chaos in Quantum Systems" Dubna 1989, Operator Theory: Advances and Applications, vol. 46, p.159, Birkhauser Verlag, Basel 1990.
4. Zakhariev B.N., Zastavenko L.G. Motion along the Axis of a Discrete Channel Variable α . Phys. Rev. A39, N11, p. 5528, 1989.
5. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. М.), Энергоатомиздат, 1985; 2-е переработанное издание Heidelberg, Springer 1990
6. Gallinar J.-P., Mattis D.C. Motion of "hopping" particles in a constant force field. J. Phys. A18, p. 2583, 1985; Merrifield P.E. Tight-Binding Wavefunctions for Electrons in Molecular Crystals in the Presence of an Electric Field. J. Chem. Phys. 39, 3540, 1963.

7. Кричевер И. М. Метод Лапласа. Алгебраические кривые и нелинейные уравнения. Функц. Анализ и Прил. 18, N3, с. 43, 1984.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Наука М. 1989 с. 752.
9. Calogero F., Degasperis A. Inverse Spectral Problem for the One-Dimensional Schroedinger Equation with an Additional Linear Potential. Lett. Nuovo Cim. 23, N4, 1978.
10. Case K. M. Orthogonal Polynomials from the Viewpoint of scattering theory. J. Math Phys. 15, N12, 2166-74, 1974.
11. Зубарев А. Л. Вариационный принцип Швингера в Квантовой механике. М. Энергоатомиздат, 1981.
12. Справочник по специальным функциям под ред. М. Абрамовица и И. Стегана, Наука, Москва, 1979.
13. Янке Е., Эмде Ф. Таблицы функций с формулами и кривыми. Физматгиз М. 1959.
14. Загребаев В. И. Многоступенчатые процессы столкновения составных частиц и квантовое трение. Межвуз сб. Элементарные процессы при столкновении атомных и молекулярных частиц. ЧГУ, Чебоксары 1977; Ann. Phys. 197, p. 33, 1990; ЯФ 49(6), 1630, 1989
15. Неудачин В. Г., СМЕРНОВ Ю. Ф., Чувильский Ю. М. и др. Нуклонные ассоциации в атомных ядрах и ядерные реакции многонуклонных передач. Гл. 11. Наукова думка. Киев, 1988
16. Pivovarchik V. N., Suzko A. A., Zakhariev B. N. Phys. Scr. 34, p. 101, 1986.
17. Вайтман А. Проблемы в релятивистской динамике квантованных полей (с. 116-122). Физматгиз, М. 1968
18. Roberts T. M. Inverse scattering for Step-Periodic Potentials in One Dimensions. Inverse Probl. 6, N 5, 797, 1990.
19. Trlify L. The Darboux and Abraham-Moses Transformations of the one-dimensional Periodic Schroedinger Equation and Inverse Problems. Inverse Problems 5, N6, 1145. 1989.
20. Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа т. 2 (с. 269-273), Физматгиз, М. 1963
21. Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Специальные функции математической физики. М. Наука. 1984; Никифоров А. Ф., Суслов С. К., Уваров В. Б. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной. М. Наука. 1985;
22. Браун П. А. Введение в теорию молекулярных спектров Л. Изд. ЛГУ 1983; Braun P. A., Shirokov A. M., Smirnov Yu. F. Molec. Phys. 56^ p. 573, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 февраля 1991 года.