

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Р4-92-10

Б. Н. Захарьев, С. И. Сердюкова

ПЕРЕСТРОЙКА СПЕКТРОВ В ДИСКРЕТНОЙ  
КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ  
(НОВЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ РЕШЕТОЧНОЙ ИНЖЕНЕРИИ)

Направлено в журнал "Physical Review"

1992

Перестройка спектров в дискретной квантовой механике  
(новые элементы решеточной инженерии)

Показано, как сдвигать отдельные уровни прямоугольной ямы конечно-разностного уравнения Шредингера и изменять нормировочные константы избранных уровней. Указаны особенности дискретного случая по сравнению со случаем уравнения движения с непрерывной переменной. Обычные потенциальные параметры  $v_n$  (диагональные) определяют форму нижней границы разрешенной зоны, а соседние с диагональными  $u_n$  (характерные для потенциалов, зависящих от скорости  $V(p^2)$ ) — ширину этой зоны. Выяснена различная роль  $u_n$  и  $v_n$  в сдвигах уровней бесконечной прямоугольной ямы:  $v_n$  толкает в одну сторону уровни, симметрично расположенные относительно середины спектра, а  $u_n$  — в противоположную.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики и Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод авторов

Zakhariev B.N., Serdyukova S.I.

P4-92-10

Reconstruction of Spectra in the Discrete Quantum Mechanics  
(New Elements of the Lattice Quantum Engineering)

It is shown what perturbation is required to variate the normalizing constants of the chosen levels and to shift separate energy levels in the rectangular well for the finite-difference Schroedinger eq. Peculiarities are found of the discrete case in comparison with the equation of motion with the continuous coordinate. The ordinary potential parameters  $v_n$  (diagonal) determine the shape of the lower boundary of the allowed zone, and the  $u_n$  on the neighbour diagonals determine the width of the zone. The different influence of  $v_n$  and  $u_n$  on the shifts of the energy levels in the rectangular well is clarified. The  $v$  pushes in one direction the levels symmetrically posed according to the middle of the spectrum, and  $u_n$  pushes them in opposite directions.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics and the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

## ВВЕДЕНИЕ

В ряде предыдущих работ [1-8] было выяснено, как селективно менять спектральные параметры различных квантовых систем: двигать отдельные уровни энергии  $E_\nu$ , варьировать отдельные приведенные ширины  $\gamma_\nu$  [5, 1-3], сгущать, разрезать спектральную решетку [7], рвать в нужном месте спектр периодическим потенциалом [8].

Был предложен новый подход [4,6] к интерпретации коэффициентов  $F_\alpha$  разложений волновых функций

$$\Psi(x) = \sum_{\alpha} F_{\alpha} \Phi_{\alpha}(x), \quad (1)$$

как другого представления волновой функции с дискретной координатой  $\alpha$  вместо непрерывной  $x$ . Экзотика движения волн по решеткам индексов  $\alpha$  (номеров конфигураций или каналов) рассматривалась в [4].

Однако оставалось неясным, как двигать отдельные уровни в бесконечной прямоугольной яме с дискретной координатой. Оказалось, что здесь не годится алгоритм, работавший в случае непрерывной координаты: вводить отталкивание в потенциал, чтобы двинуть уровень, например, вверх в точках наибольшей чувствительности состояния (где наибольшее значение принимает модуль соответствующей волновой функции) и компенсировать влияние на другие состояния притяжением в области узлов сдвигаемого состояния [1-3].

Для конечно-разностного уравнения Шредингера (с тридиагональным гамильтонианом: при каждом фиксированном  $n$  зацеплены значения функций в ближайших соседних точках  $n\pm 1$ ; мы будем полагать  $h=2m=1$ ):

$$-[\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}]/\Delta^2 + v_n \Psi_n = E \Psi_n \quad (2)$$

в бесконечной прямоугольной яме ( $\Psi_0 = 0$ ;  $\Psi_{N+1} = 0$ ; всего  $N$  связанных состояний по числу дискретных значений координаты внутри ямы) имеется симметрия по модулю волновых функций состояний (1-го и  $N$ -го; 2-го и  $(N-1)$ -го и т.д.), энергии которых располагаются симметрично же относительно середины

спектра  $(E_1 + E_N)/2$ . Благодаря этому, возмущение  $v_n$ , сдвигающее одно из состояний, необходимо сдвигает и симметричное ему. Как будет показано, различить симметричные состояния позволяет дополнительное возмущение  $u_n$  в тридиагональном гамильтониане на линиях, соседних с главной диагональю:

$$-[\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}]/\Delta^2 + u_n \Psi_n + u_n \Psi_{n+1} + v_{n-1} \Psi_{n-1} = E \Psi_n. \quad (2')$$

Это шаг и к более глубокому пониманию нелокальных взаимодействий. Ведь тридиагональная матрица взаимодействия - простейший представитель нелокальных потенциалов ("степень нелокальности" потенциала нарастает с появлением все большего числа отличных от нуля матричных элементов матрицы взаимодействия на все более дальних диагоналях).

Особенность дискретных задач проявляется и при изменении приведенных ширин  $\gamma_\nu$ . Как уже отмечалось ранее [1], нельзя изменить  $\gamma_\nu$  у одного лишь состояния: чтобы не испортить "нормировочное" соотношение  $\sum_{\nu} \gamma_{\nu}^2 = 1$  нужно менять по крайней мере две из набора ширин  $\{\gamma_{\nu}\}$ . Кроме того, при изменении  $\gamma_\nu$  нарушается симметрия (по модулю) производных всех собственных функций на краях бесконечной ямы. Это препятствует созданию аналога алгоритма расщепления непрерывного спектра в заранее заданных местах, как в случае непрерывной координаты [1-3].

В конечно-разностном случае связи между спектральными параметрами  $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$  ( $N$  значений потенциала  $v_n$  определяют  $2N$  параметров) мешают использовать технику потенциалов баргмановского типа. По-видимому, она остается в силе для квазилокальных потенциалов  $v(r^2)$ , для которых спектральные параметры  $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$  почти полностью развязываются ( $2N-1$  значений потенциала на главной и соседней с ней диагоналях матрицы взаимодействия, остается лишь одна связь  $\sum_{\nu} \gamma_{\nu}^2 = 1$ ).

## СДВИГИ УРОВНЕЙ $E_\nu$

С одной стороны, как и ожидалось, для сдвига уровня в бесконечной прямоугольной яме (с  $N = 10$ ) возмущение потенциала  $v$  имеет качественно ту же форму, что и в случае непрерывной координаты (см. рис.1). С другой стороны, симметрия состояний относительно середины спектра приводит к тому, что возмущение одного лишь  $v_n$  действует одинаково на симметричные

состояния, например, на основное и самое верхнее. Возникает проблема, как различить эти состояния, чтобы сдвинуть только один уровень. Оказывается, это достигается введением возмущения  $u_n$  на боковых диагоналях гамильтониана. Величина  $u$ , подобно переменному шагу  $\Delta$ , управляет локальной шириной разрешенной зоны.

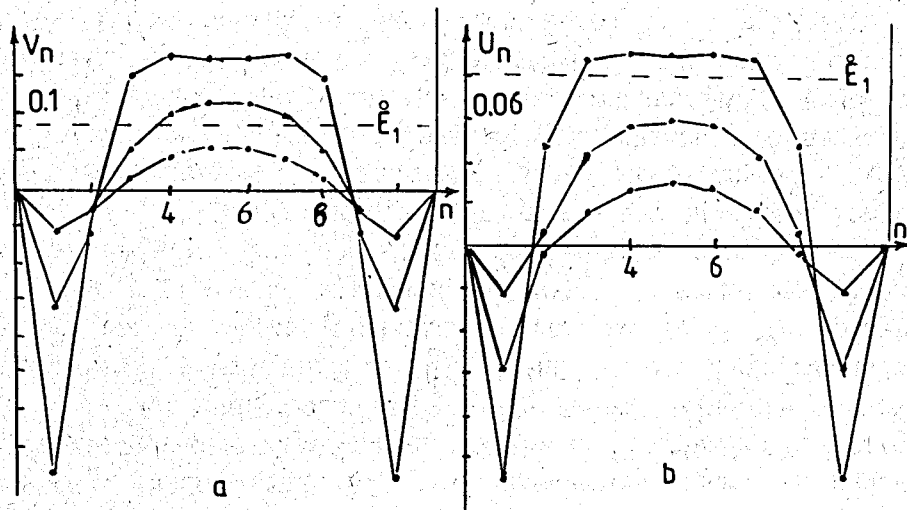


Рис.1. Потенциалы (a)  $v_n$  и (b)  $u_n$ , сдвигающие первый уровень бесконечной прямоугольной ямы вверх и не меняющие положение остальных уровней. Разные кривые на одном графике отвечают разной высоте подъема основного уровня. По форме потенциалы на главной диагонали  $v_n$  и на соседних с ней диагоналях  $u_n$  близки и очень напоминают соответствующее возмущение  $v(x)$  в непрерывном случае (с), по модулю  $u_n$

и  $v_n$  различаются примерно в два раза. Дискретные значения функций соединены для удобства обозрения сплошными линиями (то же и на других рисунках). Пунктиром помечены уровни невозмущенной ямы. Серии кривых (a,b) отвечают сдвигам  $(E_2 - E_1) d$ , где  $d=0; 0.25; 0.5; 0.75$ .

Качественно ясно, что при сжатии зоны уровни, симметрично расположенные относительно середины спектра,

подталкиваются навстречу друг другу, при расширении зоны - растаскиваются друг от друга.

Это особенно ясно видно при постоянном  $u$ . Введение  $u \neq 0$  в разностное уравнение Шредингера (для удобства мы еще добавили и вычли  $2u/\Delta^2$ ):

$$[(1-u)\Psi_{n+1} - 2(1-u)\Psi_n + (1-u)\Psi_{n-1}]/\Delta^2 + (v_n + 2u/\Delta^2)\Psi_n = E\Psi_n \quad (3)$$

эквивалентно изменению  $\Delta^2 \rightarrow \Delta^2/(1-u)$  и дополнительному сдвигу всей полосы на  $2u/\Delta^2$ . А изменение с  $\Delta$  ширины разрешенной зоны двигает уровни, лежащие по разные стороны середины спектра, в противоположных направлениях. Сложение или взаимное подавление влияния на уровни  $E_n$  изменения  $v_n$  и  $u_n$  позволяет производить их смещение по произвольному выбору.

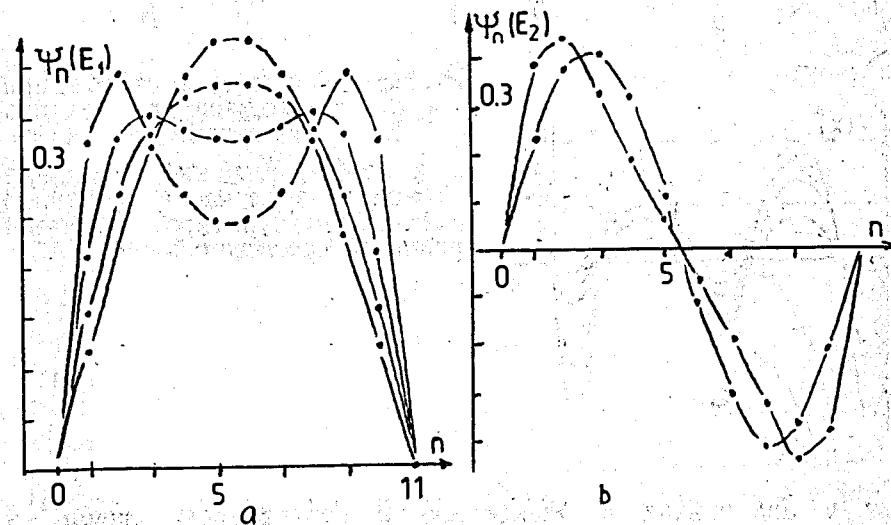
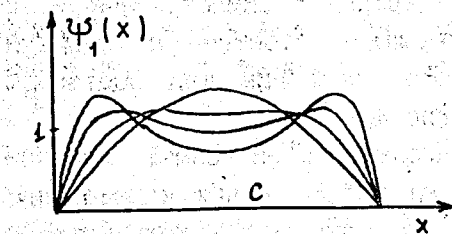


Рис.2. (a,b): Изменение волновых функций первых двух уровней при различных сдвигах основного уровня вверх по направлению к первому возбужденному:  $E_1 \rightarrow E_2$ . Для сравнения приведены соответствующие функции непрерывного случая (с).



Элементы матрицы взаимодействия, смещающие вверх второй (то есть первый возбужденный) уровень бесконечной

прямоугольной ямы с 10 дискретными значениями координаты внутри ямы показаны на рис.3. Здесь, правда, подобие форм  $v$  и  $u$  выдержано в меньшей степени, чем на рис.1.

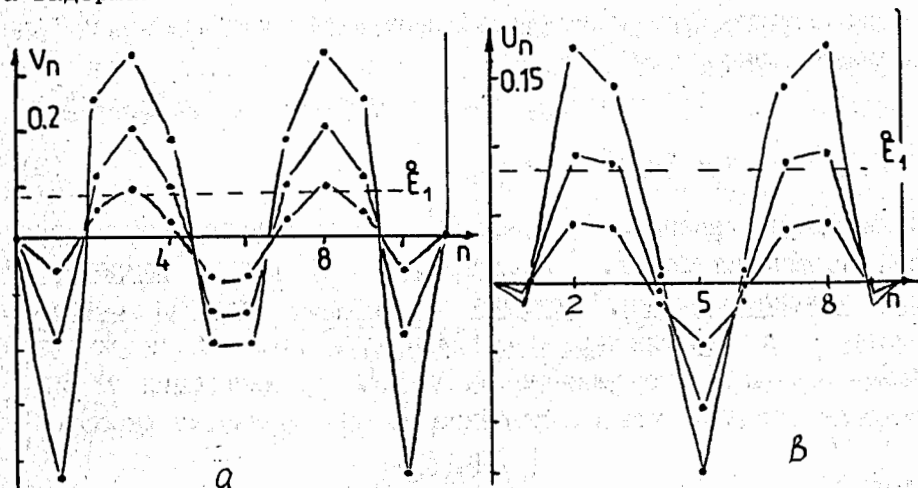
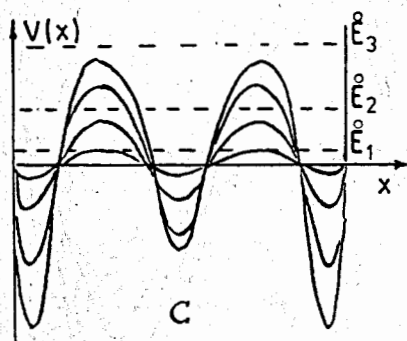


Рис.3а,б. Потенциальные возмущения  $v$  и  $u$ , необходимые для сдвига  $E_2 \rightarrow E_3$ . Для сравнения показаны и соответствующие локальные потенциалы в случае непрерывной координаты (с). Пунктиром помечены уровни невозмущенной ямы.



Форма  $v$  аналогична в дискретном и непрерывном случае, а подобная же форма  $u$  позволяет удерживать симметричный 9-й уровень на прежнем месте. Деформация собственных функций основного и первого возбужденного состояний при поэтапном подъеме  $E_2$  к  $E_3$  представлена на рис.4.

Потенциалы  $v$  и  $u$ , сдвигающие вниз самый верхний (десятый) уровень, представлены на рис.5. У них качественно много общего с потенциалами на рис.1а,б, поднимающими (симметричный ему) первый уровень. Только знаки потенциалов и противоположные.

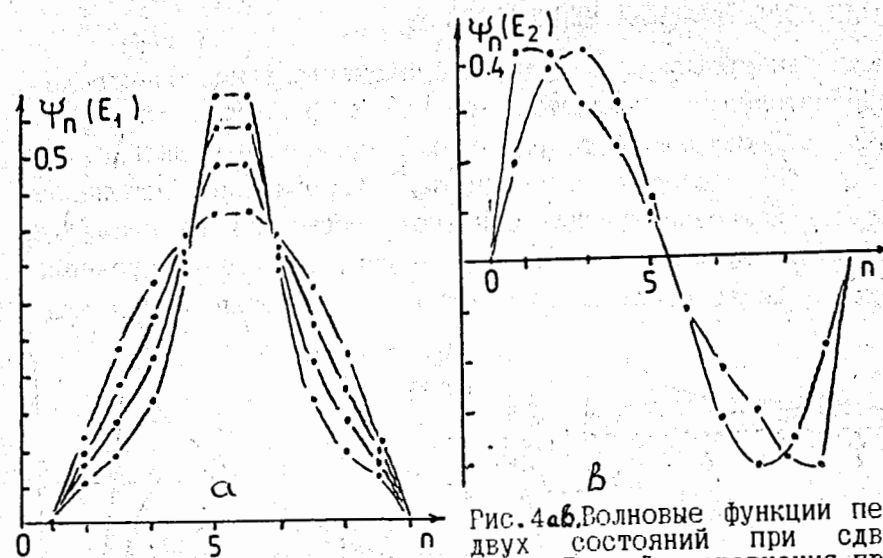


Рис.4а,б. Волновые функции первых двух состояний при сдвигах  $E_2 \rightarrow E_3$ . Для сравнения приведены функции основного состояния для непрерывного случая (с).

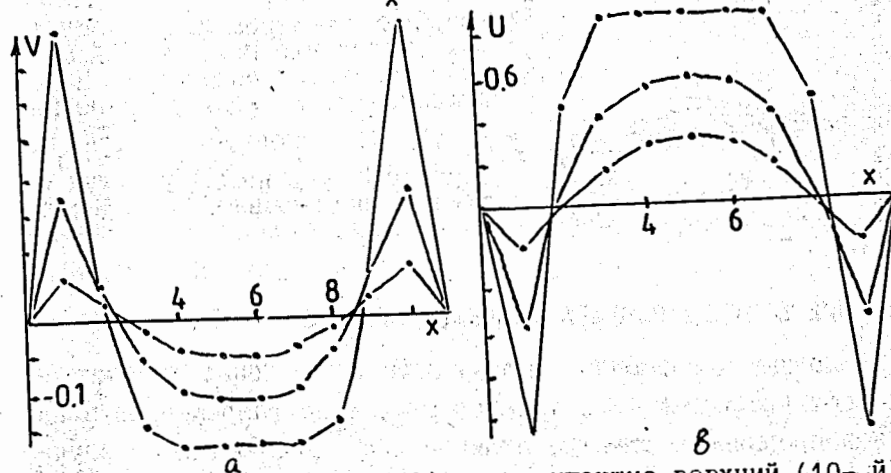
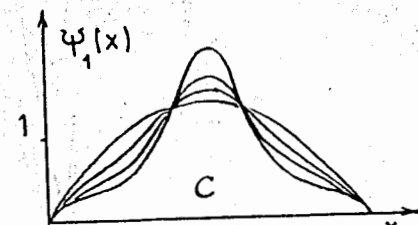
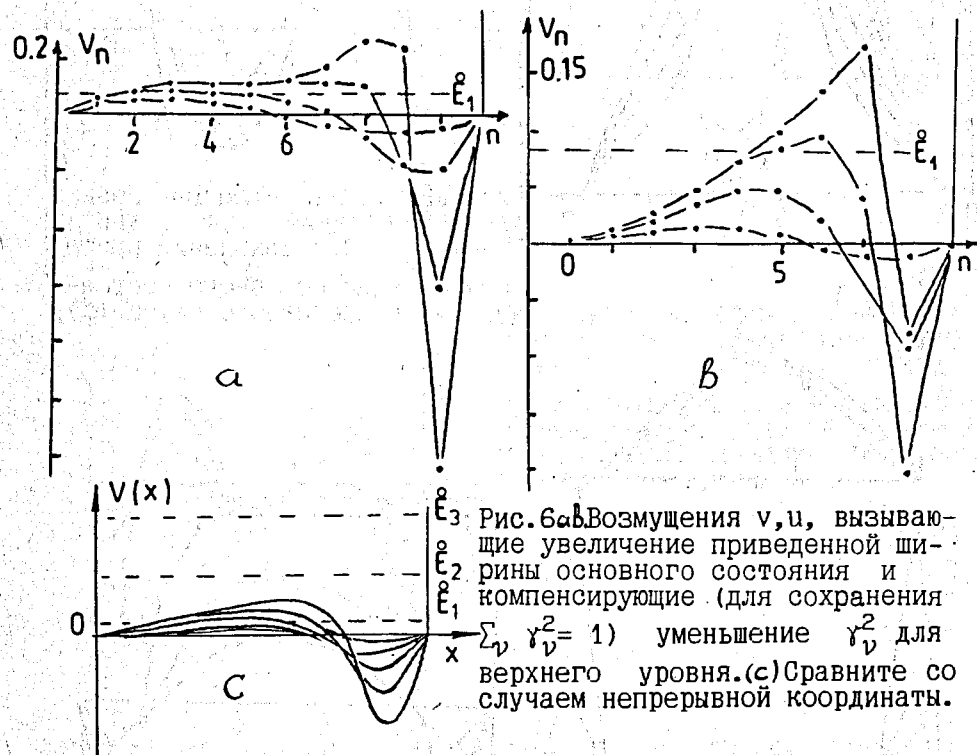


Рис.5. Потенциалы (а)  $v$  и (б)  $u$ , сдвигающие верхний (10-й) уровень бесконечной прямоугольной ямы вниз к ближайшему соседу ( $E_{10} \rightarrow E_9$ ) и не меняющие положение остальных уровней. По форме, но с точностью до знака потенциалы на главной диагонали  $v$  и на соседних с ней диагоналях  $u$  совпадают с показанными на рис. 1, но теперь  $u$  и  $v$  разных знаков.

## ИЗМЕНЕНИЕ НОРМИРОВОЧНЫХ МНОЖИТЕЛЕЙ $\gamma_\nu$

Помимо энергетических уровней фундаментальными спектральными параметрами являются  $\gamma_\nu$ , в качестве которых, например, в R-матричной теории служат приведенные ширины. На рис. 6 и 7 показаны потенциалы, вызывающие изменение производной волновой функции основного состояния на краю ямы, и собственные функции, отвечающие первому и второму уровням. Бросается в глаза аналогия дискретного и непрерывного случаев.



## ПРОСТЕЙШИЕ ПРИМЕРЫ РАЗРЫВА РАЗРЕШЕННОЙ ЗОНЫ

В случае постоянного потенциала  $v_n = \text{const}$  в спектре, отвечающем уравнению (2), имеется лишь одна разрешенная зона: полоса непрерывного спектра шириной  $4/\Delta^2$ . В простейшем случае периодического дискретного потенциала, когда  $v_n$  попеременно принимает два различных значения (период  $N=2$ ), эта зона разрывается на две спектральной щелью-лакуной. При  $N=3$  образуются две лакуны, при  $N=4$  - три и т.д.

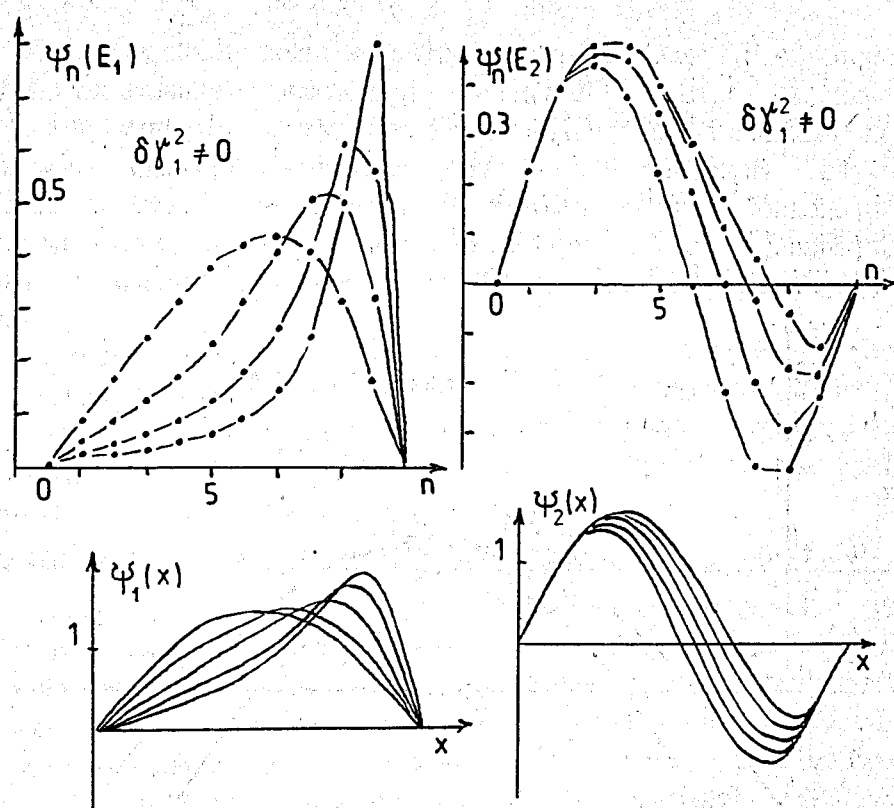


Рис. 7. Волновые функции первых двух состояний при изменении приведенной ширины (производной волновой функции на краю ямы) первого уровня в дискретном и непрерывном случае.

Пусть  $v_{2m} = 0$ ;  $v_{2m+1} = v = \text{const}$ , то есть потенциал периодический с  $N = 2$ . Потребуем, как обычно, чтобы волновая функция и ее производная менялись через период на некоторый общий фазовый множитель:

$$\Psi_1 = \exp(i\delta) \Psi_3; \quad \Psi_0 = \exp(i\delta) \Psi_2. \quad (4)$$

Тогда для  $\delta$  получаем из (2) при  $n = 1$  и  $2$  выражение:

$$\exp(i\delta) = -1 + (2-E)(2-E+v)/2 \pm \frac{1}{2} \{ [2-(2-E)(2-E+v)]^2 - 4 \}^{1/2}.$$

Откуда следует условие реальности  $\delta$ :

$$|D(E)| \equiv |2 - (2-E)(2-E+v)| < 2, \quad (5)$$

которое одновременно служит критерием принадлежности значений  $E$  разрешенной зоне. На рис.8 представлена зависимость  $D(E)$  при различных значениях  $v$ , откуда видно, что при  $v=0$  нет лакуны (кривая  $D(E)$  лишь касается границы верхней запрещенной зоны и выходит за границы  $\pm 2$  только в нижнюю запрещенную зону, простирающуюся до  $-\infty$ , а полоса непрерывного спектра, где  $|D(E)| < 2$ , не имеет разрывов).

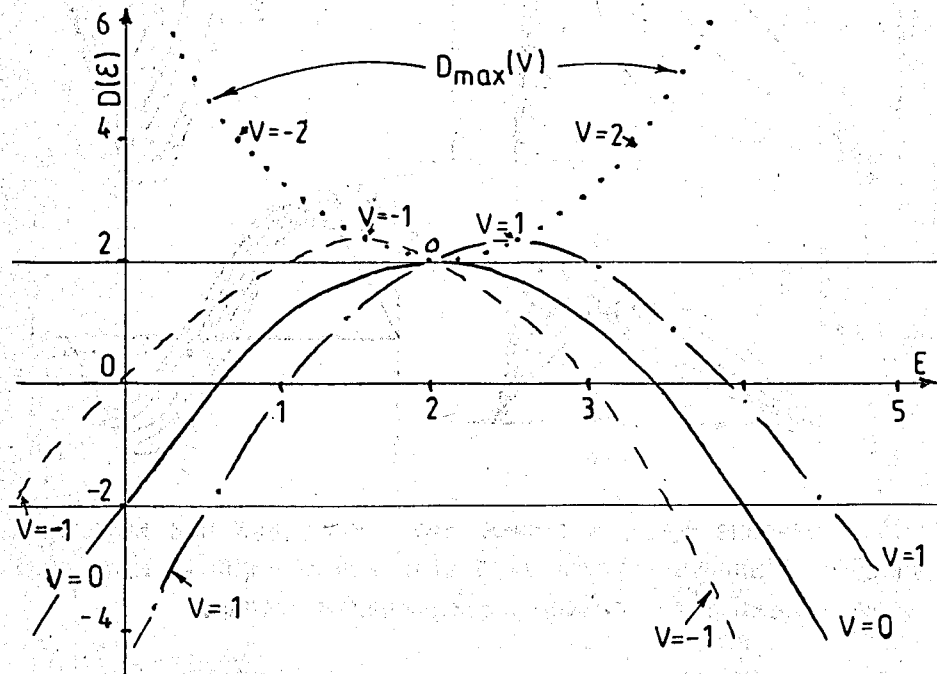


Рис.8. Зависимость функции Ляпунова (дискриминанта Хилла)  $2D$  от энергии при  $v = 0; \pm 1$ . Разрешенным зонам отвечают значения  $E$ , для которых выполняется условие (5):  $D$  лежит между  $\pm 2$ . Чем больше  $|v|$ , тем шире разрыв (лакуна) между сужающимися участками непрерывного спектра. Пунктиром обозначены положения максимумов парабол  $D(E)$  при разных  $v$ .

Зона неустойчивости к экспоненциальному разбалтыванию решения находится рядом с центром разрешенной зоны: невозмущенной задачи выше (ниже)  $E_{\max}/2$  при  $v > 0$  ( $< 0$ ).

С ростом  $|v|$  полосы разрешенных зон расходятся все дальше друг от друга и становятся все уже. Аналогично считается спектр при большем периоде  $N = 3, 4, \dots$ , только при  $N=3$  возникают две лакуны, при  $N=4$  — три и т.д.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе удалось лучше понять различную роль элементов тридиагональной матрицы взаимодействия, лежащих на главной и соседних с ней диагоналях при сдвигах отдельных уровней энергии связанных состояний. В дальнейшем было бы желательно так же просто понять роль и других диагоналей гамильтониана, а тем самым — механизмы действия нелокальных сил.

Авторы выражают благодарность И.В.Амирханову за постоянную готовность обсуждать проблемы квантовой физики, что очень помогло нашей работе. Мы признательны также Л.И.Нехамкину за дискуссии по поводу перестроек спектра, рассмотренных в приложении.

## ПРИЛОЖЕНИЕ. ПЕРЕСТРОЙКА СПЕКТРА В ЭКВИДИСТАНТНЫЙ И СО ЩЕЛЬЮ

Рассмотрим примеры более сложной перестройки, со сдвигами большого числа уровней бесконечной прямоугольной ямы. На рис.П1а представлена форма возмущения  $u$ , оставляющая крайние уровни спектра (1-й и 10-й) на своих прежних местах и располагающих все уровни на равных расстояниях  $\Delta E = (E - E_1)/(N-1)$  друг от друга. На рис.П1б показана  $\Psi(E_1)$ .

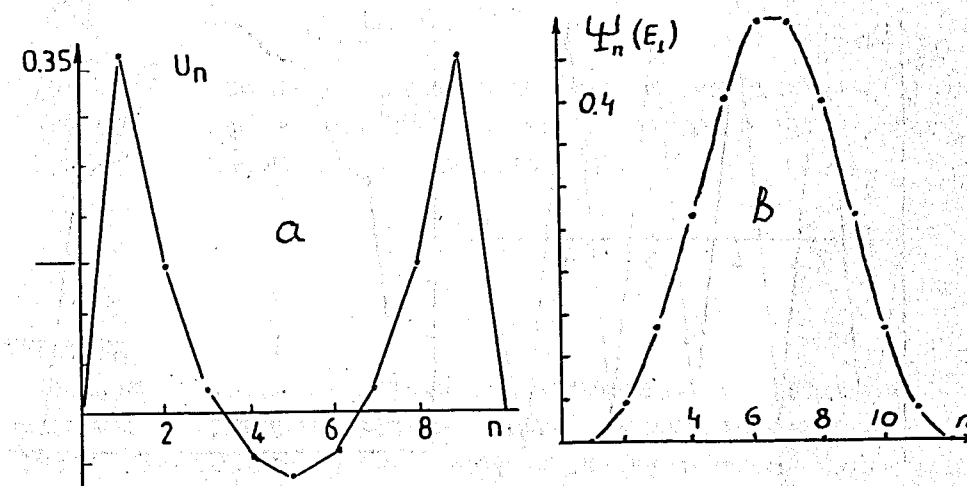


Рис.П1а) Потенциалы  $u$ , перестраивающие спектр бесконечной дискретной прямоугольной ямы в эквидистантный (внутри ямы располагаются 10 координатных точек и уровней в яме 10). Потенциал  $v$  при этом остается равным нулю. Точки значений потенциалов соединены для наглядности линиями. (б) Функции  $\Psi(E_1)$ .

Максимумы  $u$  у краев ямы сжимают там разрешенную зону, что мало влияет на крайние уровни (1-й и 10-й), волновые функции которых сильно спадают к краям ямы, и подталкивают остальные уровни к центру спектра (см. схему перестройки уровней на рис. П2).

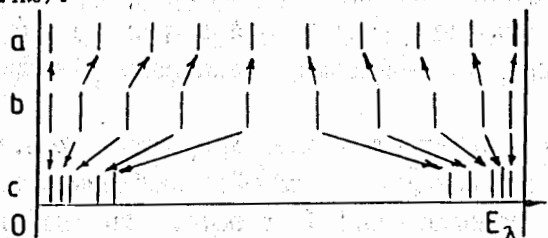


Рис. П2. Схемы 10 уровней в бесконечных ямах с 10 координатными точками между потенциальными стенками. Посередине показаны уровни невозмущенной прямоугольной ямы, сверху – эквидистантно перестроенный спектр, снизу – спектр с большой щелью.

Потенциал  $u$ , раздвигающий уровни спектра к его краям и создающий широкую щель в центре спектра, показан на рис. П3. То, что самые большие сдвиги претерпевают при этом средние уровни, модули волновых функций которых имеют наибольшее число максимумов, приводит к пилообразной форме возмущающих потенциалов. В силу симметрии  $v$  равен нулю.

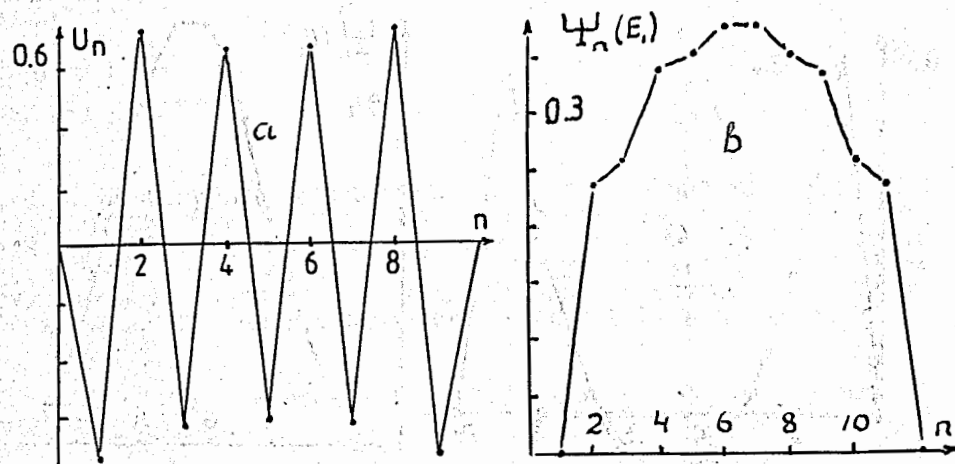


Рис. П3а. Потенциал  $u$ , создающий щель в середине спектра, как показано на нижней схеме уровней на рис. П2. (б)  $\psi_n(E_i)$

Равенство нулю  $v$  объясняется требованием симметричности деформаций спектра относительно его центра. Пять значений

потенциала  $u$  (при десяти точках внутри ямы остальные четыре значения  $u$  задаются симметрично) определяют пять же точек спектра.

При симметричном сдвиге пары уровней (например, 1-го и 10-го или 2-го и 9-го, см. рис. П4)  $v$  также оказываются нулевыми, и наоборот, можно предсказать, что при создании несимметрично расположенной щели (или сгущения) в спектре потребуются отличные от нуля значения  $v$ .

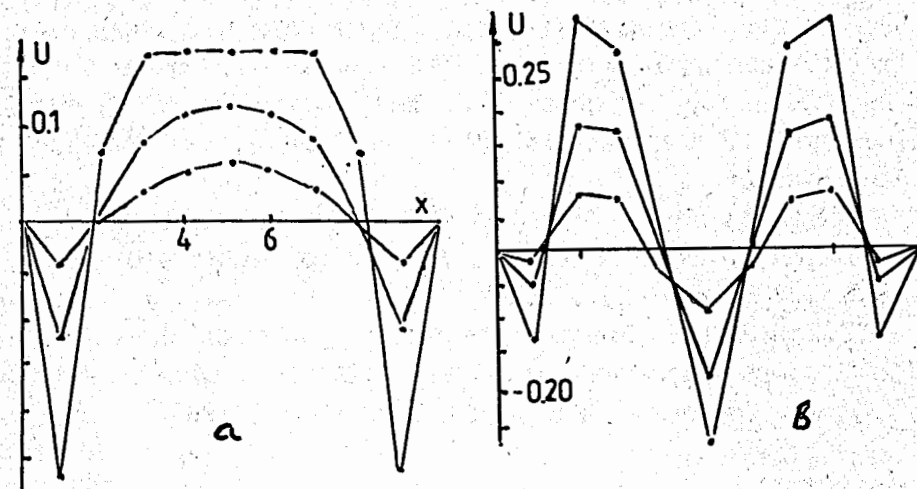


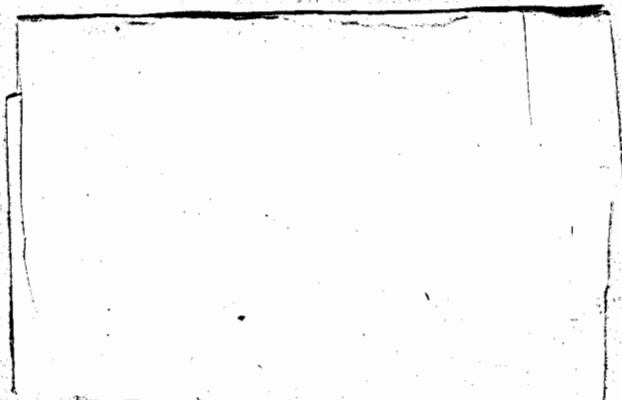
Рис. П4. Потенциалы  $u$ , симметрично сдвигающие навстречу друг другу (а) первый и последний 10-й; (б) второй и 9-й уровни. Сравни с потенциалами  $u$  на рис. 1б и 3б.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. Энергоатомиздат, М. 1985. Переработанное и дополненное английское издание: Springer, Heidelberg, 1990.
2. Захарьев Б.Н., Плеханов Е.Б. Иллюстрации из коллекции "Квантовая механика в картинках". Сообщение ОИЯИ, Р4-89-287, Дубна, 1989.



3. Захарьев Б.Н., Костов Н., Плеханов Е.Б. Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции), ЭЧАЯ, 21, с.914-962, 1990.
4. Захарьев Б.Н. Дискретная и непрерывная квантовая механика, точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции II), Направлено в ЭЧАЯ, 23, №5, 1992.
5. Poshel J., Trubovitz E. Inverse Spectral Theory. Academic. New York 1987.
6. Заставенко Л.Г., Захарьев Б.Н. Новый взгляд на механизмы образования спектральных зон (дискретная и обычная квантовая механика). Сообщение ОИЯИ, P4-91-453, Дубна, 1991; Korobov V.I., Zakhariev B.N. New algorithms of spectral management. Preprint JINR, E4-91-467, Dubna, 1991 (submitted to Phys.Rev.).
7. Serdyukova S.I., Zakhariev B.N. Why the quantum wave on the lattice doesn't slide down the potential slope. Preprint JINR E4-91-237, Dubna 1991.
8. Захарьев Б.Н. Элементы теории "управления" резонансами квантового рассеяния (простые модели, поясняющие общий случай). Сообщение ОИЯИ, Дубна, P4-91-440, 1991.



Рукопись поступила в издательский отдел  
9 января 1992 года.