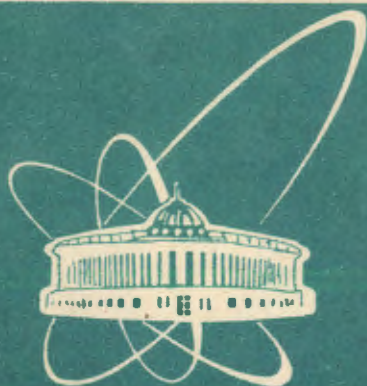


93-179



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-93-179

Б.Н.Захарьев, В.М.Чабанов

ДЕФОРМАЦИИ ПОТЕНЦИАЛОВ,
ВЫБРАСЫВАЮЩИЕ ОТДЕЛЬНЫЕ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ

Направлено в журнал «Physical Review A»

1993

"...переход на единственный (!) уровень молекулы хлорофилла запускает механизм всей жизнедеятельности на земле" [П.Рейвн и др.]

1 ВВЕДЕНИЕ

Удивительно, что до сих пор еще не публиковались картинки деформаций потенциалов при удалении из их спектров отдельных уровней. В данной работе мы получили такие картинки, нам их удалось просто объяснить, и теперь нам представляется, что на них должен был бы взглянуть каждый, кто имеет хоть какое-то отношение к квантовой механике. Таким образом можно задешево получить некоторое расширение квантового кругозора. Указанное упущение, по-видимому, объясняется тем, что квантовой обратной задачей, в рамках которой это можно было сделать, больше занимались математики, а не физики. Последние же часто еще не знают о возможностях уже разработанного математического аппарата. Математики могут обойтись формулами и без графических иллюстраций, а для физических приложений последние очень нужны, чтобы поднять понимание сути явления на интуитивный уровень.

Первыми, кто привел формулы для возмущений, убирающих уровни, были Абрагам и Мозес [1]. Строго говоря, одна тривиальная иллюстрация удаления основного состояния из осциллятора уже приводилась (в работе Сукумара [2]). Благодаря эквидистантности спектра, если не нарушать симметрию, в этом случае происходит сдвиг вверх по энергии на один межуровневый интервал кривой осцилляторного потенциала без каких-либо искажений ее формы. Но догадаться, какие изменения в той же бесконечной яме необходимы для исчезновения второго или следующих уровней, нам и самим не удавалось без компьютерной графики, хотя мы и задавали себе этот вопрос. Кстати, предлагаем читателю испытать это на себе. Может быть, кто-то окажется догадливее авторов и еще до прочтения этой работы сообразит, какими возмущениями можно порождать или поглощать отдельные квантовые состояния в бесконечной яме.

Была попытка использовать опыт деформации потенциалов для сдвига отдельных уровней, где уже достигнута ясность [3-7], какая форма возмущений ΔV обеспечивает смещение избранных собственных значений энергии. Однако "уничтожение" уровня эквивалентно бесконечному(!) числу таких сдвигов. Действительно, сдвинув "нежелательный" уровень на место ближайшего соседа сверху, а тот, в свою очередь, — на место соседа выше и т.д. до бесконечности, мы убеждаемся в том, что избранное состояние как бы пропало. Но сложно представить себе, как суммируется такое неограниченное число возмущений.

Первые результаты расчетов (см. рис.1) даже показались неправдоподобными

из-за нарушения симметрии потенциала при удалении уровня. Ведь исходная яма была симметричной и модуль "уничтожаемого" состояния симметричен. Форма же симметричного потенциала полностью задается своим спектром. Откуда же берется асимметрия? Дело здесь в том, что операция поглощения уровня является неоднозначной: свободными параметрами остаются нормировочные константы, которые, наряду со значениями уровней, являются фундаментальными спектральными данными. В подходе Марченко, которым мы воспользовались, нормировки фиксируют асимптотическое поведение собственных функций с одной из сторон, а мы для простоты оставляли их у всех сохраняемых уровней неизменными, внося тем самым наблюдаемую асимметрию.

Суть преобразования потенциала состоит в том, что в каждом из бесконечного числа состояний выше удаляемого убирается по одному узлу. Для этого собственные функции нужно сделать "короче на полволны", что достигается сужением потенциальной ямы, например сдвигом левой стенки вправо, как на рис.1. Можно добиться того же и сдвигом правой стенки. По-видимому, существует и соответствующее симметричное возмущение, форма которого предсказывается "симметризацией" кривых с рис.2.

2 ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Какое из высказываний сотрудников ЛТФ Вам больше по душе?

"То, что как следует понял сам, я смогу просто объяснить любому".

"Кто меня не понял, сам виноват: в науке нет царских путей".

"Если я понятно изложу результаты, ими могут воспользоваться другие и нанести мне ущерб".

Для напоминания сути методов обратной задачи [4-6] сделаем несколько элементарных замечаний. Хотя авторы солидарны с первым из приведенных выше утверждений, но не уверены, что сами этот раздел изложили лучшим образом. Но, во всяком случае, это очередная попытка максимально доступного и краткого вступления.

Рассмотрим некоторую потенциальную яму с лесенкой дискретных уровней энергии E_ν связанных состояний с ортонормированными волновыми функциями $\psi_\nu(x)$, которые мы рассматриваем как репер в бесконечномерном пространстве. Помимо уровней энергии есть еще фундаментальные спектральные параметры - нормировочные константы. Для задачи на полуоси $[0, \infty)$ это могут быть коэффициенты c_ν пропорциональности между нормированными на единицу функциями $\psi_\nu(x)$ и так называемыми регулярными решениями $\varphi_\nu(x)$, имеющими в точке $x=0$ производную, равную 1:

$$\psi_\nu(x) = c_\nu \varphi_\nu(x). \quad (1)$$

Двойной набор спектральных параметров $\{E_\nu, c_\nu\}$ полностью задает форму бесконечной потенциальной ямы. Те же функции при фиксированном значении координаты x и при всех значениях E_ν можно рассматривать как другие вектора и тоже ортонормированные, только в этом случае свойство ортонормированности (с весом c_ν^2) лучше известно как соотношение полноты:

$$\sum_\nu c_\nu^2 \varphi_\nu(x) \varphi_\nu(y) = \delta(x - y). \quad (2)$$

Этому соотношению удовлетворяют как решения исходного, так и возмущенного потенциала, только берутся они при значениях энергии разных спектров и ортонормированы они с разным весом c_ν^2 и $c_\nu'^2$. А обратная задача перехода от исходного потенциала к возмущенному

$$\overset{\circ}{V} \rightarrow V$$

сводится к перенормировке ортов: при изменении весовой функции исходные собственные функции уже не будут ортогональны. Напомним стандартную процедуру ортогонализации Шмидта на примере двух первоначально неортогональных (в смысле новой весовой функции) векторов $\overset{\circ}{\varphi}_1, \overset{\circ}{\varphi}_2$ (см. рис.1).

В качестве первого орта φ_1 новой системы возьмем первый невозмущенный орт $\overset{\circ}{\varphi}_1$, а второй построим из второго же невозмущенного, только вычтем из него все, что в нем имеется лишнего (параллельного $\overset{\circ}{\varphi}_2$), для ортонормированности с новым весом.

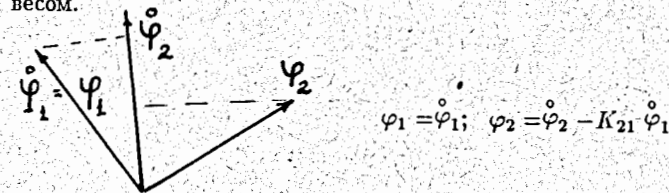


Рис.1. Для ортогонализации исходных векторов $\overset{\circ}{\varphi}_1, \overset{\circ}{\varphi}_2$ можно оставить первый прежним, а из второго выбросить проекцию на первый (в смысле скалярного произведения с новым весом)

Непрерывным аналогом этой процедуры, когда роль индексов-номеров ортов играют значения x , является:

$$\varphi_\nu(x) = \overset{\circ}{\varphi}_\nu(x) + \int K(x, y) \overset{\circ}{\varphi}_\nu(y) dy, \quad (3)$$

где пределы интегрирования $0, x -$ в подходе Гельфанда-Левитана (Г-Л) и $x, \infty -$ в подходе Марченко (М), а коэффициенты K определяются из условия ортонормировки $\varphi_\nu(x)$ ко всем векторам с "номерами" ($y < x$ или $y > x$ в подходах Г-Л или М соответственно), уже использованными при построении новых ортов, пока

шли к точке x (слева или справа по Г-Л или М). И этими уравнениями для K как раз и являются уравнения обратной задачи (с пределами интегрирования, как и в (3)):

$$K(x, y) + Q(x, y) + \int K(x, t)Q(t, y)dt = 0, \quad (4)$$

а ядро Q строится из невозмущенных функций при старых и новых спектральных параметрах:

$$Q(x, y) = \sum_{\nu} c_{\nu}^2 \dot{\varphi}_{\nu}(x) \dot{\varphi}_{\nu}(y) - \sum_{\mu} c_{\mu}^2 \dot{\varphi}_{\mu}(x) \dot{\varphi}_{\mu}(y) + \dots \quad (5)$$

Первая сумма здесь задается возмущенными параметрами E и s , а вторая — исходными. В наших задачах непрерывного спектра не будет, поэтому интеграл, отвечающий изменениям данных рассеяния, пропадает.

Если изменить спектральные параметры конечного числа связанных состояний, то для остальных соответствующие члены в левой и правой суммах взаимно сократятся, так что в Q останется конечное число членов, факторизованных по "номерам" x и y . А с таким вырожденным ядром уравнение обратной задачи сводится к системе конечного числа алгебраических уравнений. По найденному из них K определяется новый (возмущенный) потенциал.

3 ТРАНСФОРМАЦИЯ ОСЦИЛЛЯТОРА

Рассмотрим ядро Q интегрального уравнения обратной задачи (в подходе Марченко, см., например, [4]):

$$K(x, y) + Q(x, y) + \int_x^{\infty} K(x, t)Q(t, y)dt = 0. \quad (6)$$

Оно является как бы "вывернутым наизнанку" уравнением Шредингера. Вместо процедуры прямой задачи, когда в обычное уравнение Шредингера вкладывается некоторый потенциал $V(x)$ и после решения находятся физические свойства данной квантовой системы, мы можем в обратной задаче вложить желаемые спектральные параметры в ядро Q

$$Q(x, y) = \sum_{\nu} \dot{\psi}(\kappa_{\nu}, x) \dot{\psi}(\kappa_{\nu}, y) - \sum_{\mu} \dot{\psi}(\kappa_{\mu}, x) \dot{\psi}(\kappa_{\mu}, y) + \dots, \quad (7)$$

где константы $\kappa_{\nu}^2 = E_{\nu}$, $\kappa_{\mu}^2 = E_{\mu}$ определяют уровни энергии в новой V и исходной \dot{V} ямах (которых в нашем случае бесконечное число $N=M=\infty$), а отбрасываемый

в дальнейшем интеграл (лишь символически помеченный в (7)) относится к состояниям непрерывного спектра, которого в бесконечных ямах нет. Решения $\dot{\psi}_{\nu}$ в первой сумме отвечают уравнению Шредингера с исходным потенциалом, но берутся при собственных значениях энергии для возмущенной ямы и с соответствующими нормировочными множителями. Если функции в левой сумме для сохраняемых уровней брать теми же, что и в правой, это будет означать выбор для них прежних нормировочных множителей. Тогда при удалении конечного числа уровней из исходной ямы \dot{V} в (7) остаются лишь отвечающие им члены второй суммы, поскольку параметры остальных уровней предполагаются неизменными и соответствующие члены в первой и второй суммах взаимно сокращаются. С этим вырожденным ядром Q уравнение обратной задачи сводится к алгебраическому. Его просто решить, т.е. найти K , которое, в свою очередь, является ядром интегрального оператора обобщенного сдвига, переводящего волновые функции исходной невозмущенной системы $\dot{\psi}$ в функции с новым потенциалом $V(x) = \dot{V}(x) - 2K'(x, x)$. При уничтожении одного уровня имеем:

$$V(x) = \dot{V}(x) - 2 \frac{d}{dx} \left[\frac{\dot{\psi}_{\mu}^2(x)}{1 - \int_x^{\infty} \dot{\psi}_{\mu}^2(y) dy} \right]. \quad (8)$$

На рис.2 для исходной осцилляторной ямы показаны возмущенные ямы при исчезновении второго, третьего и четвертого уровней.

Рельеф нижней части возмущенной ямы определяется тем, что после ее сужения поднимается конечное число уровней под уничтожаемым, и их нужно сместить вниз согласно правилу, обсуждавшемуся в [4]. Число локальных минимумов равно числу максимумов модуля функции ближайшего к "спектральной дыре" снизу состояния, поскольку оно наиболее чувствительно к возмущениям там, где наибольшая вероятность обнаружить частицу на данном уровне. Опускание более низких состояний не так отчетливо проявляется на форме возмущения (оно лишь "модулирует несущую частоту" наиболее энергичного из группы состояний под создаваемой дырой).

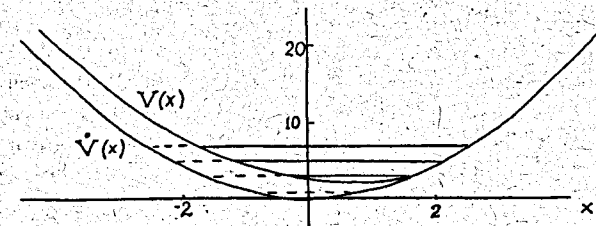


Рис.2а. Изменения формы осцилляторной ямы при исчезновении первого уровня

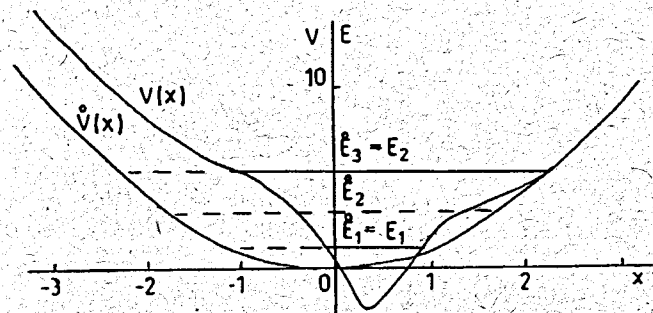


Рис.2б. Изменения формы осцилляторной ямы при исчезновении второго уровня

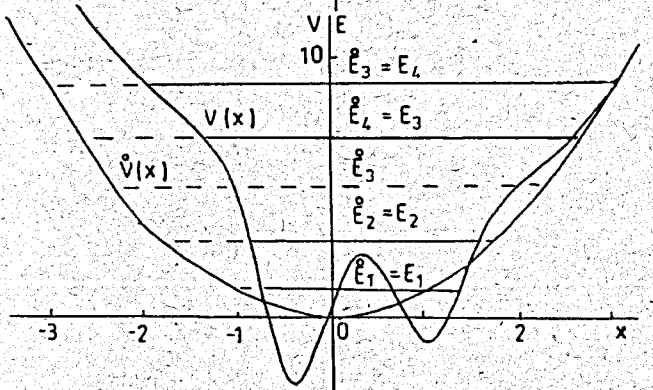


Рис.2в. Изменения формы осцилляторной ямы при исчезновении третьего уровня

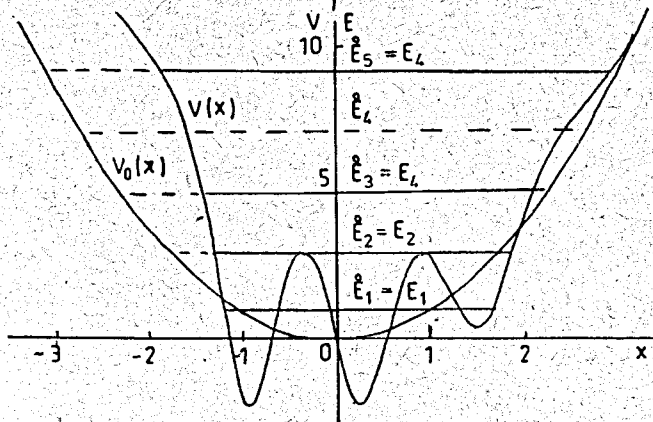


Рис.2г. Изменения формы осцилляторной ямы при исчезновении четвертого уровня

Рис.2а-г. Сужение ямы вызвано сокращением числа колебаний собственных функций состояний, расположенных выше ликвидированного уровня

В случае удаления двух уровней сужение исходной ямы получается примерно вдвое больше (см. рис.3).

Теперь можно с большой степенью надежности предсказать, что для порождения нового уровня нужно расширять яму, а конечное число расположенных ниже состояний удерживать на старых местах, подталкивая снизу вблизи точек максимумов модулей их функций.

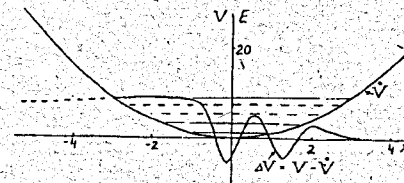
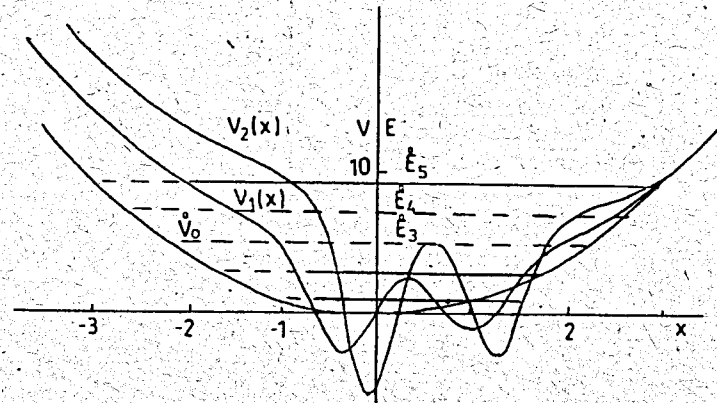


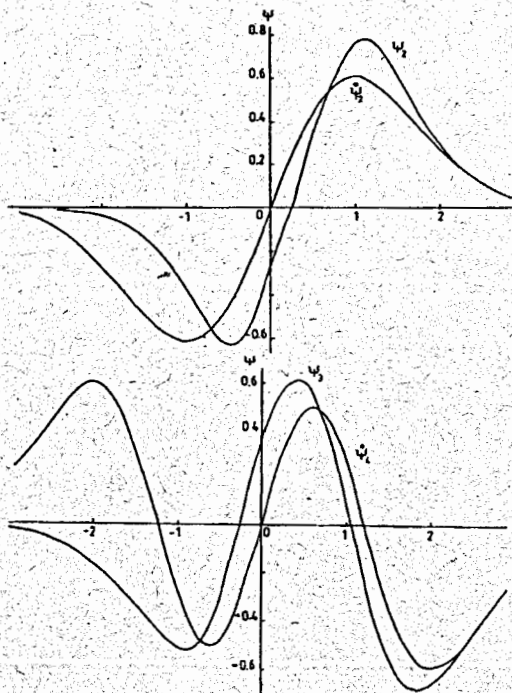
Рис.3. а) Изменение формы осцилляторной потенциальной ямы при "выбрасывании" третьего и четвертого уровней. Чем больше убирается уровней, тем уже становится яма. б) Возмущающая потенциальная добавка к осцилляторной яме для уничтожения двух указанных уровней

Возмущение потенциала стремится к нулю при больших $|x|$, в чем можно убедиться, используя правило Лопитала при раскрытии неопределенности $0/0$.

На рис.4 показано, как меняются волновые функции ближайших (к выбрасываемому снизу и сверху) состояний. Поскольку эти рисунки получены в подходе Марченко с неизменными нормировками состояний, определяющими асимптотическое поведение функций справа, исходные и возмущенные функции справа совпадают (правый край осцилляторной ямы остался на месте - см. рис. 2,3).

На рис.5,6 показаны результаты для потенциалов на полуоси, то есть они имеют отношение и к трехмерным симметричным задачам. Нужно, правда, отметить, что в этом случае мы имеем дело с уровнями, лишь отвечающими определенному значению орбитального момента l : при уничтожении, например, s -уровни с другими $l > 0$ будут смещаться. Чтобы не дать им двигаться, нужно ввести в потенциал дополнительную зависимость, нелокальную по углам. Результаты на всей оси тоже применимы в трехмерном случае, только с потенциалами, независимыми от двух из трех переменных.

Рис.4. Деформация состояний ниже и выше выбрасываемого 3-го (формулу для функций см. в Приложении). Волновая функция второго уровня лишь слегка сжимается, а функция четвертого уровня становится функцией третьего и "теряет" один узел. Исходные и соответствующие возмущенные функции имеют одинаковое асимптотическое поведение справа. Это характерно для подхода Марченко, когда функции и потенциалы строятся справа налево, а нормировочные множители собственных функций не меняются. С этим же связано совпадение асимптотического поведения справа исходных и возмущенных потенциалов на рис.2,3. В подходе Гельфанда-Левитана на полуоси $[0, \infty)$ совпадают функции и их производные в точке $x=0$



4 ПРЕДСКАЗАНИЯ

Простое объяснение показанных выше результатов позволяет делать довольно надежные предположения о качественных характеристиках потенциалов, которые должны получиться при других постановках задачи.

Если в формулах обратной задачи в подходе Марченко поменять пределы интегрирования по пространственной координате $[x, \infty)$ на $(-\infty, x]$, то полученные потенциалы и функции окажутся зеркально отраженными относительно точки $x=0$.

Было предположено, что в подходе Гельфанда-Левитана для осцилляторного потенциала на полуоси (с пределами интегрирования $[0, x]$) вертикальная потенциальная стенка в нуле должна оставаться неподвижной, а двигаться будет правый край бесконечной ямы. Это подтвердилось дальнейшими расчетами по формуле (см. рис.6):

$$V(x) = \overset{\circ}{V}(x) + 2 \frac{d}{dx} \left[\frac{\overset{\circ}{\psi}_\mu(x)}{1 - \int_0^x \overset{\circ}{\psi}_\mu(y) dy} \right]. \quad (9)$$

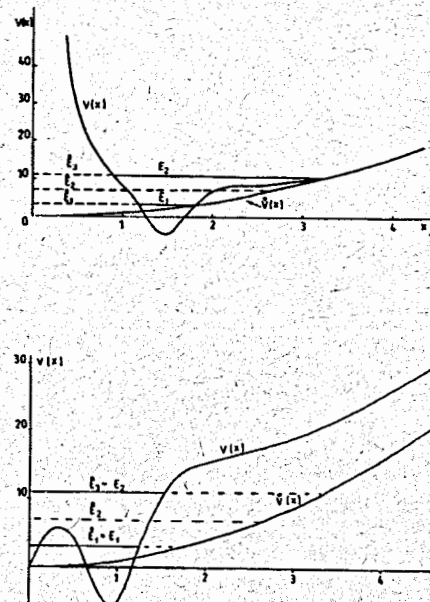


Рис.5. Деформация осцилляторного потенциала на полуоси при выбрасывании второго уровня, который совпадает с четвертым уровнем осциллятора на всей оси. Правая стенка бесконечной ямы мало меняется, как и в случае рис.2,3, поскольку возмущенный потенциал строился и там, и там по Марченко с фиксированным асимптотическим поведением функций справа

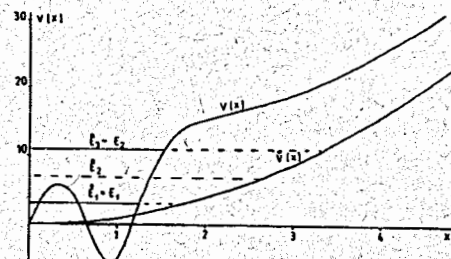


Рис.6. Деформация осциллятора на полуоси при исчезновении второго уровня. Расчеты были выполнены в подходе Гельфанда-Левитана, где нормировочные константы, предполагавшиеся неизменными при возмущении, фиксируют поведение собственных функций вблизи нуля [4,5]. Необходимое сужение ямы происходит за счет смещения правой потенциальной стенки влево

Если симметрично продолжить на левую полуось возмущенную яму с рис.5,6, то в полученных ямах лишь уровни с нечетными состояниями будут совпадать с уровнями симметричного осциллятора, поскольку только они являются одновременно и уровнями ямы на полуоси. Поэтому и форма правой стенки возмущенной потенциальной ямы на полуоси (рис.5) должна отличаться от случая выкидывания "того же" уровня в подходе Марченко на всей оси, поскольку в игре на полуоси участвуют лишь нечетные состояния симметричной ямы.

Если вместо уничтожения имеющихся уровней порождать новые состояния, то следует, естественно, ожидать соответствующего расширения потенциальных ям. Это видно, например, и из формулы для потенциала типа (8), где только в этом случае в знаменателе минус заменится на плюс. Формулами типа (8) в этом случае пользоваться сложнее, так как понадобятся нефизические решения в исходной яме при значениях энергии между связанными состояниями.

В то же время в прямоугольной яме нельзя породить новый уровень (по крайней мере, следуя обычному алгоритму обратной задачи): функции исходной ямы определены лишь на конечном отрезке внутри прямоугольной ямы и в принципе не могут быть использованы как "строительный материал" при конструировании расширенного потенциала. При уничтожении же уровня формулы баргмановского типа (см., например, [6]) для новых собственных функций не удовлетворяют граничным условиям.

Порождение одного уровня и уничтожение другого эквивалентно конечному числу сдвигов уровней. А при неравном числе порожденных и уничтоженных состояний будет наблюдаться сужение или расширение ямы в зависимости от того, в какую сторону будет нарушен баланс.

Можно, по-видимому, получать и симметричные потенциальные ямы с порожденными или уничтоженными состояниями, если воспользоваться формализмом построения потенциалов по двум спектрам [8]. Интересно было бы также обобщить данную работу на многоканальные системы.

5 ВЫБРАСЫВАНИЕ УРОВНЯ E_μ КАК ПРЕДЕЛ $c_\mu \rightarrow 0$

Перед самой сдачей этой работы в печать неожиданно выяснилось, как можно понять связь изменения величины нормировочного множителя c_μ с устранением соответствующего энергетического уровня из спектра. Из формулы для Q

$$Q(x, y) = c_\mu^2 \dot{\varphi}_\mu(x) \dot{\varphi}_\mu(y) - \dot{c}_\mu^2 \dot{\varphi}_\mu(x) \dot{\varphi}_\mu(y) \quad (10)$$

следует, что при выборе нулевой нормировки c_μ выражение для ядра Q совпадает с тем, что получается при выбрасывании μ -го уровня.

$$Q(x, y) = -\dot{c}_\mu^2 \dot{\varphi}_\mu(x) \dot{\varphi}_\mu(y) \quad (11)$$

Казалось бы, невозможно представить себе, как непрерывным процессом изменения нормировки, когда все уровни остаются на своих местах, можно добиться исключения уровня, совершаемого скачком. Типичная картина при выборе близкой к нулю нормировки показана на рис.7.

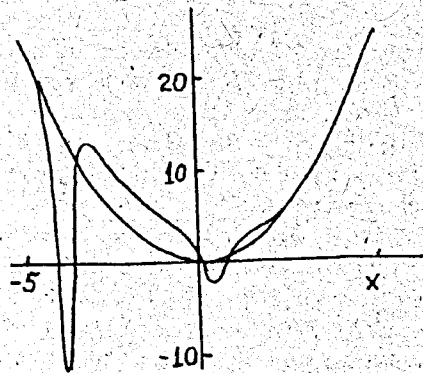


Рис.7. Близкая к нулю нормировочная константа для состояния второго уровня создает в возмущенном потенциале узкую ямку — "сосульку", уносящую на минус бесконечность область локализации этого состояния, что можно рассматривать как его постепенное "исчезновение". Состояния, лежащие выше по энергии, имеют по узлу под барьером, отделяющим сосульку от основной ямы. Внутри сосульки они делают последнее колебание с амплитудой убывающей при удалении сосульки

Характерная "сосулька" в возмущенном потенциале (при подходе Марченко, когда нормировками фиксируется асимптотическое поведение собственных функций справа) слева при $c_\mu \rightarrow 0$.

Форма сосульки такова, что в ней создаются благоприятные условия для стоячей полуволны избранного состояния, а для всех других происходит самогашение тем более сильное, чем дальше уходит сосулька. Вместе с тем вырастает барьер, сужающий исходную осцилляционную яму и уменьшающий число узлов состояний выше избранного в главной части ямы. Последние узлы (по одному для этих состояний) уходят под барьер, разделяющий сосульку и основную яму. В пределе эти последние узлы уходят на бесконечность. При удалении нескольких уровней (стремлением нормировок к нулю) появляются несколько сосуллек, взаимное расположение которых зависит от соотношения величин нормировочных множителей. В частности, сосульки могут располагаться с одной или разных сторон от главной ямы.

Это проливает дополнительный свет на, казалось бы, уже раньше полностью понятое нами возмущение потенциалов при изменении нормировок (см. [4,5]). Например, изменение приведенных ширин в прямоугольной яме, которое, хотя и не сводится даже в пределе к убиранию уровня, но дает возмущенный потенциал с "зародышами" сосуллек. В ямах с неперпендикулярными стенками эти зародыши (один или несколько) могут быть сдвинуты на любое расстояние. При этом каждый из них уносит с собой по одному узлу соответствующей функции. Мы планируем распространить результаты данной работы на многоканальный случай и, возможно, на задачи с разностными уравнениями (с дискретной переменной), в частности на "уравнения Шредингера высшего порядка" (см. [6]).

6 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В газете "Известия" от 5 мая напечатано интервью с академиком Абрикосовым, покинувшим Россию. Он не собирается возвращаться и считает, что помочь российской науке бессмысленно: надо "помочь всем талантливым ученым поскорее уехать из России, а на остальных махнуть рукой". Нам такая позиция представляется социально ущербной (если только она не была искажена журналистом). Уже всеми в мире понята принципиальная важность качества окружающей среды. Так, США уже не хватает своего кислорода, и они заботятся о джунглях Амазонки. Но для человечества еще важнее социальная и информационная глобальная экология. Мир един, и качество жизни будет на много порядков выше, если ликвидировать в нем белые пятна недостатка информации, образования (производственной, научной, в том числе физической и особенно квантовой культуры с бесконечными резервами, например микроэлектроники). Ведь самое ценное природное богатство, наш неисчерпаемый резерв — это миллиарды человеческих мозгов, пока "простаивающих", а часто даже озлобленных "загнанностью" обстоятельствами или сильными мира сего в территориальные, экономические "углы" планеты (силой, несправедливыми ценами и т.п.).

Кстати, наш привилегированный институт по отношению к нашей "провинции" представляет собой в некотором смысле то же, что США - к России. И мы себе же на пользу могли бы позаботиться о "джунглях квантовой безграмотности" вдали от научных центров. Этому способствовала бы и большая доступность наших научных результатов, на что мы хотели обратить внимание уже в эпиграфе.

7 ПРИЛОЖЕНИЕ а) Проверка формул

Покажем, что волновые функции

$$\psi_\nu(x) = \dot{\psi}_\nu(x) + \frac{\dot{\psi}_\mu(x)}{1 - \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu^2(y) dy} \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu(y) \dot{\psi}_\nu(y) dy$$

с новым потенциалом (8) удовлетворяют уравнению Шредингера. Для этого введем сначала следующие обозначения:

$$\alpha(x) = \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu(y) \dot{\psi}_\nu(y) dy, \quad p(x) = 1 - \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu^2(y) dy.$$

В дальнейшем мы для краткости будем опускать аргументы функций. Будем также использовать штрих для обозначения производной. Первая производная от ψ_ν есть

$$\psi'_\nu = \dot{\psi}'_\nu + \frac{\dot{\psi}'_\mu}{p} \alpha - \frac{\dot{\psi}_\mu^3}{p^2} \alpha - \frac{\dot{\psi}_\mu^2 \dot{\psi}_\nu}{p}.$$

Дифференцируя это соотношение еще раз, получаем выражение для второй производной от ψ_ν :

$$\begin{aligned} \psi''_\nu = & \dot{\psi}''_\nu + \frac{\dot{\psi}''_\mu}{p} \alpha - \frac{\dot{\psi}'_\mu \dot{\psi}_\mu^2}{p^2} \alpha - \frac{\dot{\psi}'_\mu \dot{\psi}_\nu \dot{\psi}_\mu}{p} - 3 \frac{\dot{\psi}_\mu^2 \dot{\psi}'_\mu}{p^2} \alpha + 2 \frac{\dot{\psi}_\mu^5}{p^3} \alpha + \frac{\dot{\psi}_\mu^4 \dot{\psi}_\nu}{p^2} \\ & - 2 \frac{\dot{\psi}_\mu \dot{\psi}'_\mu \dot{\psi}_\nu}{p} - \frac{\dot{\psi}_\mu^2 \dot{\psi}'_\nu}{p} + \frac{\dot{\psi}_\mu^4 \dot{\psi}_\nu}{p^2}. \end{aligned}$$

Далее,

$$V\psi_\nu = \dot{V}\dot{\psi}_\nu + \dot{V} \frac{\dot{\psi}_\mu}{p} \alpha - 4 \frac{\dot{\psi}_\mu \dot{\psi}_\nu \dot{\psi}'_\mu}{p} + 2 \frac{\dot{\psi}_\mu^4 \dot{\psi}_\nu}{p^2} - 4 \frac{\dot{\psi}_\mu^2 \dot{\psi}'_\mu}{p^2} \alpha + 2 \frac{\dot{\psi}_\mu^5}{p^3} \alpha.$$

Наконец, правая часть уравнения Шредингера есть

$$E_\nu \psi_\nu = E_\nu \dot{\psi}_\nu + E_\nu \frac{\dot{\psi}_\mu}{p} \alpha.$$

Подставляя полученные соотношения в уравнение Шредингера

$$-\psi_\nu'' + V\psi_\nu = E_\nu \psi_\nu,$$

проводя тривиальные сокращения и используя тот факт, что $\dot{\psi}_\nu$ и $\dot{\psi}_\mu$ удовлетворяют невозмущенному уравнению Шредингера, получаем следующее выражение для остатков:

$$\frac{\dot{\psi}'_\mu \dot{\psi}_\mu \dot{\psi}_\nu}{p} + \frac{\dot{\psi}_\mu^2 \dot{\psi}'_\nu}{p} = (E_\nu - E_\mu) \frac{\dot{\psi}_\mu}{p} \alpha.$$

Используя вронскиан

$$W(\dot{\psi}_\mu, \dot{\psi}_\nu) = \dot{\psi}'_\nu \dot{\psi}_\mu - \dot{\psi}_\nu \dot{\psi}'_\mu,$$

перепишем это выражение в виде

$$\frac{W(\dot{\psi}_\mu, \dot{\psi}_\nu) \dot{\psi}_\mu}{p} = (E_\nu - E_\mu) \frac{\dot{\psi}_\mu}{p} \alpha.$$

Но

$$W(\dot{\psi}_\mu, \dot{\psi}_\nu) = (E_\nu - E_\mu) \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu(y) \dot{\psi}_\nu(y) dy = (E_\nu - E_\mu) \alpha(x).$$

Действительно, умножив обе части уравнений Шредингера для $\dot{\psi}_\nu(x)$ и $\dot{\psi}_\mu(x)$ на $\dot{\psi}_\mu(x)$ и $\dot{\psi}_\nu(x)$ соответственно и вычтя одно из другого полученные соотношения, имеем

$$-\dot{\psi}_\nu''(x) \dot{\psi}_\mu(x) + \dot{\psi}_\nu(x) \dot{\psi}_\mu''(x) = (E_\nu - E_\mu) \dot{\psi}_\mu(x) \dot{\psi}_\nu(x),$$

или

$$-W(\dot{\psi}_\mu, \dot{\psi}_\nu)' = (E_\nu - E_\mu) \dot{\psi}_\mu(x) \dot{\psi}_\nu(x).$$

Отсюда следует, что

$$W(\dot{\psi}_\mu, \dot{\psi}_\nu) = (E_\nu - E_\mu) \int_x^\infty \dot{\psi}_\mu(y) \dot{\psi}_\nu(y) dy.$$

А это означает, что обе части соотношения для остатков в уравнении Шредингера тождественно равны друг другу. Что и требовалось доказать.

б) Трансформация кулоновского потенциала

На рис.8 показано, как меняются кулоновский потенциал и собственные функции второго уровня, при стремлении к нулю нормировочной константы "выбрасываемого" состояния.

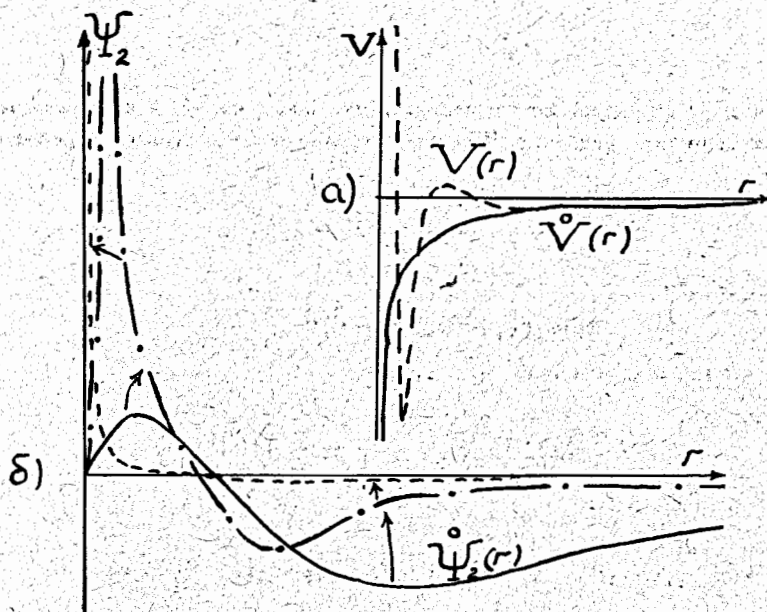


Рис.8 а) Изменение кулоновского потенциала при выбрасывании второго уровня. б) Трансформация волновой функции второго состояния при стремлении к нулю нормировочной константы второго состояния. Видно, как область локализации состояния все больше прижимается к нулю, что можно рассматривать как эффективное его "исчезновение"

Литература

- [1] Abraham P.B., Moses H.F. Phys.Rev.A22,1980, 1333.
- [2] Sukumar C.V. J.Phys.A18, 1985, L57.
- [3] Poshel J., Trubovitz E. *Inverse Spectral Theory*. Academic, New York, 1987.
- [4] Захарьев В. Н., Сузьмо А. А. *Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи*. М: Энергоатомиздат, 1985. Переработанное английское издание: *Direct and Inverse Problems*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1990.
- [5] Захарьев В.Н., Костов Н., Плеханов Е.Б. *Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции I)*, ЭЧАЯ,1990, 21, с.914.
- [6] Захарьев В. Н. *Дискретная и непрерывная квантовая механика, точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции II)*. ЭЧАЯ 1992, 23, N5, 1387.
- [7] Захарьев В. Н. *Уроки квантовой интуиции* (в печати, можно спонировать у автора с дискеты ее LaTeX - вариант).
- [8] Daskalov V.B. *On the inverse problems for the regular Sturm-Liouville operator*, to be published in 1993.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 мая 1993 года.