94-335

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-94-335

Б.Н.Захарьев, А.И.Пашнев

ПРОЗРАЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ НА РЕШЕТКАХ И В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ.

Элементы качественной теории движения волн по каналам

1994

"Если надо объяснять, то не надо объяснять,... а тут и объяснять нечего."

А.Ахматова

(В науке, во всяком случае, все как раз наоборот; в жизни часто тоже).

1 ВВЕДЕНИЕ

Параллельно с обычной квантовой механикой с непрерывными координатами развивается и ее дискретный вариант, описывающий движение волн по решеткам. Конечно-разностное уравнение Шредингера используется для описания волн в кристаллах и может служить моделью для исследования распространения волн по решеткам дискретных переменных, например, нумерующих связанные каналы или смешиваемые конфигурации [1].

Глубже понять особенности квантовой физики позволяют точно решаемые модели. Многочисленные и обширные классы таких моделей в обычной квантовой механике получались с помощью методов факторизации [2], обратной задачи [3-6] и суперсимметрии [7-14]. Наряду с замкнутыми аналитическими формулами были получены "квантовые картинки", истолкование которых подняло на более высокий уровень нашу квантовую интуицию. Появилась возможность сформулировать основанные на точных моделях алгоритмы теории качественного "управления" квантовыми системами : строить их с желаемыми спектрами и свойствами рассеяния, двигать отдельные уровни энергии, порождать их и уничтожать, менять локализацию связанных состояний, ширины резонансов, прозрачность мишеней [1-6].

Ряд точных моделей был построен и в дискретной квантовой механике [19-24]. Численные расчеты и использование аналогий с обычной квантовой механикой помогли понять некоторые особенности управления свойствами решеточных систем [1, 15-24].

Несколько месяцев назад одним из авторов (Б.З.) были разосланы письма специалистам по суперсимметричной квантовой механике с предложением найти безотражательные потенциалы для разностного уравнения Шредингера (и для разностных уравнений высших порядков N $\geq$4) или указать на соответствующие работы. После этого мы сами независимо нашли эти решения, а позднее узнали о подобных результатах, опубликованных раньше в [13].

В данной работе будет использован наш опыт построения алгоритмов качественного управления квантовыми системами для объяснения форм потенциалов, прозрачных для волн на решетке при любых значениях энергии из непрерывного спектра (в разрешенной зоне); мы укажем и на физические особенности таких потенциалов, чего не делалось раньше. Это позволит правильно качественно предсказывать результаты даже без использования формул и компьютеров. А использовать мы будем подход суперсимметричной квантовой механики (факторизацию гамильтонианов), как и в [13].

С одной стороны, по аналогии с непрерывным случаем, можно было ожидать солитонообразной формы прозрачного дискретного потенциала v(n). Но локальный потенциал изгибает полосу разрешенного движения (в плоскости "E,n", см. рис.1) без

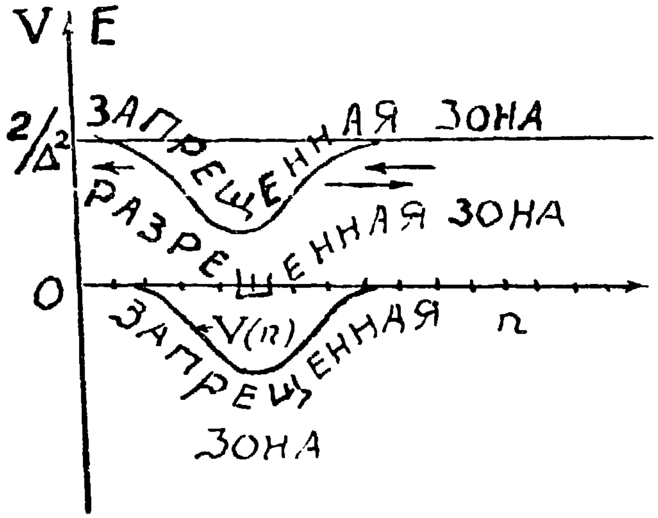

Рис.1. Разрешенная зона изгибается вместе с формой локального потенциала v(n), не изменяя своей ширины (для наглядности дискретные значения функций при целых n соединены сплошными линиями). Поэтому притягивающий потенциал тянет вниз и верхнюю границу разрешенной зоны в области своего действия, в результате чего в область непрерывного спектра спускается "барьер" запрещенной зоны, вызывающий отражение волн даже при солитонообразной форме ямы v(n)

изменения ее ширины, так что притягивающая яма прогибает вниз верхнюю границу разрешенной зоны. Это создает эффективный барьер из прогиба верхней запрещенной зоны вниз, в разрешенную зону[1]. Казалось бы, это делает безнадежным построение прозрачной мишени. Найти выход здесь помогла интуиция, приобретенная в работах [23] по управлению спектрами в дискретной квантовой механике. Требуется, помимо v(n), вводить связь функций в соседних дискретных точках – минимальную нелокальность (тридиагональность) потенциала. Значения потенциала на диагоналях, соседних с главной,

[1]Конечность ширины зоны непрерывного спектра связана с ограниченностью частоты колебаний решений на конечно-разностной решетке: например, с ростом энергии гармошка обычного непрерывного синуса неограниченно сжимается, а для "разностного синуса" предел сжатия задается шагом решетки [1]. Изгиб зоны можно понять так: для постоянного потенциала сдвигается вся зона, как при переносе точки отсчета энергии непрерывного спектра, поэтому для кусочно-постоянного (ступенчатого) потенциала получается ступенчатый изгиб, а общий случай получается со ступеньками произвольной длины.

мы будем обозначать u(n):

$$-[\psi(n+1) - 2\psi(n) + \psi(n-1)]/\Delta^2 +$$
$$u(n+1)\psi(n+1) + u(n)\psi(n) + u(n)\psi(n-1) + v(n)\psi(n) = E\psi(n), \qquad (1)$$

где Δ – шаг разностного дифференцирования. Аргумент функции "u", стоящей коэффициентом при $\psi(n-1)$, не тот же "n-1", а n (смещенный на единицу) для эрмитовости гамильтониана. О необходимости введения нелокальности взаимодействия можно было догадаться и благодаря появлению в суперсимметричном подходе с непрерывной переменной в выражении для безотражательных потенциалов первой производной от вспомогательной функции, что в случае конечных разностей переходит в минимально нелокальный оператор. С помощью этих недиагональных потенциальных членов u(n) можно управлять шириной разрешенной зоны [1] (см. рис.2).

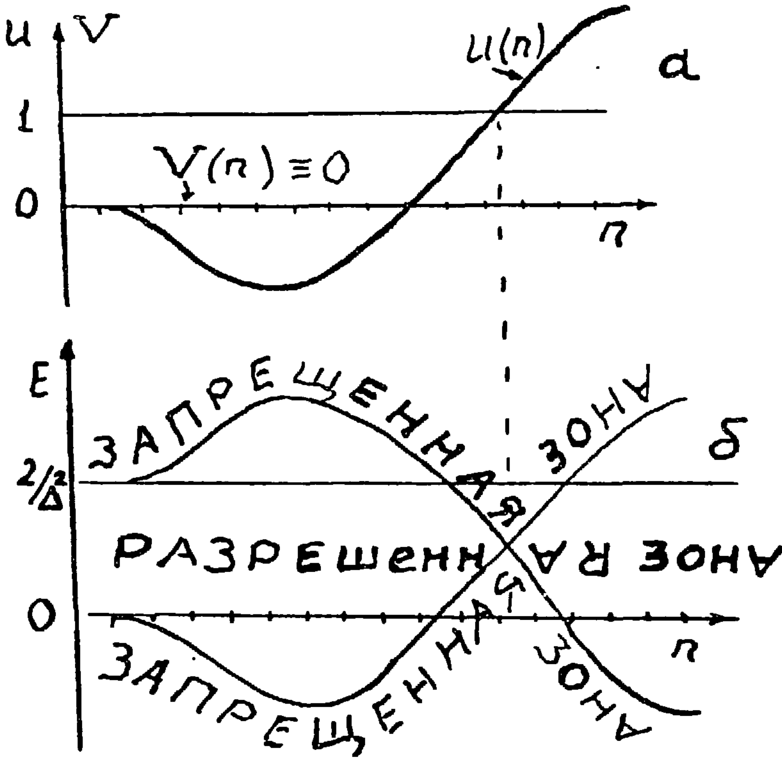

Рис.2. Изменение u(n) при v(n)=0 (а) управляет шириной разрешенной зоны (б). Для наглядности дискретные значения функций при целых n соединены сплошными линиями, как и на рис. 1. При u=1 зона "схлопывается" – сжимается до нулевой ширины, а при u> 1 происходит даже инверсия спектра [1]

Это подобно введению переменного шага $\Delta/[1-u(n)]$. В частности, можно при введении солитонообразной ямы v(n) убрать свешивающийся сверху барьер, выравнивая верхнюю границу запрещенной зоны. Семейство таких прозрачных потенциалов, как и в непрерывном случае, зависит от 2N непрерывных параметров: положений уровней энергии N связанных состояний и соответствующих нормировочных констант, определяющих положение основной локализации связанных состояний на оси n (см.[6] 1994). Можно еще построить прозрачные потенциалы со связанными состояниями над (!) непрерывным спектром или с дискретными уровнями энергии как под, так и над разрешенной зоной.

После того как прозрачные возмущения на решетках были поняты, возник вопрос об объяснении безотражательных возмущений $\Delta v(x)$ периодического поля. Подход обратной задачи давал локальные $\Delta v(x)$, а интуиция подсказывала необходимость нелокальных добавок, чтобы скомпенсировать эффективные барьеры при прогибах разрешенных зон. Выход из "тупика" оказался в том, что роль эффективной минимальной нелокальности взаимодействия здесь играют условия сшивания возмущенных решений на участках соседних периодов невозмущенной задачи.

2 ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Построим прозрачный потенциал с одним связанным состоянием при отрицательной энергии λ из функций $\exp(\pm\kappa n)$, удовлетворяющих свободному (без потенциала) уравнению при той же энергии. Выберем разностный гамильтониан H_- в виде произведения сопряженных разностных операторов A^+ и A^- первого порядка (см.[13])

$$A^-\psi(n) = s(n)\psi(n-1) + r(n)\psi(n); \tag{2}$$

$$A^+\psi(n) = s(n+1)\psi(n+1) + r(n)\psi(n) \tag{3}$$

плюс константа, равная фиксированному значению энергии $\lambda = 2 - 2\cosh(\kappa)$, при которой мы хотим породить связанное состояние:

$$H_- = A^+A^- + \lambda. \tag{4}$$

Возьмем в качестве решения свободного разностного уравнения Шредингера с $v(n) = u(n) = 0$ при отрицательной энергии λ линейную комбинацию:

$$\psi(n) = \exp(\kappa n) + c\exp(-\kappa n); \tag{5}$$

из условия, что коэффициенты в свободном разностном уравнении Шредингера в точках $n \pm 1$ равны - 1, имеем:

$$r(n) = -s^{-1}(n), \tag{6}$$

а из (6) и выбора (см. [7, 11-13]):

$$A^-\psi(n) = 0 \tag{7}$$

следует:

$$r(n) = \sqrt{\frac{\exp(-\kappa(n-1) + c\exp(\kappa(n-1))}{\exp(-\kappa n) + c\exp(\kappa n)}}; \tag{8}$$

$$s(n) = -\sqrt{\frac{\exp(-\kappa(n) + c\exp(\kappa n)}{\exp(-\kappa(n-1) + c\exp(\kappa(n-1)}}. \tag{9}$$

Из операторов (3) строим новый гамильтониан

$$H_+ = A^- A^+ + \lambda, \tag{10}$$

являющийся суперсимметричным партнером для H_-, в котором отличный от нуля безотражательный (минимально-нелокальный – тридиагональный) "потенциальный комплекс"

$$\begin{aligned} v(n) = s^2(n) + r^2(n) = \frac{\psi(n)}{\psi(n-1)} + \frac{\psi(n-1)}{\psi(n)} = \\ = \frac{\exp(-\kappa(n-1) + c\exp(\kappa n))}{\exp(-\kappa n) + c\exp(\kappa(n-1)} + \\ + \frac{\exp(-\kappa n) + c\exp(\kappa n))}{\exp(-\kappa(n-1)) + c\exp(\kappa(n-1)}; \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} u(n) = 1 + s(n)r(n-1) = 1 + \frac{\sqrt{\psi(n)\psi(n-2)}}{\psi(n-1)} = 1 + \\ + \frac{\sqrt{(\exp(-\kappa n) + c\exp(\kappa n))(\exp(-\kappa(n-2)) + c\exp(\kappa(n-2))}}{\exp(-\kappa(n-1)) + c\exp(\kappa(n-1))} \end{aligned} \tag{12}$$

является разностным аналогом солитонного потенциала. Форма этих потенциалов v(n), u(n) показана на рис.3. Нам пока не ясна роль небольшого пространственного сдвига v(n), u(n) друг относительно друга.

Решения уравнения с гамильтонианом H_+ получаются из решений свободного движения действием оператора A_-. На рис.4 изображена функция $A_- \cos(kn)$. Безотражательное взаимодействие приводит лишь к относительному фазовому сдвигу невозмущенного косинусоидального решения вдали от области интенсивного притяжения. Уменьшение амплитуды колебаний вблизи начала координат объясняется требованием сохранения потока: ведь в области притяжения безотражательная волна двигается быстрее.

Чтобы породить связанное состояние выше непрерывного спектра, используем знакопеременные решения [1]:

$$\psi(n) = (-1)_n \exp(\kappa n) + c(-1)_n \exp(-\kappa n). \tag{13}$$

С такими исходными функциями потенциал v(n) меняет знак и выгибает зоны вверх (см. рис.5), а потенциал u(n), локально расширяющий разрешенную зону, остается таким же, как и при порождении уровня под непрерывным спектром.

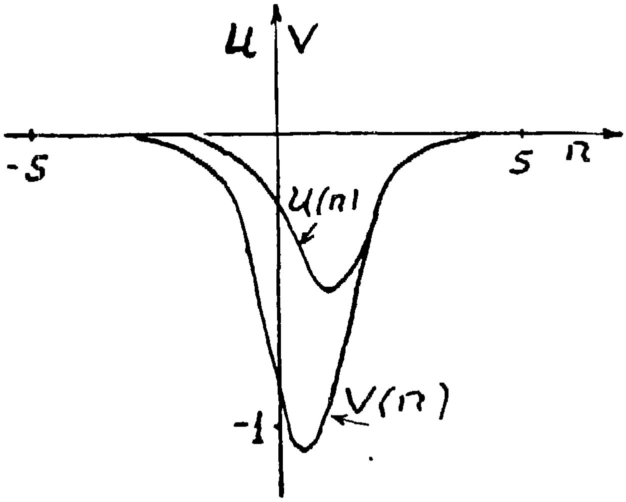

Рис.3. Абсолютно безотражательная система потенциалов u(n) и v(n), являющаяся частным примером обобщения солитонообразных потенциалов, зависящих от непрерывной координаты, на случай разностного уравнения Шредингера (изображены сплошные линии вместо дискретных значений, как и на рис.1,2)

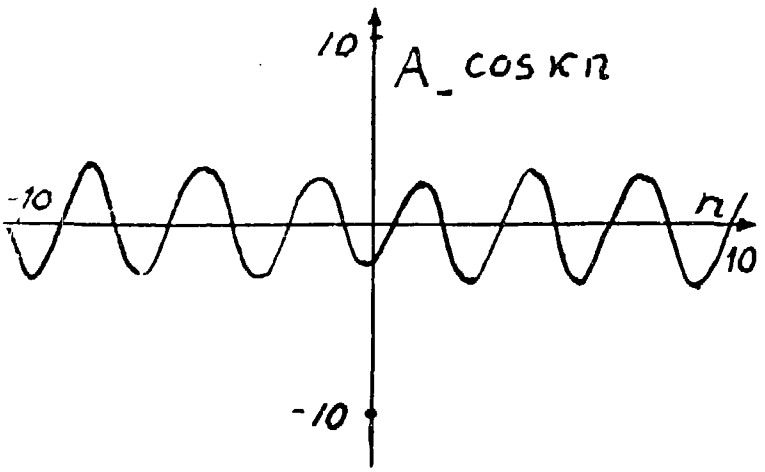

Рис.4. Решение разностного уравнения Шредингера с безотражательным потенциалом типа изображенного на рис.3. В области интенсивного взаимодействия (притяжения) вблизи нуля осцилляции решения становятся чаще, а амплитуда меньше. При удалении от начала координат амплитуды осцилляций с обеих сторон сравниваются

Можно предсказать, что для порождения связанных состояний симметрично выше и ниже разрешенной зоны диагональная часть потенциала вообще не требуется ($v(n) = 0$), а достаточно с помощью $u(n)$ локально расширить разрешенную зону, образовав солитонообразные ямы: обычную снизу и "перевернутую" в верхней запрещенной зоне (см. рис. 6).

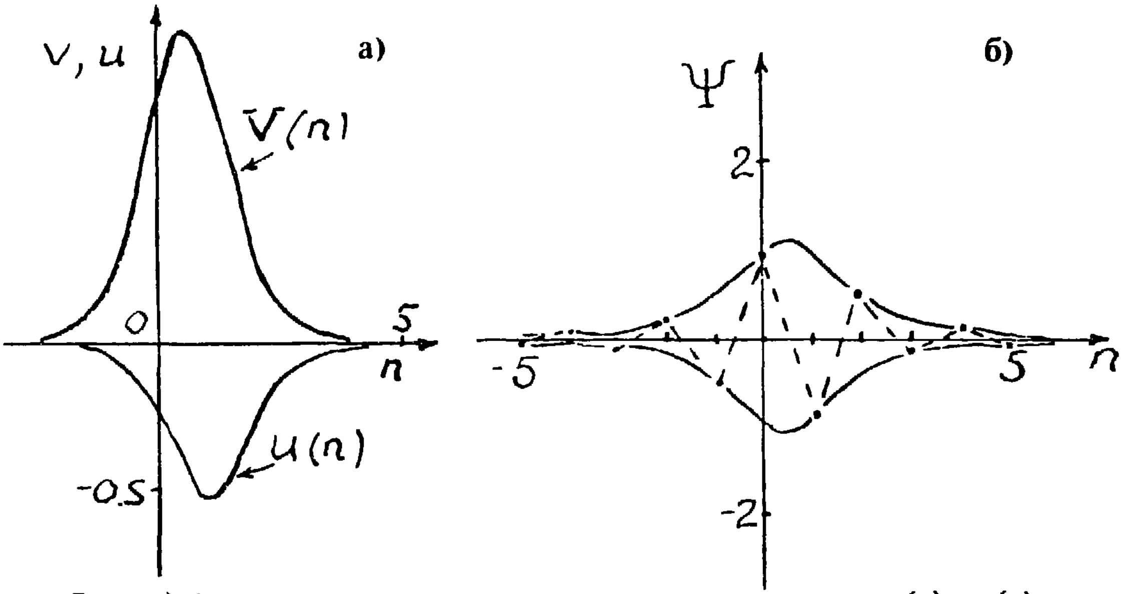

Рис.5. а) Абсолютно безотражательная система потенциалов u(n) и v(n) со связанным состоянием выше (!) полосы непрерывного спектра. б) Волновая функция такого связанного состояния (точки, соединенные штриховыми линиями) совпадает по модулю с обычной (сплошные кривые линии, положительные или отрицательные, что неважно для волновой функции) для системы потенциалов на рис.3 и отличается лишь изменением знака в каждой следующей точке

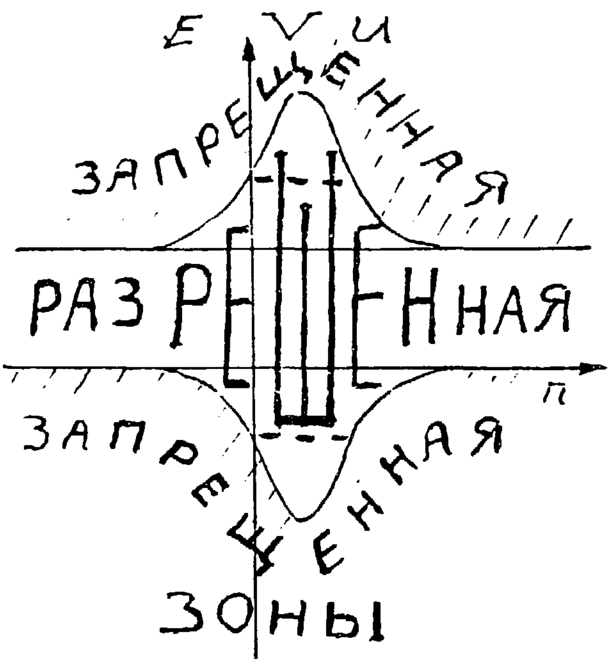

Рис.6. Абсолютно безотражательная система с потенциалом v(n)=0. Потенциал u(n) симметрично раздвигает границы разрешенной зоны

При этом волна проходит через область взаимодействия при энергии в центре разрешенной зоны не только без отражения, но и не приобретая даже фазового сдвига (опускание нижней и подъем верхней границ разрешенной зоны взаимно компенсируют друг друга: хотя нижняя эффективная потенциальная яма углубляется, но уменьшается плотность спектра при растяжении зоны; можно предположить, что то же будет для любых безотражательных потенциалов с одинаковым числом связанных состояний ниже и выше полосы непрерывного спектра). Это подтверждается результатами работы [13]. Такое невозможно в случае непрерывной координаты из-за отсутствия верхней запрещенной зоны (при $\Delta \to 0$ верхняя "половина" спектра задачи с дискретной переменной уходит вверх "за бесконечность").

2.1 Параллели между методами обратной задачи и суперсимметрии [8]

Мозес с Keeм обобщили формализм обратной задачи на многомерный случай, обходя трудность неравенства числа переменных, от которых зависят данные рассеяния и потенциал, введением нелокальности взаимодействия по углам $V(r, \theta, \phi, \theta', \phi')$. Соответствующие точно решаемые модели Мозес предложил в работе [25]. В [26] то же было достигнуто с помощью многоканального формализма. $V_{lml'm'}(r)$ зависит от четырех дискретных и одной непрерывной переменной, что может отвечать и нелокальной зависимости от углов исходного несимметричного потенциала.

3 БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В [1] была выяснена связь возмущений дна бесконечной прямоугольной ямы при изменении нормировочных констант связанных состояний с разрывом непрерывного спектра свободного движения запрещенными зонами (лакунами) при энергиях соответствующих уровней в поле, являющемся периодическим продолжением этих возмущений.

Можно рассматривать возмущения периодического поля, порождающие связанные состояния без искажения свойств непрерывного спектра. Подобно тому как волны свободного движения описываются функциями $\sin(kx)$, $\cos(kx)$, $\exp(\pm ikx)$, можно представлять себе волны непрерывного спектра в разрешенных зонах периодического поля как "блоховские синусы, косинусы, экспоненты" и в этих терминах описывать отраженные волны от потенциальных возмущений.

Аналогично безотражательным потенциалам (комбинациям солитонов) получаются в подходах обратной задачи или суперсимметричной квантовой механики прозрачные возмущения периодического поля. А роль нелокальных добавок к взаимодействию, исправляющих нарушающие прозрачность изгибы разрешенных зон при потенциальных возмущениях, играют правила сшивания возмущенных решений на концах соседних периодов (функции на n-м периоде сшиваются с функциями на периодах с номерами n±1, что можно рассматривать как аналогию минимальной нелокальности взаимодействия, т.е. тридиагональности u(n) и v(n), в рассмотренном выше разностном случае).

4 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

"Нужно писать ... коротко и неясно".

Наполеон Б.

(Если это и гениально, то не буквально точно: неясность особенно не подходит для науки, хотя на практике часто приходится иметь дело с "бонапартами от науки" в смысле туманности изложения)

Возможно, что из-за неясности изложения в литературе точно решаемых многочастичных моделей один из авторов (Б.З.) только сейчас узнал о существовании "прозрачных" мишеней с внутренней структурой (например, частица во внешнем потенциале Морзе, взаимодействующая с другой частицей с помощью потенциала $1/\sinh^2(x)$, по утверждению автора диссертации [27] (см. там же ссылки на соответствующую литературу), не возбуждается в процессе рассеяния). Хорошо было бы найти качественное физическое объяснение этому замечательному факту, чтобы обогатить свою квантовую интуицию.

На 11-м мировом конгрессе по матфизике Б.З. познакомился с Трубовицем, книга которого [28] послужила толчком к серии работ в Дубне "Уроки квантовой интуиции". Было интересно спросить, зачем математик поместил в своих лекциях рисунки возмущений бесконечной прямоугольной потенциальной ямы, изменяющих энергии и нормировки избранных состояний, да еще без каких-либо комментариев. Ответ был: "Мне просто захотелось узнать, как выглядят соответствующие формулы (функции и потенциалы)". Замечательно, что хотя Трубовиц не нашел чего-либо, на что стоило бы обратить специальное внимание на полученных картинках, чувство важности визуализации формул не обмануло его. Позднее эти, а за ними многие другие квантовые картинки получили простое физическое объяснение [1,3-6], помогли созданию качественной теории управления спектрами, рассеянием, распадами.

К данной работе имеет отношение только что появившаяся статья [31], где обсуждается теорема Левинсона для движения волн на всей оси, в частности и для случая "полу-связанных" состояний при нулевой энергии.

Один из авторов (Б.З.) благодарен В.М.Чабанову за полезные дискуссии в процессе поиска точных решений разностных уравнений, проф. фон Герамбу за указание на работы [29], где в суперсимметричном подходе, как и в [7], двойное преобразование Имшенецкого-Дарбу (см. обзор Фаддеева [30]) используется для получения формул спектрального управления, выведенных ранее в подходе обратной задачи, а также РФФИ за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Захарьев Б. Н.*Дискретная и непрерывная квантовая механика, точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции II)*. ЭЧАЯ, 1992, 23, N5, с. 1387.

[2] Infeld L., Hull T.E. The factorization method, Rev. Mod. Phys. 1951, 23, p.21-68.

[3] Захарьев Б.Н. и др. *Точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции I)* ЭЧАЯ 21, 914, 1990;

[4] Захарьев Б. Н., Сузько А. А. *Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи*. М.:Энергоатомиздат, 1985. Переработанное английское издание: Springer-Verlag, Heidelberg, 1990.

[5] Захарьев Б.Н.*Уроки квантовой интуиции*, Дубна, ОИЯИ: (в печати, но можно скопировать у автора на дискету ее непрерывно совершенствуемый *LaTeX*-вариант).

[6] Chabanov V.M., Zakhariev B.N. To the theory of resonances and bound state management. Phys.Rev.A, 1994, 49, p.3159. Absolutely transparent multichannel systems. Unexpected peculiarities. Phys.Lett.B, 1993, 319, p. 13-15. Развернутые варианты этих кратких сообщений направлены в Phys.Rev.A. (первая из этих статей появится в октябрьском номере).

[7] Березовой В.П., Пашнев А.И.ТМФ, 1987, 70, с.146; 1988, 74, с.392-398; Berezovoy V.P., Pashnev F.I., Z.Phys.C, 1991, 51, p. 525-529.

[8] Андрианов А.А., Борисов Н.В., Иоффе М.В., ТМФ, 1984, 61, с. 183; 1987, 72, с. 97; Andrianov A.A., Borisov N.V., Ioffe M.V., Phys.Lett.A, 1984, 105, p.19-22; Письма в ЖЭТФ, 1984, 39, с. 78-81.

[9] Pursey D.L. Phys. Rev.D, 1986, 33, p. 431, 1048, 2267; 1987, 36, p.1103.

[10] Sukumar C.V. J.Phys.A, 1985, 18, p. 2917-2936, 2937-2955, L57-L61, L697-L701; 1986, 19, p. 2297-2316; 1987, 20, p. 2461-2481.

[11] Spiridonov V., Vinet L., Zhedanov A.S. Lett. Math. Phys. 1993, 29, p. 63; Preprint CRM-1880 LPN-TH-145, Univ.Montreal,1993.
[12] Zhedanov A.S. Phys.lett.A, 1993, 176, p.300.
[13] Spiridonov V., Zhedanov A.S. Preprint CRM-1928, 1929 Univ.Montreal,1993 (submitted to Ann.Phys.); см. здесь же ссылки на более ранние работы.
[14] Andrianov A.A., Ioffe M.V., Spiridonov V.P. Phys.Lett.A, 1993, 174, p.273.
[15] Case K.M., Chui S.C., LauC.W., J.Math.Phys.1973, 14, p.594.
[16] Case K.M., Kac M.J.J.Math.Phys. 1973, 14, p. 594.
[17] Гусейнов Г.С. Мат.Заметки, 1978, 23, с.709; 1982, 32, с.737; ДАН СССР, 1976, 231, с. 1045; 227, с. 1289; Изв.АНСССР, сер. мат. 1982, 12, с.365.
[18] Gladwell G.M.L., Willms M.B.Inverse Probl. 1989, 5, p.165.
[19] Gallinar J.-P., Mattis D.C., J.Phys.A, 1985, 18, p.2583.
[20] Chalband E., Gallinar J.-P.,Mata J., J.Phys.A, 1986, 19, p. L385.
[21] Gallinar J.-P. Phys.Lett. A, 1984, 103, p.72.
[22] Mattis D.C. Rev.Mod. Phys. 1986, 58, p.361.
[23] Serdyukova S.I., Zakhariev B.N. Phys.Rev. A, 1992, 46, p.58; 1993, 47, N5, p.3518.
[24] Сердюкова С.И. Препринт ОИЯИ P11-92-434, Дубна, 1992
[25] Moses H.E. Lect.Notes Phys. 1979, 130, p.260.
[26] Plekhanov E.B., Suzko A.A., Zakhariev B.N. Ann.Phys. 1982, 39, N5, c. 313-319.
[27] Иноземцев В.И. "Интегрируемые одномерные системы многих взаимодействующих частиц", докторская диссертация, ОИЯИ, Дубна, 1994.
[28] Poshel J., Trubowitz E. Inverse Spectral Theory", v.130. Pure and Appl.Math. NY, Acad. Press, 1987.
[29] Baye D. Phys.Rev.Lett. 1987, 58, p. 2738; J.Phys.A, 1987, 20, p.5529; Proc. Inverse Problems, p. 127, Bad Honnef 1993, Springer, 1994
[30] Фаддеев Л.Д. УМН, 1959, 14, вып.4, с.55-82.
[31] Sassoli de Bianchi M., J.Math.Phys. 1994, 35, (6), p.2719.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 августа 1994 года.