



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-94-461

Б.Н.Захарьев, В.М.Чабанов

НЕОЖИДАННАЯ
«АННИГИЛЯЦИЯ» СОСТОЯНИЙ
ПРИ СБЛИЖЕНИИ (ВЫРОЖДЕНИИ) УРОВНЕЙ

Направлено в журнал «Physical Review Letters»

1994

Неожиданная «аннигиляция» состояний при сближении (вырождении) уровней

Неожиданно оказалось, что при сильном сближении уровней двух связанных состояний в исходной яме оба состояния «исчезают»: соответствующие волновые функции либо уносятся вспомогательными ямками на бесконечность в обе стороны на всей оси x , либо «впрессовываются» в вертикальные потенциальные стенки (при исходной бесконечной прямоугольной яме). Все функции других уровней в остальной части ямы образуют «полный» набор. В случае несимметричных потенциалов можно получить эффективное исчезновение из спектра одного состояния в вырождаемом дублете.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1994

Перевод авторов

Zakhariev B.N., Chabanov V.M.

P4-94-461

Unexpected Annihilation of States when Bringing Together (Degenerating) the Energy Levels

Unexpectedly it turned out that when drawing together the levels of two bound states in an initial potential well these states «disappear»: corresponding wave functions are either carried away with auxiliary wells to unfinity in both directions on the whole axis or pressed into the vertical potential walls (in the case of reference infinite rectangular well). All the functions of other levels in the remaining part of the well constitute a complete set. In the case of unsymmetrical potentials there can happen effective disappearance of one state of the doublet.

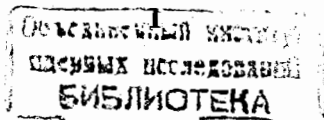
The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

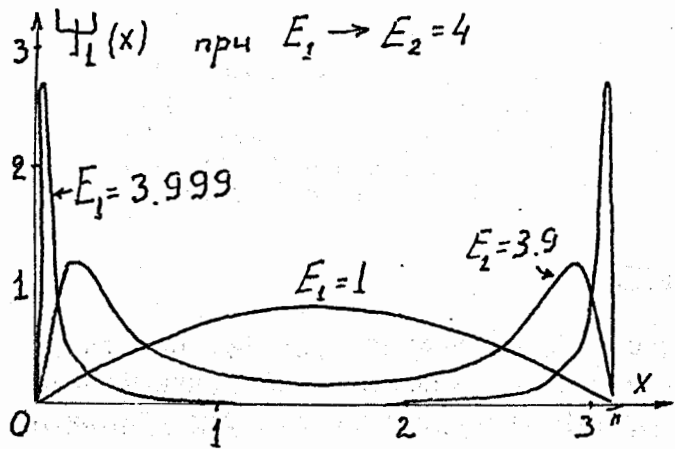
Метод обратной задачи,
"без сомнения, представляет собой
одно из самых красивых откры-
тий математической физики XX
века." В.Е.Захаров, С.В.Манаков,
С.П.Новиков, Л.П.Питаевский.

1 ВВЕДЕНИЕ

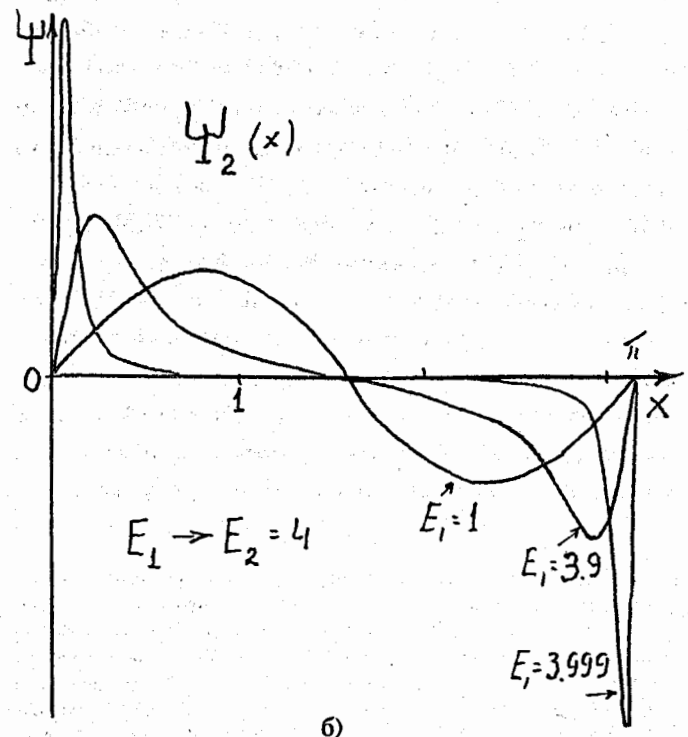
"Стоя на плечах гигантов", создавших аппарат обратной задачи, нам удалось заглянуть дальше и увидеть качественную физическую суть формул сдвига [1], уничтожения и рождения избранных уровней энергии [2], изменения пространственной локализации отдельных квантовых состояний [2], изменения ширин резонансов [2,3], управления прозрачностью квантовых систем [5] и волнами на решетках [4] (в кристаллах, в пространстве каналов и смешиваемых конфигураций) и др.¹ Казалось, что с созданием такой "наглядной" теории управления спектральными параметрами в этой области достигнут предел ясности (интуитивное понимание). Но неожиданно мы обнаружили любопытный эффект "аннигиляции" связанных состояний при предельном сближении соседних уровней энергии. Проведав соответствующие вычисления для исходной бесконечной прямоугольной ямы (без нарушения симметрии потенциала), мы увидели, что распределение плотности вероятности пары вырождающихся состояний как бы разрывается на две части, которые раздвигаются к стенкам ямы и "вдавливаются" в них, так что волновые функции этих состояний становятся отличными от нуля только на малых расстояниях от краев ямы (см. рис.1).

¹Об этом не догадывались даже классики. Интересно, например, что Трубовиц, в книге которого [6] впервые появились картинки энергетических сдвигов для симметричных потенциалов, не нашел простого качественного объяснения их формы. А авторы монографий по квантовой механике приходили на наши лекции "Уроки квантовой интуиции" во многих научных и учебных центрах мира с некоторым недоверием к тому, что можно получить качественно новые результаты в "давно устоявшейся" науке, известной уже миллионам физиков (физ.-химиков и др.). Первая реакция, когда им сообщалась масса новых фактов, часто была: "Этого не может быть!!". Но убедительные простые иллюстрации для точно решаемых моделей не оставляли сомнений в том, что им открываются новые главы из квантовой теории, в которой они чувствовали себя непререкаемыми авторитетами.





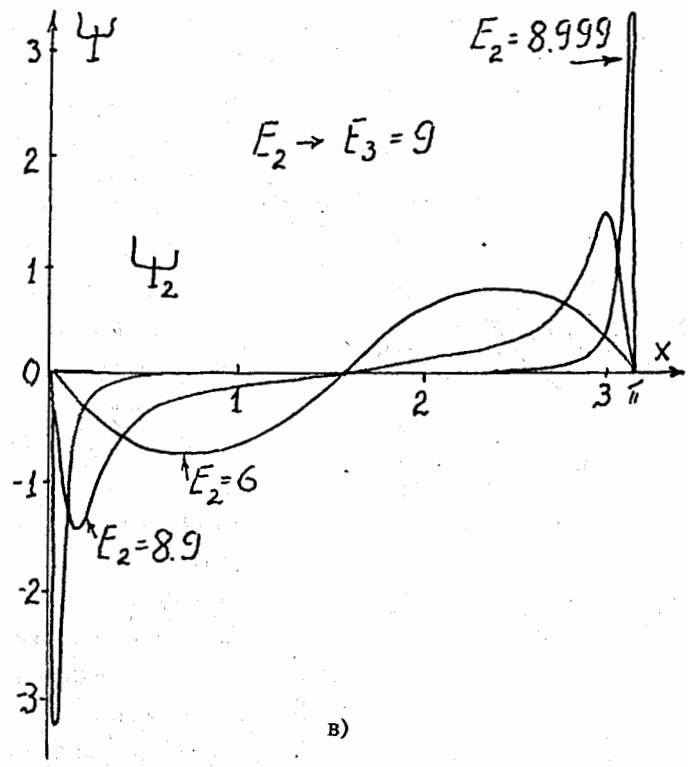
а)



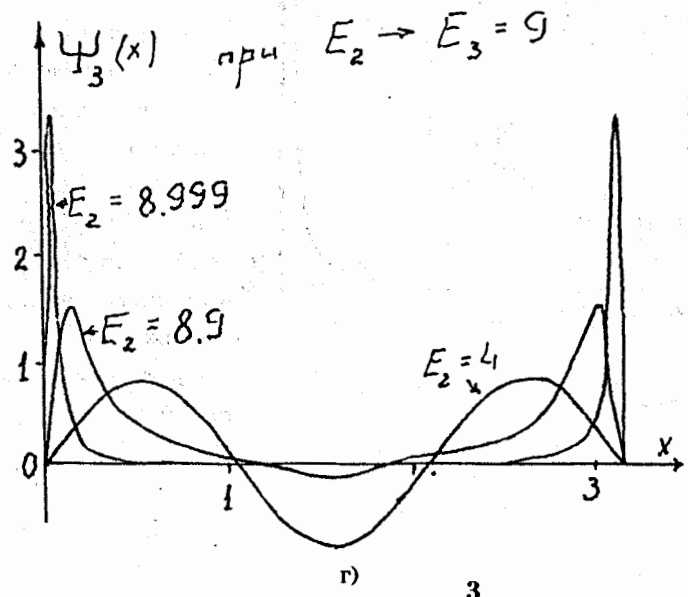
б)

Рис.1. Волновые функции выходящих состояний в случае исходной бесконечной прямоугольной ямы: а,б) ψ_1, ψ_2 при $E_1 \rightarrow E_2$; в,г) ψ_2, ψ_3 при $E_2 \rightarrow E_3$. Чем ближе друг к другу уровни дублета, тем больше вероятность обнаружить частицу у стенок исходной ямы. В средней же части эта вероятность стремится к нулю. Функции дублета становятся по модулю все больше похожими друг на друга.

Все функции других уровней в остальной части ямы образуют "полный" набор: сразу за (n-1)-ым состоянием под "аннигилирующим" дублетом ("бывших" уровней n, n+1)



в)



г)

идет состояние n (которое раньше было n+2) с n-1 узлом (два узла каждого состояния выше дублета пропадают при "исчезновении" последнего). Можно предполагать, что и при любом значении энергии (на интервале между E_{n-1}, E_{n+2}) вырождаемого дублета будет подобная картина. При такой аннигиляции состояния выше дублета "теряют" по два узла. Для каждого такого состояния волновая функция совершает первое и последнее полуколебания (все более и более короткие) по краям ямы с амплитудой, стремящейся к нулю (см. рис.2).

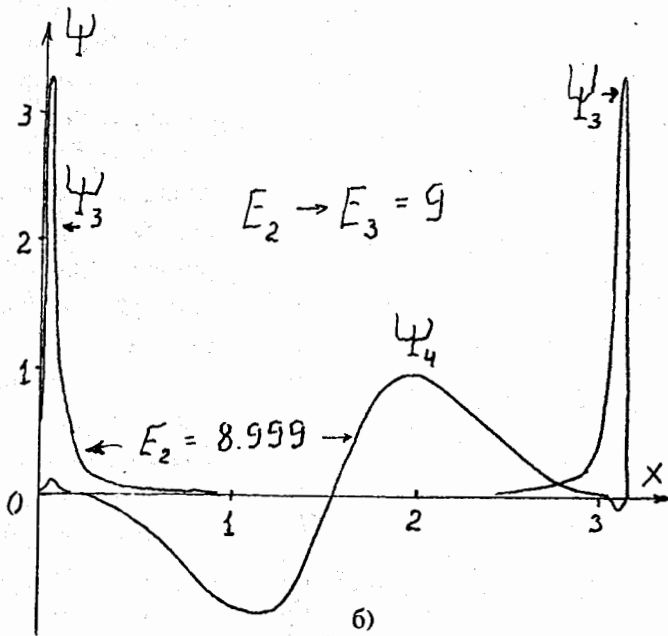
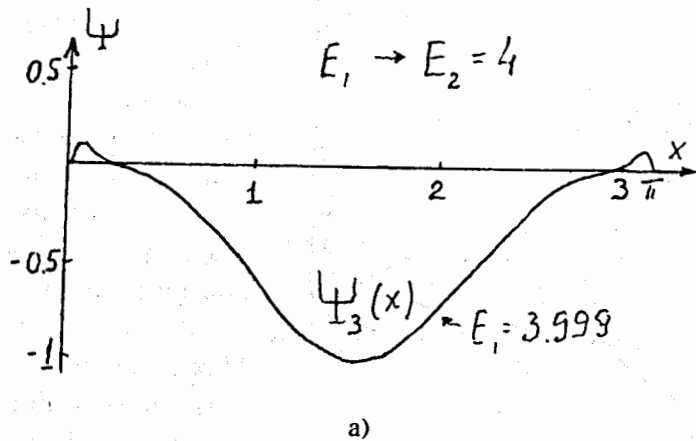


Рис.2
Волновые функции состояний над вырождающимся дублетом: а) $\psi_3(x)$ при $E_1 - E_2$ и б) $\psi_4(x)$ при $E_2 - E_3$. Чем сильнее вырождение, тем меньше амплитуда и длина первого и последнего полуколебания. В пределе полного вырождения эти волновые функции "лишаются" крайних полуосцилляций и соответствующие состояния становятся на два номера меньше. На рис.6 показана еще и $\psi_3(x)$ для демонстрации того, что там, где "хорошо живет" дублету, "неуютно" остальным состояниям. Соответствующие симметричные потенциалы, вырождающие уровни, показаны на рис.3.

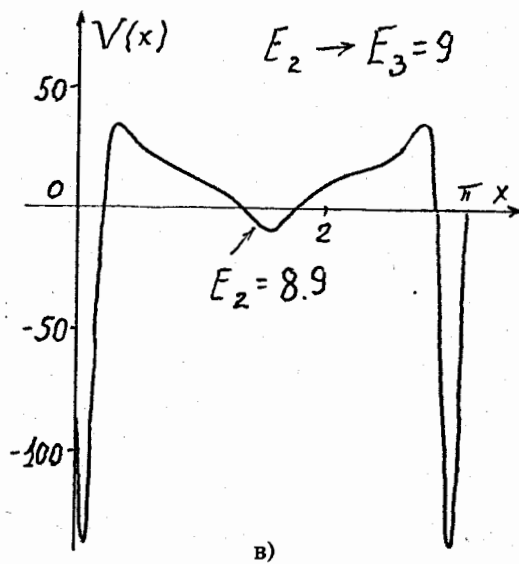
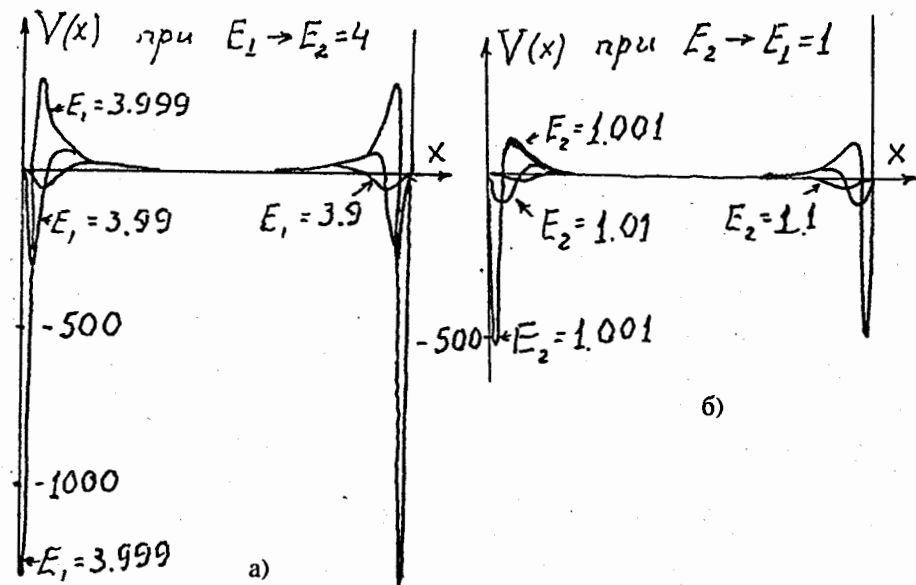


Рис.3 Симметричные возмущения бесконечной прямоугольной ямы, сближающие пары уровней: а,б) E_1, E_2 , в) E_2, E_3 . Потенциалы при $E_n \rightarrow E_{n+1}$ и при $E_{n+1} \rightarrow E_n$ оказываются в пределе похожими: в средней области они сходятся друг к другу, а ямки по краям отличаются глубиной (для обеспечения разницы в положениях вырожденного дублета).

В случае ям на всей оси указанные крайние полуколебания уносятся на бесконечность вспомогательными ямками, аналогичными тем, с помощью которых осуществляется управление локализацией избранных связанных состояний (как это было открыто нами в [2]). Таким образом, обогащается понимание универсальных элементов качественной теории управления спектрами, рассеянием, распадами. Детали формы потенциальных возмущений оказалось возможным свести к этим простейшим элементам для всевозможных вариаций параметров квантовых систем.

Потенциалы в средней области при $E_n \rightarrow E_{n+1}$ и $E_{n+1} \rightarrow E_n$ одинаковы и почти не зависят от положения дублета на интервале между его ближайшими соседями. Качественно формы этих потенциалов можно описать так же, как при уничтожении уровней (или пространственном сдвиге состояний на бесконечность) [1-4] (см. объяснение ниже в тексте). Только при аннигиляции вырождающегося дублета это можно делать, сохраняя симметрию потенциальных ям относительно их центров.

В более общем случае асимметричной деформации потенциалов появляются дополнительные степени свободы, позволяющие фиксировать поведение функций, например, справа (асимптотическое или у края). При этом оказывается возможным не дать правым частям функций вырождающегося дублета уходить вправо, а расположить их там же, где локализованы и остальные связанные состояния. Тогда "пропадает" лишь одно из состояний дублета.

При сближении трех состояний "исчезают" не больше двух ("аннигилируют" лишь четное число состояний, если специально не уводить в сторону оставшееся состояние, меняя его нормировку).

2 ФОРМУЛЫ СДВИГА УРОВНЕЙ, НЕ НАРУШАЮЩИХ СИММЕТРИИ ПОТЕНЦИАЛА НА КОНЕЧНОМ ОТРЕЗКЕ

Формулы для симметричной деформации прямоугольной ямы, вызывающей сдвиг избранного энергетического уровня, были даны в книге Пешеля и Трубовица [6]

Начнем сразу с выражения для потенциала, для которого спектр отличается от спектра "старой" системы сдвигом выбранного уровня:

$$v(x) = \overset{\circ}{v}(x) - 2\{\ln \omega(x)\}''; \quad (1)$$

$$\omega(x) = W[w(x), \overset{\circ}{\psi}(x, E(n))]. \quad (2)$$

В этом выражении "W" есть вронскиан, который мы выписываем в явном виде:

$$W[w(x), \overset{\circ}{\psi}(x, E(n))] = w(x) \overset{\circ}{\psi}'(x, E(n)) - w'(x) \overset{\circ}{\psi}(x, E(n)). \quad (3)$$

Здесь $\overset{\circ}{\psi}(x, E(n)) = \sin(\sqrt{E(n)}x)$ - n-ая собственная волновая функция исходной невозмущенной прямоугольной ямы. а

$$w(x) = \cos(\sqrt{E(n)+tx}) + \{\cos(\sqrt{E(n)}a) - \cos(\sqrt{E(n)+ta})\} \sin(\sqrt{E(n)+tx}) / \sin(\sqrt{E(n)+ta}) \quad (4)$$

("а" - правая крайняя точка прямоугольной ямы). Теперь запишем выражение для собственной функции (ненормированной) при новом собственном значении $E(n)+t$:

$$\psi(x, E(n)+t) = \overset{\circ}{\psi}(x, E(n)) / \omega(x). \quad (5)$$

Собственные функции для других (несдвинутых) уровней энергии $E(m)$ записываются при этом так ($n \neq m$):

$$\psi(x, E(m)) = \overset{\circ}{\psi}(x, E(m)) - t(1/\omega(x))w(x) \int_0^x \overset{\circ}{\psi}(y, E(n)) \overset{\circ}{\psi}(y, E(m)) dy. \quad (6)$$

Прямая подстановка данных выражений для волновых функций и потенциала в уравнение Шредингера может служить проверкой их правильности. Также нетрудно проверить, что требуемые граничные условия удовлетворяются для этих решений в точках 0 и а.

Рисунки, представленные во введении, были получены с помощью этих формул. Соответствующие параметры показаны на этих рисунках. Нарисовав $v(x), \psi(x, E(n) + t), \psi(x, E(m))$, мы видим, что при приближении второго уровня к третьему оба состояния "исчезают" в пределе (они впрессовываются в стенки ямы): как 2-е, так и 3-е состояния концентрируются внутри δ -ямок у вертикальных стенок за отделяющими их сужающимися кверху барьерами. В средней яме между барьерами основное состояние $\psi(x, E(m = 1))$ выглядит таким же, как и раньше, второе и третье состояния исчезают, четвертое состояние имеет один узел и становится "вторым" состоянием: его "лишние" узлы находятся под барьерами, а первые и последние максимумы по модулю внутри краевых δ -ямок с исчезающими амплитудами (то же для других состояний, лежащих выше).

Покажем на схематическом рис.4, как возникают силы, толкающие в обе стороны разделенные надвое части вырождающихся состояний при сближении уровней дублета. Для примера рассмотрим случай подъема уровня энергии основного состояния $\psi_1(x)$ к его ближайшему соседу сверху $\psi_2(x)$. Начнем с момента, когда эти уровни уже значительно сдвинуты. Чтобы еще пододвинуть первое состояние ко второму, нужно толкать его дополнительным $\Delta V > 0$ вверх там, где $|\psi_1(x)| > |\psi_2(x)|$ (эти места помечены на рис.4 стрелками, направленными вверх); а чтобы при этом второй и др. уровни остались на месте, введем компенсирующее притяжение $\Delta V < 0$ там, где $|\psi_1(x)| < |\psi_2(x)|$. После таких потенциальных добавок ямы $V + \Delta V$ оказываются раздвинутыми по сравнению с их исходной формой V .

Соответствующие формулы были получены и для симметричных деформаций осцилляторной ямы на всей оси (рис.5), а также для конечной прямоугольной потенциальной ямы (рис.6) с дискретным и непрерывным спектром.

Форма дна средней ямы объясняется подобно тому, как это было сделано нами при унижтожении отдельных уровней в спектре [2].

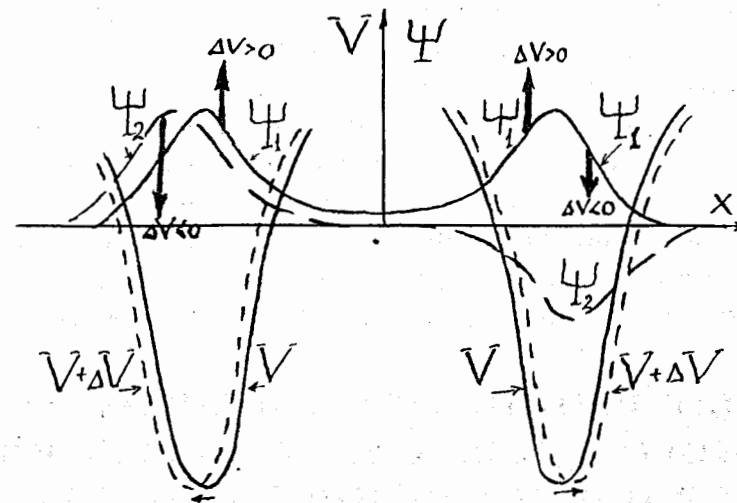


Рис.4 Разведённые в стороны части сближаемых по энергии состояний $\psi_1(x), \psi_2(x)$. Их растаскивают вспомогательные ямки, символически изображенные здесь. Ясно, что при удалении одинаковых ямок уровни в них вырождаются. Но нам нужно еще, чтобы двигалось лишь основное состояние. Для этого, помимо отталкивающих добавок к потенциалу $\Delta V > 0$ в местах, помеченных вертикальными стрелками (вверх), где $|\psi_1(x)| > |\psi_2(x)|$, нужно вводить компенсирующее притяжение $\Delta V < 0$ (стрелки вниз) там, где $|\psi_1(x)| < |\psi_2(x)|$. В результате происходит смещение ямок-переносчиков вырождающихся состояний в стороны (сдвиг штриховых линий относительно сплошных).

Во-первых, для каждого из состояний выше дублета нужно убрать по два узла в волновой функции. Это достигается соответствующим сужением ямы, которое тем меньше, чем выше уровень (с ростом частоты сокращается расстояние между узлами, и меньше нужно укорачивать интервал между точками поворота). Во-вторых, при сужении ямы должны были бы подняться уровни состояний ниже "исчезающего" дублета ($n, n+1$). А чтобы удержать их на прежнем месте, нужно создать дополнительные потенциальные ямки в местах наибольшей чувствительности ближайшего состояния под дублетом, т.е. там, где расположены максимумы модуля $(n-1)$ -ой волновой функции. Состояния ниже $(n-1)$ -го менее чувствительны к сужению верхней части ямы и их

влияние на форму потенциала не так заметно. Иллюстрацией к сказанному могут служить рисунки 2б и 6, где под дублетом (1,2) расположено лишь одно основное состояние с одним максимумом и в центральной яме создается одно дополнительное углубление в центре с прогибами потенциальной кривой вверх вокруг ямки. А на рис.5, где в исходном осцилляторном потенциале вырождался дублет (3,4), отчетливо видны две ямки в центре, удерживающие второй уровень, холмик между ними и не столь заметные "припухлости" (компенсирующего отталкивания) слева и справа.

3 ОБОБЩЕНИЕ ФОРМУЛ СИММЕТРИЧНОГО СДВИГА НА СЛУЧАЙ ВСЕЙ ОСИ И НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

Формулы (1,5,6) Трубовица [6] могут быть обобщены на всю ось и на случай конечных симметричных ям не только с дискретным, но и непрерывным спектром. Нужно только в качестве w использовать решения для исходного потенциала, (анти)симметричные относительно центра системы, совпадающего с началом координат, и пределы интегрирования в (6) надо брать $-\infty, x$. Например, в случае осциллятора $v(x) = x^2$ берутся гипергеометрические аналоги синуса (n четное) и косинуса (n нечетное):

$$w(x) = \exp(-x^2/2) {}_1F_1(1/4 - (E_n + t)/4, 1/2, x^2) - \text{"гипгеокосинус"},$$

$$w(x) = \exp(-x^2/2) {}_1F_1(3/4 - (E_n + t)/4, 3/2, x^2) x - \text{"гипгеосинус"}.$$

Пример симметричного уничтожения третьего и четвертого уровня в осцилляторной яме при их вырождении показан на рис.5.

Мы видим, что имеет место тот же (концептуально) механизм, что и рассмотренный выше на примере прямоугольной ямы. Очевидное отличие состоит только в том, что сильно сепарированные крайние полуколебания волновых функций сближаемых состояний (в которых сосредоточена нормировка) могут теперь неограниченно расходиться в обе стороны на всей оси,

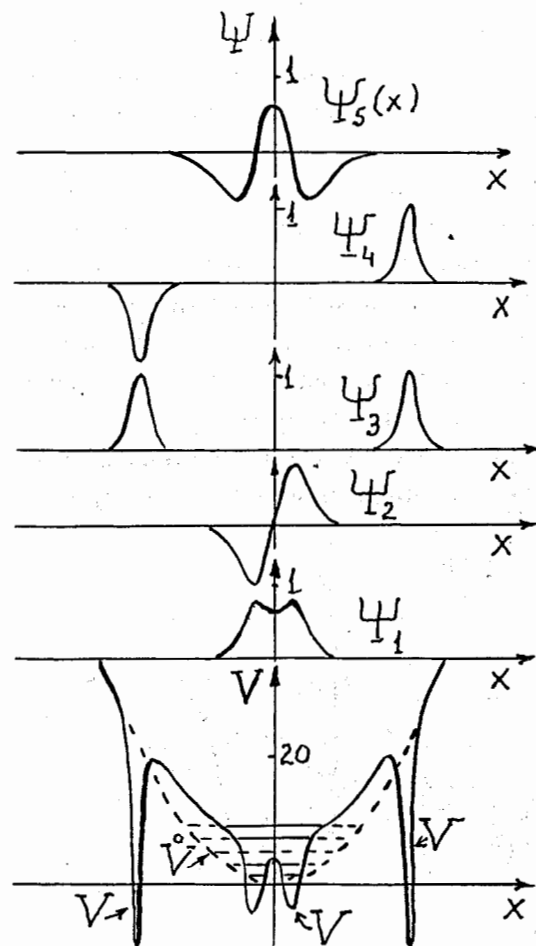


Рис.5 Симметричная деформация осцилляторного потенциала ($V(x) = x^2$) при вырождении E_3 и E_4 и соответствующие волновые функции первых пяти уровней. С помощью специальных ям-сосудок, в которых концентрируется нормировка $\psi_3(x)$ и $\psi_4(x)$, происходит "растаскивание" в обе стороны данных состояний. Волновые функции для собственных значений энергии, лежащих ниже вырождаемого дублета, изменяются мало, тогда как $\psi_3(x)$ (и все остальные $\psi_m(x), m > 5$) совершает крайние полуосцилляции с амплитудами, близкими к нулю. В пределе полного вырождения ямки-сосудульки раздвигаются симметрично до бесконечности, а вместе с ними и области, где отлична от нуля вероятность обнаружить частицу в вырождаемых состояниях; при этом все выше лежащие $\psi_m(x)$ теряют по два узла (ср. с рис. 1 и 3)

вместо впрессовывания в потенциальные стенки, как это было раньше. Важно подчеркнуть, что это осуществляется при помощи специальных "ям-сосудок", в которых устанавливается "режим наибольшего благоприятствования" для избранных вырождающихся состояний, и, наоборот, для остальных состояний там создаются условия деструктивной интерференции - колебания волновых функций гасят сами себя. Эти ямки-сосудки - наши "старые знакомые", ведь они являются основным и универсальным элементом в недавно развитой теории управления локализациями состояний [2]. Эта их неожиданная новая роль позволяет установить еще одну связь между алгоритмами сдвигов избранных состояний в конфигурационном и энергетическом пространствах.

Аналогичные результаты получаются и для потенциалов, имеющих помимо дискретного еще и непрерывный спектр, см. рис.6.

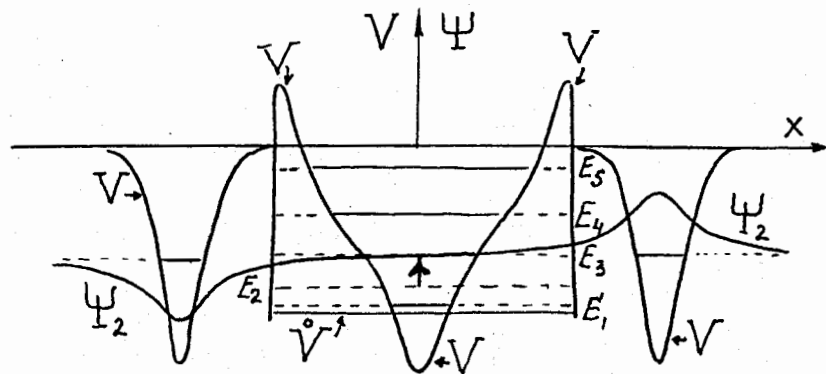


Рис.6 Симметричная деформация конечной прямоугольной ямы на всей оси (с 5-ю уровнями при вырождении E_2 и E_3) и волновая функция $\psi_2(x)$. Как и на рис.4, вспомогательные ямки по краям (в данном случае солитонные, не дающие отражения) разрывают $\psi_2(x)$ (а с ней и $\psi_3(x)$) пополам, симметрично унося на бесконечность крайние полуколебания (в которых сосредоточена вся нормировка). При этом непрерывный спектр (коэффициенты отражения) остается неизменным.

Здесь надо отметить, что возмущения исходного потенциала не изменяют состояний рассеяния (коэффициенты отражения).

4 АСИММЕТРИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

До сих пор мы ограничивались потенциалами, симметричными относительно центра, когда при чисто дискретном спектре их форма полностью определялась лишь положениями уровней. При отсутствии симметрии в полный набор спектральных параметров входят еще и нормировочные множители, управляющие сдвигами отдельных состояний в пространстве [2].

С помощью нормировок можно зафиксировать положение, например, правых частей вырождающихся состояний так, чтобы они не уходили вправо при сближении уровней, а располагались там же, где и остальные состояния. При этом левые части будут уходить влево (до $-\infty$ или впрессовываться в левую стенку). Особенностью этого случая является то, что вышеупомянутой полной аннигиляции не происходит. "Пропадает" лишь левая часть функций, а правые части функций дублета, будучи равными с точностью до постоянного множителя, "сливаются" в одно состояние общего полного набора.

Продемонстрировать это можно с помощью точно решаемых моделей баргмановского типа в обычном формализме обратной задачи Гельфанда-Левитана-Марченко, см. [1]. Так, на рис.7 показаны функции дублетов и потенциалы их вырождающие при совпадении правых частей функций (одинаковых приведенных ширины - конечных производных у правых потенциальных стенок; в симметричном случае производные функций дублета на краях ямы не фиксированы и стремятся по модулю к бесконечности).

Изменяя нормировки вырождаемого дублета, можно двигать в пространстве "гантель"¹ (разведенные части функций) влево и вправо относительно остальных состояний. Так что гантель может оказаться как полностью с одной, так и другой стороны исходной системы или по разные стороны от нее или поместиться правой (левой) своей частью внутри исходной системы.

¹ Имеется два пространственных параметра, которыми можно управлять: длина ручки гантели и расположение ее относительно всей системы.

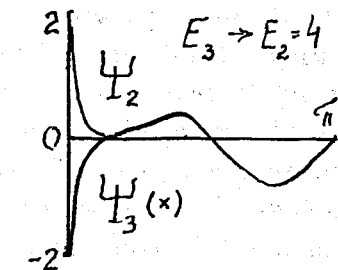
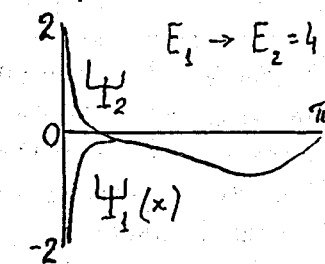
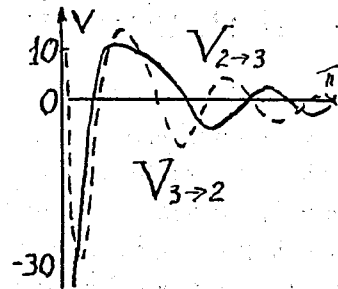
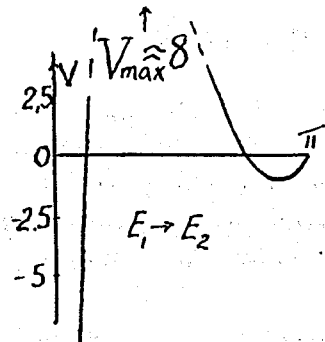


Рис.7 Асимметричная деформация конечной прямоугольной ямы при сближении уровней E_1, E_2 и E_2, E_3 . Производные функций вырождаемого дублета выбирались одинаковыми на правом краю ямы.

Случай задания неравных приведенных ширин показан на рис.8

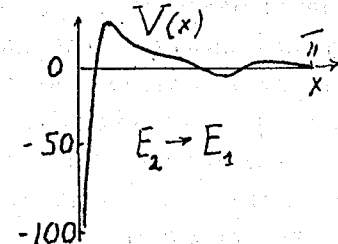
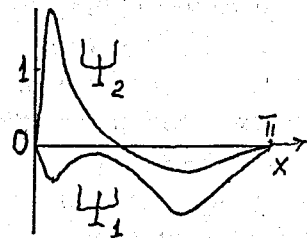


Рис.8. Волновые функции дублета и потенциал на промежуточном этапе сближения основного и первого возбужденного состояния при задании неравных производных на правой стенке исходной бесконечной прямоугольной потенциальной ямы. При дальнейшем сближении левые части функций дублета будут все сильнее прижиматься к левой стенке и в пределе "исчезнут" за бесконечным барьером.

Известно, что форма бесконечной ямы полностью определяется либо собственными значениями λ_n и соответствующими нормировками γ_n , либо двумя спектрами λ_n, μ_n (см., например, [1]) для задач с независимыми граничными условиями (например, на концах отрезка $[0, a]$):

$$\begin{aligned} 1) & y'(0) - h_1 y(0) = 0, y'(a) + H y(a) = 0; \\ 2) & y'(0) - h_2 y(0) = 0; y'(a) + H y(a) = 0; \\ & h_1 \neq h_2, H - \text{действительные числа.} \end{aligned} \quad (7)$$

Примером двух спектров осциллятора на полуоси может служить один спектр осциллятора на всей оси [1].

Оказывается, и при сближении собственных значений разных спектров при неизменном положении других происходит "исчезновение" одного из состояний (правая половина "гантели" дублета впрессовывается в стенку или, в задаче на полуоси, уходит на бесконечность). Этому отвечает сингулярность γ_n при сближении λ_n, μ_n :

$$\gamma_n = \frac{h_1 - h_2}{\mu_n - \lambda_n} \prod_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k - \lambda_n}{\mu_k - \lambda_n}. \quad (8)$$

Авторы благодарны РФФИ за поддержку (грант N 94-02-04788).
ЛИТЕРАТУРА

[1] Захарьев Б. Н., Сузько А. А. *Потенциалы и квантовое рассеяние*. М: Энергоатомиздат, 1985. *Direct and Inverse Problems. Potentials in Quantum Scattering*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1990); см. Захарьев Б.Н., ЭЧАЯ, 21, N4, с.914, 1990.
[2] Chabanov V.M., Zakhariev B.N., *Phys.Rev.A*49, 3159, 1994.
[3] Захарьев Б.Н., *Уроки квантовой интуиции*, (в печати).
[4] Захарьев Б.Н., ЭЧАЯ.23, N5, 603, 1992; см. также Serdyukova S.I., B.N. Zakhariev, *Phys.Rev. A*46, 58, 1992, *ibid.* 47, N5, 3518, 1993.
[5] Chabanov V.M., Zakhariev B.N., *Phys.Lett.B*319, 13-15, 1993; *Phys.Rev.A*, v.50, N4, 1994.
[6] Poshel J., Trubovitz E. *Inverse Spectral Theory*. Academic, New York, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 декабря 1994 года.