

# ДИСКРЕТНАЯ И НЕПРЕРЫВНАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА, ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ (Уроки квантовой интуиции II)

*Б.Н. Захарьев*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Настоящий обзор подытоживает серию исследований по «квантовой инженерии» и является продолжением предыдущего (ЭЧАЯ, 1990, т.21, с.914). Приводятся «квантовые картинки», проясняющие специфику движения волн по решеткам (каналов, конфигураций), что позволяет с качественно новой стороны взглянуть на структуру связанных состояний и механизмы рассеяния: какое нужно выбрать взаимодействие, чтобы создать желаемый спектр или резонансную картину. Демонстрируются неожиданные проявления невидимой верхней (по энергии) границы разрешенной зоны в дискретном представлении волновой функции (например, запертие волн на потенциальном склоне), роль «уравнений Шредингера высшего ( $\geq 4$ ) порядка», новые точно решаемые модели. Все это как бы перекидывает мостик между ядерной (атомной) и твердотельной квантовой физикой

This review summarizes the set of recent investigations in «quantum engineering», and is the continuation of the previous review article in Sov.J.Part.&Nucl. 21, №4, 1990. New «quantum pictures» are presented clarifying the peculiarities of the wave motion over the lattices (of configurations and channels). That allows one to look at the structure of bound states and scattering mechanisms from the other side: what interaction is necessary to provide the desired spectral or resonance features. Unexpected manifestations of invisible upper energy boundary of the allowed zone in the discrete representation of wave functions (e.g. wave confinement on the potential slope) are demonstrated as well as the significance of «Shroedinger equations of higher ( $\geq 4$ ) order» and new exactly solvable models. All this bridges the nuclear (atomic) and solid state quantum physics.

*Квантовая механика — это полная загадок и парадоксов дисциплина, которую мы не понимаем до конца, ... это антиинтуитивная дисциплина.*

М. Гелл-Манн

## ВВЕДЕНИЕ

Физикам нашего поколения, изучающим явления микромира, повезло. Мы были свидетелями перманентной революции в нашей науке, и есть основания надеяться, что так будет и дальше. Не только теория поля

и элементарных частиц (несохранение четности, кварки, электрослабое взаимодействие, суперсимметрия ...!), но и нерелятивистская физика быстро меняют свой облик.

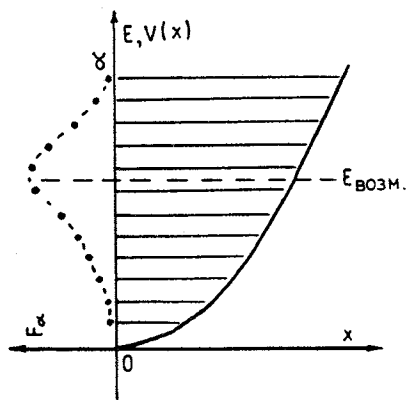
Что касается области более близкой к исследованиям автора, то кардинально обновилась квантовая механика: решение проблемы трех тел, развитие аппарата единой теории реакций (многоканальной ядерной, атомной физики), возникновение и триумф теории обратной задачи, успехи теории сверхтекучести и сверхпроводимости вместе с загадками высокотемпературных экспериментов ... .

В то же время из-за Чернобыля и в связи с окончанием холодной войны (а также с трудностями перестройки) изменилось отношение к атомщикам и ядерщикам. И несмотря на успехи теории, усовершенствование измерительной и вычислительной техники, наметился кризис ядерной физики. Наверное, есть и внутренние причины, способствующие здесь временному спаду общественного интереса: например, возможно, лавина экспериментальных данных при громоздкости и недостаточной идейной прозрачности теоретического аппарата подавляет нестойких специалистов и молодых людей, решающих, какой путь выбрать в физике. Выходу из кризиса должны помочь новые ясные и захватывающие идеи. Некоторые идеи такого плана будут рассмотрены в данном обзоре.

На новом витке спирали полезно обратиться к новым, точно решаемым моделям, чтобы взглянуть на квантовую физику с непривычной стороны. Как движение в поле простейших потенциалов легло в основу наших представлений о туннелировании, стоячих волнах, резонансах и т.п. и присутствует практически в любых наших (и самых сложных) исследованиях, так рецепты «управления» спектральными параметрами и данными рассеяния на моделях, подобные рассмотренным в этом и предыдущем [19] обзорах, должны стать элементами квантовой азбуки для обогащения выразительных возможностей будущей теории.

Еще Эйнштейн называл квантовую механику колдовским исчислением. Правда, с ее развитием она постепенно становится более понятной и предсказуемой. В этом отношении закономерным является выход в свет новой книги Брандта и Дамена «Квантовая механика на персональном компьютере» [60] — как бы оживленного компьютером варианта их первой «Книги квантовых картинок». Об аналогичной работе наших новосибирских коллег [45] упоминается в литературном комментарии в конце обзора. Все это как «педагогический бальзам» для заживления пробелов при изучении традиционного курса. В данном и предыдущем [19] обзорах автор делится опытом уроков, извлеченных им самим в последние годы в процессе новых исследований. Общение с коллегами разных возрастов показывает, что эти уроки могут быть полезны

Рис. 1. Функция  $F_\alpha$  (штриховая линия на повернутом графике в левой части рисунка), характеризующая вклад в возмущенную волновую функцию  $\Psi(E_{\text{возм}}, x)$  базисных волновых функций  $\Psi(x)_\alpha$  осцилляторного потенциала, изображенного со своими уровнями в правой части рисунка. Можно рассматривать  $F_\alpha$  как стоячую волну на решетке осцилляторных уровней, образованную волнами, бегущими вверх и вниз по лестнице эквидистантного спектра возмущаемого осциллятора. Потенциал  $w(x)$ , искажающий  $V_{\text{осц}}(x)$ , не показан



одновременно и студентам, и зрелым специалистам. Была даже высказана идея об организации школы «Уроки квантовой интуиции», где встречались бы особенно заинтересованные в том, чтобы рассказать и послушать (показать и посмотреть на экране компьютера) что-то особенное, удивительное, но обязательно понятное о закономерностях волнового микромира. Первая такая школа уже состоялась в Дубне в мае 1992 г.

В данном обзоре мы часто будем говорить о движении волн в пространствах дискретных переменных (по решеткам базисных конфигураций и каналов). Поясним, о чем идет речь, на простейшем примере применения метода смешивания конфигураций. Рассмотрим движение волны в осцилляторном потенциале  $V_{\text{осц}}$ , возмущенном некоторой потенциальной добавкой  $w$ . Разлагая волновую функцию  $\Psi(x)$  по полному набору осцилляторных состояний  $\Phi_\alpha(x)$ :

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

из исходного уравнения Шредингера для  $\Psi(x)$  получаем систему уравнений для искомым коэффициентов  $F_\alpha$ , определяющих веса, с которыми под действием возмущения  $w$  смешиваются базисные конфигурации  $\Phi_\alpha(x)$  при формировании состояния  $\Psi(x)$ . Эти коэффициенты  $F_\alpha$  являются другим представлением  $\Psi(x)$  с дискретной переменной  $\alpha$  вместо непрерывной  $x$ . Можно представить, что  $F_\alpha$  — стоячая волна на решетке конфигураций  $\alpha$  (рис.1), движение по которой определяется матричным гамильтонианом с матрицей взаимодействия  $V_{\alpha\alpha'}(x)$ , нелокальной по  $\alpha$ . При этом волна в искаженной осцилляторной яме как бы «раскачивается

на энергетических качелях»: вверх-вниз по уровням невозмущенного потенциала под действием возмущения  $w$ . Без возмущения волна могла занимать определенный (пусть  $\alpha_1$ ) уровень энергии (стоячая волна, составленная из компонент, бегущих в противоположные стороны только по  $x$ , при фиксированном  $\alpha$ ): отличен от нуля строго один коэффициент  $F_{\alpha_1} = 1$ . Включение возмущения «размывает» функцию распределения нового состояния с определенной энергией в  $V_{\text{osc}} + w$  (теперь  $F_{\alpha}$  — веса вкладов отдельных базисных состояний  $\Phi_{\alpha}$  в  $\Psi$ ) — получается стоячая волна и в направлении  $\alpha$ , изображенная слева на рис.1. Специфика движений по лестнице базисных уровней, выявляемая на простых моделях, так или иначе присутствует и в более общих случаях многомерного многоканального движения сложных квантовых систем. Взгляд с новой стороны (как бы изнутри?) позволяет вскрыть секреты квантовой кухни, лучше понять, как под действием сил готовятся сложные волновые состояния, а не просто закладывать в «черный ящик» ЭВМ параметры взаимодействий и извлекать оттуда лишь численные результаты.

Закономерности движения волн в дискретном представлении мы рассмотрим сначала в первых двух разделах на упрощенной модели тридиагонального гамильтониана, отвечающего разностному уравнению Шредингера (1). Покажем, как возникают верхняя граница непрерывного спектра, связанные состояния над ним, эффективные потенциальные барьеры, «свисающие сверху» из запрещенной зоны в разрешенную, и как сквозь эти «опрокинутые» барьеры туннелируют волны. Объясним вытекающие отсюда особенности теоремы Левинсона для рассеяния волн на решетках, и как, в отличие от классического и непрерывного квантового случая, происходит запираение волн на потенциальном склоне (они не спускаются вниз). Оказывается, точно решаемыми моделями таких связанных состояний являются обычные функции Бесселя  $J_{\alpha}(z)$ , у которых координатой служит дискретный индекс  $\alpha$ , а  $z$  рассматривается не как координата, а как параметр, характеризующий однородное внешнее поле (см. разд.2). Эти модели дают качественное представление о структуре спектра в общем случае: с потенциалами произвольной формы. Раздел 3 посвящен теории управления спектральными параметрами в задаче с дискретными переменными на моделях бесконечно глубоких потенциальных ям конечной ширины. Неожиданные, но простые правила изменения потенциала для сдвига, например, одного избранного уровня существенно проясняют теорию движения по дискретной координате. В разд.4 рассматриваются многодиагональные матричные гамильтонианы, отвечающие разностным «уравнениям Шредингера» высшего ( $p \geq 4$ )

порядка, у которых много общего с нормальными уравнениями Шредингера, но имеется для одномерной решетки больше обычного ( $p$ ) разностей волн (например, для свободного движения  $\exp(\pm ik_n x)$  с  $n = 1, 2, \dots, p/2$  вместо стандартных двух). Экзотика решений этих уравнений проявляется, например, в новой степени свободы: переходах между волнами разного рода, что может облегчить преодоление потенциальных барьеров (а барьеры могут быть в коэффициентах при  $\Psi$  и разных ее производных).

В разд.5 обсуждаются способы влияния на форму энергетической зависимости фазового сдвига рассеяния  $\delta(k)$  (группирования резонансов) для обычных и решеточных уравнений Шредингера.

В разд.6 механизм образования спектральных полос в периодическом поле сравнивается со случаем свободного разностного уравнения. Даются примеры имплантации связанных состояний в лакуны и разрешенные зоны спектра (эволюция квантовой системы при «протягивании» связанного состояния сквозь зоны). Показано, как можно создавать желаемую зонную структуру (рвать непрерывный спектр свободного движения лакунами на заданной высоте) специальными периодическими полями, используя описанный в обзоре [19] опыт спектрального управления для бесконечно глубоких потенциальных ям конечного радиуса действия.

В литературном комментарии в конце обзора дается перечень новых интересных работ по близкой тематике.

В процессе данной работы использовалась замечательная программа «Математика» на персональном компьютере. Хотелось бы обратить внимание физиков на ее возможности облегчить нашу жизнь. Правда, программа эта дорого стоит (помеха для небогатых стран из-за несовершенного еще авторского права) и помещается лишь на достаточно мощном компьютере. Благодаря простоте воспроизведения с ее помощью в графическом виде исследуемых функций, были просмотрены сотни «квантовых картинок» резонансных явлений, наиболее интересные из которых отобраны для этой публикации.

## 1. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

Неожиданно оказалось, что ядерная (атомная) физика выигрывает от «аккомпанемента» решеточной квантовой теории. Оттеняются новые аспекты волнового движения, скрытые при обычном подходе. Иногда дискретные представления помогают отчетливее выявить логический каркас квантовой механики.

Мы начнем с нестандартного объяснения конечности ширины *единственной разрешенной зоны* в случае уравнения движения волн с дискретной координатной переменной (разностного уравнения Шредингера). В разд.5 мы сопоставим это с механикой «формовки» волн с непрерывной координатой периодическим внешним полем (в простой модели  $\delta$ -образных потенциалов — «гребенки Дирака»).

**Свободные волны конечно-разностного уравнения.** Особенности движения волн по решеткам мы начнем с простейшего случая. Покажем, как появляется разрешенная зона конечной ширины для свободного движения волн с дискретной переменной.

Разностное уравнение Шредингера с потенциалом, равным нулю, имеет вид ( $\hbar = 2m = 1$ ;  $\Delta$  — шаг конечно-разностного дифференцирования):

$$-\frac{\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}}{\Delta^2} = E\Psi_n. \quad (1.1)$$

Вторая разностная производная в левой его части, естественно, есть мера «излома» первой производной решения при переходе из точки  $n$  в точку  $n + 1$ . И согласно (1.1) первая производная меняется пропорционально правой части (1.1) — двум ее факторам: как энергии  $E$ , так и значению функции в точке  $n$  (если условно представлять себе функцию в виде ломаной линии со значениями функции в дискретных точках  $n$ , соединенными отрезками прямой, с «силой изломов», пропорциональной  $E\Psi(n)$ ). При отрицательных значениях энергии частными решениями являются  $\Psi$ , все увеличивающиеся или все уменьшающиеся по модулю (см. рис.1.1,а) по экспоненциальному закону ( $\Delta = 1$ ):

$$\Psi(n) = C_{\pm} \exp(\pm\kappa n),$$

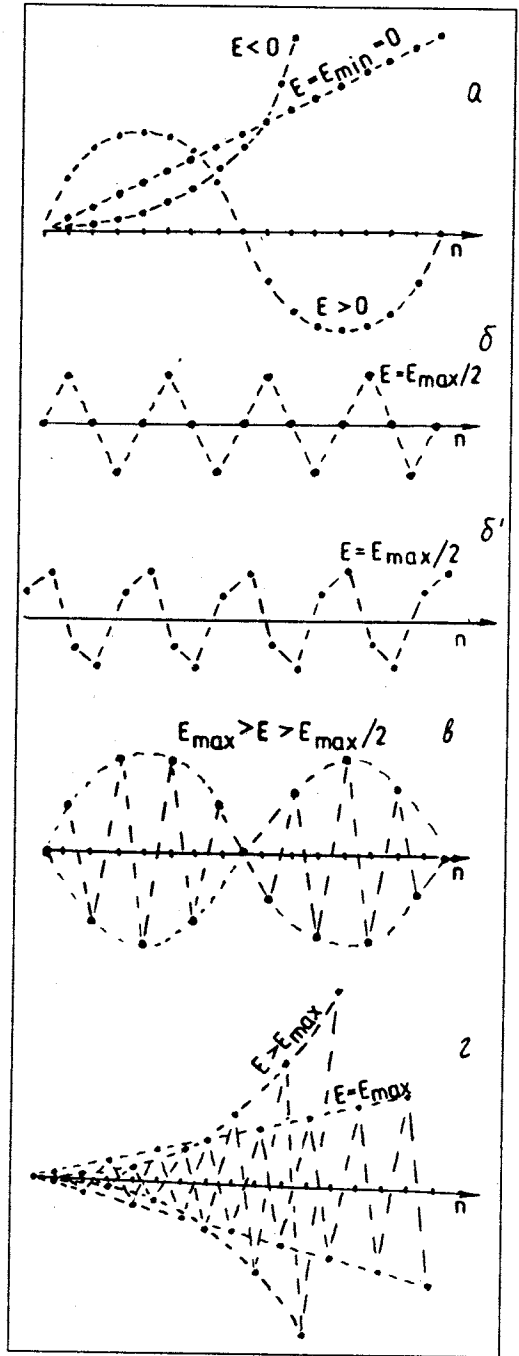
где константа  $\kappa$  связана с  $E$  соотношением  $\operatorname{ch} \kappa = 1 - E/2 > 1$ . Как и для обычного уравнения Шредингера с непрерывной переменной  $x$ ,

$$\Psi(x) = C_{\pm} \exp(\pm\kappa x), \text{ где } \kappa = (E)^{1/2}.$$

Это обычная запрещенная энергетическая зона  $[-\infty, 0]$ .

При нулевой энергии (на нижней границе разрешенной зоны  $E_{\min} = 0$ ) изломов в функции вообще нет и значения  $\Psi(n) = \alpha + \beta n$  располагаются на прямой линии (см. рис.1.1,а). Эту линию можно рассматривать как значения синуса  $A \sin(k\Delta n)$  в пределе нулевой частоты:  $k \rightarrow 0$ ;  $A \rightarrow \infty$ . При малых  $E > 0$  происходит постепенное изменение производной, как показано на рис.1.1,а. При положительных значениях функции производная монотонно уменьшается, а при отрицательных —

Рис.1.1. Решения уравнения (1.1) при различных энергиях. Дискретные значения  $\Psi(n)$  соединены для наглядности штриховыми линиями. а) При переходе через нижнюю границу разрешенной зоны ( $E = 0$ ) решение из экспоненциального (при  $E < 0$ ) превращается в линейное ( $E = E_{\min} = 0$ ), а затем в синусоидальное ( $E > 0$ ). б, б') Вид возможных решений в середине разрешенной зоны ( $E = E_{\max}/2 = 2$ ). в) Решение при энергии под верхней границей непрерывного спектра. з) На верхней границе  $E = E_{\max} = 4$  решение, как и при  $E = 0$ , по модулю линейное, а при  $E > E_{\max}$  — экспоненциальное (только по модулю), как и при  $E < 0$ . Обратите внимание на симметрию решений (по энергии относительно середины зоны проводимости) с точностью до знака. Так, синусоидальной волне с  $E_{\max}/2 > E > 0$  на рис.1.1,а отвечает синусоидальная огибающая волны (в) с  $E_{\max}/2 < E < E_{\max}$



возрастает в соответствии с отрицательным знаком второй производной в левой части уравнения (1.1). Таково решение  $A \sin(k\Delta n)$  с малой частотой. Повышая непрерывно энергию, можно получить функцию, изображенную на рис 1.1,б, обращающуюся в нуль через одну точку и колеблющуюся вокруг нулевого значения с постоянной амплитудой. (В точках, где  $\Psi(n)$  обращается в нуль, производная, как и

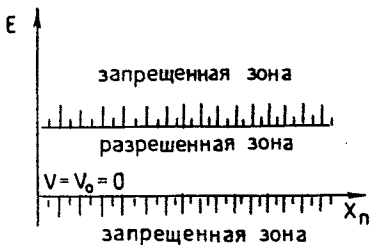


Рис.1.2. Спектр свободного движения по решеткам имеет горизонтальную разрешенную зону в плоскости  $\{E, x_n\}$  между нижней и верхней запрещенными зонами

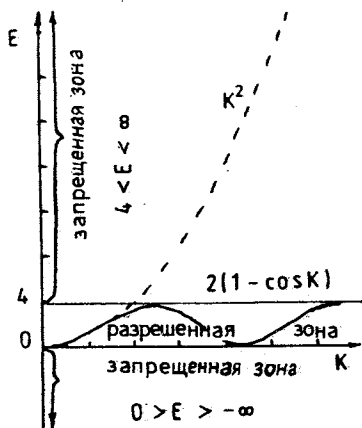


Рис.1.3. Зависимость от энергии импульса  $k$  свободного движения на решетке имеет общие черты с квазиимпульсом блоховских волн в поле периодических потенциалов

полагается, не меняется.) Ниже изображено (рис.1.1,б') решение с той же энергией  $E = 2$ , но сдвинутое по фазе  $A \sin(k\Delta n + \delta)$ . При дальнейшем увеличении энергии достигается такое значение  $E$ , при котором амплитуда колебаний линейно растет от точки к точке (рис.1.1,з). Это другая граница разрешенной зоны:  $E = E_{\max} = 4$ . Модуль

решения, как и при  $E = 0$ , меняется линейно с  $n$ , только  $\Psi$  меняет знак от точки к точке:  $\Psi(n) = -[\Psi(n+1) + \Psi(n-1)]/2$ . При еще больших энергиях размах колебаний начинает по модулю возрастать (или убывать) экспоненциально с переменной знака в каждой следующей точке (рис.1.1,з) — это верхняя запрещенная зона, которая простирается до  $E \rightarrow \infty$ , симметрично (относительно середины  $E = 2$  разрешенной зоны) нижней запрещенной зоне. Общее решение в верхней зоне является линейной комбинацией экспонент  $D_{\pm} \exp(i\pi n \pm kn)$ ,  $\text{ch } \kappa = 1 - E/2$ ;

$E > 4$ . Получается спектральный «сэндвич»: зона проводимости конечной ширины, зажатая между двумя неограниченными запрещенными зонами (см. рис. 1.2.). Это простейший пример полосатой зонной структуры. Здесь уже проявляются черты, характерные для волн в периодических полях: импульс  $k$  в зоне проводимости связан с энергией не

как в непрерывном случае ( $E = k^2$ , см.

рис.1.3), а соотношением  $\cos k = (2 - E\Delta^2)/2$ , которое получается подстановкой свободной волны  $\Psi_n = \exp(ikn\Delta)$  в уравнение (1.1) и сокращением обеих частей равенства на эту экспоненту. По существу, это простейший пример квазиимпульса.



Мы сопоставим в разд.5 волны разностного уравнения (1.1) с волнами с непрерывной координатой  $x$  в поле эквидистантно расположенных  $\delta$ -барьеров.

Особенности движения волн по решеткам с  $V \neq 0$ . Итак, уже свободное движение волн на решетке проявляет своеобразие (непрерывный спектр лишь на ограниченной полосе), посмотрим теперь, что нового вносит здесь взаимодействие. Оказывается, даже самый элементарный пример, когда потенциал отличен от нуля в одной точке  $V(n) = n\delta_{n1}$ , обнаруживает необычность теоремы Левинсона для конечно-разностного уравнения Шредингера (на полуоси  $n > 0$ ):

$$-\Psi(n + 1) + 2\Psi(n) - \Psi(n - 1) + v\delta_{n1}\Psi(n) = E\Psi(n); \quad \Psi(0) = 0. \quad (1.2)$$

Решение этого уравнения в полосе непрерывного спектра ( $E = 2 - 2 \cos k$ ) имеет при  $n > 0$  вид  $A \sin(kn + \delta)$ , где  $\delta(k)$  — фазовый сдвиг рассеяния. В зависимости от величины и знака  $v$  может еще образоваться связанное состояние ниже или выше (!) полосы непрерывного спектра (не больше одного: число их ограничено сверху числом точек, где отличен от нуля потенциал). При достаточно глубокой яме  $v\delta_{n1}$  ( $v < 0$ ) наличие связанного состояния ниже  $E = 0$  приводит, как и в случае непрерывной координаты, к тому, что предельное значение  $\delta(k \rightarrow 0) = \pi$ , то есть решение «переколебалось» на фазу  $\pi$  по сравнению со свободным. Наоборот, при достаточно большом  $v > 0$ , в «перевернутой яме» («вспученность» разрешенной зоны в верхнюю запрещенную) образуется связанное состояние выше полосы проводимости, и его вклад в фазовый сдвиг на верхней границе  $E_{\max} = 4$  ( $k_{\max} = \pi$ ) — отрицательный из-за того, что волновая функция «недоколебалась» в области барьера:  $\delta(k \rightarrow \pi) = -\pi$ . На рис.1.4 показано, как меняется форма кривой  $\delta(k)$  при изменении  $v$ . Соответствующее простое аналитическое выражение для фазы имеет вид

$$\delta(k) = \arctg [(v + \cos k)/\sin k] - k. \quad (1.3)$$

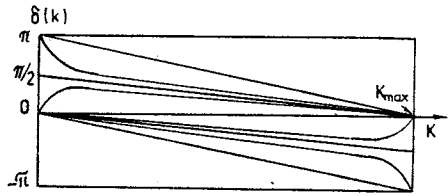
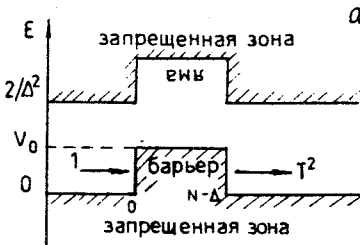
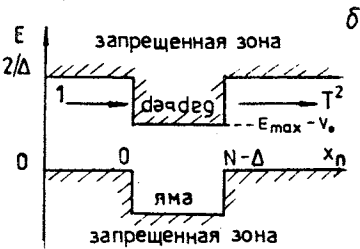


Рис.1.4. Зависимость фазового сдвига  $\delta(k)$  рассеяния на полуоси  $n > 0$  на потенциале  $v\delta_{n1}$ , отличном от нуля в единственной точке решетки  $n = 1$ , при разных значениях  $v$ . Верхняя и нижняя наклонные прямые отвечают большим отрицательным и большим положительным значениям  $v$ . Скачок  $\delta(0)$  при нулевой энергии связанного состояния аналогичен случаю непрерывной координаты. Скачок при  $k_{\max}$  связан с появлением связанного состояния над полосой непрерывного спектра



а Рис.1.5. Обычный потенциальный барьер (а) в полосе непрерывного спектра (при энергии  $E$  ниже  $V_0$  волны должны туннелировать сквозь барьер). Через «опрокинутый» потенциальный барьер (б) туннелирование происходит при  $E > E_{\max} - V_0$



б Обратите внимание на скачки в фазе на краях интервала  $[0, \pi]$  изменения  $k$  при значениях  $\nu$ , когда образуются (исчезают) связанные состояния. При прохождении связанным состоянием края нормальной или опрокинутой ямы фаза там принимает значение  $\pm\pi/2$ . Все это вносит специфику в теорему Левинсона для решеток (см. [22], гл. 4):

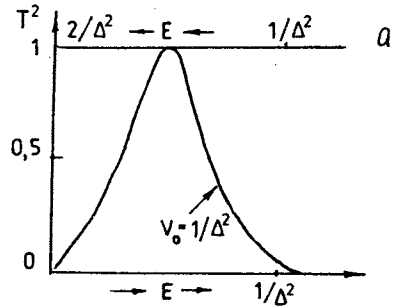
$\delta(k=0) - \delta(k=\pi) = \pi l + \pi/2(n_{\pm})$ , где  $n$  — сумма связанных состояний выше и ниже непрерывного спектра (в нашем случае  $n \leq 1$ ), а  $n_{\pm}$  — число «связанных» состояний на краях разрешенной зоны.

**Туннелирование.** Включение на конечном участке  $n = 0, 1, \dots, N$  прямоугольного потенциала  $V = \pm V_0$  приводит к локальному параллельному сдвигу (вверх-вниз) разрешенной полосы в плоскости  $(E, x)$ . В результате в полосе проводимости появляется вместе с обычной или опрокинутой ямой еще и потенциальный барьер: либо обычный (поднимающийся из нижней запрещенной зоны), либо спускающийся сверху (см. рис.1.5.).

В чистом виде (без ямы) верхний барьер можно получить, шивая в решетку дискретных значений  $x_n$  участок конечной длины с большим шагом  $\Delta_1 > \Delta$ , что приводит к локальному сужению разрешенной зоны на этом участке при невозмущенной нижней границе зоны проводимости. Общий случай переменного шага разностного дифференцирования  $\Delta(n)$  аппроксимируется переменным коэффициентом в (1.1) при второй производной. Он определяет локальную ширину разрешенной зоны, а форма потенциала задает рельеф нижней ее границы.

В отличие от случая уравнения Шредингера с непрерывной координатой  $x$ , свободные решения на решетках обладают симметрией по энергии относительно середины полосы проводимости. С этим же связана и симметрия решений относительно замены обычного потенциального барьера на барьер, «свисающий» из верхней запрещен-

Рис. 1.6. Энергетическая зависимость коэффициента прохождения  $T^2$  через барьер. Верхняя энергетическая шкала для обычного, а нижняя — для опрокинутого барьера (участка верхней запрещенной зоны, вдвинутого в зону проводимости).  
 а) Ширина барьера  $3\Delta$ , высота  $1/\Delta^2$ .  
 б) Ширина барьера  $5\Delta$ ; сплошная линия — высота барьера  $1/\Delta^2$ , штриховая линия — высота барьера  $1/2\Delta^2$

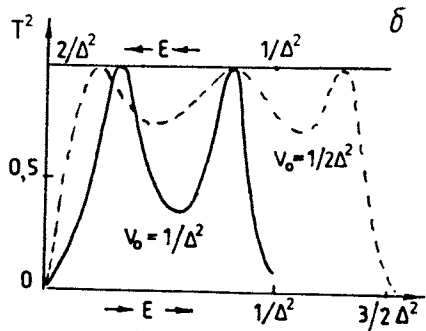


ной зоны [21]. Действительно, (1.1) не меняется, если произвести «отражение»:

$$\begin{aligned} (2 - E\Delta^2) &\rightarrow -(2 - E\Delta^2); \\ V(n) &\rightarrow E_{\max} - V(n) \end{aligned} \quad (1.4)$$

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

$$\Psi(n) \rightarrow (-1)^n \Psi(n). \quad (1.5)$$



Отметим связанную с этим разницу в поведении волновой функции внутри верхнего и нижнего барьеров (и вообще в верхней и нижней запрещенных зонах). В первом случае экспоненциальное затухание сопровождается осцилляциями («несущая частота» — изменение знака функции в каждой следующей точке; ср. волновые функции разностной задачи для нижних и верхних связанных состояний в прямоугольной яме (рис.3.15 в кн. [20]); см. также рис.2.9; 2.10 наст. обзора). Напомним еще, что движение в верхней части разрешенной зоны отвечает эффективной отрицательной массе (дырочному состоянию — как в недозаполненной ядерной или атомной оболочке). Результаты расчетов представлены на рис.1.6. С увеличением ширины барьера увеличивается число резонансов в коэффициенте проницаемости при энергиях, отвечающих условиям образования стоячих волн в области барьера (один — при  $N = 3$ , два — при  $N = 5$ ;  $V_0 = 1/\Delta^2$ ).

«Несущие» осцилляции имеются и в волновой функции связанного состояния в опрокинутой яме (на участке разрешенной зоны, вдвинутом в верхнюю запрещенную зону), см. рис 1.7. С симметрией спектра

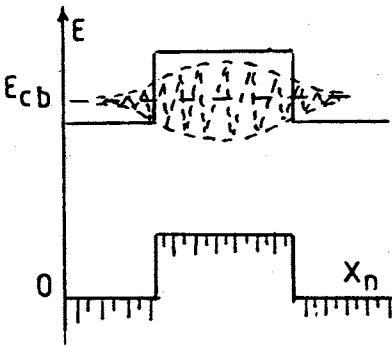


Рис.1.7. Связанное состояние (в «перевернутой вверх дном яме») над непрерывным спектром разрешенной зоны. Огибающая функции верхнего связанного состояния подобна функции основного связанного состояния в обычной неперевернутой яме

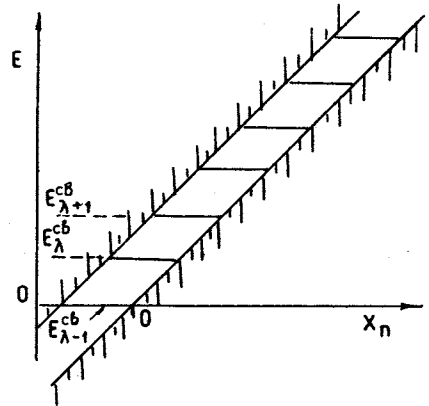


Рис.1.8. Наклонное расположение границ разрешенной зоны. Вместе с потенциальным склоном наклоняется и верхняя граница разрешенной зоны. При фиксированных энергиях  $E_{cb}$  физические решения (связанные состояния) должны затухать в обе стороны при углублении в запретные зоны (см. рис.2.3)

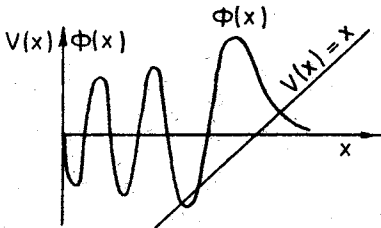


Рис.1.9. Функция Эйри

относительно его середины, упомянутой выше, но в бесконечной прямоугольной потенциальной яме, мы еще встретимся в разд.3 в связи с алгоритмами произвольного сдвига уровней. А в разд. 4 будут рассмотрены верхние и

нижние барьеры и ямы в коэффициентах уравнений высшего порядка.

Если свободное движение на решетке возмутить линейным потенциалом, то вместе с нижней границей разрешенной зоны — склоном потенциального холма — наклонится и невидимая верхняя граница. В результате произойдет конфайнмент волн (лестница связанных состояний на рис.1.8; см. также след. разд.2). Это резко отличается от поведения классического тела на склоне потенциальной горы: классический шарик скатился бы вниз со все возрастающим ускорением. То же происходит и с квантовой волной на линейном склоне в случае непрерывной координаты. Соответствующее квантовое решение представляет собой функцию

Эйри (рис.1.9), описывающую состояния непрерывного спектра: рассеяние волны потенциальным склоном с ускорением при удалении от классической точки поворота, где  $E = V$ .

## 2. НОВОЕ ФИЗИЧЕСКОЕ АМПУА (СТАРЫХ ДОБРЫХ) ФУНКЦИЙ БЕССЕЛЯ

Несколько неожиданно оказывается [21-24], что решения конечно-разностного уравнения Шредингера с линейным потенциалом есть не что иное, как функции Бесселя  $J_\alpha(z)$ , рассматриваемые, правда, не как функции от своего привычного непрерывного аргумента  $z = kr$ , а от дискретного индекса  $\alpha$ , (см. рис.2.1, 2.2, взятые из [43], рис.9.3 на с.181, а также [52], рис.109, 110). Действительно, хорошо известная рекуррентная связь (см. формулу (9.1.27) в [43]) функций Бесселя с тремя соседними значениями индекса  $\alpha$

$$J_{\alpha+1}(z) + J_{\alpha-1}(z) = (2\alpha/z) J_\alpha(z) \quad (2.1)$$

может рассматриваться как уравнение движения по  $\alpha$ -решетке. Перепишем его в несколько иной форме. Прибавим и вычтем  $2J_\alpha$ , разделим обе части равенства на  $2\Delta^2 = 2$  (ср. с (1.2)):

$$-\{J_{\alpha+1}(z) - 2J_\alpha(z) + J_{\alpha-1}(z)\}/2\Delta^2 - (\alpha/z) J_\alpha(z) = J_\alpha(z). \quad (2.2)$$

Рекуррентное соотношение (2.1) превращается в не что иное, как в конечно-разностное уравнение Шредингера с энергией  $E = 1$ , в котором роль дискретной координаты конфигурационного пространства играет индекс  $\alpha$  (как  $x_n = n\Delta$  и  $n$  в уравнении (1.2)).

На рис.2.1, 2.2 показаны функции Бесселя  $J_\alpha(z)$  как функции от  $\alpha$  при разных фиксированных значениях  $z$ . Из непрерывной функции от  $\alpha$  нужно только выбирать дискретные точки, отвечающие целому шагу  $\Delta = 1$  (при этом сами  $\alpha$  могут принимать целые или нецелые значения, но с целым шагом). Из этих рисунков видно, что функции Бесселя  $J_\alpha$  являются решениями уравнения (2.2), отвечающими граничному (асимптотическому при больших  $\alpha$ ) условию затухания в подбарьерную область (правая нижняя запрещенная зона начинается в точке поворота, где  $V(\alpha) = E = 1$ , верхняя левая запретная зона не показана). Для целых значений  $\alpha$ , благодаря соотношению, связывающему значения функций с разными знаками  $\alpha$ :

$$J_{-\alpha}(z) = (-1)^\alpha J_\alpha(z), \quad (2.3)$$

функция Бесселя экспоненциально падает и в левой верхней запрещенной зоне, только со сменой знаков в каждой следующей точке (такое затухание влево, правда, не видно явно на рис.2.1, так как из континуума значений  $J_\alpha$  нужно выделить лишь те, которые отвечают целым  $\alpha$ ). То есть, имеем квадратичную суммируемость  $J_\alpha$  с целым  $\alpha$ . Следовательно, функции Бесселя с целыми индексами  $\alpha$  являются волновыми функциями связанных состояний на линейном потенциальном склоне (!).

Сдвигу шкалы  $\alpha$  на единицу отвечает такой же сдвиг потенциального склона, что эквивалентно сдвигу по энергии на  $1/z$ . Следовательно, расстояние между уровнями связанных состояний равно  $1/z$ . Получается *эквилидистантный* спектр связанных состояний (для непрерывной координаты это получалось в осцилляторной яме  $V(x) = Cx^2$ , где, правда, спектр полуограничен снизу). Эти состояния образуют полный и ортонормированный набор (см. приложение 1).

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

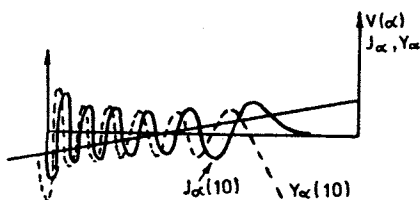


Рис.2.1. Функции Бесселя  $J_\alpha$ ,  $Y_\alpha$  в зависимости от индекса  $\alpha$ . Физическому условию затухания вправо (в подбарьерную область  $E - V(x) < 0$ ) отвечает только  $J_\alpha$ . Из непрерывной кривой нужно выбирать лишь дискретные точки с целым шагом, отвечающие координатам точек решетки разностного уравнения (2.1). Наклонная линия обозначает потенциал

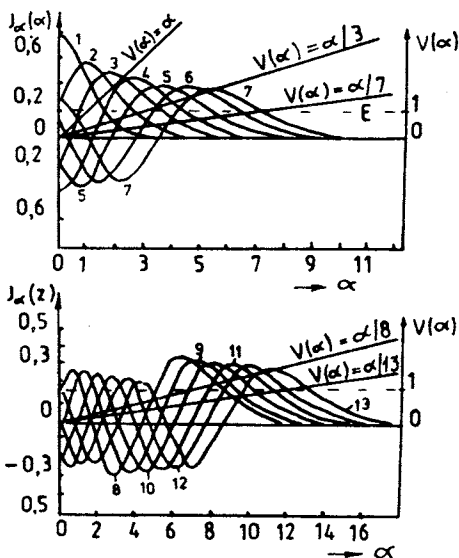


Рис.2.2. Функции Бесселя  $J_\alpha$  при разных значениях  $z$ . Показаны потенциалы  $V(\alpha)$  для некоторых значений  $z$  (наклонные линии). С ростом  $z$  крутизна  $V(\alpha)$  убывает и волны все дальше проникают вправо. Запрещенная зона начинается при  $\alpha$ , где  $V(\alpha) = E = 1$  (уровень  $E = 1$  обозначен штриховой линией). Левые верхние запрещенные зоны  $V(\alpha) + 2$  не показаны. Шкалы энергий расположены справа

$$\sum_{\alpha = -\infty}^{\alpha = +\infty} J_{\alpha+m}(z) J_{\alpha}(z) = \delta_{m0}. \quad (2.4)$$

В случае нецелых  $\alpha$  функции Бесселя являются нефизическими решениями разностного уравнения Шредингера, растущими в левой верхней запрещенной зоне и отвечающими значениям энергии между уровнями связанных состояний. Влево они растут раскачиваясь, что видно на рис.2.1. С ростом  $z$  потенциальный склон становится более пологим, и затухающие под барьером функции проникают все дальше в запрещенную область вправо (рис.2.2). То, что колебания функций на рис.2.1, 2.2 учащаются слева, соответствует росту кинетической энергии при спуске с потенциальной горы. Пример линейно независимого нефизического решения (функции Бесселя второго рода  $Y_{\alpha}$ ), растущего под барьером вправо (в глубь потенциальной горы), показан на рис.2.1.

С уменьшением крутизны потенциального склона  $V(\alpha) = 2\alpha/z$ , т.е. с ростом  $z$ , увеличивается плотность уровней в разрешенной наклонной полосе (см. рис.2.3). В пределе  $z \rightarrow \infty$  разрешенная зона располагается горизонтально и уровни сливаются в непрерывную полосу состояний свободного движения по всей оси  $\alpha$ . При

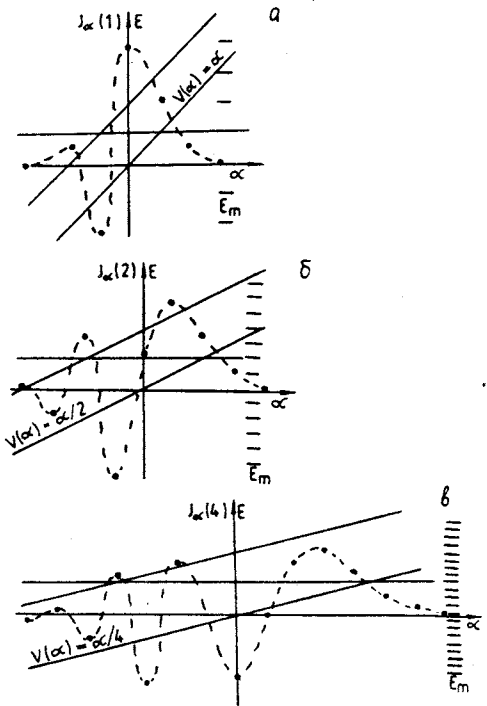


Рис.2.3. Волновые функции связанных состояний на склоне линейных потенциальных гор:  $V(\alpha) = \alpha, \alpha/2, \alpha/4$  с дискретной переменной  $\alpha$  — это функции Бесселя  $J_{\alpha}$  от целого индекса. Значения функций условно соединены штриховой линией. Здесь параметр  $z$  уже не играет роль координаты, а регулирует крутизну потенциального склона. Чем положе наклон, тем гуще эквидистантный спектр связанных состояний  $E_n$ . Функции всех этих состояний для данного  $V(\alpha)$  имеют одинаковую форму, но со сдвинутым на целое число аргументом. При нецелом  $\alpha$ , но с целым шагом решетки, функции Бесселя — нефизические состояния, растущие по модулю влево

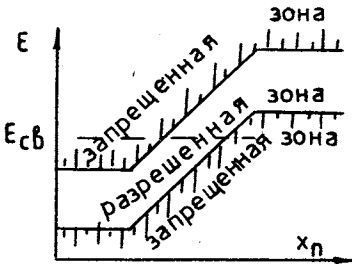


Рис.2.4. Пример запираия стоячей волны на ограниченном участке потенциального склона. Связанное состояние оказалось между полосами непрерывного спектра, отвечающими неограниченному движению влево и вправо

$z \rightarrow 0$  к нулю стремится и плотность уровней.

Изменение шага  $\Delta$  в разностном уравнении Шредингера в  $s$  раз эквивалентно

замене  $z \rightarrow z/s^2$ ;  $E \rightarrow E/s^2$ , т.е. тоже соответствует изменению крутизны потенциального склона.

Возможно, окажется интересным рассмотрение и других специальных функций, насколько они могут служить физическими разностными моделями. Связь ортогональных полиномов с теорией рассеяния рассматривал Кейз [63].

Для запираия волны в связанном состоянии достаточно конечного наклонного участка внешнего потенциального поля, как это показано на рис.2.4.

Интуиция, приобретенная нами при рассмотрении точно решаемых бесселевых моделей, позволяет делать качественные предсказания о том, как нужно трансформировать линейный потенциал, чтобы произвольным образом менять исходный эквидистантный спектр.

Так, можно получить щель желаемой ширины в спектре уровней, вводя дополнительную потенциальную ступеньку

$$V(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{для } \alpha < 0 \\ V_0 & \text{для } \alpha \geq 0, \end{cases} \quad (2.5)$$

как показано на рис.2.5. Вертикальной части потенциальной кривой (максимальной крутизне) отвечает нулевая плотность уровней.

Наоборот, сгущение уровней на некотором участке спектра достигается введением возмущающей скошенной потенциальной ступеньки

$$V(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{для } \alpha < 0 \\ \frac{\alpha}{z} & \text{для } 0 \leq \alpha \leq N \\ V_0 & \text{для } \alpha > N, \end{cases} \quad (2.6)$$

которая создает горизонтальный участок разрешенной зоны (рис.2.6).

Численные результаты (С.И.Сердюковой и А.И.Широковой) подтвердили качественные спектральные картинки на рис.2.5, 2.6. Чем



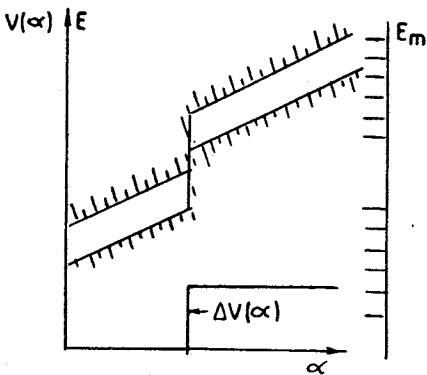


Рис.2.5. Энергетическая щель, созданная в первоначально эквидистантном спектре уровней на линейном потенциальном склоне с помощью возмущающего потенциала в виде ступеньки  $\Delta V(\alpha)$ , см. формулу (2.5). Это согласуется с рис.2.3, откуда следует, что разрежение спектра достигается увеличением крутизны потенциального склона. Лесенка энергетических уровней показана справа

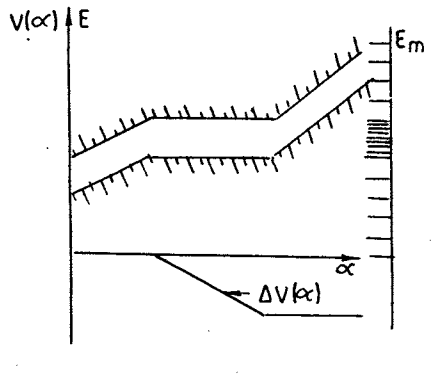
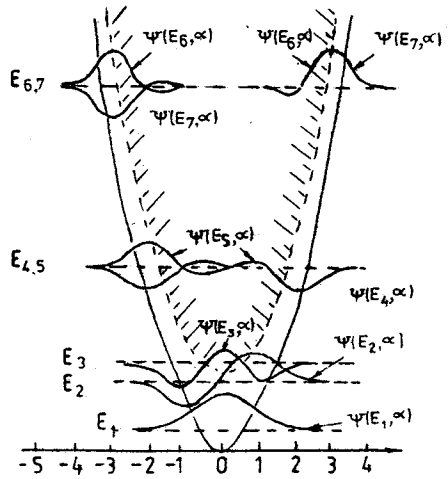


Рис. 2.6. Локальное сгущение уровней получается при возмущении типа скошенной ступеньки, см. формулу (2.6), благодаря возникновению горизонтального участка разрешенной зоны в соответствии с рис.2.3

Рис.2.7. Дискретный осциллятор имеет верхнюю запрещенную зону (ее граница обозначена штриховой линией) внутри потенциальной ямы. В отличие от непрерывного осциллятора с эквидистантным спектром, здесь уровни с ростом энергии становятся почти дважды вырожденными (симметричные и антисимметричные комбинации состояний у разных краев ямы, разделенных внутренней запрещенной зоной). Расстояние между этими парами уровней увеличивается с ростом энергии, как в непрерывной бесконечной прямоугольной яме



длиннее горизонтальный участок разрешенной зоны, тем гуще спектр в этом месте.

После этого ясно, какова должна быть структура спектра при произвольной форме потенциальной кривой. Например, очевидно, что спектр дискретного осциллятора с потенциалом  $V(n) = n^2$  на полуоси  $n > 0$  разрежается с ростом энергии из-за увеличения крутизны  $V(n)$  при

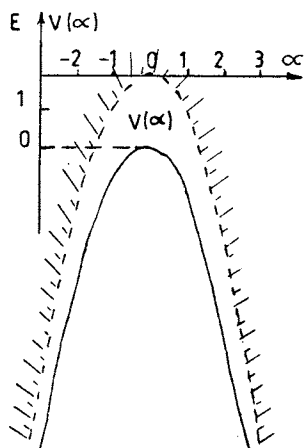


Рис.2.8. «Перевернутый дискретный осциллятор». Его запрещенная зона располагается вне потенциальной кривой, а спектр похож на зеркальное отражение спектра рис.2.7 (относительно  $E = 1$ )

больших  $n$ , в отличие от эквидистантного спектра в случае непрерывного осциллятора (см. аналитические решения в [77, 64]). Верхние уровни  $E_m$  растут пропорционально  $m^2 - 1$ . Это почти как у бесконечной прямоугольной ямы с непрерывной координатой.

Дискретный осциллятор на всей оси имеет дополнительные уровни энергии, отвечающие четным собственным функциям (симметричным по отношению к центру (рис.2.7)). Эти новые уровни с ростом  $m$  приближаются все больше к своим партнерам с нечетными функциями — новое своеобразие дискретной задачи (внутренняя верхняя запрещенная зона как бы разделяет осцилляторную яму на две). Отметим еще, что если центр ямы поместить между дискретными координатными точками, спектр немного изменится.

«Перевернутый» осцилляторный потенциал  $V(n) = -n^2$ , изображенный на рис.2.8, имеет спектр, симметрично отраженный вниз относительно значения  $E = 1$ . Невидимая (но изображенная нами, как и на предыдущих рисунках) запрещенная зона располагается теперь вне потенциальной кривой. Связанные состояния удерживаются, как «облачка на горе».

Другой пример такой спектральной симметрии показан на рис.2.9 с дискретными связанными состояниями (лесенка уровней слева) выше непрерывного спектра (волнистые линии со стрелками) (а). Яма и перевернутый потенциальный барьер со связанными состояниями под полосой непрерывного спектра (б). Соответствующие волновые функции показаны на рис.2.10

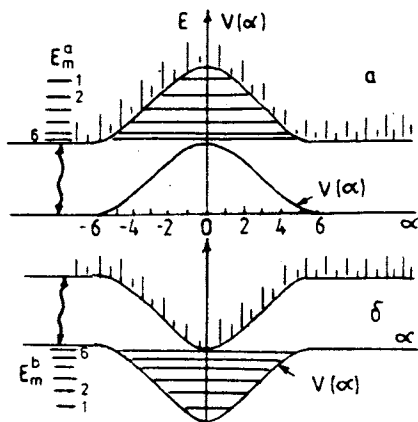


Рис.2.9. Потенциальный барьер и перевернутая потенциальная яма со связанными состояниями (лесенка уровней слева) выше непрерывного спектра (волнистые линии со стрелками) (а). Яма и перевернутый потенциальный барьер со связанными состояниями под полосой непрерывного спектра (б). Соответствующие волновые функции показаны на рис.2.10

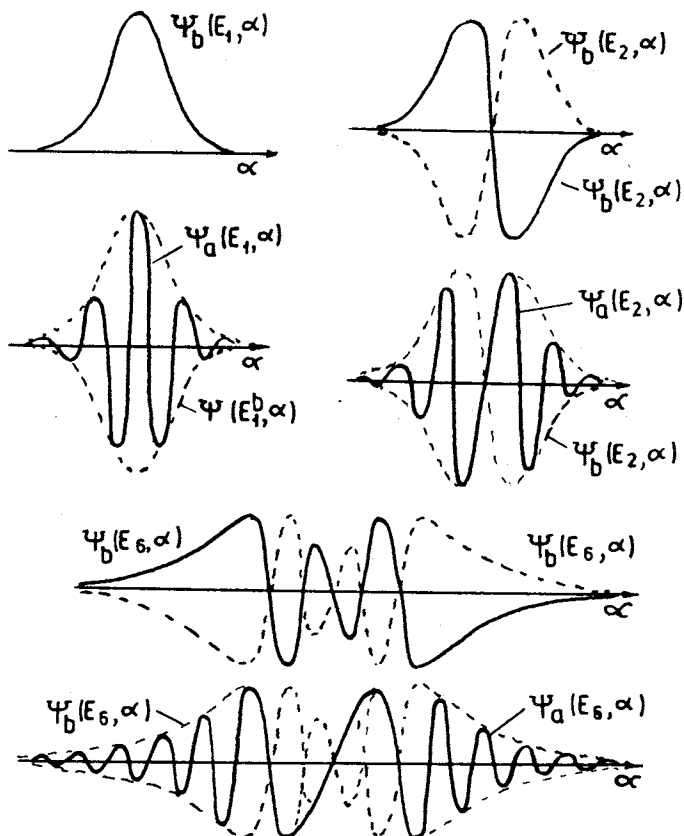


Рис. 2.10. Волновые функции некоторых связанных состояний выше и ниже полосы непрерывного спектра для потенциалов, показанных на рис. 2.9. Линии только соединяют дискретные точки значений волновых функций

Волновые функции, отвечающие некоторым связанным состояниям ниже и выше непрерывного спектра ( $E_1, E_2, E_3$  с нумерацией состояний, зеркально симметризованной для нижней и верхней перевернутой ям), для потенциалов с рис. 2.9, показаны на рис. 2.10.

Нетрудно обобщить приведенные выше рассуждения на случай переменной ширины разрешенной зоны за счет переменного шага  $\Delta$  или значений потенциала на диагоналях гамильтониана, соседних с главной диагональю («минимальная нелокальность», см. разд. 3). Этого мы кос-

немся в след. разделе при обсуждении правил управления спектрами в бесконечно глубоких ямах конечной ширины.

Рассмотренные выше функции Бесселя (по переменной  $\alpha$ ) имеют много общего с решениями дифференциального уравнения Шредингера с периодическим полем и с включенным однородным электрическим полем, где также наклоняются разрешенные и запрещенные зоны, а роль дискретной переменной играет номер периода. Последние решения рассматривались Кричевером [30].

Особенности движения волн по решеткам конфигураций с потенциальными склонами имеют место и для уравнений движения более высокого порядка (см. разд.4).

Двух (и более)-мерное пространство  $\alpha, \beta (\gamma, \dots)$ . Увеличение размерности пространства приводит к некоторым новым качественным моментам. Например, в двухмерном случае имеем два индекса:  $\alpha, \beta$ . Разрешенная полоса становится разрешенным *слоем*, в котором ограничено поперечное движение, но не вдоль слоя (лишняя степень свободы). Можно ожидать здесь нового понимания коллективной проницаемости потенциальных барьеров (обход барьеров как функций от расстояния между центрами масс ядер по путям («волноводам») в дискретных пространствах каналов).

В многоканальных задачах наличие верхней запрещенной зоны при движении по дискретной каналовой переменной накладывает ограничения на пути распространения волн в смешанных непрерывно-дискретных пространствах  $\{x, \alpha\}$ .

Когда мы рассматриваем рассеяние двух сложных систем (например, ядер) друг на друге, мы часто разлагаем волновую функцию  $\Psi(x, \xi)$  всей системы по состояниям  $(\Psi_\alpha(\xi))$  внутреннего возбуждения ( $x$  — расстояние между сталкивающимися объектами, а  $\xi$  — набор координат их внутреннего движения):

$$\Psi(x, \xi) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(x) \Phi_{\alpha}(\xi). \quad (2.7)$$

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

$$-\Psi_{\alpha}''(x) + \sum_{\alpha} V_{\alpha\beta}(x) \Psi_{\beta}(x) = (E - \epsilon_{\alpha}) \Psi_{\alpha}(x), \quad (2.8)$$

которую при фиксированном  $x$  можно рассматривать [91] как уравнение движения по дискретной переменной  $\alpha$  (будем для простоты полагать, что

единственной переменной  $\xi$  отвечает одна переменная  $\alpha$ ) и непрерывной переменной  $x$ . Матрицу взаимодействия  $V_{\alpha\beta}(x)$  можно рассматривать при фиксированном  $x$  в пространстве дискретной переменной  $\alpha$ , нумерующей каналы, как разностный оператор кинетической энергии движения по  $\alpha$  и потенциал (нелокальный по  $\alpha$ ) одновременно [91]. Член с  $\varepsilon_\alpha$  можно рассматривать как добавку к потенциальной энергии (монотонно возрастающих с  $\alpha$  энергий внутренних возбуждений). Эта добавка, как и в рассмотренной выше задаче для функций Бесселя с линейным потенциалом  $\alpha/z$ , наклоняет разрешенную зону в плоскости  $\{E, \alpha\}$ . Волны, бьющиеся между запрещенными зонами, двигаются как по волноводам, выбирая наиболее проницаемые траектории в пространстве  $\{x, \alpha\}$ .

По-видимому, точно решаемые многоканальные модели [20] могли бы послужить иллюстрацией того, как параметры модели влияют на заселенность пространства  $\{\alpha; x\}$ .

Интересно еще исследовать  $J_\alpha$ -модель с комплексным потенциалом.

### 3. ПЕРЕСТРОЙКА СПЕКТРОВ В ДИСКРЕТНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В ряде работ [18—20,84] было выяснено, какие возмущения потенциала селективно меняют спектральные параметры различных квантовых систем: двигают отдельные уровни энергии  $E_\nu$ , варьируют отдельные приведенные ширины  $\gamma_\nu$ .

*Однако оставалось неясным, как двигать отдельные уровни в бесконечной прямоугольной яме с дискретной координатой. Оказалось, что здесь требуется несколько модифицировать 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 [18—20].*

Для конечно-разностного уравнения Шредингера (с тридиагональным гамильтонианом: при каждом фиксированном  $n$  зацеплены значения функций в ближайших соседних точках  $n \pm 1$ ):

$$-\left[\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}\right]/\Delta^2 + v_n\Psi_n = E\Psi_n. \quad (3.1)$$

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 относительно середины спектра  $(E_1 + E_N)/2$ . Благодаря этому возмущение  $v_n$ , смещающее одно из состояний, необходимо сдвигает и симметричное ему. *Различить симметричные состояния позволяет введение дополнительного возмущения  $u_n$  в тридиагональном гамильтониане на линиях, соседних с главной диагональю:*

$$-[\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}]/\Delta^2 + u_n\Psi_n + u_n\Psi_{n+1} + v_{n-1}\Psi_{n-1} = E\Psi_n. \quad (3.2)$$

Это одновременно является и шагом к более глубокому пониманию нелокальных взаимодействий. Ведь тридиагональная матрица взаимодействия — простейший представитель нелокальных потенциалов (с минимальной нелокальностью: «степень нелокальности» потенциала нарастает с появлением все большего числа отличных от нуля элементов матрицы взаимодействия на все более дальних диагоналях).

Особенность дискретных задач проявляется и при изменении приведенных ширин  $\gamma_v$ . Как уже отмечалось ранее [20], нельзя изменить  $\gamma_v$  одного лишь состояния, чтобы не испортить «нормировочное» соотношение  $\sum_v \gamma_v^2 = 1$  (следующее из полноты собственных функций), нужно менять по крайней мере две из набора ширин  $\{\gamma_v\}$ . Кроме того, при изменении  $\gamma_v$  нарушается симметрия (по модулю) производных всех собственных функций на краях бесконечной ямы, что препятствует созданию аналога алгоритма расщепления непрерывного спектра в заранее заданных местах, как в случае непрерывной координаты [18—20].

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

Сдвиги уровней  $E_v$ . С одной стороны, как и ожидалось, для сдвига уровня в бесконечной прямоугольной яме возмущение потенциала  $v$  име-

ет качественно ту же форму, что и в случае непрерывной координаты\* (см. рис.3.1, соответствующие волновые функции показаны на рис.3.2). 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 (мы уже сталкивались с этим, обсуждая туннелирование).

Качественно ясно, что при сжатии зоны уровни, симметрично расположенные относительно середины спектра, подталкиваются навстречу друг другу, при расширении зоны — растаскиваются.

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

$$-[\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}](1-u)/\Delta^2 + (v_n + 2u/\Delta^2)\Psi_n = E\Psi_n \quad (3.3)$$

эквивалентно изменению шага конечно-разностного дифференцирования  $\Delta^2 \rightarrow \Delta^2/(1-u)$  и дополнительному сдвигу всей полосы на  $2u/\Delta^2$ , что соответствует сжатию (растягиванию) границ зоны

\*Поскольку книга [84] не издавалась у нас, выпишем здесь выражения для потенциалов, сдвигающих уровень  $E_v$  (бесконечной прямоугольной ямы с непрерывной координатой) на новое место  $E'_v$ :

$$V(x) = -2\frac{d^2}{dx^2} \{\omega_{vv'}\},$$

где  $\omega_{vv'}(x) = [W(x), \frac{1}{k_v} \sin(k_v x)] \equiv W(x) \cos(k_v x) - W'(x) \frac{1}{k_v} \sin(k_v x)$ , а  $W(x)$  — решение невозмущенного уравнения с симметричными краевыми условиями  $W(0) = W(a) = 1$ :

$$W = \cos(k'_v x) + \left[ \frac{k'_v}{\sin(k'_v a)} [\cos(k_v a) - \cos(k'_v a)] \right] \frac{\sin(k'_v x)}{k'_v};$$

возмущенные собственные функции, отвечающие несдвинутым уровням  $E_\mu \neq E_v$ :

$$\Psi(x, E_\mu) = \left[ \frac{E_v - E_\mu}{E_v - E_\mu} \right]^{1/2} \left[ \left( \frac{2}{a} \right)^{1/2} \sin(k_\mu x) + (E'_v - E_v) \frac{W(x)}{\omega_{vv'}(x)} \int_x^1 \left( \frac{2}{a} \right)^{1/2} \sin(k_\mu x') \sin(k'_v x') dx' \right]$$

и при энергии возмущенных уровней:

$$\Psi(x, E_v) = [(E_v - E'_v) k'_v d/dE] \left( \frac{1}{k} \sin k \right) \Big|_{k=k_v} / \sin(k'_v) \Big|^{1/2} \frac{\sin(k_\mu x)}{(a/2)\omega_{\mu v'}}.$$

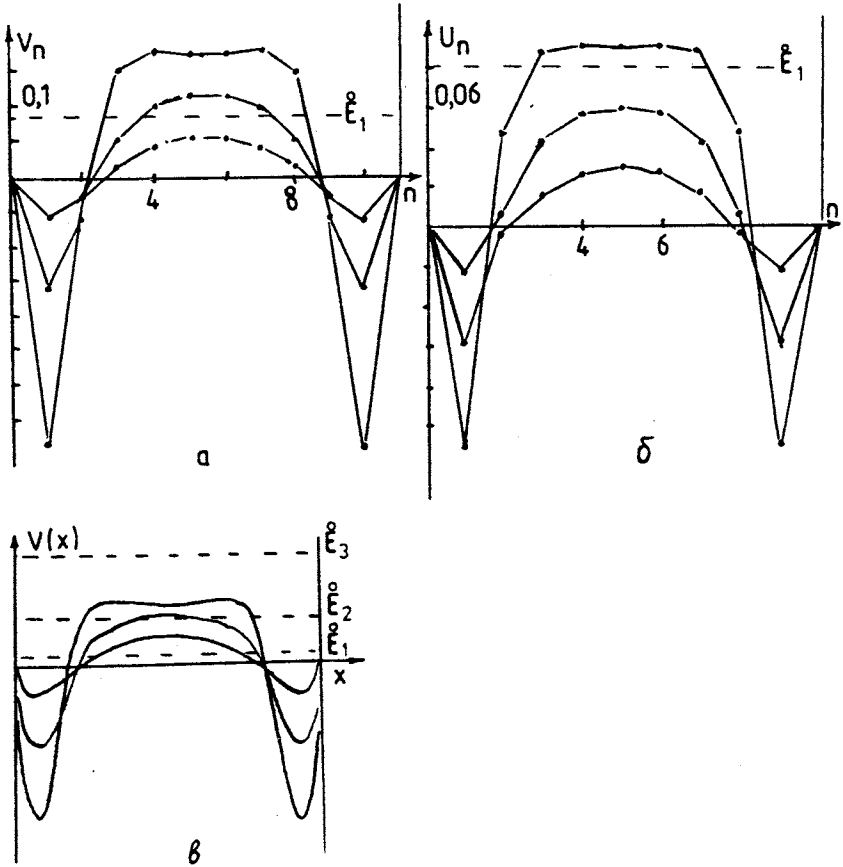


Рис.3.1. Потенциалы  $v_n$  (а) и  $u_n$  (б), сдвигающие первый уровень бесконечной прямоугольной ямы вверх и не меняющие положение остальных уровней. Различные кривые на одном графике отвечают разной высоте подъема основного уровня. По форме потенциалы на главной диагонали  $v_n$  и на соседних с ней диагоналях  $u_n$  близки и очень напоминают соответствующее возмущение  $v(x)$  в непрерывном случае (в), 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). Штриховой линией помечены уровни невозмущенной ямы. Серии кривых (а,б) отвечают сдвигам  $(E_2 - E_1)d$ , где  $d = 0; 0,25; 0,5; 0,75$

относительно ее середины. То есть, изменение вместе с «и» ширины разрешенной зоны двигает уровни, лежащие по разные стороны середины спектра, в противоположных направлениях. Аналогично в общем слу-



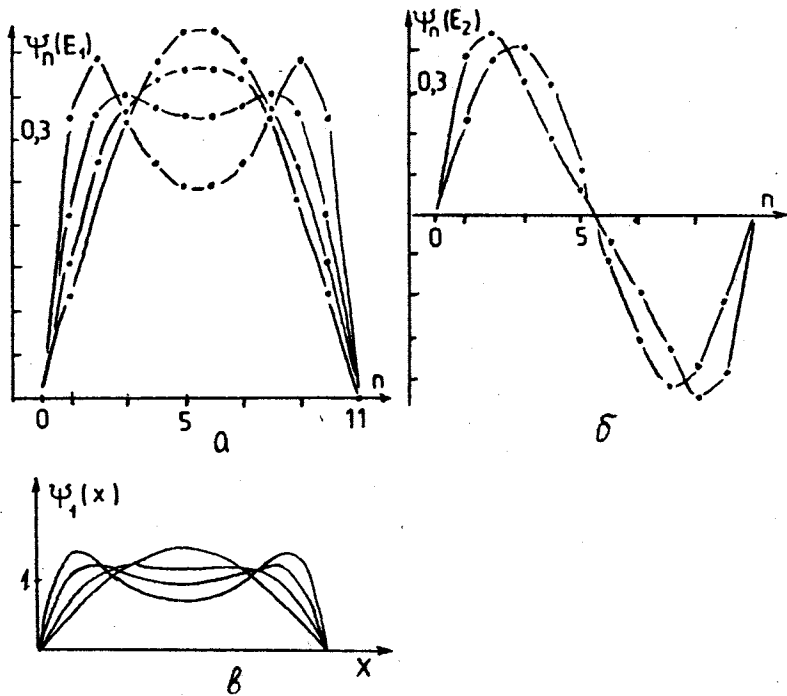


Рис.3.2. Изменение волновых функций первых двух уровней (а,б) при различных сдвигах основного уровня вверх по направлению к первому возбужденному:  $E_1 \rightarrow E_2$ . Для сравнения приведены соответствующие функции в случае непрерывной координаты (в)

чае  $u_n$  действует отчасти подобно переменному шагу  $\Delta_n$  и создает зону проводимости с переменной шириной. Сложение или взаимное подавление влияния на уровни  $E_n$  изменения  $v_n$  и  $u_n$  позволяет производить их смещение по произвольному выбору (в частности, инверсию спектра, при которой число «узлов» собственных функций убывает с ростом энергии возбуждения уровня).

Элементы матрицы взаимодействия, смещающие вверх второй (то есть первый возбужденный) уровень бесконечной прямоугольной ямы с 10 дискретными значениями координаты внутри ямы, показаны на рис.3.3. Здесь, правда, подобие форм  $v$  и  $u$  выдержано в меньшей степени, чем на рис.3.1. 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 перво-

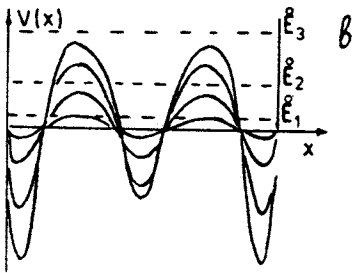
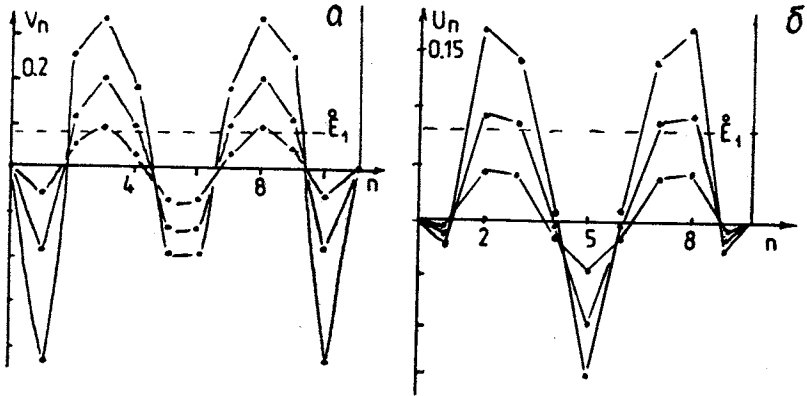


Рис.3.3. Потенциальные возмущения (а,б)  $v$  и  $u$ , необходимые для сдвига  $E_2 \rightarrow E_3$ . Для сравнения показаны соответствующие локальные потенциалы в случае непрерывной координаты (в). Штриховой линией помечены уровни невозмущенной ямы

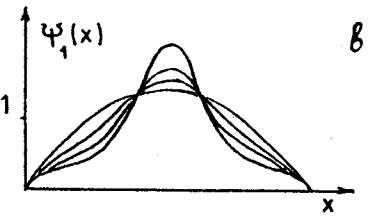
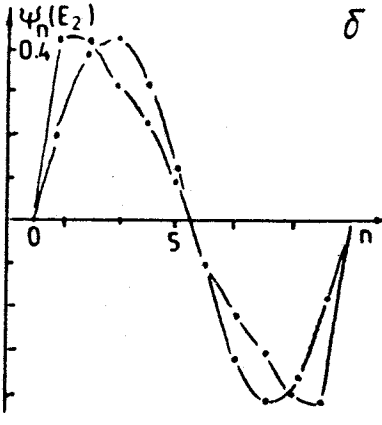
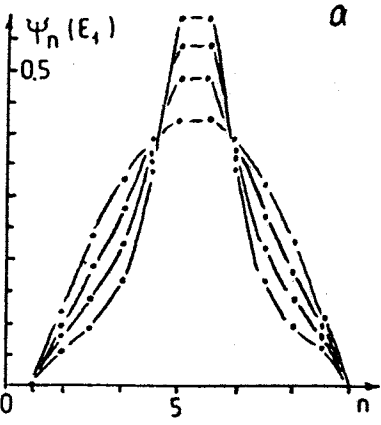


Рис.3.4. Волновые функции первых двух состояний (а,б) при сдвигах  $E_2 \rightarrow E_3$ . Для сравнения приведены функции основного состояния для случая непрерывной координаты

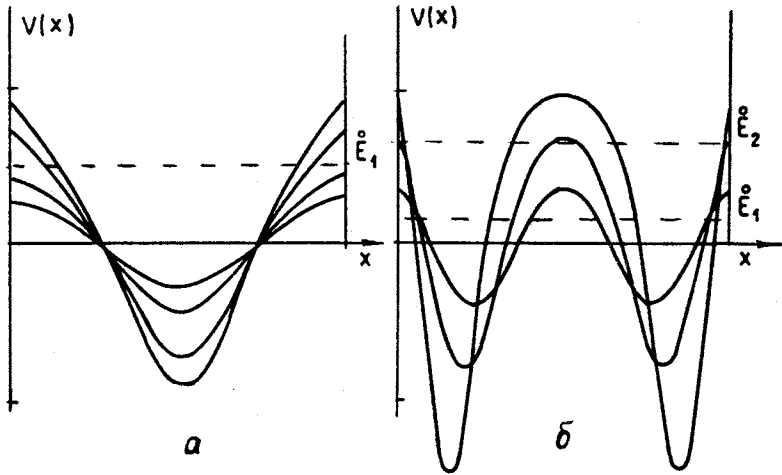


Рис.3.5. Потенциалы  $V(x)$ , сдвигающие вниз основной (а)  $E_1 = 0,9; 0,75; 0,5; 0,25$  и первый возбужденный (б)  $E_2 = 1,75; 1,5; 1,25$  уровень. Штриховой линией помечены уровни энергии исходных связанных состояний. Сравните форму этих потенциалов с потенциалами (рис.3.1,а,в и 3.3,а,в), поднимающими первый и второй уровни

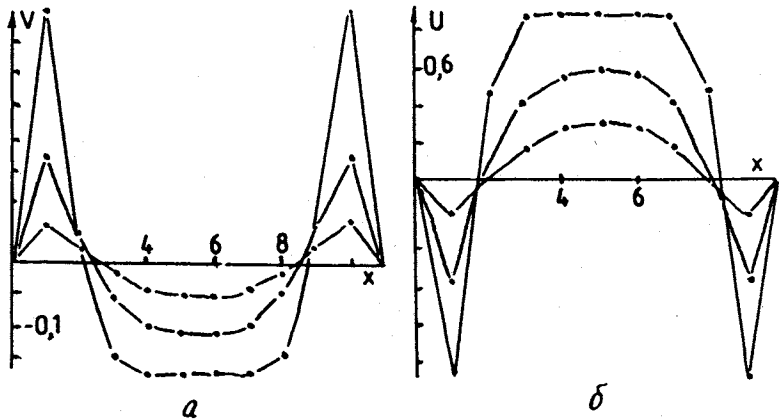


Рис.3.6. Потенциалы (а)  $v$  и (б)  $u$ , сдвигающие верхний (10-й) уровень бесконечной прямоугольной ямы вниз к ближайшему соседу ( $E_{10} \rightarrow E_9$ ) и не меняющие положение остальных уровней. По форме, но с точностью до знака, потенциалы на главной диагонали  $v$  и на соседних с ней диагоналях  $u$  совпадают с показанными на рис.1.1, но теперь  $u$  и  $v$  разных знаков

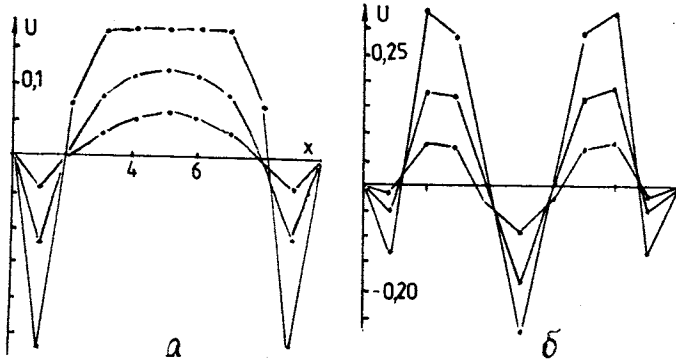


Рис.3.7. Потенциалы  $u$ , симметрично сдвигающие навстречу друг другу а) 1-й и последний 10-й; б) 2-й и 9-й уровни. Ср. с потенциалами  $u$  на рис.3.1,б и 3.3,б

го возбужденного состояний при поэтапном подъеме  $E_2$  к  $E_3$  представлена на рис.3.4.

Ясно, что при сдвиге основного или первого возбужденного состояния вниз возмущающие потенциалы должны быть похожи на потенциалы на рис.3.1 и 3.3, сдвигающие соответствующие уровни вверх, но только иметь другой знак. Поскольку в работах [84, 18—20] картинки этих потенциалов не приведены, мы покажем их здесь (см. рис.3.5). Читателю предлагается самому объяснить разницу модулей потенциалов на рис.3.1,в; 3.3,в и 3.5,а; 3.5,б, а также предсказать форму их дискретных аналогов.

Потенциалы  $v$  и  $u$ , сдвигающие вниз самый верхний (10-й) уровень, представлены на рис.3.6. У них качественно много общего с потенциалами на рис.3.1,а,б, поднимающими (симметричный ему) первый уровень. Только знаки потенциалов  $u$  в этих случаях противоположные.

Симметричная относительно центра спектра передвижка уровней производится с помощью одного лишь потенциала  $u$ . Так, при сдвиге пары уровней (например, 1-го и 10-го или 2-го и 9-го (рис.3.7))  $v$  оказываются нулевыми. Интересно, что форма потенциалов  $u$  на рис.3.7 похожа по модулю на потенциалы  $v$  и  $u$ , сдвигающие только один уровень (см. рис.3.1,б; 3.3,б).

**Перестройка спектра (в эквидистантный и со щелью).** Рассмотрим примеры более сложной перестройки, со сдвигами большого числа уровней бесконечной прямоугольной ямы. На рис.3.8 представлена форма возмущения  $u$ , оставляющая крайние уровни спектра (1-й и 10-й) на

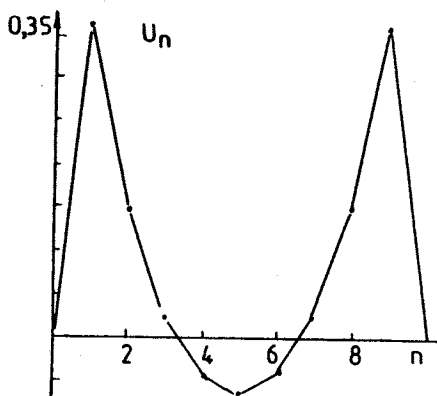


Рис.3.8. Потенциал  $u$ , перестраивающий спектр бесконечной дискретной прямоугольной ямы в эквидистантный (внутри ямы располагается 10 координатных точек и 10 уровней в яме). Точки значений потенциалов соединены для наглядности линиями

своих прежних местах и располагающая все уровни на равных расстояниях  $\Delta E = (E_1 - E_{10}) / (N - 1)$  друг от друга.

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.3.9).

Потенциал  $u$ , раздвигающий уровни спектра к его краям и создающий широкую щель в центре спектра, показан на рис.3.10. То, что самые большие сдвиги претерпевают при этом средние уровни, модули волновых функций которых имеют наибольшее число максимумов, приводит к пилообразной форме возмущающих потенциалов.

Изменение нормировочных множителей  $\gamma_\nu$ . Помимо энергетических уровней, фундаментальными спектральными параметрами являются  $\gamma_\nu$ ,

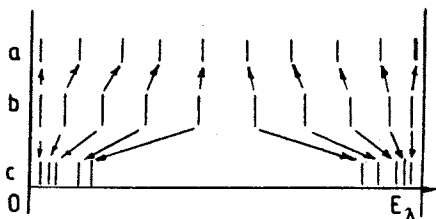


Рис.3.9. Схемы 10 уровней в бесконечных ямах с 10 координатными точками между потенциальными стенками. Посередине показаны уровни невозмущенной прямоугольной ямы, сверху — эквидистантно перестроенный спектр, снизу — спектр с большой щелью

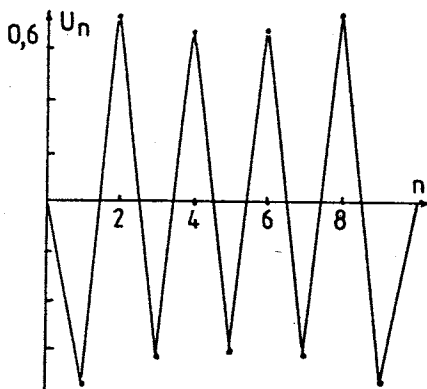


Рис.3.10. Потенциал  $u$ , создающий щель в середине спектра, как показано на нижней схеме уровней на рис.3.8

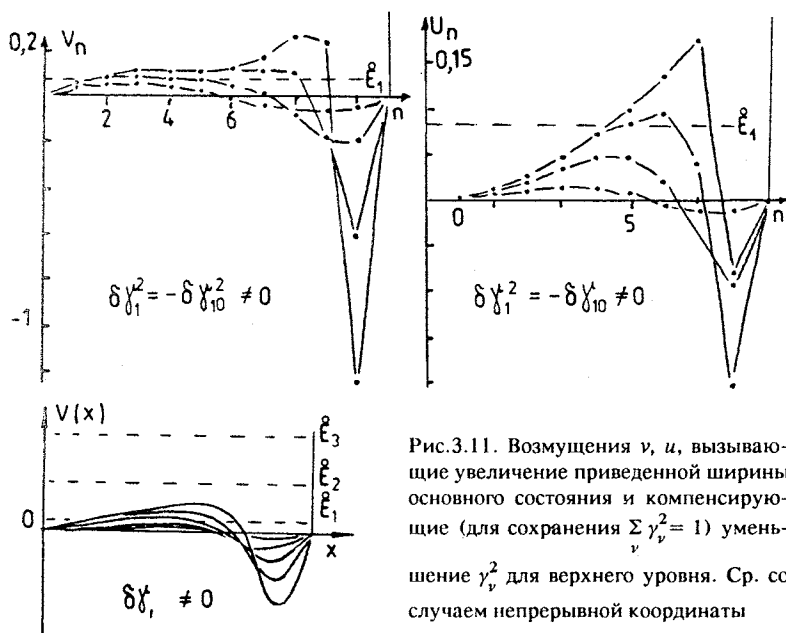


Рис.3.11. Возмущения  $v$ ,  $u$ , вызывающие увеличение приведенной ширины основного состояния и компенсирующие (для сохранения  $\sum_v \gamma_v^2 = 1$ ) уменьшение  $\gamma_v^2$  для верхнего уровня. Ср. со случаем непрерывной координаты

в качестве которых, например, в  $R$ -матричной теории, служат приведенные ширины. В [18—20] подробно обсуждалась форма возмущения, вызывающая нужное изменение  $\gamma_v$  в случае непрерывной координаты. Здесь мы рассмотрим то же для дискретного случая. На рис.3.11 и 3.12 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. Однако имеется и существенное различие. При дискретной координате имеется связь приведенных ширин  $\sum_v \gamma_v^2 = 1$ , следующая из соотношения полноты собственных функций, и нельзя изменить только одну ширину. В нашем случае (рис.3.11 и 3.12) для компенсации увеличения  $\delta \gamma_1^2$  уменьшалась еще  $\delta \gamma_{10}^2 (= -\delta \gamma_1^2)$  — приведенная ширина последнего уровня. Интересно, что узкая ямка притяжения в правой части  $v$  не только формирует нужным образом собственную функцию первого состояния, как в непрерывном случае, но и вызывает такой же прогиб вниз верхней запрещенной зоны, создавая эффективный потенциальный барьер (перевернутый). «Экспоненциальное» спадание при туннелировании в нем вправо  $\Psi_n(E_{10})$  обеспечивает уменьшение

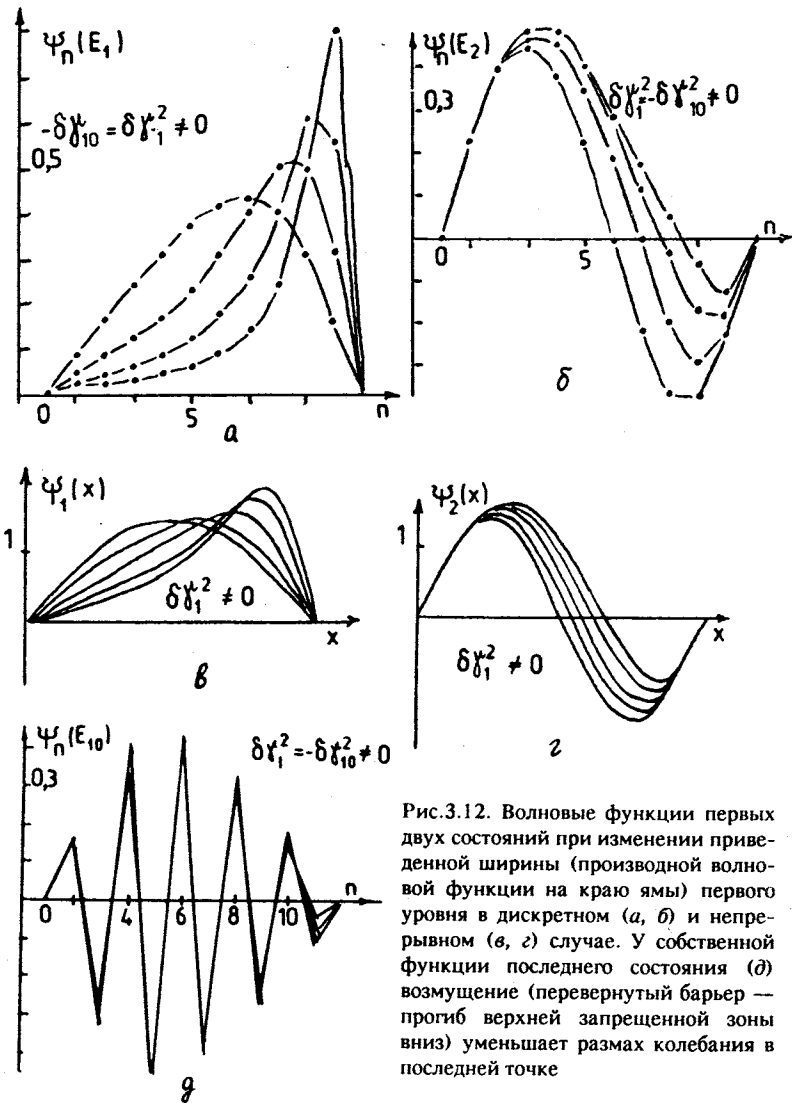


Рис.3.12. Волновые функции первых двух состояний при изменении приведенной ширины (производной волновой функции на краю ямы) первого уровня в дискретном (а, б) и непрерывном (в, г) случае. У собственной функции последнего состояния (д) возмущение (перевернутый барьер — прогиб верхней запрещенной зоны вниз) уменьшает размах колебания в последней точке

$\delta\gamma_{10}^2$ . Относительно небольшой потенциал  $u_n$  не оказывает сильного влияния.

Простейшие примеры разрыва разрешенной зоны. В случае постоянного потенциала  $v = \text{const}$  в спектре, отвечающем уравнению (3.1), имеется лишь одна разрешенная зона: полоса непрерывного спектра

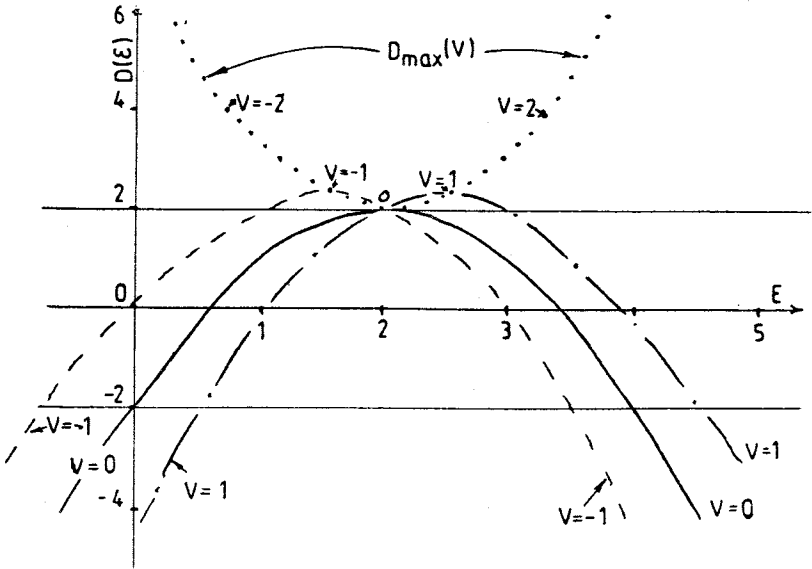


Рис.3.13. Зависимость  $D(E)$  (равной половине функции Ляпунова или дискриминанта Хилла  $2D$ ) от энергии при  $\nu = 0; \pm 1$ . Разрешенным зонам отвечают значения  $E$ , для которых выполняется условие (3.5):  $D$  лежит между  $\pm 2$ . Чем больше  $|\nu|$ , тем шире разрыв (лакуна) между сужающимися участками непрерывного спектра. Штриховой линией обозначены положения максимумов парабол  $D(E)$  при разных  $\nu$

шириной  $4/\Delta^2$ . В простейшем случае периодического дискретного потенциала, когда  $\nu_n$  попеременно принимает два различных значения (период  $N = 2$ ), эта зона разрывается на две спектральной щелью-лакуной.

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

$$\Psi_1 = \exp(i\delta) \Psi_3; \quad \Psi_0 = \exp(i\delta) \Psi_2. \tag{3.4}$$

Тогда для  $\delta$  получаем из (3.1) при  $n = 1$  и  $2$  выражение

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

Отсюда следует условие реальности  $\delta$ :

$$|D(E)| \equiv |2-(2-E)(2-E+\nu)| < 2, \tag{3.5}$$



которое одновременно служит критерием принадлежности значений  $E$  разрешенной зоне. На рис.3.13 представлена зависимость  $D(E)$  при различных значениях  $\nu$ , откуда видно, что при  $\nu = 0$  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).

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

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

В данном разделе мы обсуждали 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 понять роль и других диагоналей гамильтониана, отвечающих разностным производным высших порядков (см. след. раздел) или механизмы действия нелокальных сил.

**Многоканальные задачи.** Когда данный обзор уже находился в издательстве, удалось понять [26], какой вид должна иметь матрица взаимодействия для того, чтобы менять отдельные спектральные параметры многоканальной системы с непрерывной координатой  $x$ .

Соответствующие формулы, являющиеся матричным обобщением точно решаемых моделей баргмановского типа, были получены раньше [19]. Теперь задача стала ясней на интуитивном уровне.

Систему связанных одномерных уравнений можно рассматривать как одно двумерное уравнение: по непрерывной переменной  $x$  и дискретной  $\alpha$ . В частном случае постоянной матрицы взаимодействия переменные  $x$  и  $\alpha$  разделяются. Уровни энергии представляются при этом в виде суммы энергий движения по  $x$  и по  $\alpha$ :  $E = E_n^x + E_m^\alpha$ . Их можно рассматривать как уровни  $x$ -задачи, расщепленные в мультиплеты по  $\alpha$ -движению. Идея управления таким спектром состоит в сочетании соответствующих алгоритмов для одноканальных задач. Возмущение диагональных элементов матрицы взаимодействия в основном влияет на характеристики целых мультиплетов, а недиагональные  $V_{\alpha\alpha'}$ , нелокальные по  $\alpha$ , позволяют выделить отдельные состояния в мультиплетах.

#### 4. «УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА» ВЫСШЕГО ( $\geq 4$ ) ПОРЯДКА

*Я еще не вполне понимал, что такое дифференциальные уравнения, но что-то уже угадывал и испытывал восторг перед их всесилием.*

А.Д.Сахаров. Воспоминания

В этом разделе мы рассмотрим уравнения высших порядков, которые нужны нам для описания распространения волн в дискретных пространствах квантовых чисел  $\alpha \dots$ , нумерующих базисные конфигурации  $\Phi_\alpha$ , в разложениях типа ( $F_\alpha$  — другое представление  $\Psi$ ):

$$\Psi(x, \xi) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(x) \Phi_{\alpha}(\xi). \quad (4.1)$$

Это позволяет взглянуть как бы со стороны уравнений высших порядков на обычное уравнение Шредингера второго порядка и тем самым лучше понять его.

Подобно тому, как решения для прямоугольной потенциальной ямы и прямоугольного барьера при первом знакомстве с квантовой механикой вооружают нас на всю дальнейшую жизнь качественным пониманием общих закономерностей связанных состояний и рассеяния, так физическое исследование уравнений высших порядков естественно начинать с моделей, в которых в коэффициенты при производных разных порядков (а не только в потенциальный член, как в обычном уравнении Шредингера) вводятся возмущения простейшей формы.

Сначала несколько слов о том, где в волновой физике возникают уравнения высших порядков (дифференциальные и разностные). Напомним, что колебания тонкой упругой струны описываются обыкновенным уравнением Шредингера *второго* порядка. Уравнение колебания стержня — уже *четвертого* порядка, и возможно сочетание волн с разными волновыми числами, например,  $\exp(\pm ik_1 x)$ ,  $\exp(\pm ik_2 x)$ . Колебания полого цилиндра допускают уже четыре типа волн с  $\pm k_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ), чему соответствует уравнение 8-го порядка.

Другая возможность получения уравнений высших порядков возникает при разложении оператора, соответствующего энергии в релятивистском случае (релятивистского гамильтониана) в ряд по  $\hat{p}^2$  для учета релятивистских поправок:

$$\sqrt{\hat{p}^2 + m^2 c^4} = \hat{p}^2 + m^2 c^4 + \hat{p}^4 + \dots \quad (4.2)$$

«Уравнения Шредингера» высших порядков возникают при описании колебаний плазмы. В физике конденсированных сред используются разностные уравнения высших порядков (колебания кристаллов, спиновые решетки). Выпишем для примера разностное уравнение четвертого порядка (коэффициенты могут зависеть от  $n$ ):

$$c\Psi_{n+2} + d\Psi_{n+1} + e\Psi_n + d\Psi_{n-1} + c\Psi_{n-2} = E\Psi_n. \quad (4.3)$$

Этим рекуррентным соотношениям отвечает пятидиагональная симметричная матрица. Сравним с разностным уравнением Шредингера второго порядка (с тридиагональным гамильтонианом,  $T$  - оператор кинетической энергии,  $m = 1$ ):

$$(T + v_n) \Psi_n \equiv -\frac{\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}}{2\Delta^2} + v_n \Psi_n = E\Psi_n, \quad (4.4)$$

где  $\Delta$  — шаг разностного дифференцирования. Разностному уравнению 6-го порядка отвечает матрица с семью диагоналями и т.д.

Одномерное «уравнение Шредингера» высшего порядка имеет не одну волну, бегущую в одном направлении (и одну в обратном:  $\exp(\pm ikx)$  в случае свободного движения или  $\exp(\pm ikl\Delta)$  для дискретной переменной  $x_n = n\Delta$ ), как обычное уравнение Шредингера второго порядка, а несколько волн.

Например, подставляя в простейшее уравнение четвертого порядка с постоянными  $c, d, e$ :

$$-c\Psi^4(x) - d\Psi^{(2)}(x) = (E - e) \Psi(x) \quad (4.5)$$

решение в виде  $\Psi = \exp(\pm ikx)$ , находим четыре значения для волновых чисел:

$$k_{1-4} = \sqrt{y_{\pm}}, \text{ где } y_{\pm} = \frac{-c \pm \sqrt{c^2 - 4a(E - e)}}{2a}. \quad (4.6)$$

Или, подставляя в уравнение (4.3)  $\Psi_n = \exp(\pm ikn\Delta)$ , получаем характеристическое уравнение для  $k$ , в предположении постоянства коэффициентов  $c, d, e$ :

$$4c \cos^2(\Delta k) + 2d \cos(\Delta k) - 2c + e = E, \quad (4.7)$$

$$\cos(\Delta k) = \frac{-2d \pm \sqrt{4d^2 - 16c(e - 2c - E)}}{8c} \equiv Y_{\pm}, \quad (4.8)$$

откуда находим четыре значения квазиимпульса  $\pm k_1, \pm k_2$ :

$$k_{1-4} = \pm \arccos [Y_{\pm}] / \Delta. \quad (4.9)$$

Знаки  $\pm$  в выражениях для  $u$ ,  $Y$  в (4.6; 4.8) вносят различие по модулю значений  $k_1$  и  $k_2$ , а знаки самих  $k_1, k_2$  определяют направление распространения волны (вправо или влево, если построить из этих волн пакеты с учетом временных факторов  $\exp(-iEt)$ ). Отметим еще, что при росте  $E$  модуль одного из волновых чисел растет, а другого — убывает. Соответственно у волновых пакетов, построенных из разных ветвей спектра, будут разные скорости даже при совпадающих средних энергиях.

В характеристическое уравнение в общем случае (порядка  $2p$ ) входит полином степени  $p$  относительно  $\cos(\Delta k)$ , что может дать  $p$  ветвей спектра.

Между волнами с разными  $k$  происходят переходы, если коэффициенты уравнения не постоянны. Например, пусть какой-то из коэффициентов имеет форму прямоугольного барьера, а остальные постоянные. Пошлем на барьер одну волну  $\exp(ik_1x)$ . Этого можно добиться специальным выбором граничных условий, полагая равными нулю амплитуды других волн с одной стороны барьера. В результате рассеяния на барьере мы получим несколько волн отраженных и несколько прошедших [65]. Исследуя рассеивающие свойства простейших барьеров в различных коэффициентах уравнения, можно приобрести интуицию, которая позволит понимать и общий случай переменных коэффициентов. Полезно провести параллели с многоканальной задачей, где также в области постоянной матрицы зацепления каналов имеются несколько независимых волн. Здесь, как и там, естественно ожидать эффектов типа усиления проницаемости [20] и нарушения симметрии прохождения волн через барьеры в противоположных направлениях.

В квантовой физике при решении многомерных и многочастичных задач [12, 20] все чаще используются эффективные нелокальные силы. Решаемые задачи все более усложняются. Приходится передавать их решение вычислительным машинам, как в черный ящик, откуда извлекаются ответы без ясного представления о происходящем в квантовых системах. Необходим процесс накопления квантовой интуиции, касающейся, в частности, движений волн, определяемых дифференциальными и разностными операторами высших порядков (нужно выявлять здесь поучительные параллели). Возможно, на этом пути удастся лучше понять свойства нелокальных потенциалов (пока достаточно хорошо изучены лишь простейшие из них — сепарабельные [27]). Ведь в разностном приближении нелокальному потенциалу соответствует матрица взаимодействия, что, в свою очередь, отвечает конечно-разностному уравнению высшего порядка. В разностном приближении интегральный член с взаимодействием  $\int V(x, x') \Psi(x') dx'$  заменяется на сумму

$\sum_{n'} V_{nn'} \Psi_{n'}$ , которую можно рассматривать как разностный оператор (порядка  $2p$ , если в матрице  $V_{nn'}$  оставить лишь полосу из  $2p + 1$  диагоналей). Так что понимание особенностей решений разностных уравнений высших порядков может служить мостиком к пониманию и свойств нелокального взаимодействия.

Как уже отмечалось, при разложениях типа (4.1) получаем систему связанных уравнений для канальных функций  $F_\alpha(x)$ , где  $\alpha$  можно рассматривать, как дискретную переменную, движение по которой определяется разностным оператором с коэффициентами  $V_{\alpha\alpha'}(x)$  — матрицей взаимодействия, нелокальной по  $\alpha$  (распространение волн по решетке каналов). В методе смешивания конфигураций коэффициенты  $F_\alpha$  не зависят от  $x$ , и  $\alpha$  нумерует точки решетки базисных состояний.

Для выполнения законов сохранения нужны самосопряженные операторы. Это ограничивает нас дифференциальными операторами, общий вид которых представляет собой сумму членов вида

$$L_{2n} \Psi(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} \left( p(x) \frac{d^n}{dx^n} \Psi(x) \right),$$

$$L_{2n-1} \Psi(x) \equiv \frac{1}{2} \frac{d^n}{dx^n} \left( ip(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} \Psi(x) \right) + \frac{1}{2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} \left( ip(x) \frac{d^n}{dx^n} \Psi(x) \right). \quad (4.10)$$

Действительно, интегрируя по частям, убеждаемся, что

$$(\Phi, L_{2n} \Psi) = (\Psi, L_{2n} \Phi), \quad (\Phi, L_{2n-1} \Psi) = (\Psi, L_{2n-1} \Phi).$$

Интересные результаты из работ по уравнениям высшего порядка. Поскольку прямые и особенно обратные задачи для дифференциальных уравнений высших порядков недостаточно известны среди физиков, мы обратим внимание на некоторые важные моменты.

Для дифференциальных выражений  $2p$ -го ( $p \geq 2$ ) порядка существует [41] бесконечно много попарно неэквивалентных задач (собственные функции эквивалентных задач переводятся друг в друга оператором обобщенного сдвига  $f(x) = f_0(x) + \int_0^x K(x, t) f_0(t) dt$ ). Поэтому нужно специально находить подходящую исходную задачу (в случае  $p = 2$  имеется всего две попарно неэквивалентные задачи, например, с решениями  $\sin$  и  $\cos$ ).

Подробно обратную задачу для уравнений  $n$ -го порядка рассмотрел З.Л.Лейбензон [33]. Он вводил  $n - 1$  однородных краевых условий ( $k - 1$  на одном конце интервала интегрирования и  $n - k$  — на другом;  $k = 1, 2, \dots, n - 1$ ) и соответствующие сопряженные задачи на собственные значения. В отличие от уравнений второго порядка, где искомым потенциал  $V$  получался из произвольного известного  $V_0$ , здесь приходится специально позаботиться о выборе известной опорной системы. Дается нетривиальное обобщение понятия спектральной меры (исходные для обратной задачи «данные рассеяния» и спектральные данные). В общем случае  $n > 2$  не существует вольтерровских преобразований (треугольных операторов обобщенного сдвига  $V_0 \rightarrow V$ ) для любых  $V$  и  $V_0$ , и Лейбензон предлагает новую процедуру восстановления искомого оператора по спектральным данным.

В работе [78] сформулирована обратная задача для уравнения

$$\Psi^{(4)} + (A \Psi^{(1)})^{(1)} + B\Psi = \lambda\Psi \quad (4.11)$$

с однородными краевыми условиями на концах интервала  $[0, 1]$ :

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(1) &= \Psi(1) = 0, \\ \Psi^{(2)}(0) + a\Psi(1)(0) - b\Psi(0) &= 0, \\ \Psi^{(3)}(0) + [b + A(0)]\Psi^{(1)}(0) + c\Psi(0) &= 0. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Вводятся две нормировочные константы для нормированных на единицу собственных функций  $\Psi$ , отвечающих собственным значениям  $\lambda_n$ :

$$\gamma_n = \Psi(0, \lambda_n) \text{ и } \xi_n = \Psi^{(1)}(0, \lambda_n), \quad (4.13)$$

вместо одной приведенной ширины для уравнения Шредингера второго порядка. Решение обратной задачи состоит в том, что по набору  $\{\lambda_n, \gamma_n, \xi_n\}$  нужно восстановить функции  $A$  и  $B$  и постоянные  $a, b, c$ .

Оказывается, можно записать уравнение обратной задачи в точности такое, как обычное уравнение Гельфанда — Левитана, связывающее коэффициенты из (4.11), (4.12) со спектральными параметрами:

$$K(x, y) + Q(x, y) + \int_0^x K(x, z)Q(z, y)dz = 0, \quad (4.14)$$

где ядро  $Q$  определяется через «свободные» (исходные) решения  $\Psi_0$ , отвечающие нулевым значениям коэффициентов  $A, B, a, b, c$  и соответствующим собственным числам  $\lambda_n^*$ :

$$Q(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \{ \Psi_0(x, \lambda_n^*) \Psi_0(y, \lambda_n^*) - \Psi_0(x, \lambda_n) \Psi_0(x, \lambda_n) \}. \quad (4.15)$$

Однако в  $Q$  явно не входят нормировочные константы  $\gamma_n, \xi_n$ , как это имеет место в обычном формализме Гельфанда — Левитана — по-видимому, из-за разницы в выборе граничных условий «свободной» и возмущенной задач, а коэффициент при *второй* производной выражается как потенциал обычного уравнения Шредингера:

$$A(x) = -4 \frac{d}{dx} K(x, x). \quad (4.16)$$

Для  $B$  получается более сложная связь с  $K$ , и только для определения констант  $b, c$  требуются  $\gamma_n$  и  $\xi_n$ .

Очевидно, что в случае совпадения спектральных данных возмущенной и «свободной» задач для уровней выше некоторого конечного  $n = N$  в выражении для  $Q$  остается конечное число  $2N$  членов, и с таким вырожденным ядром интегральное уравнение сводится к точно решаемой системе алгебраических уравнений — как для потенциалов баргмановского типа [20].

В работе [57] рассматривается обратная задача для симметричной  $(2p + 1)$ -диагональной матрицы, отвечающей разностному «уравнению Шредингера»  $2p$ -го порядка. Для восстановления матрицы требуется  $p + 1$  спектров, отвечающих разным однородным краевым условиям, либо один спектр и  $p$  последних (или первых) компонент собственных векторов (играющих роль нормировочных констант), что напоминает многоканальное обобщение теоремы «о двух спектрах» [17]. Условия полноты собственных векторов накладывают теперь больше условий на эти нормировочные константы, вместо одного  $\sum_v \gamma_v^2 = 1$  в случае трехдиагонального гамильтониана (2-го порядка).

Имеется, правда, определенный произвол в интерпретации гамильтониана в матричной форме. Его можно рассматривать и как разностный аналог оператора Шредингера порядка  $2p$ , где  $p$  — число отличных от нуля пар побочных диагоналей с  $2p$  нулевыми «граничными» условиями в  $p$  точках с обеих сторон интервала «интегрирования». А можно считать оператором 2-го порядка, но с нелокальным потенциалом, обращаемым в нуль вне этого интервала. И нулевые граничные условия в первом случае, и ограничение «радиуса» действия нелокального потенциала служат обрыву системы уравнений (ограничению матрицы конечными размерами  $N \times N$ ).

Об условиях существования операторов преобразования треугольного вида (операторов обобщенного сдвига:  $\frac{d^2}{dx^2} + \lambda \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} - q(x) - \lambda$ ) см. [34,41].

Замечание о возможности проникновения в классически запрещенные области частиц, подчиняющихся уравнениям движения высшего порядка, имеется в работе Борнеаса (1963) [59]. Он еще рассматривал обобщенные квантовые уравнения (1972, 1988) [59]; см. также работы Бордлея [58] и Флойда [66].

В работе В.А.Юрко [51] строится общая теория обратной задачи для дифференциальных уравнений высшего ( $\geq 2$ ) порядка. В ней отмечается, что для операторов высшего порядка с неаналитическими коэффициентами операторы обобщенного сдвига от функций  $\Psi_0$  исходной задачи к возмущенным  $\Psi$  имеют более сложную («не треугольную») структуру, что затрудняет их применение при решении обратной задачи. Используемая в [51] матрица Вейля наиболее полно выражает спектральные свойства операторов, другие методы обратной задачи представляют частные случаи предложенного формализма [43].

Модели. Элементарные представления для обычного одномерного уравнения Шредингера о прохождении волн через прямоугольные потенциальные барьеры и ямы, а также о связанных состояниях в последних присутствуют при решении практически всех квантовых задач (любой потенциал можно приблизить кусочно-постоянной функцией). Так, исследование особенностей движения, управляемого операторами более высоких порядков, естественно начинать с подобных моделей с простейшими формами зависимости коэффициентов при производных разного порядка, а не только потенциалов — коэффициентов при волновой функции, как в обычном уравнении Шредингера.

Когда написаны дифференциальные или разностные уравнения и заданы соответствующие граничные условия, можно составить программу для ЭВМ и переложить на нее заботы о численных результатах. Но желательно иметь качественную картину ожидаемых результатов. Поэтому лучше дополнить наши представления наглядными моделями.

Выше мы рассматривали модель «сवेशивающегося сверху» (из верхней запретной зоны) барьера для разностного уравнения Шредингера второго порядка, здесь мы обсудим специфику подобного явления для уравнения 4-го порядка.

Рассмотрим сначала структуру зон в случае постоянных коэффициентов в уравнениях. Разрешенным зонам отвечают действительные волновые числа  $k$ . Для дифференциального уравнения (4.5) одна из границ (общая для двух  $k!$  - получается «складка»: как бы одну исходную



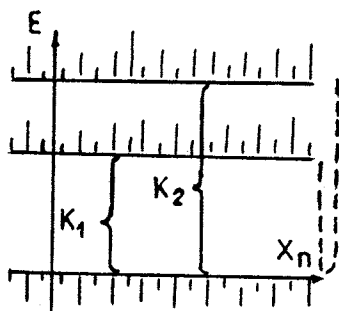


Рис.4.1. Разрешенные зоны для уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами и двух волновых чисел  $k_1$  и  $k_2$ . Обе зоны можно представить себе как «складку» единой зоны, условно изображенной штриховой линией справа

зону перегнули и получили две) разрешенной зоны задается нулем (точкой изменения знака) подкоренного выражения в  $u$ , в формуле (4.6):

$$d^2/4c \geq (E - e). \tag{4.17}$$

Другая граница для  $k_1$  при знаке «минус» в числителе  $u$  в (4.6) определяется нулем этого числителя (пусть  $d < 0$ ,  $c < 0$ ):

$$E > e. \tag{4.18}$$

Для разностного уравнения 4-го порядка (4.3) при  $c = d = e = 1$  получаем общую нижнюю границу для двух «зон проводимости»  $E = -1,25$ ; и разные верхние границы:  $E = 1$  для  $k_1$  и  $E = 5$  для  $k_2$ . Эти зоны показаны на рис.4.1.

Верхняя граница более узкой зоны проводимости для  $k_1$  отвечает разным знакам членов в числителе правой части (4.8), а для  $k_2$  — одинаковым. Важно также, что на верхних границах своих разрешенных зон одно из волновых чисел достигает значения  $\pi/\Delta$ , а другое обращается в нуль (то есть одно из решений имеет там максимальную частоту, а другое — минимальную). На нижней границе  $k_1$  и  $k_2$  сравниваются, а под ней становятся разными, но комплексными. Две ветви (складки) колебаний с  $k_1$  и  $k_2$  можно рассматривать как продолжение одной ветви другою в разрешенной зоне. Некоторая аналогия здесь имеется с акустической и оптической ветвями колебаний решетки, составленной из частиц двух сортов, соединенных пружинами [14] и [4]. Изменением коэффициентов уравнения можно сдвигать положение складки и даже полностью разогнуть ее. Тогда останется одна разрешенная зона с одним волновым вектором.

Если внести в постоянный коэффициент при  $\Psi$  (на главной диагонали матрицы коэффициентов системы (4.3)) возмущение на конечном интервале изменения аргумента в виде «потенциальной» ямы, то под ее воздействием возможны переходы друг в друга волн с разными  $k$ . На рис.4.2 показано искажение границ зон под действием возмущения — возникновение выступов-барьеров, свешивающихся в разрешенные зоны из

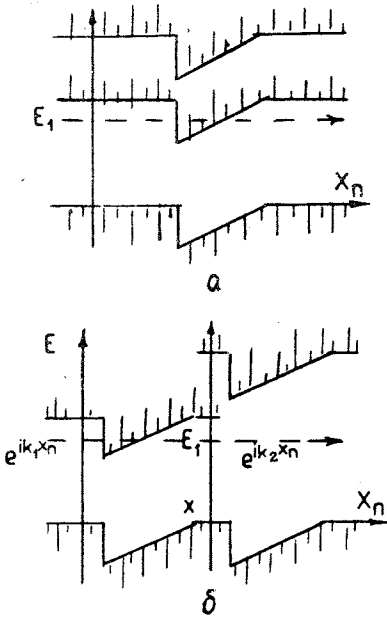


Рис.4.2. Деформация зон (условное изображение) проводимости при введении асимметричной «потенциальной» ямы в коэффициент при  $\Psi_n$  в уравнении (4.3). а) При энергии  $E$  движению волны в состоянии с  $k_1$  препятствует барьер (свисающий из верхней запрещенной зоны), сквозь который нужно туннелировать, а в состоянии с  $k_2$  туннелирование не требуется. б) Зоны для волн с  $k_1$  и  $k_2$  изображены отдельно. Для волн с  $k_1$  барьер легче проникаем слева, а с  $k_2$  — справа

нарушение симметрии проницаемости в разных направлениях. Если волна  $\exp(ik_1 x)$  падает слева, то резкий край барьера способствует трансформации волн и усилению проницаемости. Если же волна  $\exp(-ik_1 x)$  падает справа, то правый пологий склон барьера слабо возмущает

верхних запрещенных (ср. со случаем уравнений 2-го порядка в первом разделе этого обзора). В зоне проводимости, отвечающей волновому числу  $k_2$ , верхняя граница выше и свисающий барьер не достигает выбранной энергии  $E$  и потому преодолевается без туннелирования. Кроме того, происходит нарушение симметрии проницаемости в противоположных направлениях (сравни с двухканальным туннелированием [20]).

Рассмотрим теперь возмущение (типа прямоугольной ямы или барьера) в коэффициенте  $d$  при  $\Psi_{n\pm 1}$ , то есть на боковой диагонали, соседней с центральной в матрице коэффициентов, отвечающей алгебраическим урав-

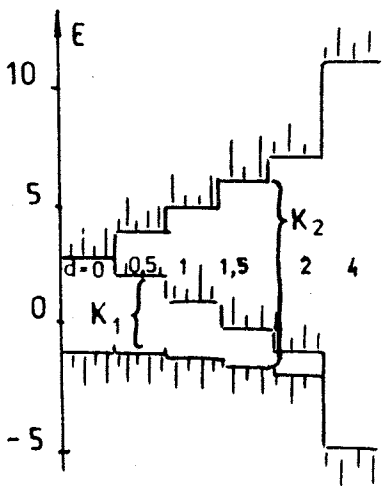
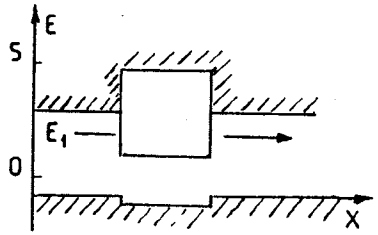


Рис.4.3. Деформация зон при ступенчатом изменении коэффициента  $d$  в разностном операторе Шредингера четвертого порядка (4.3)

Рис. 4.4. Структура зон, усиливающая проникаемость барьера волной с  $k_1$  благодаря тому, что в области барьера трансформация в волну с  $k_2$  позволяет избежать туннелирования



нениям (4.3). Замечательно, что эффект от замены любого коэффициента на конечном отрезке другой константой сводится к изменению границ зон. На рис. 4.3 изображено изменение зоны проводимости в случае, когда  $c = e = 1$ , а коэффициент  $d$  выбран кусочно-постоянным ( $d = 0; 0,5; 1; 1,5; 2; 4$ ). При  $d = 4$  остается только одна зона (спектральная складка как бы разворачивается). При изменении знака  $d$  картина симметрично продолжается влево. При  $d = 0$  обе зоны для  $k_1$  и  $k_2$  совпадают. Если на конечном участке  $c = d = e = 1$ , а вне его  $d = 0; c = e = 1$ , то получается картина, изображенная на рис. 4.4.

Влияние величины коэффициента  $c$  при  $\Psi_{n\pm 2}$  в разностном операторе Шредингера четвертого порядка (4.3) на зоны показано на рис. 4.5 ( $d = e = 1$ ). При  $c = 1/4$  остается только одна зона. Значение  $c = 0$  является сингулярной точкой (общая граница зон опускается при  $c = +0$  в  $-\infty$ , а при  $c = -0$  поднимается в  $+\infty$ ). При отрицательных  $c$  порядок границ зон переворачивается: общая граница зон оказывается не снизу, а сверху.

Для демонстрации возможности управлять складками спектра уравнения высшего порядка рассмотрим, кроме приведенных (рис. 4.3, 4.5), зависимость расположения разрешенных зон от величины коэффициентов  $c, d$  и  $e$ , изображенную несколько иначе на рис. 4.6, а. Коэффициент  $e$  приводит лишь к общему сдвигу зон, не меняя их относительного положения. Коэффициент  $d$  управляет расстоянием между границами разрешенных зон, где  $k = 0$  и  $\pi$  ( $\cos k = \pm 1$ ),

где  $E - e = 2c \pm 2d$  (наклонные линии на рис. 4.6, а). Из этого же соотношения очевидно, что коэффициент  $c$  опреде-

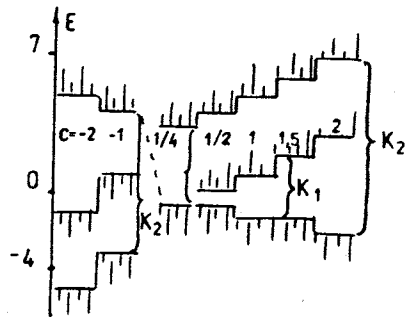


Рис. 4.5. Деформация зон при ступенчатом изменении коэффициента  $c$  при  $\Psi_{n\pm 2}$  в (4.3). При положительных  $c$  нижняя граница общая для зон. При отрицательных  $c$  более узкая зона проводимости расположена сверху (верхняя граница, общая для двух зон)

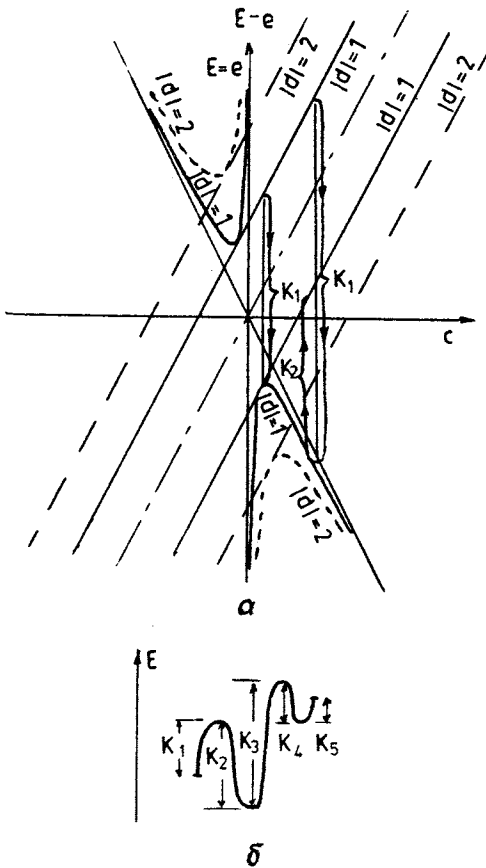


Рис.4.6. Влияние коэффициентов уравнения (4.3) на величину и расположение двух разрешенных зон (а). Вертикаль при заданном  $c$  в точках пересечения с кривыми и наклонными прямыми линиями, отвечающими постоянным  $d$ , определяет точки перегиба спектра  $k_1 = k_2$  и границы, где  $k = 0, \pi$ . Стрелки на фигурных скобках указывают направление роста  $k_i$ . В экстремальных точках кривых исчезает одна из зон. При  $c = 0$  происходит инверсия спектра — сингулярный разрыв линий, отвечающих фиксированным  $d$ , где происходит перегиб одной зоны в другую  $k_1 = k_2$ . Линии  $|d| = 1$  сплошные, а  $|d| = 2$  — штриховые. б) Возможная 5-зонная схема спектральных складок уравнения 10-го порядка. Изменение коэффициентов деформирует расположение разрешенных зон, число которых сокращается при разгибании складок

ральной складки», если рассматривать обе разрешенные зоны как продолжение друг друга) по формуле:  $E - e = -2c - d^2/4c$ . Эти точки в зависимости от величины  $c$  представлены кривыми линиями на рис.4.6, а (при  $d = 0$  эти кривые превращаются в штрихпунктирную прямую  $E - e = 2c$ ). В этих точках происходит изменение прямой зависимости  $E(k)$  на обратную: в одной из разрешенных зон  $E$  растет вместе с  $k$ , а в другой — убывает. При некоторых значениях коэффициентов одна из разрешенных зон исчезает (этому соответствует точка касания наклонной и кривой линий для границ: можно сказать, что ширина одной из зон обратилась в нуль в процессе «разворачивания спектральной складки»). При переходе через точку  $c = 0$  происходит инверсия спектра. Влияние коэффициента  $c$  на спектр иллюстрирует в то же время роль нелокальных компонент взаимодействия (матричных элементов, расположенных на

ляет середину между этими границами; кроме того, он вместе с  $d$  задает общую границу двух разрешенных зон (точку перегиба — «спектральной складки»).

диагоналях, лежащих через одну от главной). Если коэффициенты  $c, d, e$  меняются от точки к точке, то соответственно меняются и границы зон. При управлении разрешенными зонами происходит деформация и зависимости показателей  $\kappa_{1,2}(E)$  экспоненциального роста решений в запрещенных зонах.

На рис.4.6,б условно представлена схема складок зависимости  $E(k)$  для уравнения 10-го порядка (с 11-диагональной матрицей зацепления). Нам еще предстоит овладеть алгоритмами управления (деформациями) спектральных складок уравнений высокого порядка.

Аналогичный указанному выше [22] реальный эффект усиления проницаемости барьеров, благодаря преобразованию волн, слабо туннелирующих в более проникающие для реальной физической системы, был предсказан В.И. Юкаловым [50]. Он рассматривал уравнения 4-го порядка для описания распространения максвелловских и спиновых волн в металле. В пустоте распространяются электромагнитные волны (уравнения второго порядка), но, падая на парамагнитную пленку, они быстро затухают внутрь металла (запрещенная зона), возбуждая в то же время спиновые волны (которые, наоборот, возможны только в среде, где оба типа волн описываются уравнением 4-го порядка), затухающие значительно слабее и способные на другой стороне пленки преобразоваться снова в электромагнитную волну.

**Расщепление уравнения высшего порядка.** Рассмотрим модельный случай разностного оператора четвертого порядка с нулевыми диагоналями, соседними с главной (отличны от нуля элементы матрицы лишь на следующих за ними диагоналях). Такой оператор связывает значения функций через одну точку (отдельно в четных и нечетных точках). Три его отличные от нуля диагонали соответствуют двум операторам второго порядка с удвоенным шагом.

Если отличны от нуля только три диагонали, но между ними лежат по две нулевые диагонали, то уравнение шестого порядка распадается на три уравнения второго порядка, зацепляющих значения функций в точках, отстоящих друг от друга на три шага.

Каждому из парциальных уравнений отвечает своя разрешенная зона и спектр уравнения высшего порядка складывается из спектров операторов низшего порядка, на которые он распадается. При введении ненулевых элементов в нулевые промежуточные диагонали независимые зоны сцепляются, образуя складки.

В следующем разделе будет указано на особенность резонансного рассеяния мишенью, внутреннее движение которой описывается уравнением высшего порядка.

## 5. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ «УПРАВЛЕНИЯ» РЕЗОНАНСАМИ КВАНТОВОГО РАССЕЯНИЯ (Простые модели, поясняющие общий случай)

В данной главе рассматривается влияние структуры мишени на энергетическую зависимость фазового сдвига  $\delta(k)$  рассеяния. Например, как обеспечить ее рост на величину порядка нескольких  $\pi$ . Это шаг к качественному пониманию алгоритмов «резонансной кухни» (формирования произвольного резонансного поведения  $\delta(k)$ ).

В принципе определение потенциала для любых допустимых характеристик дискретного и непрерывного спектра возможно с помощью теории обратной задачи. Однако ее аппарат в общем своем виде не всегда достаточно прозрачен для качественного понимания механизмов связи свойств квантовых систем с видом взаимодействия. Здесь очень полезными могут быть «квантовые картинки», особенно для точно решаемых моделей, например, с точечными потенциальными барьерами и мишенью как одноканальной, так и со связью каналов.

Можно задать такой вопрос о росте  $\delta(k)$ : какая структура мишени позволяет «затянуть» в нее несколько узлов синусоиды, являющейся решением соответствующего уравнения Шредингера вне области взаимодействия при изменении волнового числа на узком участке  $\Delta k$ ?

Без всякой мишени «гармошка» свободного решения ( $\Psi_0 = \sin kx$ ) сжимается с ростом энергии, и его узлы входят в конечную окрестность начала координат (например,  $0 < r < \pi$ , по одному при изменении  $k$  на 1; см. рис.5.1). Появление и

рост фазового сдвига  $\delta(k)$  с  $k$  происходит при более интенсивном затягивании узлов в эту область, если поместить там мишень с нужными свойствами.

Первая рассмотренная модель мишени в виде конечного участка полуоси  $r$  ( $r < \pi$ ), отгороженного от внешней области полупроз-

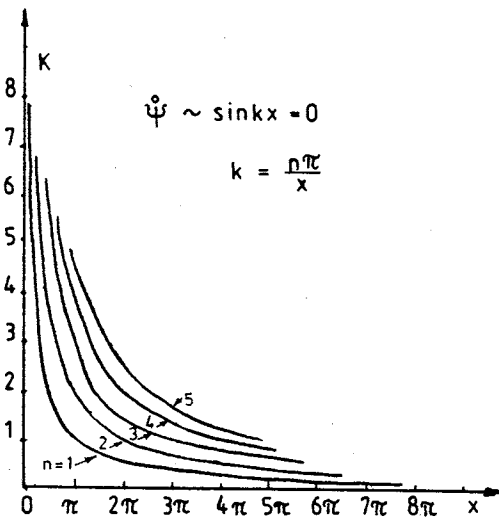


Рис.5.1. Сгущение узлов волновой функции свободного движения к точке  $x = 0$  с ростом  $k$

рачной  $\delta$ -образной стенкой (рис.5.2, б), хорошо имитирует резонансные явления, но сильно ограничивает рост фазы рассеяния. Действительно, между уровнями квазистационарных состояний, переходящих в пределе непрозрачной перегородки в связанные состояния бесконечной прямоугольной ямы, фазовый сдвиг  $\delta(k)$  опускается на величину  $\leq \pi$  из-за *вытеснения волн из зоны мишени*, вызываемого самогашением при энергии, когда внутри мишени расфазированы волны, многократно отраженные от потенциальных стенок. Происходит сдвиг «гармошки» решения вне мишени ( $\Psi = \sin(kx + \delta(k))$ ) вправо, то есть уменьшение фазы рассеяния (рис.5.3). Вблизи каждого уровня фазовый сдвиг  $\delta(k)$  резко поднимается с ростом энергии (зоны резонансов) на рис.5.3. При этом подъемы  $\delta(k)$  происходят не больше чем на  $\pi$  и полностью компенсируются спадами. Аналогичная картина получается и для конечно-разностного уравнения Шредингера, только с учетом возможности связанных состояний выше непрерывного спектра (рис.5.4), которые дают вклад в теорему Левинсона (фазовый сдвиг на верхней границе разрешенной зоны равен  $-\pi n$ , где  $n$  — число таких «верхних» связанных состояний). Насколько это известно автору, картинки решеточных фазовых сдвигов, подобные рис.5.4, ранее не публиковались.

Введение в мишень внутренних  $\delta$ -перегородок (рис.5.6) позволяет ступить резонансы и добиться желаемого подъема фазы рассеяния больше чем на  $\pi$  на участке  $\Delta k < 1$  (см. рис.5.7).

Выбранные сверхпростые модели (требующие все же некоторого внимания, чтобы усвоить разнообразные качественные аспекты резонансного поведения) могут послужить нам ступеньками к пониманию более сложных систем.

Так, можно исследовать поведение фазового сдвига в случае многоканальной мишени, описываемой системой связанных уравнений Шредингера (см. формулы (5.16) — (5.18) и рис.5.8, 5.9, 5.10). В пределе выключенной связи между каналами спектр полной системы получается *наложением* друг на друга спектров отдельных каналов, что, очевидно, допускает *вырождение* (кратное числу каналов  $M$ ) уровней и резонансов и без сингулярностей во взаимодействии. Это свойство наложения отдельных «ветвей» спектра, хотя и зависимых теперь, сохраняется при включении связи каналов. Многоканальность как бы увеличивает емкость мишени (ее способность «заглатывать» узлы внешней синусоиды волновой функции) без увеличения размеров. Двухканальная мишень отталкивает рассеивающиеся волны при энергиях между резонансами, как одноканальная мишень того же размера, а плотность уровней в ней — как в вдвое большей по размерам одноканальной мишени с внутренней  $\delta$ -перегородкой. Похожее явление также должно наблюдаться,

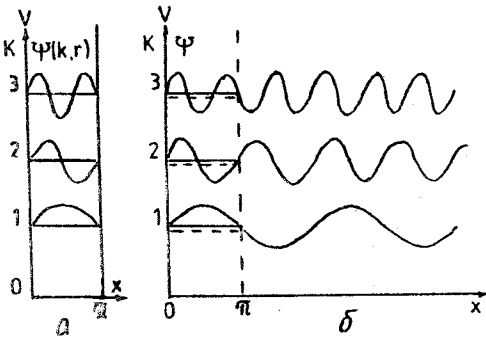


Рис.5.2. Связанные состояния бесконечной прямоугольной ямы (а) превращаются в квазистабильные резонансные состояния при замене одной из стенок ямы полупрозрачным  $\delta$ -барьером (б). Уровни резонансов смещаются несколько вниз (показаны штриховыми линиями) относительно уровней связанных состояний. Функции связанных состояний переходят без искажения в волновые функции непрерывного спектра, так как  $\delta$ -барьер не возмущает решений, имеющих узел в точке расположения барьера. На рис.5.5 та же модель, что и (б), но с опущенным дном потенциала мишени

интересных задач. Уравнение Шредингера для нашей модели имеет вид ( $\hbar = 2m = 1$ ):

$$-\Psi'' + \nu\delta(x - \pi)\Psi = E\Psi, \quad (5.1)$$

$\delta$ -барьер имеет проницаемость, зависящую от множителя  $\nu$  при нем ( $\nu\delta$  есть предел прямоугольного барьера шириной  $\Delta x$  и высотой  $\nu(\Delta x)^2$  при  $\Delta x \rightarrow 0$ ). В отгороженной барьером области возникают квазисвязанные состояния с временами жизни, увеличивающимися с ростом  $\nu$ . При  $\nu \rightarrow \infty$  барьер становится непрозрачным, а уровни и волновые функции квазистабильных состояний превращаются в соответствующие величины для связанных состояний в бесконечно глубокой яме шириной  $\pi$  (рис.5.2,а). На внешней границе мишени ( $r = \pi$ ) сшиваем синусоиды волновых функций ( $\Psi$  должна быть непрерывной) и их производные ( $d\Psi/dr$  имеет разрыв в точке  $\delta$ -барьера):

$$A \sin k\pi = \sin [k\pi + \delta(k)], \quad (5.2)$$

$$Ak \cos \pi + \nu A \sin k\pi = k \cos [k\pi + \delta(k)]. \quad (5.3)$$

если структура мишени отвечает «уравнению Шредингера» высшего (больше двух) порядка, см. разд.4 [22] (за счет наложения друг на друга «складок» спектра). Зависимость потенциала от энергии — еще один способ наслаивания резонансов. И, конечно, нелокальные потенциалы еще в бóльшей степени обладают такими степенями свободы.

Модель с  $\delta$ -стенкой, удерживающей квазистабильные состояния. Подобные модели можно найти в книге Флюгге [48], т.1, задача 20, рис. 3, 4 на с. 52 (см. также [11,1]), но возможности их далеко не исчерпаны, и в [23] были продемонстрированы их новые стороны. Это в особенности касается систем многоканальных, где возникает новый пласт



Из (5.1), (5.2) находим фазу рассеяния  $\delta(k)$  и амплитуду  $A(k)$  функции внутри мишени:

$$\delta(k) = \operatorname{arccotg} [\operatorname{ctg} k\pi + \nu/k] - k\pi, \quad (5.4)$$

$$A(k) = \sin [k\pi + \delta(k)] / \sin k\pi. \quad (5.5)$$

Эти функции представлены на рис.5.3,а,б. При вычислении  $\operatorname{arccotg}$  нужно позаботиться о непрерывности  $\delta(k)$ : убрать возможные скачки с помощью добавок, кратных  $\pi$ .

Задержке волны в мишени отвечает участок подъема  $\delta(k)$  — см. рис.5.3,а,б. В точках максимумов ( $k = 1, 2, \dots$ ) и минимумов  $\delta(k)$  происходит смена режимов выталкивания волн из мишени и их удержания ( $\delta'$  меняет знак). При этих значениях  $k$  сравниваются амплитуды синусоид вне и внутри мишени. В пределе  $\nu \rightarrow \infty$  кривая  $\delta(k)$  превращается в «пилу», состоящую из наклонных отрезков прямых, спускающихся между целыми значениями  $k$  от 0 до  $-\pi$  и вертикальных скачков от  $-\pi$  до 0 при целых  $k$ .

*Резонансы на решетке.*

Рассмотрим разностное уравнение Шредингера (3.1) (шаг

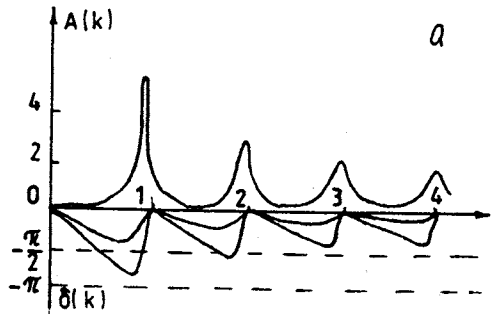
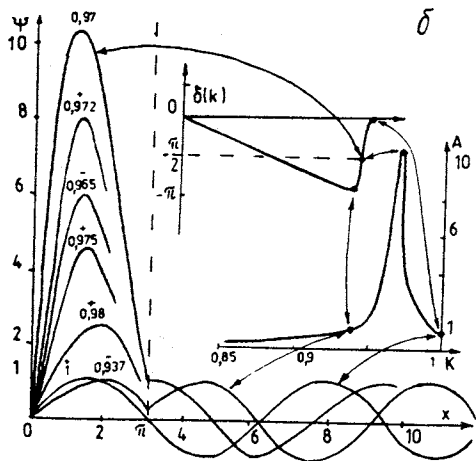


Рис.5.3. Резонансное поведение (а) амплитуды  $A(k)$  волновой функции в области, отгороженной  $\delta$ -барьером, и фазового сдвига  $\delta(k)$ . По оси ординат отложены две шкалы: вверх для  $A(k)$  и вниз — для  $\delta(k)$ . Функция  $A(k)$  отвечает барьеру с  $\nu = 5$ , а  $\delta$  — с  $\nu = 5$  и  $\nu = 1$ . Для неточечных барьеров подъемы не достигают нуля; только  $d \rightarrow 0$ . б) Поведение волновой

функции  $\Psi(k, x)$ , ее амплитуды  $A$  внутри мишени и фазового сдвига  $\delta(k)$  при изменении  $k$  от 0 до 1. Стрелками сопоставляются значения функций при одинаковых значениях  $k$  (в резонансе, при минимальном значении фазы и т.д.). Амплитуда волны вне мишени нормирована на единицу. Ниже резонанса в точке  $k_{\min}$  (минимум фазы) амплитуды функций внутри и вне мишени сравниваются, как и в точке  $k = 1$  выше резонанса



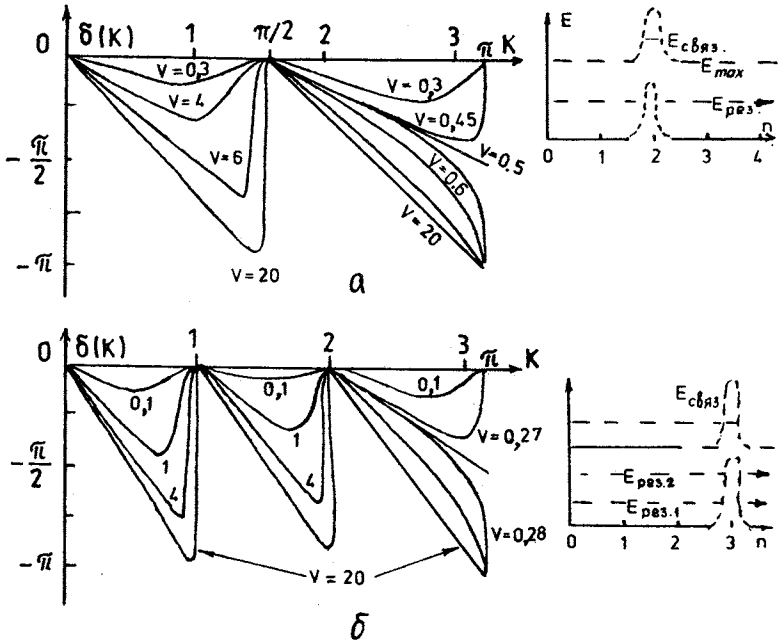


Рис.5.4. Фаза рассеяния  $\delta(k)$  для разностного уравнения (5.6) и решеточных мишеней с одной (а)  $n = 1$  и двумя (б)  $n = 1, 2$  точками за барьером и для разных значений  $\nu$ . Условные картинки справа показывают барьеры в разрешенной зоне и локальный подъем разрешенной зоны над барьерами в верхнюю запрещенную зону. Скачок в  $\delta$  при  $k = \pi$  отвечает значению  $\nu$ , при котором появляется связанное состояние выше непрерывного спектра. При значении  $\nu$ , когда над барьером появляется связанное состояние выше зоны проводимости, фазовый сдвиг терпит на краю зоны  $k = \pi$  скачок от  $\delta(\pi) = 0$  до  $\delta(\pi) = -\pi$

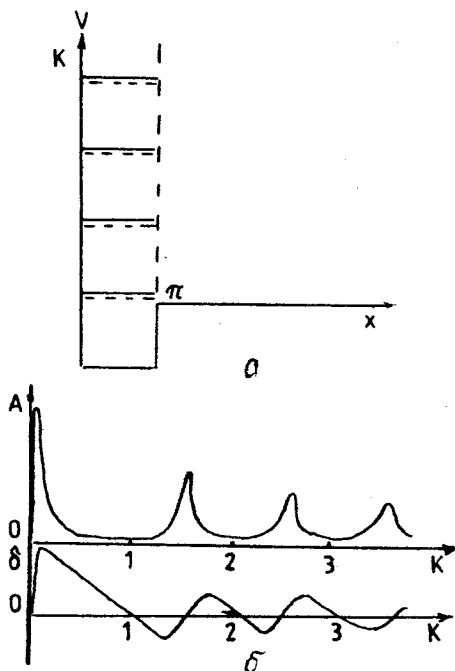
разностного дифференцирования  $\Delta = 1$ ):

$$-\Psi(n+1) + 2\Psi(n) - \Psi(n-1) + \nu(n)\Psi(n) = (E \equiv -2 \cos k) \Psi(n) \quad (5.6)$$

с потенциалом в виде барьера  $\nu_0 \delta_{nm}$ , сосредоточенного в точке  $n = m$ . В отличие от случая непрерывной координаты, здесь число квазисвязанных состояний и резонансов ограничено числом координатных точек внутри мишени.

На рис.5.4,а,б показана энергетическая зависимость фазы рассеяния в зоне проводимости (см. условные картинки справа, где запрещенные зоны выделены штриховкой), когда  $m = 2$  и  $3$ . При  $m = 1$  барьер отгораживает лишь одну точку, и с такой мишенью возможен лишь один

Рис.5.5. То же, что на рис.5.2,а,б и 5.3,а, но для мишени с квазисвязанным состоянием вблизи  $k = 0$ , когда потенциальное дно мишени опущено ниже  $E = 0$



резонанс. При  $m = 3$  имеются два резонанса. В точке барьера «локальная разрешенная зона» вдвигается в верхнюю запрещенную зону на глубину (скорее, высоту)  $\nu$ . В образовавшейся «перевернутой» яме глубиной  $\nu$  могут при достаточно большом  $\nu$  (при  $m = 2$  для  $\nu > 0,5$ ) образоваться связанные состояния. В этом случае фаза на верхней границе  $E_{\max} = 4$  ( $k_{\max} = \pi$ ) зоны проводимости оказывается равной  $-\pi$ . Такое поведение  $\delta(k)$  согласуется с теоремой Левинсона для решеток, которая была уже рассмотрена нами в первом разделе.

При малой высоте барьера  $\nu$  резонансы не возникают: кривые  $\delta(k)$  не достигают величины  $-\pi/2$  и «вмятина» в верхней запрещенной зоне оказывается недостаточно глубокой для появления связанного состояния.

Если углубить потенциал внутри мишени, как показано на рис.5.5,а, фаза  $\delta(k)$  начинает расти уже от  $k = 0$  (рис. 5.5,б). То же можно получить и для моделей с дискретной координатой.

Итак, в рассмотренных примерах мы получили колебания энергетической зависимости фазы рассеяния с амплитудой  $\leq \pi$ . А нельзя ли «раскачать»  $\delta(k)$  с большей амплитудой? Оказывается, можно, если сдвинуть соседние резонансы (квазистабильные состояния) в тесные группы. Проще всего этого можно добиться с помощью  $\delta$ -потенциальных перегородок внутри модельной мишени (см., например, рис.5.6 и 5.7). Мишень со спаренными резонансами способна с удвоенной интенсивностью «втягивать» в себя синусоиду внешней волновой функции (в области резонансов) и «выталкивать» ее (вдали от резонансов).

Формулы, аналогичные (5.2)–(5.5), для случая мишени с внутренними  $\delta$ -перегородками получаются сшиванием  $\Psi$  в точках каждого

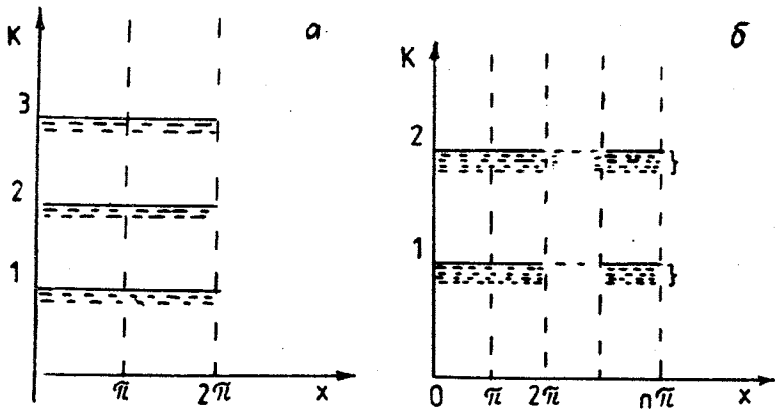


Рис. 5.6. Мишень, образованная а) двумя  $\delta$ -барьерами в точках  $\pi$  и  $2\pi$ ; б)  $n$  барьерами. В пределе непроницаемых барьеров мишень превращается в систему двух ( $n$ ) бесконечно глубоких прямоугольных ям с дважды ( $n$ -кратно) вырожденными уровнями (сплошные линии при  $k = 1, 2, 3 \dots$ ). Слабая прозрачность барьеров приводит к расщеплению уровней в пары ( $n$ ) близких резонансов, расположенных несколько ниже стабильных уровней (штриховая линия)

барьера ( $A_2, \delta_2$  — амплитуда и фаза синусоиды внутри второго отсека мишени):

$$A_1 \sin k\pi = A_2 \sin (k\pi + \delta_2), \quad (5.7)$$

$$A_1 k \cos k\pi + v_1 A_1 \sin k_2\pi = A k \cos (k\pi + \delta_2), \quad (5.8)$$

$$\delta_2(k) = \text{arccctg} [\text{ctg} k\pi + v/k] - k\pi, \quad (5.9)$$

$$\delta(k) = \text{arccctg} [\text{ctg} k2\pi + \delta_2 + v/k] - 2k\pi, \quad (5.10)$$

$$A_1 = A_2 \sin [k\pi + \delta_2(k)] / \sin k\pi, \quad (5.11)$$

$$A_2 = \sin [2k\pi + \delta(k)] / \sin 2k\pi. \quad (5.12)$$

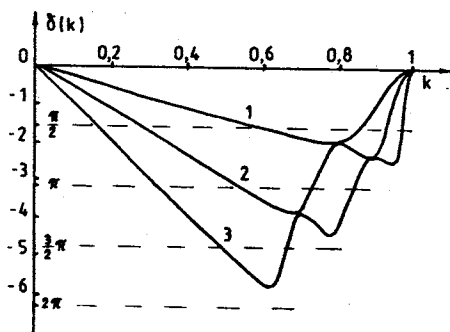
Подобные формулы получаются и для мишени с  $n$   $\delta$ -перегородками в точках  $\pi, 2\pi \dots$ :

$$A_{m-1} = A_m \sin [(m-1)\pi + \delta_m] / \sin [(m-1)\pi + \delta_{m-1}]; \quad \delta_1 = 0, \quad (5.13)$$

$$\delta_n(k) = \text{arccctg} \{ \text{ctg} [(n-1)k\pi + \delta_{n-1}] + v/k \} - k\pi(n-1), \quad (5.14)$$

$$\delta(k) = \text{arccctg} \{ \text{ctg} [nk\pi + \delta_n] + v/k \} - k\pi n. \quad (5.15)$$

Рис.5.7. Зависимость фазового сдвига от  $k$  для одного  $\delta$ -барьера ( $V \equiv 2$ )- $\delta(x-\pi)$  в точке  $x = \pi$ , двух таких же  $\delta$ -барьеров при  $x = \pi; 2\pi$  и трех таких же  $\delta$ -барьеров при  $x = \pi; 2\pi; 3\pi$ . В точках касания разных кривых последний барьер попадает на узел волновой функции и не возмущает ее



Мишень с  $n$  слабопрозрачными  $\delta$ -барьерами, расположенными эквидистантно (в точках  $\pi; 2\pi; 3\pi, \dots, n\pi$ ), имеет группы по  $n$  резонансов на узких интервалах  $\Delta k < 1$  (рис.5.6, 5.7). Тесное расположение резонансов приводит к втягиванию  $n$  узлов волновой функции в мишень при прохождении (с ростом)  $k$  резонансной зоны (ср. с многоканальным случаем рис.5.8, 5.9).

Фазы от одной и двух ям совпадают в точке минимума фазы от первой ямы (рис.5.7), где выравниваются амплитуды синусов внутри обоих отсеков мишени (излом функции на внутренней перегородке меняет знак ее производной, оставляя ее модуль неизменным) и вне мишени. Это волновое число  $k_{\min}$  отвечает связанному состоянию в яме с бесконечной стенкой в точке  $x = 2\pi$  и  $\delta$ -перегородкой посередине. Аналогичная ситуация и для фазовых сдвигов для двух и трех ям (рис.5.7).

В большой мишени (рис.5.6, б) перегородки вызывают самогашение волн в областях между резонансными зонами (при длинах волн, далеких от размеров отдельных отсеков). Там с ростом  $k$  фаза убывает, а в области квазистационарных уровней  $\delta(k)$  поднимается на величину порядка  $n\pi$ , не успевая опускаться между уровнями. При прохождении узкой резонансной зоны ( $\Delta k < 1$ ) мишень «заглатывает»  $n$  узлов (в группе квазисвязанных состояний число узлов нарастает по одному при подъеме от соседа к соседу).

Если в уравнении Шредингера помимо потенциала имеется центробежный барьер  $l(l+1)/r^2$  или кулоновский  $z_1 z_2 / r$ , фазовый сдвиг  $\delta(k)$  отсчитывается относительно функции Бесселя — волновой функции свободного движения с отличным от нуля угловым моментом  $l$ , или кулоновской функции [40]. Если имеется  $n$  квазисвязанных состояний за барьером за счет дополнительного короткодействующего притягивающего потенциала, то они обеспечивают рост фазового сдвига  $\delta(k)$  с энергией на

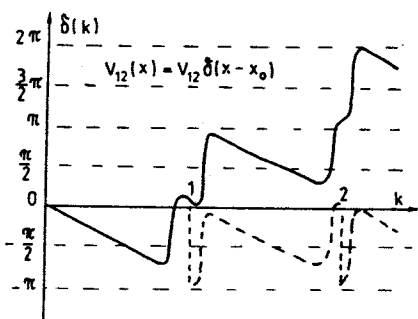


Рис.5.8. Фазовый сдвиг для двухканальной мишени с  $\delta$ -связью каналов (5.16). Ср. со случаем одноканальной мишени с двумя отсеками (рис.5.7). Здесь мишень компактнее и слабее выражено спадание  $\delta(k)$  между резонансными зонами. Пунктирная кривая со скачками при целых  $k$  объясняется, как в разностном случае (рис.5.10)

величину порядка  $n\pi$ . Только за верхним резонансом начинается в соответствии с теоремой Левинсона спад  $\delta(k)$  к нулю при  $k \rightarrow \infty$ .

**Многоканальные системы.** В  $M$ -канальной системе возможно  $M$ -кратное вырождение уровней, как в мишени с  $M$   $\delta$ -перегородками. Это можно просто продемонстрировать на системе связанного с  $\delta$ -образной или постоянной матрицей взаимодействия  $V_{\alpha\beta}$  на конечном отрезке:  $0 < r < r_0$ , когда закрыты все каналы, кроме канала упругого рассеяния (пусть  $V_{\alpha\alpha}$  для закрытых каналов обращается в бесконечность при  $r > r_0$ ). В простейшем случае двух каналов система уравнений Шредингера с  $\delta$ -связью каналов в точке  $x_0$  и  $\delta$ -барьером в первом канале в точке  $\pi$  имеет вид

$$\begin{aligned} -\Psi_1'' + V_{12}\delta(x - x_0)\Psi_2 + V_1\delta(x - \pi) &= E\Psi_1, \\ -\Psi_2'' + V_{21}\delta(x - x_0)\Psi_1 &= E\Psi_2; \quad \Psi_2(\pi) = 0. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Решение системы (5.16), запишем с помощью функции-ступеньки  $\Omega$ :

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A_1 \sin kx - \left(\frac{V_{12}}{k}\right) \cos kx \sin kx_0 \Omega(x - x_0) \Psi_2(x_0) - \\ &\quad - \left(\frac{V_{12}}{k}\right) \sin kx \cos kx_0 \Omega(x_0 - x) \Psi_2(x) \text{ и аналогично для } \Psi_2(x); \\ \Psi_1(x_0) &= (A_1 \sin kx_0 - L)/P \text{ и аналогично для } \Psi_2(x_0), \end{aligned}$$

где  $L = (V_{12}/k) \sin^2 kx_0 \cos kx_0$ ,  $P = 1 - (V_{12}^2/4k^2) \sin 2kx_0$ ,

$$\delta(k) = \text{arccotg}[\Psi'(\pi)/\Psi(\pi)] \frac{1}{k} + V_1 - k\pi. \quad (5.17)$$

Эта фаза представлена на рис.5.8: сплошная кривая отвечает зависимости  $\delta(k)$  без скачков (аналогичная «лесенка» получается и при постоянной связи — рис.5.9).

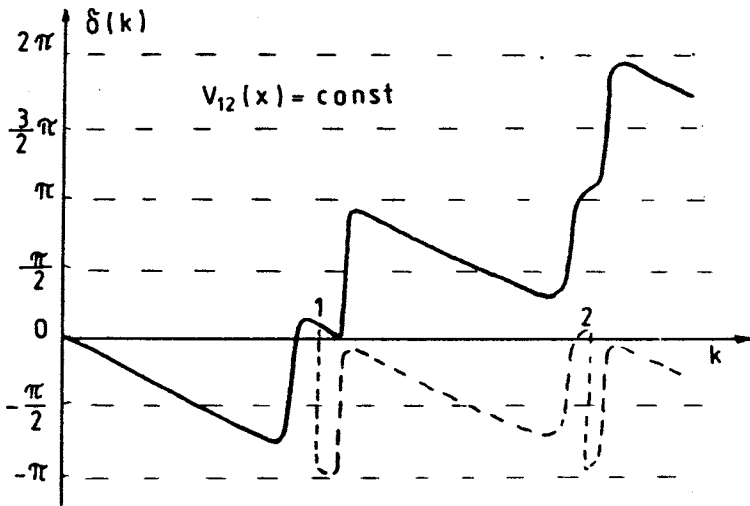


Рис.5.9. То же, что на рис. 5.8, только для  $V_{12}(x) = \text{const}$

Благодаря простой  $\delta$ -связи, из второго уравнения в (5.16) легко выразить  $\Psi_2$  через  $\Psi_1$  и подставить в уравнение для  $\Psi_1$ . В результате получим одноканальное уравнение с эффективным  $\delta$ -потенциалом, зависящим от энергии:

$$-\Psi_1'' + V(k) \delta(x - x_0)\Psi_1 = E\Psi_1 \tag{5.18}$$

с сингулярностями при  $k = 1, 2, \dots$ :

$$v_{\text{ef}}(k) = V_{12}V_{21} \sin kx_0 \{ \text{ctg } kx_0 - \cos kx_0 \} / k.$$

В общем же случае потенциалы, зависящие от энергии, позволяют создавать резонансные зоны с произвольным числом и плотностью резонансов.

Рассмотрим двухканальную мишень с постоянными матричными элементами  $V_{12} = V_{21} = \text{const}$ , осуществляющими связь каналов:

$$\begin{aligned} -\Psi_1'' + V_{12}\Psi_2 + V_{11}\delta(x - \pi)\Psi_1 &= \Psi_1, \\ -\Psi_2'' + V_{12}\Psi_1 &= \Psi_2, \quad \Psi_2(\pi) = 0. \end{aligned} \tag{5.16'}$$

Как и в системе (5.16), открыт только первый канал, перегородженный  $\delta$ -барьером в точке  $x = \pi$ , а волны второго заперты на интервале  $[0, \pi]$  и сообщаются с внешней областью лишь через связь  $V_{21}$  с первым каналом

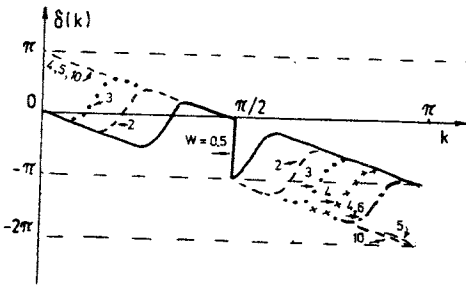


Рис.5.10. Фазовый сдвиг  $\delta(k)$  двухканальной мишени разностной системы (5.19) с барьерами в точке 2: непроницаемым во втором и полупрозрачным в первом канале. При увеличении силы связи каналов (значения  $w = V_{12}, V_{21}$  помечены цифрами) два резонансных скачка раздвигаются, пока квазистабильные состояния не переходят в связанные состояния ниже (при  $w > 3$ ) и выше (при  $w > 4,6$ ) разрешенной зоны

(только теперь эта связь равномерно распределена по всей мишени, а не сосредоточена в одной точке  $x_0$ ). Благодаря постоянству матрицы взаимодействия внутри мишени для комбинаций  $\Psi_1 \pm \Psi_2$  получается расцепленная система:

$$\begin{aligned} -(\Psi_1 + \Psi_2)'' + V_{12}(\Psi_1 + \Psi_2) &= E(\Psi_1 + \Psi_2), \\ -(\Psi_1 - \Psi_2)'' - V_{12}(\Psi_1 - \Psi_2) &= E(\Psi_1 - \Psi_2) \end{aligned}$$

с решениями

$$\Psi_1 + \Psi_2 = A_+ \sin k_+ x, \quad \Psi_1 - \Psi_2 = A_- \sin k_- x, \quad k_{\pm} = (E \pm V_{12})^{1/2},$$

$$\delta(k) = \arccos \left[ \frac{k_+}{2k} \operatorname{ctg} k_+ \pi + \frac{k_-}{2k} \operatorname{ctg} k_- \pi + \frac{2V_0}{k} \right] - k\pi.$$

Эта фаза представлена на рис.5.8 (сплошная линия с гладкой зависимостью от  $k$ ).

Аналогом (5.18) здесь служит одноканальное уравнение с эффективным потенциалом, который нелокален и также сингулярен при  $k = 1, 2, \dots$ :

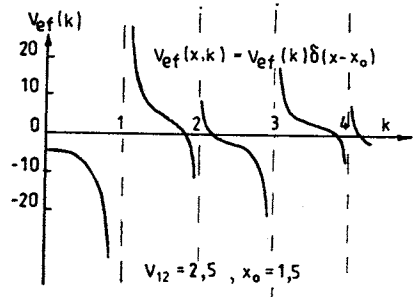
$$V_{\text{ef}}(k, x, x') = V_{12} V_{21} \left( \frac{\cos k\pi \sin kx \sin kx'}{\sin k\pi} - \begin{cases} \sin kx \cos kx' & \text{при } x' > x \\ \cos kx \sin kx' & \text{при } x' < x \end{cases} \right).$$

При двух и более открытых каналах вместо фазовых сдвигов нужно рассматривать *собственные фазовые сдвиги*. В собственно фазовых состояниях узлы канальных функций «заглатываются» одновременно во всех каналах. Здесь также еще предстоит разобраться в механизмах формирования энергетической зависимости параметров рассеяния. Это же относится и к уравнениям с высшими производными

Рассмотрим конечно-разностную двухканальную модель с  $\delta$ -связью каналов (шаг разностного дифференцирования  $\Delta = 1$ ):



Рис.5.11. Сингулярная зависимость эффективного потенциала, заменяющего  $\delta$ -образную связь двух каналов



$$-\Psi_1(n+1) + 2\Psi_1(n) - \Psi_1(n-1) + V_{12}\delta_{n1}\Psi_2(n) + \delta_{n2}V\Psi_1(n) = (E \equiv 2 - 2 \cos k)\Psi_1(n),$$

$$-\Psi_2(n+1) + 2\Psi_2(n) - \Psi_2(n-1) + V_{21}\delta_{n1}\Psi_1(n) = E\Psi_2(n). \quad (5.19)$$

Второй канал будем полагать закрытым при всех энергиях:  $\Psi_2(2) = 0$ , а в первом в точке  $n = 2$  имеется  $\delta$ -барьер высотой  $V$ . Фаза рассеяния на такой системе ( $W = V_{12}V_{21}$ ):

$$\delta(k) = \text{arccctg}\{\text{ctg}(k)[1 - 1/(2 \cos^2 k - W/2)] + V/\sin k\} - 2k \quad (5.20)$$

показана на рис.5.10.

При слабой связи каналов в зоне проводимости имеется два резонанса (в каждом канале за барьером по одной точке). С ростом  $V_{12}$  (или  $W$ ) сначала первый резонанс опускается под нижнюю границу разрешенной зоны и становится обычным связанным состоянием. При этом  $\delta(0)$  претерпевает скачок из  $0$  в  $\pi$  в соответствии с теоремой Левинсона. Затем второй резонанс пересекает верхнюю границу зоны проводимости и превращается в связанное состояние над непрерывным спектром. Нужно еще учитывать другое связанное состояние над непрерывным спектром, обусловленное барьером  $V$  в первом канале.

Аналогично (5.18) можно свести систему (5.19) к одноканальному уравнению Шредингера с зависящим от энергии потенциалом:

$$V_1(k) = V_{12}V_{21}/(E - 2) = -V_{12}V_{21}/(2 \cos k). \quad (5.21)$$

Обратите внимание на сингулярность потенциала (скачок со сменой знака от  $-\infty$  до  $+\infty$ ) в центре разрешенной зоны  $E = 2$ . Скачок фазы  $\delta(k)$  на  $\pi$  (рис.5.11) при  $E = 2$  диктуется согласованием с величинами фаз рассеяния в более простых системах, в которых эффективный потенциал,

зависящий от энергии, заменяется на равный ему при данной энергии, но не зависящий от  $E$ .

Положение указанной сингулярности можно сдвигать, вводя отличный от нуля диагональный потенциал  $V_{22}\delta_{n1}$  во втором канале: тогда знаменатель в (5.21) заменится на  $E - 2 - V_{22}$  и скачок в потенциале и фазе будет при энергии  $2 + V_{22}$ .

## 6. О МЕХАНИЗМАХ ОБРАЗОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗОН

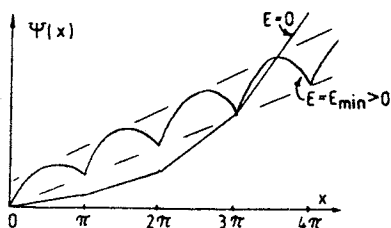
В этом разделе сравниваются механизмы образования разрешенных и запрещенных зон на простейших моделях: с периодическими  $\delta$ -образными потенциалами (гребенка Дирака) и со свободным движением волн по дискретной переменной (разд. 1). Сравнение этих объектов разной природы помогает пониманию процессов формирования решений в разных зонах (волн с экспоненциальным «разбалтыванием» в запрещенных зонах и с ограниченными амплитудами — в разрешенных).

В разделе 1 было показано, как для разностного уравнения (1.1) возникает *единственная разрешенная зона* конечной ширины. Теперь сопоставим этот случай с моделью периодического внешнего поля в виде  $\delta$ -образных потенциалов  $\sum_n V \delta(x - x_n)$  с непрерывным  $x$  и дискретным

$x_n$ . Здесь возникает конкуренция «загибания решения к нулю» оператором кинетической энергии и «ломки производной» решения потенциальными барьерами — зубцами гребенки Дирака (рис.6.1) в сторону роста абсолютной величины решения. При фиксированной энергии преобладает одна из тенденций и устанавливается режим устойчивых или неустойчивых (с разбалтыванием) колебаний решений. С изменением энергии происходит смена режимов, что приводит к бесконечному чередованию зон разрешенных (проводимости) и запрещенных (лакун).

Будет также рассмотрена связь спектральных параметров, отвечающих потенциалу на конечном отрезке (задача Штурма — Лиувилля), с зонной структурой периодического потенциала, полученного бесконечным повторением потенциала на отрезке. Так, например, повторив бесконечно глубокую прямоугольную яму шириной  $l$ , мы получим в периодическом случае бесконечное вырождение каждого уровня  $E_n = n^2$  исходного спектра. Если же убрать непроницаемые перегородки между ямами, то вырожденные уровни «развернутся» в непрерывный спектр свободного движения. А что произойдет со спектром, если в исходной потенциальной яме деформировать дно так, чтобы [20,84] изменить

Рис. 6.1. Примеры волновых функций в поле «гребенки Дирака». В отличие от рис. 1.1, при  $E = 0$  происходит рост экспоненциального типа за счет изломов линейной функции. На нижней границе первой зоны проводимости  $E = E_{\min}$  синусоидальное решение ломается  $\delta$ -барьерами, так что получается линейный рост точек изломов  $\Psi$



приведенную ширину одного из уровней, не меняя их положений. Оказывается [16, 74, 25], в окрестности избранного уровня произойдет разрыв соответствующего периодического потенциала из-за нарушения симметрии производных  $\gamma_v$  собственных функций на краях периода (образуется лагуна с тем большей степенью запрещенности движения волн, чем сильнее нарушена указанная симметрия). Незапланированные запретные зоны оказываются пренебрежимо малыми. Сдвигая уровни  $E_v$  исходной ямы, можно управлять ширинами зон. Таким образом, мы имеем простые приемы «спектральной инженерии».

**Гребенка Дирака.** В разд. 5 мы обсуждали резонансное рассеяние на  $\delta$ -барьерах, теперь рассмотрим, как ведут себя волны в периодическом поле  $\delta$ -барьеров.

Для упрощения наших рассуждений будем нетрадиционно рассматривать вещественные решения, а не комплексные функции Блоха. Ведь для того, чтобы судить о характере решения (относится ли оно к разрешенной или запрещенной зоне), этого достаточно.

Решение уравнения Шредингера с потенциалом в виде периодически расположенных  $\delta$ -функций

$$-\Psi''(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x - x_n) \Psi(x) = E\Psi(x); \quad x_n = an \quad (6.1)$$

имеет общие черты с конечно-разностным. В точках  $\delta$ -сингулярностей происходит излом решения — скачок производной, пропорциональный произведению  $V_0 \Psi(x_n)$ , а не  $E\Psi$ , как в (1.1) (благодаря непрерывности  $x$ , последний член отвечает теперь за плавные изгибы  $\Psi$  между  $\delta$ -пиками):

$$\Psi'(x_n + 0) = \Psi'(x_n - 0) + V_0 \Psi(x_n). \quad (6.2)$$

При  $\Psi(x_n) > 0$  излом происходит вверх, а при отрицательных значениях  $\Psi$  в точках  $\delta$ -стенок — вниз. Эти изломы приводят при  $E > 0$  к уменьшению фазового сдвига решения  $A \sin(kx + \delta)$  (не следует путать фазовый сдвиг  $\delta(k)$  и потенциальные  $\delta(x - x_n)$ -стенки). Между  $\delta$ -пиками

решение представляет собой волну свободного движения, например,  $A \sin(kx + \delta)$ , и происходит постепенное накопление (увеличение) фазы между точками ломки первой производной. Так что увеличение фазы за счет изгиба функции между потенциальными стенками конкурирует с уменьшением фазы (скачком) при их прохождении. (В случае конечно-разностного уравнения свободного движения (1.1) было лишь дискретное накопление фазы от точки к точке.) Благодаря этой конкуренции происходит разрыв зоны непрерывного спектра лагунами — участками запрещенных зон. Можно подобрать энергию  $E = E_n$  так, чтобы узлы решения совпадали с положениями барьеров ( $x_n$ ). Тогда, в соответствии с (6.2), изломы решения исчезают:  $\delta$ -функции не возмущают волновую функцию свободного движения. Эти значения энергий совпадают с уровнями бесконечной прямоугольной ямы с непроницаемыми стенками вместо  $\delta$ -пиков. Именно эти значения энергии  $E_n$  служат границами между разрешенными и запрещенными зонами. При энергиях немного выше и ниже  $E_n$  изломы решения барьером имеют разные знаки (вместе с  $\Psi$ ).

При отрицательных энергиях решением между пиками является, например, растущее решение:  $C \exp(kx) > 0$ , которое в точках зубцов потенциальной гребенки претерпевает изломы, только усиливающие рост. Так что, как и следовало ожидать, при  $E < 0$  имеем запрещенную зону. При  $E = 0$  между барьерными пиками происходит линейный рост  $\Psi$ , а в пиках — изломы, все время усиливающие этот рост, так что в результате получается все же рост экспоненциального (в среднем) типа (рис.6.1). Значит, верхняя граница нижней запрещенной зоны сдвигается по сравнению со случаем свободного движения в область  $E > 0$ . Действительно, в верхней предельной точке нижней запрещенной зоны ( $E = E_{\min} > 0$ ) между перегородками поведение синусоидальное, а барьеры так ломают функцию, что получается рост «линейного типа» (на одной линии, например, лежат точки изломов) — получается равновесие между выгибанием в одну сторону кривой решения между пиками и ломкой в другую сторону (рис.6.1).

При  $E > E_{\min}$  рост фазы в промежутках между пиками превышает уменьшение фаз за счет ломки (выгибание пересиливает ломку) — получается кусочно-синусоидальная кривая, модулированная колебаниями меньшей частоты (типа биений). На верхней границе  $E_{\max}$  нижней зоны проводимости ( $k_{\max} = 1$ ) модуляция исчезает, узлы синусоиды попадают в точки пиков и, благодаря отсутствию изломов (пропорциональных  $\Psi$  и равных в данном случае нулю), имеем волновую

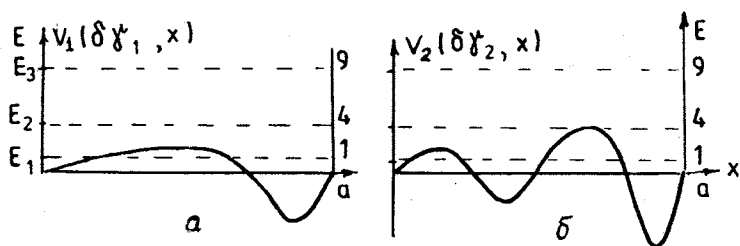


Рис.6.2. Деформация  $V_{1,2}(x)$  дна бесконечной: прямоугольной ямы, необходимая для увеличения модуля производной  $\gamma_{1,2} = \Psi'_{1,2}(x = a)$  на краю ямы у нормированной волновой функции  $\Psi(x)$ : а) основного состояния  $\Psi_1$  и б) первого возбужденного —  $\Psi_2$ ; остальные связанные состояния деформируются, не меняя своих производных на краях интервала, как показано на рис.6.3; 6.4 (все уровни остаются неизменными). Эти потенциалы  $V_{1,2}(x)$ , продолженные периодически на всю ось, «рвут непрерывный спектр» (создают лакуны) в окрестности  $E_{1,2}$  соответственно

функцию, совпадающую с невозмущенным решением  $\sin(k_{\max}x)$ . Выше  $E_{\max}$  начинается новая запрещенная зона (первая лакуна). Вообще, энергии  $E_n = n^2$  уровней прямоугольной ямы с шириной, равной периоду  $a = \pi$ , служат верхними границами зон проводимости. Выше этих уровней в каждой из запрещенных зон имеется по одной энергетической точке «фазового равновесия»: при этих энергиях фаза функции после непрерывного нарастания между барьерами и резкого скачка в точке очередного барьера возвращается к своему значению сразу после предыдущего барьера (фаза — функция с периодом  $a$ ).

Аналогично можно рассмотреть и случай периодических  $\delta$ -ям. В частности, первая разрешенная зона опускается ниже  $E = 0$ .

Как создать запрещенную зону — лакуну по заказу («порвать» непрерывный спектр в заданном месте) [16, 74, 25]. Алгоритм изменения спектральных параметров: произвольных уровней  $E_\nu$  и нормировочных констант  $\gamma_\nu$  бесконечной прямоугольной потенциальной ямы (или положений и приведенных ширин соответствующих  $R$ -матричных резонансов [20,84]) в подходе обратной задачи — техники «одевания» — оказался удобным аппаратом построения точно решаемых моделей с периодическими потенциалами. Например, просто получить потенциал с лакуной в энергетической окрестности заданного уровня  $E_\nu$  [16,74,25]. Для этого достаточно периодически повторить возмущение  $V(x)$  плоско-

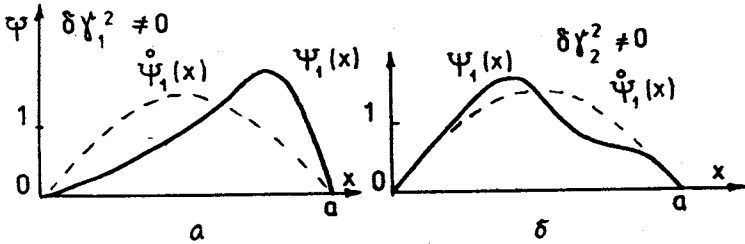


Рис.6.3. Возмущенные волновые функции основного состояния (сплошные линии), отвечающие потенциальным ямам рис.6.2. Невозмущенные функции показаны штриховыми линиями: а) деформация дна прямоугольной ямы увеличивает крутизну наклона  $\Psi_1$  в точке  $x = a$ ; б) производная от  $\Psi_1$  в точке  $x = a$  не меняется

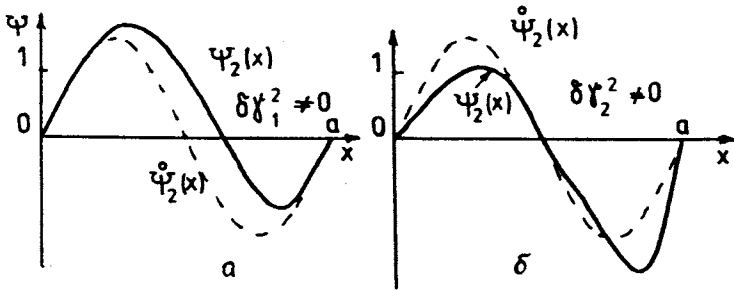


Рис.6.4. Волновые функции (возмущенные — сплошные линии, невозмущенные — штриховые) первых возбужденных состояний, отвечающие потенциальным ямам с рис.6.2.: а) при изменении только спектрального параметра  $\gamma_1$  производная от  $\Psi_2$  в точке  $x = a$  остается неизменной; б)  $\Psi_2$  ( $x = a$ ) возрастает, так как именно для этого специально выбиралось возмущение  $V_2$  в форме, показанной на рис.6.2, б

го дна прямоугольной ямы радиуса  $a$ , меняющее соответствующую  $\gamma_v$  (рис.6.2, 6.5):

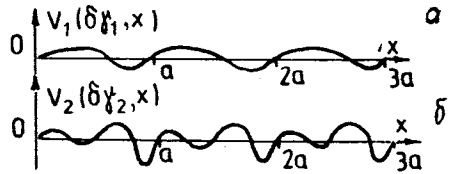
$$V(x) = \delta\gamma_v^2 \cos k_v x \frac{1}{k_v} \sin k_v x / p(x) + (\delta\gamma_v^2)^2 \frac{1}{k_v^4} \sin^4 k_v x / p^2(x), \quad (6.3)$$

где

$$p(x) = 1 + \delta\gamma_v^2 \frac{1}{k_v^2} \int_x^a \sin^2 k_v t dt.$$

Соответствующее этому возмущению точное решение имеет простой аналитический вид:

Рис. 6.5. Потенциалы  $V_{1,2} \equiv V(\delta\gamma_{1,2}, x)$  (рис. 6.2), продолженные периодически на всю ось  $x$ . Созданные для нарушения симметрии производных слева и справа ( $\gamma_{1,2}$ ) на краях интервала  $[0, a]$  для функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  соответственно, эти потенциалы имеют запрещенные зоны в окрестности отвечающих им уровней энергии  $E_{1,2}$  (см. рис. 6.8)



$$\phi = \frac{1}{k_v} \sin k_v x p^{-1}(x), \tag{6.4}$$

а для произвольной энергии  $E$  ( $k^2 = E$ ):

$$\phi(E, x) = \frac{1}{k} \sin(kx) - \delta\gamma_v^2 \frac{1}{k_v^2 k} \sin(k_v x) \int_x^a \sin(k_v t) \sin(kt) dt. \tag{6.5}$$

Изменение  $\gamma$ , вызывает асимметрию модулей производных соответствующей собственной функции и сохранение такой симметрии для всех других состояний, как показано на рис. 6.3; 6.4. При сшивании прямоугольных ям (без возмущения дна) в периодическую цепочку каждый уровень переходил в соответствующее значение энергии непрерывного спектра. Действительно, собственные функции на краях сшиваемых отрезков равны нулю и равны по модулю их производные, значит, просто их непрерывно сшить в цепочку, добавляя лишь множители  $\pm 1$ . Но периодически повторенные функции  $\Psi$  из рис. 6.3; 6.4 (Пешель и Трубовиц [84]) на соседних отрезках уже так просто не сшиваются (рис. 6.6). Чтобы приравнять производные, нужно умножить одну из функций  $\Psi$  на число, отличное по модулю от единицы (в частном случае, представленном на рис. 6.6, этим числом служит 2). На следующем сочленении потребуется снова умножение на такое же по модулю число и т.д., т.е. получится (квази)экспоненциально возрастающее решение (знакопеременное или нет, в зависимости от четности выбранного уровня). Эти растущие решения отвечают запрещенной зоне периодического потенциала (соответствующие собственные значения — точки так называемого дополнительного (вспомогательного) спектра  $\{\mu_i\}$ ). Все остальные уровни, для которых производные собственных функций на краях интервала не менялись, сшиваются в периодические решения (как для второго уровня на рис. 6.7, а и первого — на рис. 6.7, б), оказываются точками вспомогательного спектра, совпадающими с границей разрешенной зоны. Вспомогательный спектр располагается на одной точке внутри или на границе каждой из лагун (между границами разрешенных зон, которые могут смыкаться: «схлопывание» лагун). Можно ожи-

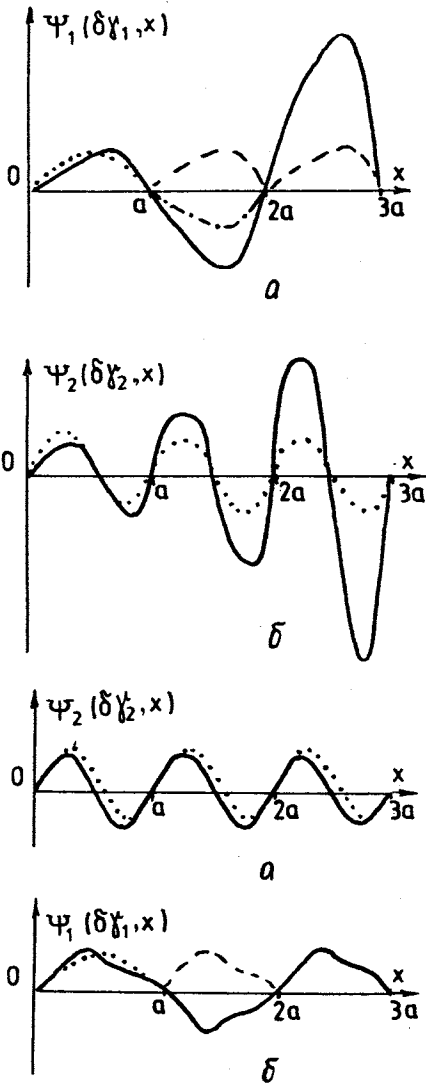


Рис.6.6. Волновые функции  $\Psi_1(\delta\gamma_1 \neq 0, x)$  и  $\Psi_2(\delta\gamma_2 \neq 0, x)$  на всей оси  $x$  (сплошные кривые), сшитые из решений  $\Psi_{1,2}(x)$  на интервале  $[0, a]$ , отвечающих потенциалам  $V_{1,2}(x)$  (рис.6.2), продолженным периодически на всю ось  $x$ . Штриховой линией показаны невозмущенные функции  $\Psi_{1,2}(x)$  прямоугольной ямы. Экспоненциальное раскачивание, характерное для запрещенной зоны, получается из-за необходимости умножения на каждом следующем периоде на множитель (в данном случае 2), чтобы приравнять производные функций с соседних периодов в точках сшивания. Штриховой линией (а) показана периодически повторенная  $\Psi_1(\delta\gamma_1, x)$ ; штрихпунктиром —  $-\Psi_1(x-a)$ , которую потребовалось умножить на 2, чтобы гладко сшить производные  $\Psi_1(x)$  и  $-\Psi_1(x-a)$  в точке  $a$ ; для продолжения на следующий период нужно было умножить  $2\Psi_1(x)$  еще на 2. Другие функции  $\Psi_1(\delta\gamma_2, x)$  и  $\Psi_2(\delta\gamma_1, x)$ , как и  $\Psi_{i>2}(x)$ , продолжают простым повторением, что свидетельствует о принадлежности  $E_{i>1}$  к разрешенной зоне, см. рис.6.7

Рис.6.7. Волновые функции с ненарушенной симметрией модулей производных на краях интервала  $[0, a]$  периодически (без экспоненциального роста) продолжают на всю ось  $x$ . Это означает, что энергии соответствующих уровней лежат в разрешенной зоне периодически продолженных потенциалов из рис.6.5.

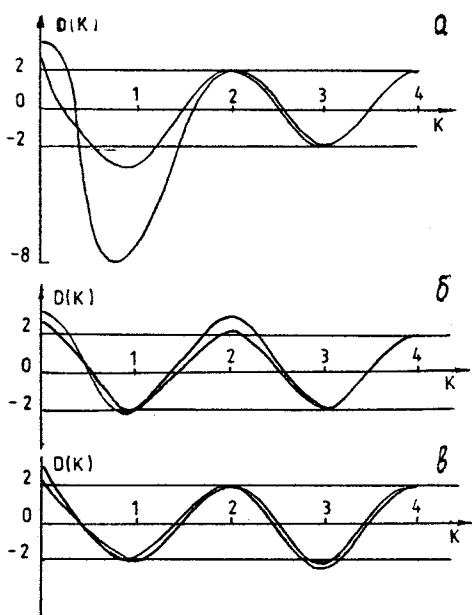
дать [16,74], что лакуны, отвечающие неискаженным  $\gamma_{\mu \neq \nu}$ , будут существенно меньше.

Точным критерием наличия лакун является  $|D(k)| > 2$ , где  $D(k)$  с точностью до множителя 2 совпадает с функцией Ляпунова, называемой также дискриминантом Хилла [36]:

$$D(k) = \phi'(x = a) + \psi(x = a), \text{ где } \phi(0) = \psi'(0) = 0, \phi'(0) = \psi(0) = 1.$$



Рис.6.8. Области значений  $k$ , где функция Ляпунова (дискриминант Хилла)  $D(k)$ , характеризующая полосатый спектр периодического потенциала, имеет модуль больший, чем 2, являются лагунами — запрещенными зонами. Видно, что непрерывный спектр рвется именно около тех уровней а)  $E_1 = (k_1 = 1)^2$ ; б)  $E_2 = (k_2 = 2)^2$ ; в)  $E_3 = (k_3 = 3)^2$ , где менялись приведенные ширины, то есть нарушалась симметрия производных на концах интервала  $[0, a]$



Расчеты Коробова действительно подтвердили нашу качественную гипотезу [16,74] (рис.6.8).

Таким образом, благодаря простоте предлагаемого алгоритма (на основе точно решаемых моделей), возможности произвольно менять любые спектральные параметры (задачи Штурма — Лиувилля на конечном отрезке), появляется возможность конструировать желаемую зонную структуру периодических систем. Можно управлять и положением, и шириной, и «силой запрещенности» лагун (сдвигая уровни  $E_p$  исходной ямы — границы

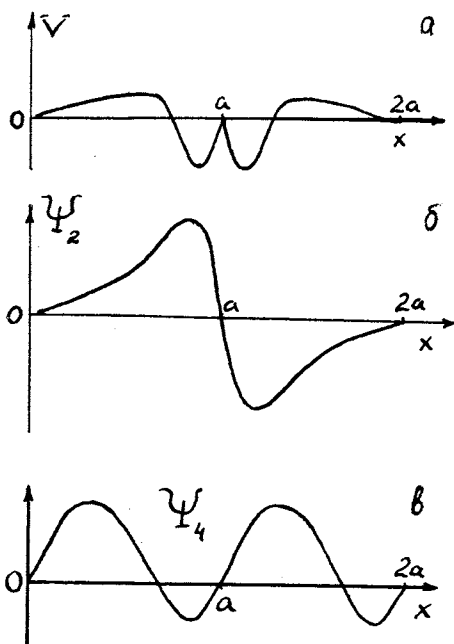
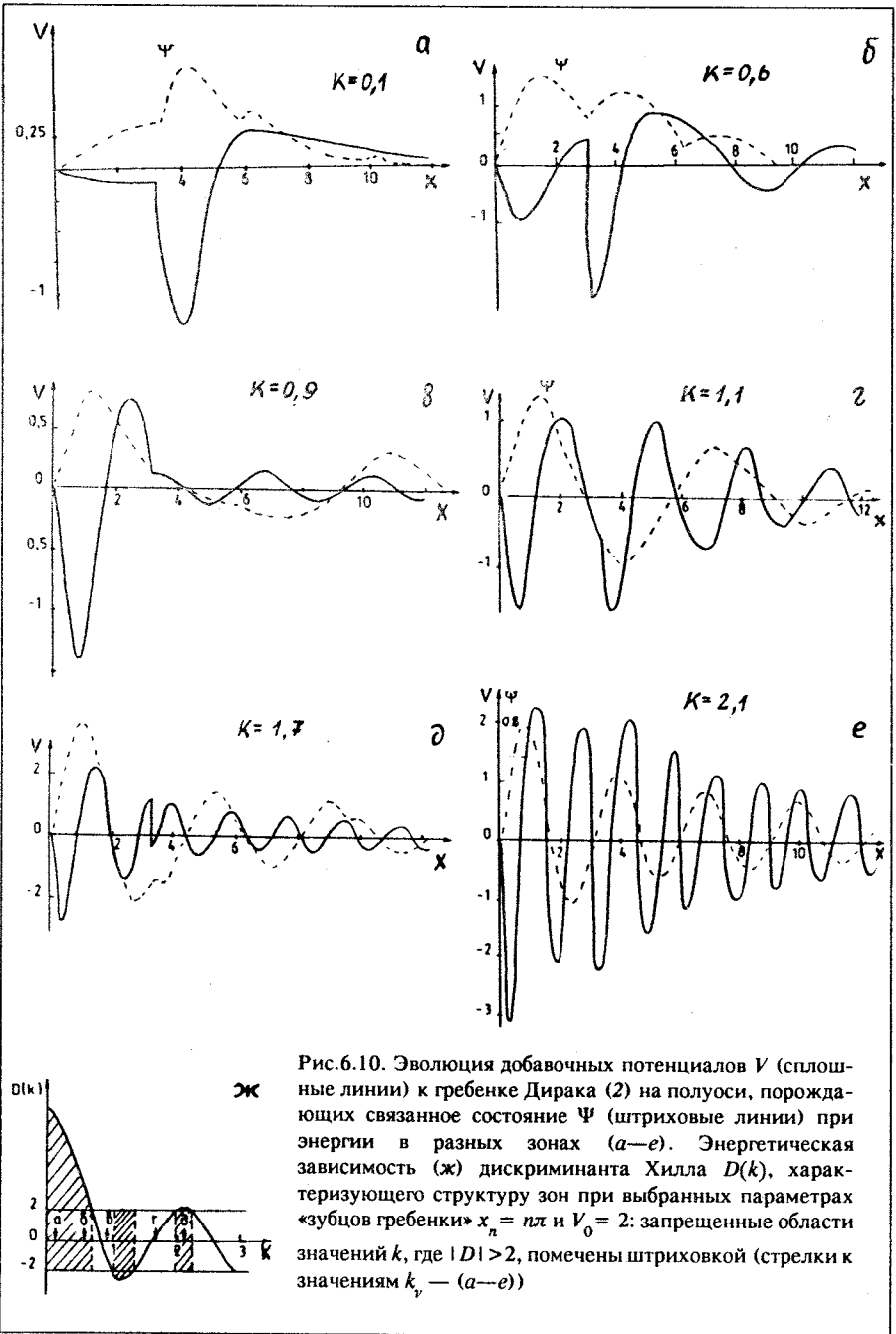


Рис.6.9. «Симметризованные» потенциалы и функции, построенные из потенциалов рис.6.2. Благодаря этой симметризации ни один из уровней исходной прямоугольной ямы не попадает внутрь лагун периодически продолженных потенциалов



зон и меняя асимметрию производных  $\gamma$ , соответствующих состояний).

Можно пришить к потенциалу, изображенному на рис.6.2, его отражение относительно крайней правой точки, чтобы получился симметричный потенциал. Соответственно антисимметричным будет и решение (с изменением знака правой части). При периодическом повторении такого симметризованного потенциала решение уже не будет возрастать. Правда, расчеты [74] показали, что выше этого уровня происходит значительный разрыв непрерывного спектра, что связано с большей чувствительностью к возмущениям функций широкой ямы.

**Имплантиция связанных состояний** (в разрешенные и запрещенные зоны систем с периодическим полем). Техника обратной задачи позволяет строить явный вид потенциальных возмущений для создания связанных состояний при любой энергии, например, погруженных в непрерывный спектр [20]. Аналогично можно добавлять и к периодическому потенциалу такие возмущения, чтобы в любой зоне непрерывного спектра или любой лакуне возникало связанное состояние [87, 21].

Приведем простейший вид такого добавочного потенциала к гребенке Дирака (6.1) с  $x_n = n\pi$  на полуоси  $x \geq 0$ , порождающего связанное состояние при  $k = k_v$  (рис.6.10):

$$V(x) = 4\delta\gamma^2 k_v A_i^2 \cos(k_v x + \delta_i) \sin(k_v x + \delta_i) / p_i + 2\delta\gamma^2 \frac{1}{k^4} A_i^4 \sin^4(k_v x + \delta_i) / p_i^{-2}, \quad (6.6)$$

где  $A_i, \delta_i, p_i$  — амплитуды и фазовые сдвиги при  $k = k_v$  на  $i$ -м участке (где находится выбранное значение  $x$ ) гребенки Дирака, а

$$p_i(x) = 1 + \delta\gamma^2 \frac{1}{k_v^2} \left[ \sum_{s=1}^{i-1} A_s^2 \int_{\pi(s-1)}^{\pi s} \sin^2(k_v t + \delta_s) dt + A_i^2 \int_{\pi(i-1)}^x \sin^2(k_v t + \delta_i) dt \right].$$

Соответствующая аналитическая формула для функции связанного состояния (штриховые линии на рис.6.10):

$$\Psi(k_v, x) = A_i \sin(k_v x + \delta_i) / p_i(x). \quad (6.7)$$

Таким образом, точно решаемая модель (6.6), (6.7) позволяет просто проследить за эволюцией имплантируемого связанного состояния (рис.6.10) при «протаскивании» его из нижней запрещенной зоны сквозь зоны проводимости и лакуны, а также за соответствующей деформацией дополнительного потенциала. Только для состояния, расположенного глубоко в нижней запрещенной зоне (рис.6.10,а), заметно сильное затухание потенциала и волновой функции связанного состояния. В бо-

лее высоких запрещенных зонах (см. рис.6.10,ж, где запрещенные зоны помечены штриховкой) модуль функции  $D(E)$  не намного превышает критическое значение 2 (рис. 6.10,е), и «экспоненциальное» подавление хвостов  $\Psi$  и  $V_{\alpha\beta}$  слабо выражено.

Принципиальная возможность сконструировать желаемую зонную структуру периодических систем, продемонстрированная здесь, требует, правда, для эффективной реализации накопления большого опыта «спектральной инженерии». Было бы желательно распространить технику разрыва непрерывного спектра и имплантации связанных состояний на многоканальные, многомерные системы и дискретные решетки.

Написать этот обзор мне помогли дискуссии с И.В.Амирхановым, А.М.Горбатовым и его учениками, В.А.Загребновым, сверхтерпеливым собеседником Л.Г. Заставенко, В.И.Иноземцевым, А.Л.Куземским, В.К.Лукьяновым, Л.А.Маловым, М.М.Маламудом, В.Б.Приезжевым, С.И.Сердюковой, Н.П.Юдиным, В.И.Юкаловым. Прекрасно работать в такой большой лаборатории, как ЛТФ, где столько квалифицированных теоретиков практически по всем разделам физики, где многочисленные кабинеты коллег можно сравнить с ячейками сот, заполненных медом научного опыта, которым я многократно лакомялся.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ПОЛНОТА И ОРТОНОРМИРОВКА ФУНКЦИЙ БЕССЕЛЯ $J_n(z)$ ПО ДИСКРЕТНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ $n$ [24]

Легко проверить, что условиям и ортонормировки, и полноты

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=+\infty} \Psi_m(\alpha) \Psi_n(\alpha) = \delta_{nm}, \quad \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \Psi_n(\alpha) \Psi_n(\alpha') = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (\text{П1.1})$$

можно придать одинаковую форму:

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=+\infty} J_{\alpha+m}(z) J_{\alpha}(z) = \delta_{m0}. \quad (\text{П1.2})$$

Действительно, производя замену  $\Psi \rightarrow J$  и переменных суммирования, мы получаем

$$\sum_{\alpha'=-\infty}^{\alpha'=+\infty} J_{\alpha'+m} J_{\alpha'+n} = \delta_{nm} \rightarrow \sum_{\alpha'=-\infty}^{\alpha'=+\infty} J_{\alpha'+m-n} J_{\alpha'} \rightarrow \sum_{\alpha'=-\infty}^{\alpha'=+\infty} J_{\alpha'+p} J_{\alpha'} = \delta_{p0},$$

что совпадает с (П1.2), и аналогично

$$\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} J_{\alpha+n} J_{\alpha'+n} = \delta_{\alpha\alpha'} \rightarrow \sum_{\beta=-\infty}^{\beta=+\infty} J_{\beta} J_{\beta+\alpha-\alpha'} \rightarrow \sum_{\beta=-\infty}^{\beta=+\infty} J_{\beta} J_{\beta+p} = \delta_{p0}.$$

Теперь получим условие ортогональности. Согласно рекуррентному соотношению (2.1) имеем

$$J_{\alpha+m+1}(z) + J_{\alpha+m-1}(z) = \{2(\alpha + m)/z\} J_{\alpha+m}(z), \quad (\text{П1.3})$$

$$J_{\alpha+n+1}(z) + J_{\alpha+n-1}(z) = \{2(\alpha + n)/z\} J_{\alpha+n}(z). \quad (\text{П1.4})$$

Умножая (П1.3) на  $J_{\alpha+n}(z)$ , а (П1.4) на  $J_{\alpha+m}(z)$  и суммируя их по всем  $\alpha$ , мы получим такое же выражение в правой части. Вычитая из одного полученного уравнения другое, имеем

$$\{2(m - n)/z\} \sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=+\infty} J_{\alpha+n}(z) J_{\alpha+m}(z) = 0. \quad (\text{П1.5})$$

Это дает при  $m \neq n$  условие ортогональности. Из хорошо известного представления

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(iz \sin \phi + in\phi) d\phi$$

получаем условие нормировки (используя  $\sum_n \exp(in\phi) = \delta(\phi)$ ):

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\alpha=+\infty} |J_n(z)|^2 = 1.$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2. СВЯЗЬ ПРИВЕДЕННЫХ ШИРИН С R-МАТРИЧНЫМИ РЕЗОНАНСАМИ (МНОГОКАНАЛЬНОЕ ОБОБЩЕНИЕ ТЕОРЕМЫ О ДВУХ СПЕКТРАХ)

В стандартной постановке одноканальной обратной спектральной задачи потенциал однозначно определяется двойным набором параметров: положениями уровней энергии  $E_\lambda$  ( $R$ -матричных резонансов) и нормировочных констант  $\gamma_\lambda$  (амплитудами приведенных ширин). Для потенциальной ямы с формой, симметричной относительно ее центра, достаточно задать лишь  $\{E_\lambda\}$  [20]. Б.М. Левитаном и М.Г. Гасымовым [32] было показано, что в общем одноканальном случае двойному набору  $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$  эквивалентны наборы двух спектров  $\{E_\lambda, E_\mu\}$ , отвечающих двум

независимым способам задания однородных граничных условий задачи Штурма — Лиувилля (теорема о двух спектрах).

Особенно прозрачно теорема о двух спектрах доказывается (следуя В.Н. Мельникову, см. [20] с. 41—43) в случае конечно-разностных уравнений. Ниже это доказательство обобщается на случай  $M$  связанных обыкновенных дифференциальных уравнений Шредингера.

**Конечно-разностная многоканальная задача [17].** Рассмотрим систему  $M$  связанных конечно-разностных одномерных уравнений Шредингера ( $\hbar = 2m = 1$ ):

$$-\frac{\Psi_{\alpha}(n+1) - 2\Psi_{\alpha}(n) + \Psi_{\alpha}(n-1)}{\Delta^2} + \sum_{\beta} V_{\alpha\beta}(n) \Psi_{\beta}(n) = E_{\alpha} \Psi_{\alpha}(n), \quad (\text{П2.1})$$

где  $\Delta$  — шаг конечно-разностного дифференцирования,  $E_{\alpha} = E - \varepsilon_{\alpha}$ ,  $\varepsilon_{\alpha}$  — энергии порогов возбуждения непрерывного спектра в каналах  $\alpha$ .

Однородным граничным условиям

$$\Psi_{\alpha}(0) = 0, \quad \Psi_{\alpha}(N+1) = \Psi_{\alpha}(N+2) \quad (\text{П2.2})$$

отвечают собственные значения  $E = E_{\lambda}$  задачи Штурма — Лиувилля (П2.1), (П2.2). Этих собственных значений конечное число  $(N+1)M$ , равно числу неизвестных в уравнении (П2.1) с учетом условий (П2.2). Обозначим  $u_{\lambda\alpha}(n)$  компоненты соответствующих собственных вектор-функций, удовлетворяющие условиям ортонормировки и полноты:

$$\sum_{\alpha=1}^M \sum_{n=1}^{N+1} u_{\lambda\alpha}(n) u_{\lambda'\alpha}(n) \Delta = -\delta_{\lambda\lambda'}, \quad (\text{П2.3})$$

$$\sum_{\lambda=1}^{(N+1)M} u_{\lambda\alpha}(n) u_{\lambda\alpha}(m) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{nm} / \Delta. \quad (\text{П2.4})$$

Функция Грина  $G(n, m)$  для уравнения (П2.1):

$$-\frac{G_{\alpha\alpha'}(n+1, m) - 2G_{\alpha\alpha'}(n, m) + G_{\alpha\alpha'}(n-1, m)}{\Delta^2} + \sum_{\beta=1}^M V_{\alpha\beta}(n) G_{\beta\alpha'}(n, m) - E_{\alpha} G_{\alpha\alpha'}(n, m) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{nm} / \Delta \quad (\text{П2.5})$$

может быть найдена двумя способами. Заменим в правой части уравнения (П2.5) произведение символов Кронекера с помощью соотношения полноты (П2.4) и воспользуемся тем, что оператор  $\hat{H}$  в левой части (П2.1) имеет собственные вектор-функции с компонентами  $u_{\lambda\alpha}$ . Разделим обе части (П2.5) на  $(\hat{H} + \hat{\varepsilon} - \hat{E}I)$ , где  $\hat{\varepsilon}$  — диагональная матрица с элементами  $\varepsilon_{\alpha}$ , и получим

$$G_{\alpha\alpha'}(n, m) = \sum_{\lambda} \frac{u_{\lambda\alpha}(n) u_{\lambda\alpha'}(m)}{E_{\lambda} - E}, \quad (\text{П2.6})$$

поскольку действие функции от оператора  $f(\hat{H})$  на его собственные функции  $u_{\lambda}$  эквивалентно умножению на  $f(E_{\lambda})$ , а пороговые константы  $\varepsilon_{\alpha}$ , одинаковые для всех уровней энергии  $E_{\lambda}$ , сокращаются.

При  $n = m = N + 1$  выражение (П2.6) переходит в  $R$ -матрицу многоканальной системы (П2.1), (П2.2) с положениями  $E_{\lambda}$   $R$ -матричных резонансов и амплитудами приведенных ширин  $\gamma_{\lambda\alpha} = u_{\lambda\alpha}$ .

Другой способ решения системы (П2.5) — применить формулу Крамера (будем полагать  $m = N + 1$ ):

$$G_{\alpha\alpha'}(n, N + 1) = A_{\alpha\alpha'}(E)/D(E), \quad (\text{П2.7})$$

где  $D$  — детерминант системы (П2.1, 2):

$$D(E) = \prod_{\lambda=1}^{M(N+1)} (E - E_{\lambda}), \quad (\text{П2.8})$$

а  $A_{\alpha\alpha'}$  — детерминанты, отличающиеся от  $D$  заменой  $\alpha$ -го столбца соответствующей матрицы на вектор-столбец, отвечающий правой части системы (П2.5) с  $m = N + 1$  и фиксированным  $\alpha'$ . Благодаря тому, что в этом столбце отличен от нуля лишь один элемент, детерминант  $A_{\alpha\alpha'}$  совпадает с соответствующим алгебраическим дополнением матрицы коэффициентов системы уравнений (П2.1), (П2.2), а при  $\alpha = \alpha'$  — с детерминантами матриц коэффициентов  $M$  других задач на собственные значения: системы (П2.1) с граничными условиями, несколько модифицированными по сравнению с (П2.2):

$$\Psi_{\alpha}(0) = 0, \quad \Psi_{\alpha}(N + 1) = (1 - \delta_{\alpha\alpha'}) \Psi_{\alpha}(N + 2). \quad (\text{П2.9})$$

Обозначим собственные значения задач (П2.1), (П2.9) как  $E_{\mu}^{\alpha'}$ , а соответствующие детерминанты матрицы коэффициентов выражаются через них:

$$A_{\alpha\alpha'}\Delta = \prod_{\mu=1}^{M(N+1)-1} (E - E_{\mu}^{\alpha'}). \quad (\text{П2.10})$$

Спектральные наборы (всего  $M + 1$  наборов):  $\{E_{\lambda}\}$ ,  $\{E_{\mu}^{\alpha}\}$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, M$ , будут использованы для построения компонент нормировочных векторов  $\gamma_{\lambda\alpha}$ .

В частном случае, когда уравнения в системе (П2.1) расцепляются на независимые уравнения Шредингера, детерминант  $D(E)$  распадается на произведение парциальных детерминантов  $D_\alpha(E)$  для отдельных уравнений, и аналогично факторизуются детерминанты  $A_{\alpha\alpha}(E)$ :

$$D(E) = \prod_{\alpha}^M D_{\alpha}(E), \quad (\text{П2.8}')$$

$$A_{\alpha\alpha}(E)\Delta = D_{\alpha}(E) \prod'_{\beta \neq \alpha} D_{\beta}(E), \quad (\text{П2.10}')$$

где парциальный детерминант  $D_{\alpha}(E)$  отвечает  $N$  собственным значениям  $\alpha$ -го уравнения (канала со специальным граничным условием  $\Psi_{\alpha}(0) = \Psi_{\alpha}(N+1) = 0$ ). Спектр системы (П2.1) при расцеплении ее уравнений распадается на сумму  $M$  независимых спектров отдельных уравнений. Выражение (П2.7) для функции Грина при  $n = N+1$  с учетом (П2.8) и (П2.10) имеет вид отношения полиномов по  $E$ , которое может быть представлено в виде суммы (см. формулу (1.7.4) в кн.: Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1974):

$$G_{\alpha\alpha}(N+1, N+1) = \sum_{\lambda}^{k_{\lambda}} \sum_{j=1}^{b_{\lambda j}^{\alpha}} \frac{1}{(E - E_{\lambda})^j}, \quad (\text{П2.11})$$

где  $k_{\lambda}$  — кратность собственных значений  $E_{\lambda}$  ( $k_{\lambda} \leq M$ ). При отсутствии вырождений собственных значений  $E_{\lambda}$  коэффициенты  $b_{\lambda j}$  имеют вид

$$b_{\lambda 1}^{\alpha} = A_{\alpha\alpha}(E_{\lambda})/D'(E)|_{E=E_{\lambda}}. \quad (\text{П2.12})$$

Сравнивая (П2.11) и (П2.6) при  $\alpha = \alpha'$  и  $n = m = N+1$ , получаем

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda\alpha}^2 &= A_{\alpha\alpha}(E_{\lambda})/D'(E)|_{E=E_{\lambda}} = \\ &= \frac{1}{\Delta} \prod_{\mu=1}^{M(N+1)-1} (E_{\mu} - E_{\mu}^{\alpha}) / \prod'_{\nu=1}^{M(N+1)} (E_{\lambda} - E_{\nu}), \end{aligned} \quad (\text{П2.13})$$

то есть квадраты компонент вектора нормировок выражаются через собственные значения  $M+1$  спектральных наборов задач (П2.1), (П2.2) и (П2.1), (П2.9). Относительные знаки компонент  $\gamma_{\lambda\alpha}$ ,  $\gamma_{\lambda\beta \neq \alpha}$  должны быть определены отдельно (общий знак вектора нормировок не важен).

В пределе несвязанных уравнений — расцепленных каналов с диагональной матрицей взаимодействия — должно быть  $2M$ , а не  $M+1$  спектров — по два на каждое из  $M$  отдельных уравнений (по теореме о двух спектрах). Казалось бы, получается противоречие. Но при счете спектров



нужно учитывать разницу спектров системы уравнений и отдельного уравнения (спектр расцепленной системы представляет собой сумму  $M$  независимых одноканальных спектров) и не считать спектры для одного и того же канала дважды.

В случае, когда система (П2.1) распадается на независимые уравнения, формула (П2.14) переходит в обычную связь каждой парциальной нормировки с двумя спектрами соответствующего уравнения, а множители в числителе и знаменателе (П2.13), относящиеся к другим уравнениям, сокращаются. При этом  $M + 1$  спектров общей системы уравнений (П2.1) эквивалентны  $2M$  парциальным спектрам расцепленных уравнений с независимыми граничными условиями, отвечающими (П2.2), (П2.9).

**Предел непрерывной пространственной переменной.** Естественно ожидать, что в пределе  $\Delta \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \infty$  формула (П2.13) будет верна для обычного уравнения Шредингера с непрерывной переменной:

$$\gamma_{\lambda\alpha}^2 = A_{\alpha\alpha}(E_\lambda)/D'(E)|_{E=E_\lambda} = \frac{1}{\Delta}(E_\lambda - E_\lambda^\alpha) \prod'_\mu (E_\mu - E_\mu^\alpha)/(E_\lambda - E_\mu). \quad (\text{П2.14})$$

В случае вырождения собственных значений  $E_\lambda$  коэффициенты  $b_{\lambda j}^\alpha$  следует находить последовательно из соотношений  $[\phi_\lambda(E) \equiv D(E)/(E - E_\lambda)]$ :

$$\begin{aligned} \Delta A_{\alpha\alpha}(E_\lambda) &= b_{\lambda k_\lambda} \phi_\lambda(E_\lambda), \\ \Delta A'_{\alpha\alpha}(E_\lambda) &= b_{\lambda k_\lambda} \phi'_\lambda(E_\lambda) + b_{\lambda k_\lambda - 1} \phi_\lambda(E_\lambda), \\ &\dots\dots\dots \\ \Delta A_{\alpha\alpha}^{(k-1)}(E_\lambda) &= b_{\lambda k_\lambda} \phi_\lambda^{(k_\lambda - 1)}(E_\lambda) + k_\lambda b_{\lambda k_\lambda - 1} \phi_\lambda^{(k_\lambda - 2)}(E_\lambda) + \dots + k_\lambda! b_{\lambda 1} \phi_\lambda(E_\lambda). \end{aligned} \quad (\text{П2.15})$$

### ПРИЛОЖЕНИЕ 3. СДВИГИ БЕСКОНЕЧНОГО ЧИСЛА УРОВНЕЙ

Поставим полупрозрачную потенциальную  $\delta$ -стенку  $V(x) = V_0 \delta(x - \pi/2)$  в центре ( $x = \pi/2$ ) бесконечной прямоугольной ямы. Все четные уровни оказываются нечувствительными к такому возмущению потенциала, так как узлы собственных функций расположены в центре ямы. Все нечетные уровни сдвинутся вверх. Нечетные собственные функции приобретут излом на месте  $\delta$ -барьера. С ростом  $V_0$   $\delta$ -стенка становится более непроницаемой и нечетные уровни будут все теснее

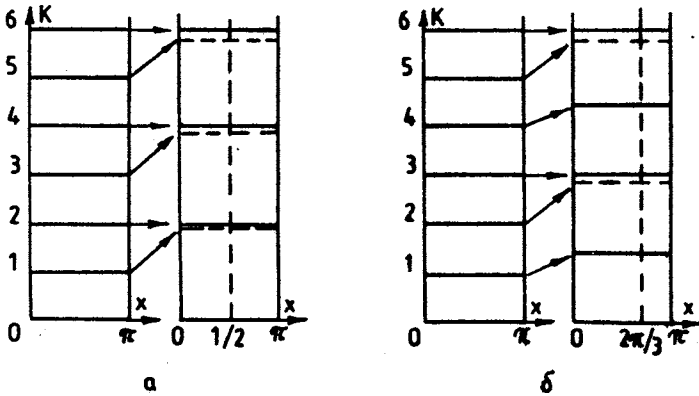


Рис.13. Подъем уровней прямоугольной ямы шириной  $\pi$  с уменьшением проницаемости  $\delta$ -перегородки: а) в центре ямы и б) в точке  $2\pi/3$ . По оси ординат отложен волновой вектор  $k = E^{1/2}$

сближаться со своими неподвижными соседями сверху (расстояние между сближающимися уровнями меньше для нижних уровней). В пределе непроницаемой стенки, естественно, будет полное двукратное вырождение всех уровней. Все сказанное верно, конечно, и для любой бесконечной ямы, симметричной относительно своего центра (см. рис.13).

Если же  $\delta$ -барьер расположить на расстоянии  $1/3$  ширины ямы от одной из ее стенок, то нечувствительными к нему будут все уровни, кратные трем, где расположены узлы их собственных функций. С ростом  $V_0$  все уровни  $3n - 1$  и  $3n - 2$  будут подниматься к неподвижным уровням  $3n$ . При этом в узкой части ямы собственные функции поднимающихся уровней будут испытывать самогашение (у функций  $3n - 2$  с ростом  $V_0$  убывание амплитуды монотонное до полного исчезновения в области  $2/3\pi < x < \pi$ , а у функции  $3n - 1$  перед слиянием с верхним соседом сформируется стоячая волна той же амплитуды, что и в широкой части ямы). В пределе непроницаемой стенки уровни  $3n - 1$  сольются с уровнями  $3n$  (для которых  $E_{3n} = 9n^2$ , собственные функции  $3n$  и  $3n - 1$  будут отличаться только знаком в узкой части ямы), а уровни  $3n - 2$  станут уровнями ямы шириной  $2/3\pi$  ( $E = 3/2\pi$ ). Вообще, при  $\delta$ -барьере в точке  $x = (m - 1)\pi/m$  на месте остаются уровни, кратные  $m$ , а уровни, лежащие между ними, поднимаются по направлению к ним.

Если вместо отталкивающей  $\delta$ -перегородки ввести притягивающую (сменив ее знак), то, как и прежде, уровни, функции которых имеют уз-

лы в точке расположения  $\delta$ -потенциала, остаются невозмущенными. Остальные опустятся к своим неподвижным соседям снизу. Основное состояние может опуститься ниже дна исходной прямоугольной ямы в  $\delta$ -яму.

Восстановление потенциала « $2n$ -кратной» ямы по части уровней  $E_\nu$  с номерами  $\nu = nr$  (где  $r = 1, 2, 3$ ). Известно, что для восстановления потенциала бесконечной симметричной ямы достаточно половины спектральных данных — только положений уровней  $E_\lambda$  без нормировочных констант  $\gamma_\lambda$ . Это связано с тем, что достаточно восстановить одну половинку потенциала, а другую построить симметрично. Для этой половинки спектр  $E_\lambda$  всей ямы является комбинацией двух спектров  $E_\nu$ ,  $E_\mu$  задач с разными краевыми условиями на ее концах (в центре  $x = 0$  целой ямы:  $\Psi_\nu(0) = 0$  и  $\Psi'_\mu(0) = 0$ ). А по теореме о двух спектрах набор  $\{E_\nu, E_\mu\}$  эквивалентен стандартному набору исходных данных  $\{E_\nu, \gamma_\nu\}$  для восстановления половинки потенциала. Аналогичные рассуждения показывают, что бесконечная потенциальная яма, дно которой составлено из  $2n$  одинаковых потенциальных профилей, восстанавливается по  $(1/n)$ -й части всех уровней. Действительно, избранные уровни  $E_\nu$  с  $\nu = nr$ , где  $r = 1, 2, 3, \dots$ , представляют собой два спектра для  $(1/2n)$ -й элементарной составляющей всей ямы (с краевыми условиями: общим на одном краю ( $x = x_1$ )  $\Psi(x_1) = 0$  и разными на другом ( $x = x_2$ )  $\Psi(x_2) = 0$  и  $\Psi'(x_2) = 0$ ), восстановив которую, мы узнаем и весь потенциал.

#### ПРИЛОЖЕНИЕ 4. ОЦЕНКИ ШИРИН РЕЗОНАНСОВ В ПОДХОДЕ С ЧИСТО ДИСКРЕТНЫМ СПЕКТРОМ

Идея предлагаемого метода возникла у автора в дискуссиях с А.М.Горбатовым, В.П.Комаровым, П.Ю.Никишовым и В.Л.Скопичем (см. кандидатские диссертации трех последних, статьи в журнале ЯФ [11] и сборниках трудов Тверского университета и ссылки в них). Рассмотрим простейшую модельную систему с квазистабильными состояниями: движение волн на полуоси  $0 < r < \infty$  с  $\delta$ -барьером в точке  $x = \pi$  (можно представить себе, что в начале координат имеется непроницаемая стенка). Если бы  $\delta$ -барьер был непроницаем ( $V_0 = \infty$ ), между барьером и стенкой были бы стационарные состояния, как в бесконечной прямоугольной яме. При конечных значениях  $V_0$  эти уровни превращаются в квазистационарные состояния (они спускаются по энергии по сравнению

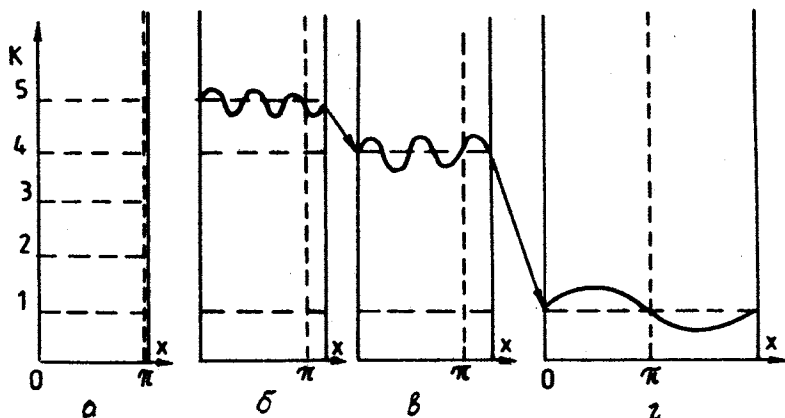


Рис.П4. Опускание уровня, отвечающего стоячей волне в расширяющейся правой части ямы (за  $\delta$ -перегородкой в точке  $\pi$ ), где решение  $\Psi(x > \pi) = A_2 \sin[kx + \delta_2(k)]$ ;  $\Psi(a) = 0$ , с  $\delta_2$ , совпадающим с фазовым сдвигом рассеяния на  $\delta$ -перегородке при соответствующей энергии. (Из условия  $\Psi(a) = 0 \rightarrow ka + \delta = n\pi \rightarrow \delta = n\pi - ka$ .) Показаны лишь случаи совпадений уровней расширенной ямы с уровнями исходной ямы. В промежуточных положениях (вдали от резонансов, расположенных чуть ниже уровней исходной ямы) волновая функция опускающегося уровня подавляется в левой стороне ямы. В точках резонансов амплитуда функции слева от перегородки резко возрастает относительно амплитуды функции справа. Форма  $\delta_2(k)$  совпадает с формой  $\delta(k)$ , показанной на рис.5.3,а

со стационарными состояниями рис. 5.2,а в зависимости от силы  $V_0$ . Наша цель — определить (показать, как определить) ширины этих состояний, решая не задачу рассеяния, а задачу на собственные значения для системы с чисто дискретным спектром, когда справа от  $\delta$ -барьера имеется вторая бесконечная непроницаемая стенка (см. рис.П4).

Проследим, что происходит с уровнями системы при движении правой стенки вправо от точки положения  $\delta$ -барьера. При слиянии правой стенки с барьером уровни системы совпадают с уровнями прямоугольной ямы. В предыдущем разделе мы двигали  $\delta$ -барьер, а теперь будем при фиксированном его положении непрерывно двигать правую стенку ямы. Собственная функция в правой части ямы пропорциональна функции свободного движения при данной энергии: наличие бесконечной стенки не искажает ее, если стенка располагается в узле функции. При расширении правой части ямы опускаются уровни, отвечающие стоячим

волнам в ней. Таким образом, при движении стенки вправо от  $\delta$ -барьера происходит как бы «прощупывание» (сканирование) внутренней части ямы волной из внешней части ямы с непрерывным изменением  $E$  от  $\infty$  до 0. Фаза рассеяния, например, определяется простой формулой по значению волнового числа  $k(a)$ ,  $n$ -го уровня, отвечающего данному положению  $x = a$  правой стенки:  $\delta(k) \equiv \delta(k, a) = \pi l - ka$  (она показана на рис.П4.).

## ЛИТЕРАТУРНЫЕ КОММЕНТАРИИ

Здесь мы перечислим наиболее интересные, по мнению автора, работы (как правило, новейшие), имеющие отношение к теме данного обзора.

Две группы сотрудников Новосибирского (О.А.Ткаченко, Г.Л.Коткин, В.А.Ткаченко, В.Г.Тупицин и др., см. [45] и ссылки там) и Московского (НИИЯФ: А.М.Попов, Е.А.Волкова, А.Т.Рахимов [9]) университетов в течение последних лет занимаются разработкой компьютерного моделирования по квантовой механике (имеют дискеты с иллюстративными материалами типа квантовых картинок Брандта и Дамена [60] и распространяют их, правда, к сожалению, очень дорого).

Л.Г.Заставенко [15] указал на класс потенциалов, убывающих на бесконечности как  $\sim 1/r$  (задаваемых, правда, в виде ряда, а не замкнутого выражения), со связанными состояниями в континууме, убывающими более быстро, что существенно расширяет известные модели.

Первое упоминание о функциях Бесселя как решениях конечно-разностного уравнения Шредингера появилось в [80,68]. Аналитические решения для осцилляторного потенциала на решетке дискретной переменной [77,64] и для «дискретного кулоновского потенциала» [69] появились до работ [21,22,24], но без вывода об общих правилах качественного предсказания спектральных свойств произвольных дискретных квантовых систем. Ссылки на литературу по теории и экспериментальным наблюдениям дискретного спектра (резонансов) суперрешеток в однородном внешнем поле («наклоненный полосатый спектр») см. в [88].

Хеллер и Ямани [72], Ю.Ф.Смирнов, Г.Ф.Филиппов и др. (см. [47] и ссылки там) рассматривали дискретное представление волновых функций, но, в отличие от этого обзора, шаг решетки используемой ими дискретной переменной асимптотически сгущается, а ширина разрешенной зоны неограниченно возрастает. При этом, правда, устанавливается более тесное соответствие непрерывных пространственных и дискретных базисных переменных, которое позволяет просто сформулировать граничные условия рассеяния (имеется много приложений [47] к много-

частичным ядерным задачам). В этом подходе еще не ставился интересный вопрос об ограничениях, накладываемых сужением разрешенных зон на малых расстояниях.

Согласно обычной теореме Левинсона (см. [20], гл.4 и обзор [6]) несингулярные потенциалы с разным числом связанных состояний не могут давать одинаковые фазы рассеяния при всех энергиях. По обобщенной же теореме Левинсона для потенциалов с сингулярностью  $r^{-2}$  это возможно (см. рисунки в [56]).

В работе Верхана [89] показано, что точно решаемые потенциалы локально ведут себя как осцилляторные или пешль-теллеровские.

Д.И.Абрамов [53] предложил новый тип обратной задачи, напоминающий метод фазовых функций. Рассматривается континуум вспомогательных потенциалов, получаемых из искомого обрезанием хвоста в точке  $r$ , где воздвигается бесконечная стенка. Уровни  $E_\lambda(r)$  этих ям подчиняются системе нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка, к решению задачи Коши для которых и сводится обратная задача.

Еще один тип обратной спектральной задачи с неразделенными граничными условиями на концах конечного отрезка рассмотрела О.А.Плаксына [39].

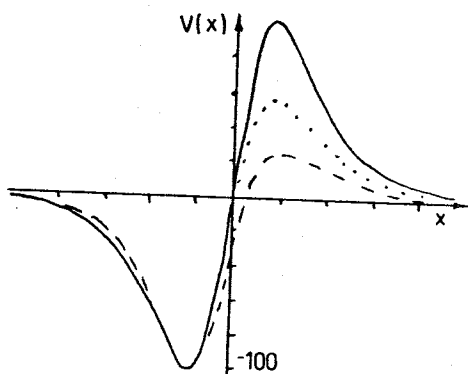
Диссертация Вилмса [90] посвящена исследованиям по матричной спектральной обратной задаче (разностные уравнения высшего порядка); а И.Дж. Марданов [35] рассмотрел разложение разностного оператора второго порядка на множители.

Фридланд [67] рассмотрел вопрос о существовании решений аддитивной и мультипликативной обратных задач на собственные значения: какую диагональную матрицу  $D$  нужно прибавить или на какую  $D$  нужно умножить исходную матрицу  $A$ , чтобы спектр матриц  $A + D$  или  $AD$  был заданным:  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ . Алгоритмы построения  $D$  создают возможность произвольно двигать уровни энергии соответствующих систем.

Хальд и Мак-Лафлин [79] рассматривали обратную задачу, где в качестве входных спектральных данных служат положения узлов собственных функций. Расстояние между узлами является квазилокальной информацией о потенциале (одна из особенностей этого подхода — в отличие от входных данных рассеяния и спектральных данных, несущих лишь «глобальную» информацию). Точные решения получаются для кусочно-постоянных потенциалов.

Условия существования решения обратной задачи для уравнения 4-го порядка были рассмотрены Барсилоном [55].

Рис.ЛК. Потенциальные ямы с барьером, допускающие точные решения уравнения Шредингера [90]



Ссылки на обобщенные уравнения движения высшего порядка для классической механики см. в работе Борнеас (1988) [59]. О законах сохранения для уравнений высшего порядка (инварианты Пуанкаре — Картана) говорится в книге Арнольда [2].

Зависящие от орбитального момента локальные потенциалы, эквивалентные нелокальным потенциалам, рассматривались в [76].

В.Г.Багров и др. [3] построили методом «одевания» класс новых потенциалов, зависящих от времени и допускающих точные решения уравнения Шредингера (с нелокальными операторами симметрии).

В новой книге Кима и Ноза [73] рассматриваются квантовые системы в представлении (Вигнера) фазового пространства, а Балаш и Вереш [54] применили это представление для туннелирования.

Теорема Левинсона для фазы Берри обсуждается в работе [81].

Класс точно решаемых моделей с потенциалами типа изображенных на рис.ЛК с ямой, в которой могут быть связанные состояния, и барьером был найден Петшем [83].

Задача трех тел на решетке рассматривалась Ю.А.Купериним и Б.С.Павловым в [75].

Г.М.Хенкин и др. [49] предложили метод приближенного решения обратной задачи с помощью паде-аппроксимаций.

Рассеяние блоховских волн на кристаллических дефектах рассмотрел Р.Ньютон [82], а обратную задачу для полубесконечного периодического потенциала на полуоси с потенциальной ступенькой исследовал Робертс [85].

В общем случае периодического комплекснозначного потенциала спектр [38] располагается на аналитических дугах, играющих роль разрешенных зон (отрезков вещественной оси  $E$ ).

М.Ю.Сумецкий [44] предложил квазиклассический подход к оценке резонансного туннелирования в сложных, не сводимых к одномерным структурах.

В книге В.В.Смелова [42] показано, как улучшаются аппроксимирующие свойства собственных функций операторов Штурма —

Лиувилля на отрезке  $[a, b]$ , если область определения разлагаемых по ним функций уже этого отрезка или если при совпадении области определения с  $[a, b]$  разложение ведется сразу по собственным функциям двух задач Штурма — Лиувилля (с разными граничными условиями).

В новой книге Икрамова [28] хорошо изложена проблема собственных значений для матриц с нарушенной симметрией.

Данный обзор войдет в книгу «Уроки квантовой интуиции», а ее электронный вариант (LATEX) будет готов для копирования на дискеты в конце 1992 г.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альбеверлио С., Гестези Ф., Хеэг-Крон Р., Хольден Х. — Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.
2. Арнольд В.И. — Математические методы классической механики. М: Наука, 1989.
3. Багров В.Г., Шаповалов А.В., Широков И.В. — ТМФ, 1991, т.87, N3, с.426; Изв.вуз. (физ.) 1991, N4, с.95.
4. Бриллюэн Л., Пароди М. — Распространение волн в периодических структурах. М.: ИЛ, 1959, с.90.
5. Белокопос Е.Д. — ТМФ, 1980, т.45, N2, с.268; УМН 1986, т.41, вып 2,3.
6. Береги П., Захарьев Б.Н., Ниязгулов С.А. — ЭЧАЯ, 1973, т.4, с.512.
7. Браун П.А. — Введение в теорию молекулярных спектров Л.: Изд. ЛГУ, 1983; см. также Браун Р.А., Широков А.М., Smirnov Yu.F. — Molec.Phys. 1985, vol.56, p.573.
8. Вайтман А. — Проблемы в релятивистской динамике квантованных полей. М.: Физматгиз, 1968, с.116—122.
9. Волкова Е.А., Попов А.М., Рахимов А.Т. — Квантовая механика на персональном компьютере. М.: МГУ, 1992.
10. Горбатов А.М. и др. — ЯФ, 1989, т. 49, с.144; 1990, т. 51, с.3.
11. Демков Ю.Н., Островский В.Н. — Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд. ЛГУ, 1975.
12. Жигунов В.П., Захарьев Б.Н. — Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. М.: Атомиздат, 1974.
13. Загребаев В.И. — Межвуз сб.: Элементарные процессы при столкновении атомных и молекулярных частиц. Чебоксары: Изд. ЧГУ; Ann.Phys.1990, vol.197, p.33; ЯФ, 1989, т.49(6), с.1630.
14. Займан Дж. — Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966, с.50.
15. Заставенко Л.Г. — Краткие сообщения ОИЯИ №2[53]-92, Дубна, 1992, с.9.
16. Заставенко Л.Г., Захарьев Б.Н. — Сообщение ОИЯИ P4-91-453, Дубна, 1991.
17. Захарьев Б.Н. — Краткие сообщения ОИЯИ №6 [45]-90, Дубна, 1990.
18. Захарьев Б.Н., Плеханов Е.Б. — Препринт ОИЯИ P4-89-287, Дубна, 1989.
19. Захарьев Б.Н., Костов Н.А., Плеханов Е.Б. — ЭЧАЯ, 1990, т.21, с.914—962.
20. Захарьев Б.Н., Сузко А.А. — Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. М.: Энергоатомиздат, 1985. Переработанное изд.: Springer-Verlag, Heidelberg, 1990.
21. Захарьев Б.Н. — Препринт ОИЯИ P4-90-46, Дубна, 1990; Сообщение ОИЯИ P4-91-98, Дубна, 1991.
22. Захарьев Б.Н. — Сообщение ОИЯИ, P4-91-127, Дубна, 1991.
23. Захарьев Б.Н. — Сообщение ОИЯИ P4-91-440, Дубна, 1991.
24. Zachariev B.N., Serdjukova S.I. — JINR Preprint E4-91-237, Dubna, 1991; Phys.Rev.A, v.46, №1, p.48, 1992.



25. Захарьев Б.Н., Сердюкова С.И. — Сообщение ОИЯИ Р4-92-10, Дубна, 1992; Phys.Rev.A, 1992 (to be published).
26. Захарьев Б.Н., Нехамкин Л.И., Чабанов В.М. — Сообщение ОИЯИ Р4-92-496, Дубна, 1992.
27. Зубарев А.Л. — Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоатомиздат, 1981.
28. Икрамов Х.Д. — Несимметричная проблема собственных значений. М.: Наука, 1991.
29. Итс А.Р., Матвеев В.Б. — ТМФ, 1975, т.23, №1, с.51; Функц.анализ и прил., 1975, т.9, с.65.
30. Кричевер И.М. — Функц. анализ и прил. 1984, т.18, №3, с.43.
31. Левитан Б.М. — Обратные задачи Штурма — Лиувилля (гл.8. Конечнозонные потенциалы). М.: Наука, 1984.
32. Левитан Б.М., Гасымов М.Г. — УМН, 1964, т.19, 2, с.3.
33. Лейбензон З.Л. — Тр. Моск.мат.общ., 1966, т.15, с.70—144; ТММО, 1971, т.25, с.15—58.
34. Маламуд М.М. — ТММО, 1990, т.53, с.68.
35. Марданов И.Дж. — Доклады Азерб.АН, 1990, т.46, 2, с.3.
36. Марченко В.А. — Операторы Штурма — Лиувилля и их приложения (гл.4). Киев: Наукова думка, 1977.
37. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. — Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1984; Никифоров А.Ф., Суслов С.К., Уваров В.Б. — Классические ортогональные полиномы дискретной переменной. М.: Наука, 1985.
38. Пастур Л.А., Ткаченко В.А. — Мат. заметки, 1991, т.50, вып.4.
39. Плаксина О.Л. — Мат.сб., 1986, т.131, с.3.
40. Попушой М.Н. — Изв.АН СССР, 1989, т.53, №12, с.2460; ЯФ 1991, т.54, с.1262.
41. Сахнович Л.А. — Мат.сб., 1958, т.46., с.61; 1961, т.55, №3, с.347; 1962, т.56, №2, с.137; УМН, 1961, т.16, №5, с.199.
42. Смелов В.В. — Операторы Штурма — Лиувилля и их неклассические приложения. Новосибирск: Наука, 1992.
43. Справочник по специальным функциям (под ред. М.Абрамовица и И.Стегана). М.: Наука, 1979.
44. Сумецкий М.Ю. — Письма в ЖЭТФ, 1991, т.53, с.24; J.Phys.: Condens. Matter, 1991, vol.3, p.2651; Physica, 1991, vol.B175, p.287.
45. Ткаченко О.А. — Эффективное компьютерное моделирование в квантовой механике. Диссертация (канд.) и автореферат. Новосибирск: НГУ, 1990.
46. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. — Курс современного анализа. М.: Физматгиз, 1963, т.2, с. 269—273.
47. Филиппов Г.Ф. и др. — ЭЧАЯ, 1984, т.15, с.600; 1985, т.16, с.153; ЯФ, 1980, т.32, с.480.
48. Флюгге З. — Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974, т.1, с.78—80.
49. Хенкин Г.М., Гончар А.А., Новикова Н.Н. — Мат. сб., 1991, т.182, №8, с.1091.
50. Юкалов В.И. — Изв.вуз, радиофиз., 1975, т.18. №7, с.1039—1044; см.также ФТТ, 1973, т.15, №2, с.417; ФММ, 1973, т.36, №4, с.686.
51. Юрко В.А. — Мат.сб., 1991, т.182, №3, с.431.
52. Янке Е., Эмде Ф. — Таблицы функций с формулами и кривыми. М.: Физматгиз, 1959.
53. Abramov D.I. — Inverse Probl., 1991, vol.7, p.493.
54. Balazs N.L., Voros A. — Preprint Inst.Theor.Phys.Univ.Calif.NSF- ITP-89-149i, 1991.
55. Barcilon V. — Inverse Probl., 1987, vol.3, №2, p.181.
56. Baye D. — J.Phys., 1987, vol.A20, p.5529.
57. Boley D., Golub G.H. — Inv. Probl., 19876, vol.3, p.595—622.
58. Bordley R.F. — Phys.Lett., 1986, vol.A118, p.107.

59. Borneas M. — *Am.J.Phys.*, 1972, vol.40, №2, p.248; *Phys.Lett.*, 1988, vol.A128, p.395; *Acta Phys.Polonica*, 1963, vol.24, p.471.
60. Brandt S., Dahmen H.D. — *The Picture Book of Quantum Mechanics*. J.Wiley&Sons, NY, 1985; *Quantum Mechanics on the Personal Computer*. Springer, Heidelberg, 1990.
61. Braun P.A., Shirokov A.M., Smirnov Yu.F. — *Molec. Phys.*, 1985, vol.56, p.573.
62. Calogero F., Degasperis A. — *Lett.Nuovo Cim.*, 1978, vol.23, №4, p.143.
63. Case K.M. — *J.Math.Phys.*, 1974, vol. 15, №12, p.2166.
64. Chabband E., Gallinar J.-P, Mata G. — *J.Phys.*, 1986, vol.A19, p.L385.
65. Diver D.A., Laing E.W. — *J.Phys.*, 1990, vol.A23, p.1699-1701.
66. Floyd E.R. — *Phys.Lett.*, 1987, vol.A123, p.155; *Phys.Rev.*, 1982, vol.D26, p.1339; 1984, vol.D29, p.1842.; 1986, vol.D34, p.3246.
67. Friedland S. — *Lin.Alg.and its Appl.*, 1977, vol.17, p.15—51; *SIAM J.Numer.Anal.*, 1987, vol.24, p.634.
68. Gallinar J.-P., Mattis D.C. — *J.Phys.*, 1985, vol.A18, p.2583.
69. Gallinar J.-P. — *Phys.Lett.*, 1984, vol.103A, p.72.
70. Gladwell G.M.L., Willms N.B. — *Inv.Probl.*, 1989, vol.5, p.165—179.
71. Grosse H., Martin A. — *Nucl.Phys.*, 1979, vol.B148, p.413.
72. Heller E.J., Yamani H.A. — *Phys.Rev.*, 1974, vol.A9, №3, p.1201.
73. Kim Y.S., Noz M.E. — *Phase Space Picture of Quantum Mechanics*. Singapore: World Scien., 1991.
74. Korobov V.I., Zakhariyev B.N. — Preprint JINR E4-91-467, Dubna, 1991
75. Kuperin Yu.A., Pavlov B.S. — Proc. «Rigorous Results in Quantum Dynamics», Singapore: World Scien., 1991
76. Lassaut M., N.Vinh Mau — *Nucl. Phys.*, 1990, vol.A518, p.441.
77. Mattis D.C. — *Rev.Mod.Phys.*, 1986, vol.58, p.361.
78. McLaughlin J.R. — *SIAM Rev.*, 1986, vol.28, №1, p.53—72.
79. McLaughlin J.R. — *J.Diff.Eq.*, 1988, vol.73, №2, p.354; *Inverse Problems*, 1989, vol.5, p.307.
80. Merrifield R.E. — *J.Chem.Phys.*, 1963, vol.39, p.3540.
81. Moriconi L. — *Phys.Rev.*, 1991, vol.44, №4, p.1335.
82. Newton R.G. — *J.Math.Phys.*, 1991, vol.32, p.551.
83. Petsch D. — *J.Phys.*, 1990, vol.A23, p.4145.
84. Poschel J., Trubowitz E. — *Inverse Spectral Theory*. Acad. Press, NY, 1987.
85. Roberts T.M. — *Inverse Probl.*, 1990, vol.6, №5, p.797.
86. Rodrigues M.C.S., Rodrigues P.R. — *Am.J.Phys.*, 1970, vol.38, №5, p. 557.
87. Trlify L. — *Inverse Problems*, 1989, vol.5, №6, p.1145.
88. Voisin P. — Proc. 8-th General Conf. Europ.Phys.Soc. «Trends in Physics». Prometheus., Prague.1991, p.692.
89. Wehrhahn R.F. — Preprint DESY 91-009, 1991.
90. Willms N.B. — *Some matrix Inverse Eigenvalue Problems*. Thesis. Univ. Waterloo, Ontario, 1988.
91. Zakhariyev B.N., Zastavenko L.G. — *Phys.Rev.*, 1989, vol.A39, №11, p.5528.