

# ДВУХЦЕНТРОВЫЙ КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян, С.В. Тер-Антонян

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ, Дубна

*В 1989 году вышла статья [1] с участием Игоря Владимировича Луценко, в которой были сформулированы три точки зрения на природу двукратного вырождения энергетических уровней в одномерной квантовой механике – эффекта, открытого Лаудном в 1959 году [2]. По прошествии трех лет после статьи [1] нами было показано, что эффект Лаудона характерен и для двухцентровых одномерных задач [3]. Эта работа очень понравилась Игорю Владимировичу, и он, находясь в командировке в Дубне, помог нам отправить ее в печать. Работа вышла в качестве препринта ОИЯИ и послана в Phys. Lett. A, где была отклонена с разъяснением, что полученные в ней результаты качественно схожи с результатами, о которых западный читатель знал по недоступной нам монографии [4]. Позднее мы убедились, что замечания рецензента были вполне резонны. Однако совершенно недавно выяснилось [5], что двухцентровый квантовый осциллятор [3] имеет принципиальное преимущество перед двойным осциллятором [4], а именно: его обобщение на пространство  $\mathbb{R}^2$  приводит к точно решаемому уравнению Шредингера, чего нет для двойного осциллятора. Таким образом, задача приобрела для нас снова научный интерес, в связи с чем мы решили воспроизвести ее здесь и посвятить памяти Игоря. Поступив так, мы, во всяком случае, соблюдаем важное условие – учитываем мнение самого Игоря Владимировича о настоящей работе. Это согревает нам сердца.*

## 1 Введение

Двухцентровые модели имеют широкую область применений. Они используются в квантовой теории поля (моделирование спонтанного нарушения симметрии), в квантовой механике (физика двухуровневых систем), в физике высоких энергий (осцилляции нейтральных каонов), в квантовой химии (расщепление двухатомных молекул).

Двухцентровые потенциалы обычно не поддаются точному анализу, т. к. решения соответствующего им уравнения Шредингера не выражаются через известные специальные функции. Вместо этого приходится иметь дело с многочленными рекуррентными соотношениями, из которых невозможно получить замкнутое выражение для волновых функций, а следовательно, невозможно вывести точные уравнения, определяющие спектр энергий.

В настоящей работе предложена модель двухцентрового квантового осциллятора, которая в указанном выше смысле решается точно. Эта модель описывается потенциалом

$$V(x_0, x) = m\omega^2|x^2 - x_0^2|/2, \quad (1)$$

где  $x_0$  изменяется в пределах  $0 \leq x \leq \infty$ . Точки  $x = \pm x_0$  представляют собой два центра притяжения, отделенных барьером с параметрами  $(2x_0, m\omega^2 x_0^2/2)$ . Таким образом, модель полностью регулируется одним параметром  $x_0$ . Рост параметра  $x_0$

не только увеличивает высоту барьера, но и одновременно отдаляет центры друг от друга. В этом отношении обсуждаемая модель отличается от моделей, в которых двухцентровость реализуется за счет включения в игру добавочного дельтаобразного взаимодействия [6].

Наша цель заключается в выяснении зависимости энергетических уровней и волновых функций двухцентрового квантового осциллятора от параметра  $x_0$ .

## 2 Волновые функции

Введем следующие вспомогательные величины:  $\varepsilon = E/\hbar\omega$ ,  $\eta = (2m\omega/\hbar)^{1/2}x$ ,  $\eta_0 = (2m\omega/\hbar)^{1/2}x_0$ ,  $\lambda = -\eta_0^4/4 - \varepsilon$ ,  $\mu = \eta_0^4/4 - \varepsilon$ . Уравнение Шредингера вне и внутри барьера трансформируется в этих обозначениях в уравнения для функций параболического цилиндра [7]:

$$\Psi''_{out} - (\eta^2/4 + \lambda)\Psi_{out} = 0, \quad (2a)$$

$$\Psi''_{in} + (\eta^2/4 - \mu)\Psi_{in} = 0. \quad (2b)$$

Второе уравнение получается из первого заменой  $\lambda \rightarrow -i\mu$ ,  $\eta \rightarrow \eta e^{i\pi/4}$ . Согласно [7], фундаментальные решения этих уравнений с данной четностью даются следующими выражениями:

$$y_1(\lambda, \eta) = e^{-\eta^2/4} F(1/4 + \lambda/2; 1/2; \eta^2/2), \quad (3a)$$

$$y_2(\lambda, \eta) = \eta e^{-\eta^2/4} F(3/4 + \lambda/2; 3/2; \eta^2/2), \quad (3b)$$

$$\bar{y}_1(\mu, \eta) = e^{-i\eta^2/4} F(1/4 - i\mu/2; 1/2; i\eta^2/2), \quad (4a)$$

$$\bar{y}_2(\mu, \eta) = \eta e^{-i\eta^2/4} F(3/4 - i\mu/2; 3/2; i\eta^2/2). \quad (4b)$$

Внутри барьера волновые функции имеют вид

$$\Psi_{in}^{(\pm)}(\mu, \eta) = a_{in}^{(\pm)} \bar{y}_k(\mu, \eta). \quad (5)$$

Здесь  $a_{in}^{(\pm)}$  – нормировочные константы, а значения  $k = 1$  и  $k = 2$  относятся к четным и нечетным решениям. Вне барьера должно соблюдаться граничное условие

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} \Psi_{out}(\lambda, \eta) = 0.$$

Функции (3a) и (3b) не удовлетворяют этому условию, однако их линейная комбинация

$$U(\lambda, \eta) = \alpha y_1(\lambda, \eta) + \beta y_2(\lambda, \eta), \quad (6)$$

в которой

$$\alpha = \Gamma(1/4 - \lambda/2) \frac{\cos \pi(1/4 + \lambda/2)}{\pi^{1/2} 2^{\lambda/2 - 1/4}},$$

$$\beta = \Gamma(3/4 - \lambda/2) \frac{\sin \pi(1/4 + \lambda/2)}{\pi^{1/2} 2^{\lambda/2 + 1/4}},$$

имеет нужное поведение [7]:

$$U(\lambda, \eta) \rightarrow e^{-\eta^2/4} \eta^{-\lambda - 1/2}.$$

Из функций (6) можно построить четные ( $\sigma = 0$ ) и нечетные ( $\sigma = 1$ ) решения вне барьера:

$$\Psi_{out}^{(\pm)}(\lambda, \eta) = a_{out}^{(\pm)} U(\lambda, |\eta|) (\text{sgn} \eta)^\sigma. \quad (7)$$

Таким образом, внутри и вне барьера волновые функции с данной четностью даются выражениями (5) и (7).

### 3 Уровни энергии

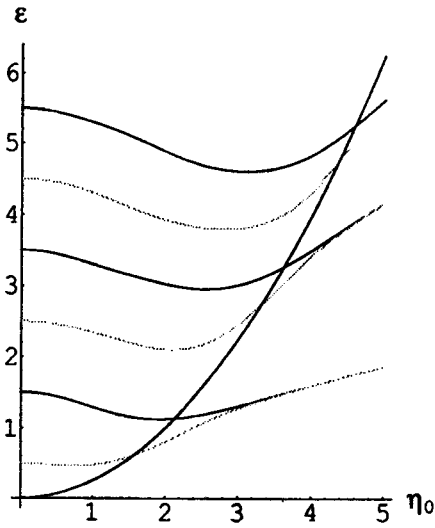


Рис. 1. График зависимости высоты барьера и первых шести уровней энергии от параметра  $\eta_0$ .

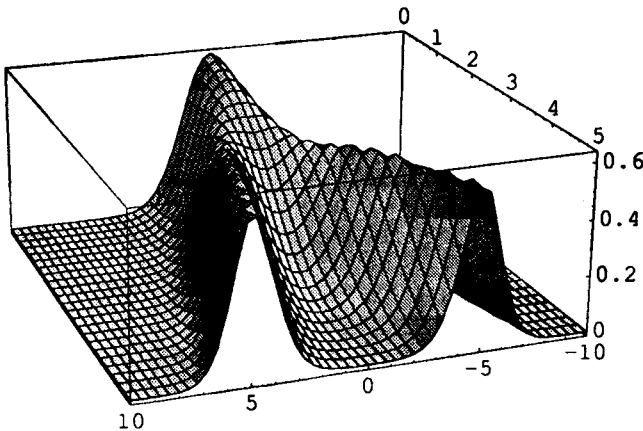


Рис. 2. График зависимости волновой функции нулевого уровня от  $\eta$  и  $\eta_0$ . Здесь  $-10 \leq \eta \leq 10 \leq 5$

Энергетический спектр двухцентрового квантового осциллятора получается сшивкой логарифмических производных решений (5) и (7) в точке  $\eta = \eta_0$ :

$$\left(\frac{U'(\lambda, \eta)}{U(\lambda, \eta)}\right)_{\eta=\eta_0} = \left(\frac{\bar{y}'_1(\mu, \eta)}{\bar{y}_1(\mu, \eta)}\right)_{\eta=\eta_0},$$

$$\left(\frac{U'(\lambda, \eta)}{U(\lambda, \eta)}\right)_{\eta=\eta_0} = \left(\frac{\bar{y}'_2(\mu, \eta)}{\bar{y}_2(\mu, \eta)}\right)_{\eta=\eta_0}.$$

Первое из этих уравнений относится к четным, а второе – к нечетным уровням. Численный анализ этих уравнений приводит к указанной на рисунке 1 зависимости энергетических уровней от параметра  $\eta_0$ .

При  $\eta_0 = 0$  уровни энергии, как и должно быть, совпадают с уровнями энергии линейного осциллятора. Включение параметра  $\eta_0$  приводит уровни в движение. Находясь над барьером, они сначала слегка опускаются, а затем начинают расти, но не столь быстро, как высота барьера. С некоторого значения  $\eta_0$  (своего для каждого уровня) высота барьера настигает уровень и обходит его. С этого "момента" уровень захватывается ямой. Описанная часть графика качественно повторяет поведение термов двухатомных молекул при изменении расстояния между атомами [8]. Дальнейшее увеличение  $\eta_0$  приводит к конденсации уровней в ямах, их росту и попарному слиянию. При  $\eta \geq 6$  мы практически вместо шести начальных уровней имеем три двукратно вырожденных уровня.

Вблизи центров  $\eta = \pm\eta_0$  потенциал (1) трансформируется в две однородные ямы:  $V(x_0, x) \cong \eta_0|\eta \pm \eta_0|/2$ . При  $\eta_0 \gg 1$  эти ямы достаточно глубоки и в них захватываются несколько слившихся уровней. Ввиду однородности ям слившиеся уровни должны вести себя при  $\eta_0 \gg 1$ , как  $\varepsilon \cong n^{2/3}\eta_0^{2/3}$ , где число  $n$  нумерует слившиеся уровни. Отметим также, что численный анализ условия квантования Бора – Зоммерфельда для потенциала (1) убедил нас в том, что квазиклассическое приближение точно воспроизводит приведенную выше картину энергетических уровней (исключения составляют весьма малые окрестности вокруг точек поворота).

## 4 Спонтанное нарушение симметрии

Условие непрерывности волновой функции в точке  $\eta = \eta_0$  приводит к следующей связи:

$$a_{in}^{(\pm)} = \frac{U(\lambda, \eta_0)}{\bar{y}_k(\mu, \eta_0)} a_{out}^{(\pm)}.$$

Константы  $a_{out}^{(\pm)}$  определяются из условия нормировки и имеют вид

$$a_{out}^{(\pm)} = 2^{-1/2} \left\{ \left| \frac{U(\lambda, \eta_0)}{\bar{y}_k(\mu, \eta_0)} \right|^2 \int_0^{\eta_0} |\bar{y}_k(\mu, \eta)|^2 d\eta + \int_{\eta_0}^{\infty} |U(\lambda, \eta)|^2 d\eta \right\}^{-1/2}.$$

Эти формулы вместе с формулами (3), (4), (5) и (7) полностью определяют поведение волновых функций от переменной  $\eta$  и параметра  $\eta_0$ . Следующие два графика дают представление об указанных зависимостях (рис. 2, 3).

Мы видим, что по мере роста параметра  $\eta_0$  волновые функции первых двух уровней постепенно локализируются вне барьера и при  $\eta \geq 6$  вокруг центров  $\eta = \pm\eta_0$

образуются две изолированные друг от друга ямы. Изображение передних профилей двух последних графиков дано на рисунке 4.

Из него видно, что модули волновых функций нулевого и первого уровней совпадают уже при  $\eta_0 = 5$ . Однако было бы наивно думать, что в пределе  $\eta_0 \rightarrow \infty$  именно эти волновые функции будут описывать двукратно вырожденный уровень, образованный слиянием первых двух уровней. На самом деле в указанном пределе система расщепляется на две изолированные подсистемы: частица, захватившись одним из центров, уже не может вернуться ко второму. Говоря иначе, в пределе  $\eta_0 = \infty$  реализуется спонтанное нарушение симметрии: на смену волновым функциям  $\Psi^+(\eta)$  и  $\Psi^-(\eta)$  "мгновенно" приходят волновые функции  $\Psi_L = (\Psi^+ - \Psi^-)/2^{1/2}$  и  $\Psi_R = (\Psi^+ + \Psi^-)/2^{1/2}$ , описывающие состояние частицы в левой и правой яме.

Следя за поведением системы в обратном порядке, т. е. от  $\eta_0 = \infty$  до  $\eta_0 = 0$ , мы обнаруживаем, что точку  $\eta_0 = \infty$  можно интерпретировать как предельную точку бифуркации, т. к. в ней происходит расщепление уровня и перестройка симметрии. Как убеждают вычисления, этот сценарий повторяется и для других, более высоких уровней энергии и соответствующих им волновых функций.

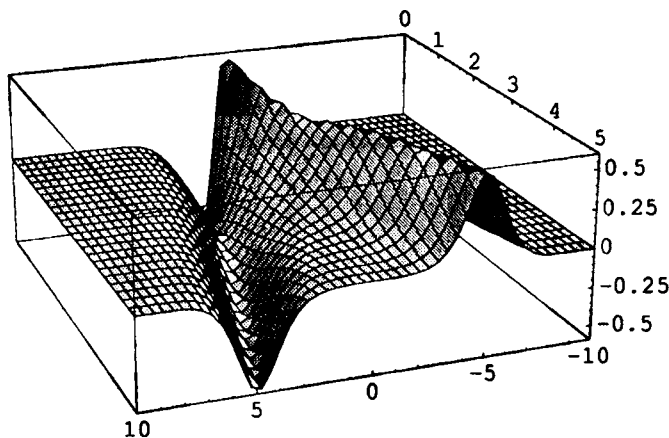


Рис. 3. График зависимости волновой функции первого уровня от  $\eta$  и  $\eta_0$ . Здесь, как и выше,  $-10 \leq \eta \leq 10 \leq 5$

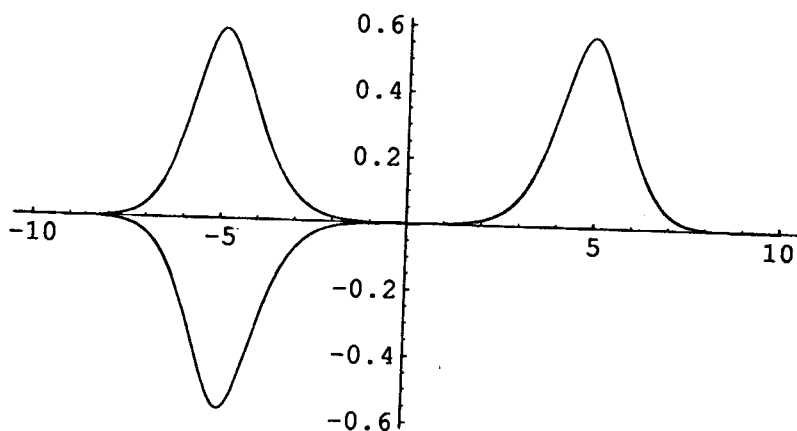


Рис. 4. График зависимости волновых функций первых двух уровней от переменной  $\eta$  при  $\eta_0 = 5$

## Список литературы

- [1] I.V. Lutsenko, G.S. Pogosyan, A.N. Sissakian, V.M. Ter-Antonyan, Three Views on the Problem of Degeneralization in the One-Dimensional Quantum Mechanics. In the Proceedings of V International Symposium on Selected Topics in Statistical Mechanics, World Scientific Publishing, 1989.
- [2] R. Loudon, One-Dimensional Hydrogen Atom, *Am. J. Phys.* **27**, 679, 1959.
- [3] А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян, С.В. Тер-Антонян, Двухцентровый квантовый осциллятор, Препринт ОИЯИ Р2-92-51, Дубна 1992.
- [4] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, 1970.
- [5] Ye. Hakobyan, S. Ter-Antonyan, V. Ter-Antonyan, *Quantum Parabolic Sombrego*, quant-ph/ 9908016.
- [6] M. Avakian, G. Pogosyan, A. Sissakian, V. Ter-Anonyan, *Phys. Lett. A* **124**, 233, 1987.
- [7] *Handbook of Mathematical Functions*, Ed. by Abramowitz and A. Stegan, Dover 1965.
- [8] L. Landau, E. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Nauka, Moscow, 1989.