NEW SITUATION
IN QUANTUM MECHANICS
(POSSIBILITIES
OF CONTROLLING
SPECTRA, SCATTERING
AND DECAY)

B. N. ZAKHAR'EV

The recently discovered simple rules of potential transformation. either shift one chosen energy level or move the bound state in space, are demonstrated. It is shown how bound states can be created or removed. An analogy with the algorithms of changing parameters of scattering states and algorithms of the half-lives of decaying states is drawn.

Демонстрируются OTкрытые недавно простые правила изменения формы потенциалов для сдвига избранного уровня энергии или для пространственного перемещения связанного состояния квантовой системы. Рассказано о том, как можно порождать новые связанные состояния или уничтожать имеющиеся. Проводится аналогия с алгоритмами изменения свойств состояний рассеяния и времен жизни распадных состояний.

НОВАЯ СИТУАЦИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(о возможностях управления спектрами, рассеянием, распадами)

Б. Н. ЗАХАРЬЕВ

Учебный центр Объединенного института ядерных исследований, Дубна Московской обл.

Все окружающее нас и мы сами состоим из частиц (или волн), поведение которых определяется квантовыми законами. Изучение их помогает познать себя и мир, в котором мы живем. Решение проблемы источников энергии уже в значительной мере сейчас, а в будущем практически целиком будет зависеть от взаимодействий в микросистемах ядерного масштаба, где безраздельно правит волновая механика. Успехи микроэлектроники и ее захватывающее воображение дальнейшее развитие опирается на квантовую науку. Таким образом, она же лежит в основе компьютерных информационных систем, а через них влияет и на решение проблем межчеловеческих коммуникаций в глобальном масштабе, что позволит оптимизировать социальный прогресс во всех аспектах нашей жизни (в том числе в науках и прочих видах деятельности).

Границы нашего познания расширяются по экспоненциальному закону. Это естественно. И все же ошеломляет высказывание о том, что в математике за последние 20 лет создано столько же нового, сколько за всю ее многовековую историю. Немалый вклад внесла в это квантовая электроника, на которой основана вычислительная техника. Продолжает обновляться и сама квантовая наука.

Нерелятивистскую квантовую теорию (для скоростей, малых по сравнению со скоростью света) можно условно разделить на две части: прямую и обратную задачи. Прямая задача состоит в решении уравнения Шредингера, определяющего движение частиц под действием сил (при заданных потенциалах). Обратная задача состоит в определении потенциала по спектральным данным (включая характеристики рассеяния) или, что интереснее, в управлении потенциалами с помощью спектральных параметров (как раз этому и посвящена данная статья).

Как правило, физики знают лишь одну половину квантовой механики — ее прямую задачу, хотя обратная важнее, так как позволяет нам заглянуть в глубины микромира. Обратная задача появилась с опозданием на четверть века (когда были написаны ее основные уравнения), ее математический аппарат

представлялся более сложным). Как подметил в свое время Л.Д. Фаддеев, обратной задачей в основном занимались математики. Но математикам достаточно доказать теоремы существования, а извлекать физическую суть из математических формул дело физиков. И только сейчас, благодаря появлению многочисленных классов точно решаемых моделей, наступил счастливый момент, когда обратная задача позволяет сделать понимание квантовой механики даже проще, чем в подходе прямой. Этих моделей было найдено удивительно много: целые классы их полных наборов, позволяющих аппроксимировать системы (одномерные или с разделяющимися переменными) с произвольными потенциалами. Теперь об этом можно рассказать доступно, наглядно, на поучительных картинках, которые мы получили и из которых извлекли качественную теорию в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований в Дубне. Эта информация должна быть понятна даже школьникам, хотя она не успела еще достаточно распространиться среди студентов, аспирантов и даже профессоров, читающих курсы квантовой механики.

Если прямая задача была создана в основном за рубежом (Планк, Бор, Гайзенберг, Шредингер и др.), то фундамент обратной задачи — уравнения Гельфанда—Левитана—Марченко (в одномерном случае) и Л.Д. Фаддеева (в многомерном) — это вклад отечественной науки. Победить неустойчивость к погрешностям всевозможных обратных задач (ввести понятие о некорректно поставленных задачах и предложить методы их регуляризации) тоже впервые удалось нашим математикам — А.Н. Тихонову и др.

Хотя теория обратных задач еще недостаточно широко известна, все мы постоянно с ними сталкиваемся. Так, наши глаза решают обратную задачу, собирая рассеянные лучи и восстанавливая образы рассматриваемых предметов. Там, где нет подобных устройств, например, в физике ядра и элементарных частиц, где микросистемы "освещаются" слишком жесткими ультракоротковолновыми лучами с помощью ускорителей, у нас нет возможности рассматривать исследуемые объекты. Здесь роль глаз играет математический аппарат соответствующих обратных задач.

Как пример "сверхобратной" задачи можно рассматривать установленную современными космологами связь рассеяния галактик во Вселенной с взаимодействиями элементарных частиц на начальной стадии эволюции (после взрыва): поразительная зависимость предельно макроскопических и микроскопических объектов!

В данной статье мы ограничимся достижениями нерелятивистской квантовой теории, расскажем об элементарных "кирпичиках" (спектральных и потенциальных), из которых строятся квантовые системы. Будет пояснено, как можно менять положения

энергетических уровней (существуют уже технологии перестройки систем в микроэлектронике, квантовой оптике, тонких квантовых проводников и др.). Будет сказано и о новых возможностях квантовой теории: каким потенциальным возмущением можно устранить из дискретного спектра произвольный уровень, не трогая остальных, или породить на заданном месте новый, как сдвигать локализацию отдельных состояний в пространстве и на энергетической шкале, как изменять скорости распадов отдельных квазистационарных состояний (резонансов) и квантовые переходы между дискретными состояниями, как управлять прозрачностью квантовых систем, туннелированием.

Все это демонстрируется на точных моделях, но качественно верно и в общем случае, так что приобретаемая интуиция имеет большую предсказательную силу: многие результаты можно предвидеть без формул и компьютеров.

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Поведение квантовых волн (частиц) управляется уравнением Шредингера (1): оно задает вид волновой функции $\psi(x)$, квадрат которой определяет вероятность обнаружения частицы в разных точках х (мы ограничимся для простоты одномерным движением одной частицы в поле V(x)). Функция $\psi(x)$ характеризует все свойства системы. Уравнение (1) отражает факт равенства полной энергии Е сумме кинетической T и потенциальной V энергий. Оператор же кинетической энергии $\hat{T} = -d^2/dx^2$, действующий на $\psi(x)$, представляет собой вторую производную, которая, как известно, характеризует скорость изменения первой производной, то есть силу изгиба $\psi(x)$. Так что можно сказать, что уравнение Шредингера представляет собой аппарат, управляющий изгибами $\psi(x)$. Чтобы подчеркнуть это, мы специально выделим в левую часть этого уравнения кинетический член:

$$(\hat{T} = -d^2/dx^2)\psi(x) = (E - V(x))\psi(x). \tag{1}$$

Из этого уравнения следует, что при положительной кинетической энергии E > V(x) знак второй производной определяется знаком $\psi(x)$, а интенсивность изгиба — модулем правой части (1). То есть волновая функция изгибается в сторону оси абсцисс. Типичным представителем такого решения при $V = \cos x$ является $\sin(kx)$ (как и любые его комбинации с $\cos(kx)$, $\exp(ikx)$, $\exp(-ikx)$), где частота колебаний $k = \sqrt{E-V}$ характеризует одновременно и скорость распространения волн. Поскольку допустимы любые положительные значения частот, имеется непрерывный спектр состояний свободного движения с E > V.

Ограничим движение волн конечным интервалом, вводя бесконечные потенциальные стенки, например, в точках x=0 и x=a (это простейшая модель, на которой легко понять возникновение

дискретного спектра квантовой системы). Теперь среди решений уравнения Шредингера нужно отобрать только те, которые не нарушают физических условий, чтобы волны обращались в нуль там, где расположены бесконечные потенциальные стенки (дальше их распространение энергетически запрещено). В результате оказываются годными только функции $\sin(nx)$ с целочисленными значениями частот: n=1,2,3,... Это так называемые стоячие волны, отвечающие связанным состояниям с дискретным набором энергетических уровней E=1,4,9,... (см. рис. 1a). Волновые функции квантовых состояний нормируются так (умножаются на такое число), чтобы вероятность обнаружить частицу в потенциальной яме равнялась единице.

В случае потенциала, зависящего от x (рис. 1ε , 3ε , 3), частота колебаний волновой функции больше там, где больше E-V(x).

При отрицательной кинетической энергии волновая функция отгибается от оси абсцисс, что соответствует решениям, экспоненциально убывающим внутрь областей за потенциальными стенками, где движение запрещено по классической механике (см. ψ на рис. 1e). Там локальная частота $k=i\kappa=\sqrt{E-V}$ колебаний становится мнимой (за точками поворота, где кинетическая энергия E-V(x)

обращается в нуль). В модельных потенциальных ямах с бесконечно высокими стенками (рис. 1a-e, $\partial-3$) спектр чисто дискретный. В яме конечной глубины (рис. 1e) могут быть и связанные состояния дискретного спектра и состояния рассеяния непрерывного спектра, когда волны способны уходить на бесконечность.

СДВИГИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

Знакомство с алгоритмами спектрального управления мы начнем с сопоставления трансформаций простейших систем с бесконечным числом уровней (указанной выше прямоугольной ямы и осциллятора) и одним единственным уровнем (знаменитыми солитонообразными потенциалами).

Уже из прямой задачи известно, что при сужении потенциальной ямы все уровни связанных состояний поднимаются (это следует, например, из приведенных выше рассуждений об уровнях прямоугольной ямы).

Но как сдвинуть вниз по энергии первый уровень (основного состояния) прямоугольной ямы на рисунке 1a, оставляя все другие уровни на прежних местах? Для этого углубим исходную потенциальную яму в центре, где волновая функция основного состояния имеет максимум и где наибольшая

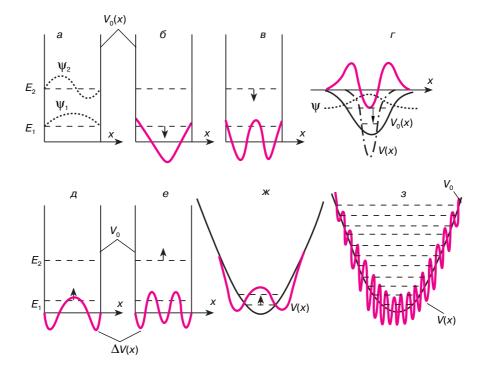


Рис. 1. Исходные потенциальные ямы (сплошные темные линии) трансформируются так (красные линии), чтобы сдвинулся лишь один уровень энергии. Невозмущенная бесконечно глубокая прямоугольная яма (a) с волновыми функциями двух нижних состояний. (f - r) Сдвиг одного уровня вниз в прямоугольной и солитонообразной ямах. (f - r) Сдвиг одного уровня вверх в прямоугольной и осцилляторной ямах; в последнем случае (f - r) сдвигается 30-й уровень. Сравните и объясните формы потенциальных возмущений (f - r), (f

вероятность пребывания волны (частицы) и наибольшая чувствительность основного состояния к изменениям потенциала.

Но одно лишь углубление ямы сдвинет все уровни вниз. Чтобы удержать остальные уровни на местах, добавим компенсирующее отталкивание (потенциальные холмики) вблизи стенок ямы, где функция основного состояния мала (см. искривление дна ямы на рисунке 16). Здесь удается сыграть на разнице форм волновых функций всех других состояний. Функциональный анализ, который служит математическим аппаратом квантовой механики, устанавливает простой порядок в казалось бы невообразимо сложном множестве функций. Каждую из них можно представлять себе одной точкой (вектором) только не в привычном нам трехмерном, а в бесконечномерном пространстве. В этих пространствах можно ввести понятие ортогональности функций. Оказывается, все функции связанных состояний в одной потенциальной яме ортогональны друг другу (представляют собой независимые орты бесконечномерного пространства функций, заданных внутри ямы). Поэтому можно подобрать специальный вид потенциала, сдвигающего избранный уровень и оставляющего бесконечное число других на месте. Теория обратной задачи определяет для каждой заданной глубины сдвига основного уровня соответствующую форму углубления посередине и холмиков по краям. Чем сильнее сдвиг уровня вниз, тем глубже центральная ямка и выше боковые холмики.

Теперь читатель может и сам догадаться, как нужно трансформировать плоское дно исходной прямоугольной ямы, чтобы опустить один лишь второй уровень. Поскольку у стоячей волны второго состояния две пучности (см. рис. 1а), нужно тянуть второе состояние вниз по энергии двумя потенциальными ямками, а компенсировать их влияние на другие уровни тремя холмиками, как показано на рисунке 1в. Сдвиг любого другого уровня требует соответствующего числа областей притяжения и отталкивания возмущающего потенциала. Те же алгоритмы сдвига уровней остаются верными и для других исходных систем, например, сдвиг единственного уровня солитонообразной потенциальной ямы на рисунке 1г (ср. возмущающие потенциалы на рисунках 16 и 1 ϵ).

Та же логика управления положением уровней действует и при их сдвиге вверх. Только теперь (меняя знак потенциального возмущения) толкать избранный уровень вверх нужно холмиками в области пучностей стоячей волны соответствующего состояния, а компенсировать их влияние на другие уровни ямками вблизи ее узлов. На рисунках 1д и 1е показана трансформация прямоугольной ямы при подъеме первого и второго уровней. Чтобы убедиться в универсальности найденных правил, сравните с трансформацией параболической (осцилляторной)

потенциальной ямы при подъеме основного состояния, представленной на рисунке 1 m, и при сдвиге 30-го состояния на рисунке 1 m.

Отдельные ямки и бугорки рассмотренных потенциальных возмущений и есть их "кирпичики" или "атомы", из которых можно построить любую, как минимум одномерную, квантовую систему.

Так можно приближать форму исходного симметричного потенциала к форме другого при последовательном совмещении их уровней (см. [1-4]).

Уже созданы и продолжают совершенствоваться технологии, позволяющие создавать системы с заданными потенциалами (суперрешетки, квантовые проволочки, туннельные микроскопы). Таким образом, мы получаем возможность и изучать фундаментальные (глубинные) характеристики строения материи, и изменять их. Наше общество очень нуждается сейчас в "квантовой пропаганде", чтобы "оценить красоту нашего прекрасного мира, понять, что составляет сейчас главную часть истинной культуры нашей эпохи, ... подключиться к этому величайшему дерзанию, на которое когда-либо пускался человеческий ум" (Р. Фейнман).

СДВИГИ ОТДЕЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В ПРОСТРАНСТВЕ

Для рассмотренного выше случая потенциалов, симметричных относительно их центра и с чисто дискретным спектром, положения уровней энергии связанных состояний полностью определяют форму потенциала. Для несимметричных потенциалов такой полный набор спектральных параметров, как "пульт управления" с соответствующими кнопками или рычагами, состоит, помимо уровней энергии, еще и из весовых констант, по одной для каждого состояния. Они характеризуют поведение волновых функций на краю области взаимодействия (у бесконечной вертикальной потенциальной стенки или при больших значениях координаты x). Оказалось, что, изменяя значения именно такого параметра для избранного состояния при фиксированных остальных, можно управлять положением этого состояния в пространстве.

Так, на рисунке 2*а* показано, как, меняя наклон нормированной волновой функции у края ямы (он и служит здесь весовым фактором), можно прижать волновую функцию основного состояния к одной из стенок бесконечной прямоугольной ямы. Достигается это трансформацией исходного потенциала: ямкой, притягивающей волну направо, и барьером, выдавливающим волну из левой части ямы, где энергия частицы меньше высоты барьера.

Как и в случае сдвигов по энергии, влияние ямок и барьеров возмущающего потенциала компенсируется для других состояний (ни один из уровней не сдвигается). На рисунках 26, 26, 2θ показано, что аналогичные потенциальные возмущения сдвигают вправо основное состояние в солитонообразной

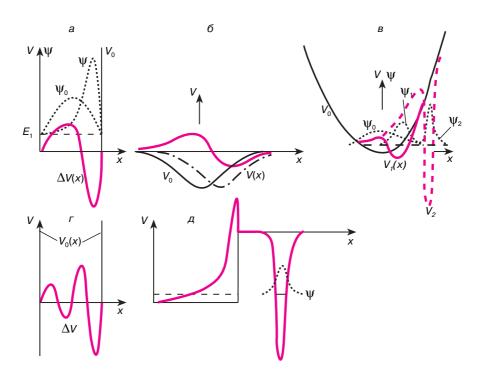


Рис. 2. Трансформации потенциалов, сдвигающих избранное состояние вправо по координате x. Основное состояние сдвигается с помощью вспомогательных ямки и барьера (a - B, d, красные линии). Первое возбужденное состояние сдвигается уже двумя ямками и барьерами (r).

яме, в осцилляторном и конечном прямоугольном потенциале. Причем в случаях разрешенного движения волн по всей оси можно сдвинуть избранное состояние как угодно далеко, отделив его от остальных. Здесь мы знакомимся с понятием ямки — переносчика избранного состояния. Аналогично можно сдвинуть в пространстве любое другое состояние (например, второе состояние, как показано на рисунке 2г). Только для этого требуются возмущения с большим числом ямок и барьерчиков (на каждую пучность стоячей волны по блоку барьерчик + ямка).

Удивительно, что алгоритм сгребания избранного состояния к одной из стенок бесконечной прямоугольной ямы оказался годным и для превращения состояния рассеяния с любой энергией в связанное состояние (сгребание волновой функции рассеяния к началу координат). При этом остальные состояния непрерывного спектра, как выше, так и ниже (!) этого связанного состояния, остаются состояниями рассеяния (с неизменными фазами на больших расстояниях). Получается так называемое связанное состояние, погруженное в непрерывный спектр (резонанс с нулевой шириной). Соответствующие потенциалы имеют вид типа $\sin(kx)/x$ с колебаниями, спадающими по амплитуде с ростом x(ср. с рис. 2г, где спадание амплитуды происходит влево и лишь на ограниченном отрезке; для сгребания функции рассеяния с бесконечным числом пучностей требуется бесконечное число блоков барьер + ямка). Такие потенциалы преобразуют в связанные лишь те состояния, с которыми они находятся "в резонансе" (когда совпадают частоты колебаний потенциала и функции).

Хотя в свое время Гелл-Ман назвал квантовую механику антиинтуитивной дисциплиной, а Эйнштейн — колдовским исчислением, эта наука постепенно упрощается, а рассмотренные выше примеры могут служить первыми уроками квантовой интуиции.

РОЖДЕНИЕ И УНИЧТОЖЕНИЕ КВАНТОВЫХ УРОВНЕЙ

Замечательно, что из тех же "кирпичиков" (ямок и барьеров) можно построить потенциальные возмущения, позволяющие вырывать из спектра связанных состояний любой уровень или вставлять туда новый. На рисунке За показан предельный случай удаления третьего уровня из осцилляторной ямы с помощью сдвига локализации соответствующего связанного состояния на бесконечность (оно уносится ямкой-переносчиком и эффективно исчезает). Рисунки типа рисунка За удалось просто объяснить. После исчезновения *п*-го уровня номера всех лежащих выше по энергии состояний уменьшаются на единицу и теряют по половине стоячей волны, из-за чего становятся короче. Для этого потенциал сужается в верхней части. Состояния же

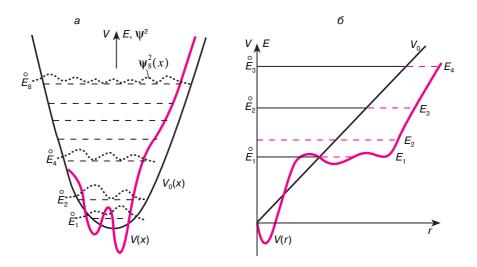


Рис. 3. Уничтожение (*a*) третьего уровня в осцилляторной потенциальной яме. Рождение (*б*) нового уровня между первым и вторым в исходной линейной яме.

ниже исчезнувшего остаются с прежними номерами и при сужении ямы должны были бы подняться. Поэтому для опускания их на прежнее место нужно воспользоваться рассмотренным выше алгоритмом сдвига уровней вниз. Так, две ямки на рисунке 3a тянут вниз второй уровень (ср. с рис. 1a, найдите на рис. 3a аналоги крайних отталкивающих горбиков). Более глубокие уровни менее чувствительны к сужению верхней части ямы и удержать их на месте удается менее заметными деталями потенциального возмущения.

Таким образом, постепенно отдельные островки квантовой интуиции сливаются в единый континент, что подтверждается и дальнейшим изложением.

Чтобы добавить уровень к спектру, необходимо над ним, наоборот, расширить яму, увеличивая на полколебания (на одну пучность) стоячие волны всех расположенных выше состояний. На рисунке 36 показано создание нового уровня между первым и вторым состояниями исходного спектра в линейной яме.

УПРАВЛЕНИЕ РАСПАДАМИ И РАССЕЯНИЕМ

Квантовые волны способны проникать в классически запрещенные (подбарьерные) области, где кинетическая энергия становится отрицательной, а волновые функции экспоненциально затухают. Благодаря такой проницаемости, стоячие волны в ограниченной области, отгороженной потенциальным барьером конечной высоты и ширины от пространства, где разрешено движение падающих и рассеянных волн, образуют квазисвязанные (резонансные) состояния, способные распадаться сквозь барьер. Поскольку экспоненциальный спад волновой функции к внешнему краю барьера усиливается с углублением состояния, распад для нижних квазисвязанных состояний происходит обычно с меньшей скоростью.

Рассмотренная выше теория изменения спектральных параметров позволяет сдвигать (проносить) любое распадающееся состояние сквозь запирающий потенциальный барьер ближе к его внешнему краю для увеличения скорости его распада без изменения времени жизни остальных с помощью потенциальной ямки — переносчика избранного квазисвязанного состояния (см. рис. 4). Таким образом, теория распада Гамова получает существенное обобщение.

Изложенная качественная теория распространяется и на случай более сложных квантовых систем. Так, например, объясняется экзотика движения волн в периодических и решеточных системах [1, 4].

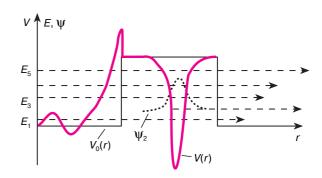


Рис. 4. Перенос квазисвязанного (распадного, резонансного) состояния сквозь потенциальный барьер для увеличения скорости его распада (ширины резонанса).

ФИЗИКА

НЕЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотренные выше иллюстрации отражают тот факт, что потенциал взаимодействия V(x) и спектральные данные S(E) являются, в сущности, одним и тем же объектом, только в разных представлениях. Вообще, очень полезно иметь возможность взглянуть на предмет исследования с разных сторон. В данном же случае оказывается, что, помимо уравнения Шредингера, потенциал V(x) может входить уже в качестве волнового пакета в знаменитое нелинейное уравнение Кортвега-де Фриса (КдФ), описывающее изменение его формы в пространстве и времени, а соответствующая временная эволюция его другого представления S(E) определяется линейным уравнением. Решая такое более простое уравнение для S(E) и восстанавливая V(x) по S(E)для произвольного значения временного параметра, мы получаем решение КдФ. Подобным образом метод обратной задачи явился как бы волшебным ключиком к решению многих нелинейных уравнений, важных для приложений. По мнению специалистов нелинейной теории (В.Е. Захаров, С.П. Новиков и др.), это "без сомнения представляет собой одно из самых красивых открытий математической физики XX века".

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Есть замечательная книга [5] Л.И. Пономарева "Под знаком кванта" о развитии с древних времен представлений о микромире, завершившемся созданием квантовой механики (прямой задачи). Я сам много почерпнул из нее, а для моего молодого соавтора последних работ по обратной задаче (о которых сказано выше) В.М. Чабанова она даже определила выбор жизненного пути.

Не знаю, хотел ли этого автор, но, показав, что создание этой науки не было актом кучки гениев в начале XX столетия, а длинной лестницей, тянущейся из глубин веков до нашей эры с сотнями ступенекоткрытий, он предостерегает читателя от переоценки гениальности участников научного прогресса (фетишизма, культивируемого незадачливыми популя-

ризаторами науки). Ясно, что если разобраться подетальнее, то и каждую такую ступеньку прогресса можно было бы разбить на множество более мелких ступенек, хотя принцип экономии мышления (памяти) приводит обычно к тому, что результаты труда многих приписываются кому-то одному. Тем самым возникает понимание, что в той или иной степени это доступно практически каждому. Это способствует освобождению от широко еще распространенного комплекса неполноценности, стимулирует дерзание в науках.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Захарьев Б.Н. Дискретная и непрерывная квантовая механика, точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции II). // ЭЧАЯ. 1992. Т. 23. № 5. С. 1387.
- 2. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. М.: Энергоатомиздат, 1985. Переработанное английское издание: Heidelberg: Springer-Verlag, 1990.
- 3. *Захарьев Б.Н., Костов Н., Плеханов Е.Б.* Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции I) // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21. № 4. С. 914.
- 4. *Захарьев Б.Н.* Уроки квантовой интуиции. ¹ Дубна: Изд. отдел ОИЯИ, 1996.
- 5. Пономарев Л.И. Под знаком кванта. М.: Наука, 1989.

Борис Николаевич Захарьев, доктор физикоматематических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований. Читает лекции в учебном центре ОИЯИ. Область научных интересов: квантовая обратная задача, теория рассеяния, проблема малого числа тел, суперсимметричная квантовая механика. Автор более 100 научных статей и 4 монографий.

¹ Картинная галерея удивительных потенциалов.

Алгоритм управления спектрами, рассеянием, распадами. Точно решаемые модели обратной задачи и суперсимметрии.

Универсальные строительные элементы — "кирпичики и блоки" квантовых систем.