Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Е. П. Величева, А. А. Сузько, Точно решаемые модели и динамические квантовые системы, *ТМФ*, 1998, том 115, номер 1, 106–131

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf861>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.205.19.152

26 апреля 2023 г., 17:49:33

© 1998 г.

Е. П. Величева*, А. А. Сузько†

ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ И ДИНАМИЧЕСКИЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

Сложные динамические системы с несколькими степенями свободы исследуются методами обратной задачи в адиабатическом подходе в согласованной постановке двух задач. На основе параметрической обратной задачи разрабатывается алгебраическая техника восстановления зависящих и не зависящих от времени двумерных потенциалов и соответствующих решений и вычисляются матричные элементы обменного взаимодействия, определяющие систему калибровочных уравнений. Показано, что основные черты обменного взаимодействия, существенно зависят от постановки параметрической задачи, а именно, она задана на всей оси. Матричные элементы связи не имеют сингулярностей в точках вырождения двух уровней, если параметрическая задача определена на всей оси, в то время как для радиальной параметрической задачи или для задачи на полуоси они сингулярны. Исследуется влияние параметрических спектральных характеристик на свойства динамических систем. В частности, установлено, что при специальном выборе нормировочных функций переходы между состояниями двух-уровневой системы отсутствуют.

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод адиабатического представления весьма перспективен для исследования многих реальных квантовых систем со сложной динамикой, таких как ядра, атомы, молекулы, металлические кластеры и т.д. Такие системы характеризуются взаимодействием коллективных медленно изменяющихся внешних полей и внутренних быстро изменяющихся полей, что может приводить к возникновению монополярных калибровочных потенциалов и к таким интересным явлениям, как неинтегрируемые геометрические фазы, открытые Берри [1], молекулярный эффект Ааронова–Бома [2], нелинейные эффекты и хаос для коллективного движения [3]. Точно решаемые модели обратной задачи могут быть использованы для исследования монополярных калибровочных потенциалов и связанной с ними проблемы пересечения уровней в квантовых системах с несколькими степенями свободы и могут служить хорошим методом для моделирования процессов влияния быстрой динамики.

*Гомельский государственный университет, Гомель, Беларусь

†Институт радиационных физ.-хим. проблем, Академия наук Беларуси, Минск, Беларусь

Прямая задача рассеяния в адиабатическом подходе имеет богатую историю, которая восходит к первым исследованиям Борна и Оппенгеймера [4], Борна и Фока [5], и впоследствии интенсивно развивалась многими авторами, такими как Ландау [6] и Зинер [7, 8], Хилл и Уилер [9], Демков [10] и Мид [2] (некоторые дополнительные ссылки можно найти в работах [11–14]). Постановка же обратной задачи в адиабатическом представлении была предложена лишь относительно недавно [15, 16].

Процедура адиабатического представления может рассматриваться как вариант размерной редукции пространства $\mathcal{M} = \mathcal{B} \times \widehat{\mathcal{M}}$, т.к. она сводит решение всей задачи рассеяния к двум эффективным задачам в пространствах $\mathcal{B}$ и $\widehat{\mathcal{M}}$ размерности меньшей, чем размерность исходного пространства $\mathcal{M}$. Одна из них – параметрическая задача для уравнения Шредингера, описывающего быструю динамику при параметрической зависимости от “медленных” координатных переменных $x \in \mathcal{B}$. Другая проблема формулируется для систем калибровочных уравнений с потенциалами, индуцированными процедурой адиабатического разложения полной волновой функции

$$\Psi(x, y) = \sum \int \psi_n(x; y) F_n(x)$$

по собственным состояниям $\psi_n(x; y)$ самосопряженного параметрического гамильтониана.

Метод аналитического моделирования в таком подходе основан на согласованной формулировке в аналитическом виде двух взаимосвязанных задач: параметрической задачи и многоканальной, ассоциируемой с системой уравнений с ковариантной производной. Главная особенность такого подхода состоит в том, что потенциал и волновые функции должны находиться по данным рассеяния $\{\mathcal{E}_n(x), M_n^2(x), \mathcal{S}(x, k)\}$, которые параметрически зависят от пространственных переменных. Обобщение техники баргмановских потенциалов на параметрическое семейство обратных задач основано на выборе функций Йоста. Они должны быть рациональными, как обычно, но при этом их спектральные характеристики должны параметрически зависеть от адиабатических переменных. В одной из двух согласованных постановок эта зависимость определяется из решения обратной задачи для системы калибровочных уравнений. Затем с помощью полученных спектральных данных необходимо решить параметрическую обратную задачу для определения потенциала $V(x; y)$ и собственных функций $\psi_n(x; y)$. Если функциональная зависимость в данных рассеяния $\{\mathcal{E}_n(x), M_n^2(x), \mathcal{S}(x, k)\}$ от внешней адиабатической переменной задана заранее, то вначале необходимо восстановить потенциал $V(x, y)$ и определить базисные функции $\psi_n(x; y)$, решая параметрическую обратную задачу, затем по аналитическим базисным функциям вычислить матричные элементы индуцированных векторного $A(x) = \langle \psi(x; y) | \nabla_x | \psi(x; y) \rangle$ и скалярного $V(x) = \langle \psi(x; y) | V(x, y) | \psi(x; y) \rangle$ потенциалов. При заданной функциональной зависимости спектральных характеристик от времени алгебраическая процедура используется для конструирования в явном аналитическом виде зависящих от времени многомерных потенциалов и соответствующих им решений параметрической задачи. Затем

вычисляются матричные элементы связи A_{nm} , характеризующие систему калибровочных уравнений в различные моменты времени. Такой подход позволяет оценить влияние параметрических спектральных характеристик на поведение динамических квантовых систем.

Интересно отметить, что матричные элементы обменного взаимодействия $A_{nm}(x)$ сильно зависят от выбора нормировочных функций собственных состояний параметрического гамильтониана. Специальный выбор нормировочных функций, определяющих безотражательный симметричный по быстрым переменным y потенциал ($-\infty < y < \infty$), приводит к нулевой связи между состояниями двухуровневой системы: $A_{12}(x) = 0$ даже в точках вырождения. В то же время при любых других нормировках и тех же термах получаются несимметричные по y потенциалы и ненулевая связь, $A_{12}(x) \neq 0$, между теми же состояниями. Следовало бы отметить, что в случае параметрической задачи на всей оси потенциалы, собственные функции и матричные элементы обменного взаимодействия не сингулярны в точках вырождения двух состояний, как это имеет место для параметрической задачи на полуоси $0 \leq y < \infty$. Таким образом, характерные особенности гамильтониана медленной подсистемы определяются природой параметрической задачи: а именно, она либо радиальная, либо задана на полуоси или на всей оси. Предлагаемый подход позволяет также исследовать медленно эволюционирующие квантовые системы с предписанной зависимостью от адиабатической переменной $x(t)$.

2. АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОДХОД И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА

Рассмотрим квантовую систему, эволюционирующую в соответствии с уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H(x(t))|\Psi(t)\rangle, \quad (1)$$

где гамильтониан $H(x(t))$ задан в виде

$$H(x(t)) = -\partial^2/\partial x^2 + h(x(t)), \quad h(x(t)) = -\partial^2/\partial y^2 + V(x(t), y). \quad (2)$$

Если $\psi_n(x(t); y)$ – решения параметрического уравнения

$$h(x(t))|\psi_n(x(t); y)\rangle = \mathcal{E}_n(x(t))|\psi_n(x(t); y)\rangle \quad (3)$$

и образуют полный ортонормированный набор

$$|\psi_n(x; y)\rangle \langle \psi_n(x; y')| = \delta(y - y'), \quad \langle \psi_n(x; y)|\psi_m(x; y)\rangle = \delta_{nm} \quad \forall x,$$

то волновая функция Ψ может быть представлена в виде разложения

$$|\Psi(x, y)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi\rangle = \sum_n \int \psi_n(x; y) F_n(x) \quad (4)$$

по собственным состояниям уравнения (3). Подставляя разложение (4) в уравнение Шредингера (1) и используя ортонормированность собственных функций, получим многоканальную систему калибровочных уравнений

$$[-(\nabla_x + A(x))^2 + V(x)]F(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} F(x). \quad (5)$$

Здесь $A(x)$ и $V(x)$ – эффективные векторные и скалярные потенциалы, матричные элементы которых индуцируются базисными функциями параметрической задачи (3):

$$A_{nm}(x) = \langle \psi_n(x; y) | \nabla_x | \psi_m(x; y) \rangle, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} V_{nm}(x) &= \langle \psi_n(x; y) | h(x) | \psi_m(x; y) \rangle - i\hbar \langle \psi_n(x; y) | \partial_t \psi_m(x; y) \rangle \equiv \\ &\equiv \mathcal{E}_n(x(t))\delta_{nm} - i\hbar B_{nm}(x(t)). \end{aligned} \quad (7)$$

В случае медленной и плавной зависимостей от коллективных координат x обычно пренебрегают второй производной по x в (2), $H(x(t)) \rightarrow h(x(t))$, и решение уравнения (1) ищут в виде разложения (см., например, [17])

$$|\Psi(x(t), y)\rangle = \sum_n C_n(x(t)) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{E}_n(x(t')) dt'\right) |\psi_n(x(t); y)\rangle. \quad (8)$$

Принимая во внимание (8) и (3), получим для (1) систему уравнений на $C_n(t)$:

$$\partial_t C_n(t) = \sum_m B_{nm}(x(t)) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t (\mathcal{E}_n(t') - \mathcal{E}_m(t')) dt'\right] C_m(t). \quad (9)$$

Матричные элементы обменного взаимодействия $B_{nm}(x(t))$ генерируются базисными функциями $|n\rangle$ “мгновенного” гамильтониана (3)

$$B_{nm}(x(t)) = \langle n | \dot{m} \rangle = A_{nm}(x(t)) \cdot \dot{x}(t), \quad (10)$$

где точка обозначает производную по времени. Разложение (8) применяется при адиабатическом приближении, в то время как использование адиабатического представления (3) дает математически корректную постановку задачи (1). Таким образом, исходная задача в адиабатическом подходе последовательно сводится к параметрической задаче (4) и к многоканальной системе уравнений калибровочного типа (5) или в адиабатическом приближении к задачам (8) и (9). Здесь предполагается, что гамильтониан $H(x(t))$ как функция времени действителен, ограничен и непрерывен. Так как при каждом t собственные функции вещественны и ортонормированы $\langle \psi_n(x; t) | \psi_m(x; t) \rangle = \delta_{nm} \forall x$, то матричные элементы неадиабатической связи $A_{nm} = -A_{mn}$ в (6) вещественны и антисимметричны по n и m .

Основываясь на параметрической обратной задаче [18, 19], рассмотрим процедуру восстановления двумерных баргмановских потенциалов $V(x; y)$, для которых решения параметрического уравнения Шредингера

$$\left[-d^2/dy^2 + \overset{\circ}{V}(y) + V(x; y) \right] \psi(x; y) = \mathcal{E}(x) \psi(x; y) \quad (11)$$

могут быть найдены в аналитическом виде. Матричные элементы (6) можно вычислить в терминах аналитических собственных функций $\psi(x; y)$ уравнения (11) при заданной функциональной зависимости данных рассеяния $\{\mathcal{E}_n(x), M_n^2(x), \mathcal{S}(x, k)\}$ от параметрической координатной переменной x . После этого амплитуды $F(x)$ в (4) или амплитуды перехода $C(x)$ в (8) должны находиться из решений систем уравнений (5) или (9). Используем так называемые физические $\psi(x; y)$ и регулярные $\phi(x; y)$ решения уравнения (11), которые образуют полные наборы и выражаются через решения Йоста $f_{\pm}(x; k, y)$ при каждом фиксированном значении x :

$$\begin{aligned} \psi(x; k, y) &= (-1/i) [f_{-}(x; k, y) - \mathcal{S}(x; k) f_{+}(x; k, y)], \\ \psi(i\kappa_n(x), y) &= M_n(x) f_{+}(i\kappa_n(x), y), \quad \mathcal{E}_n(x) = -\kappa_n^2(x), \\ \phi(x; y) &= (1/2ik) [f_{-}(x; k) f_{+}(x; k, y) - f_{+}(x; k) f_{-}(x; k, y)]. \end{aligned} \quad (12)$$

Матрицы $\mathcal{S}(x; k)$ параметрического уравнения определяются функциями Йоста $f_{\pm}(x; k)$, зависящими от x как от параметра:

$$\mathcal{S}(x; k) = f_{-}(x; k) f_{+}^{-1}(x; k). \quad (13)$$

Из определения функций Йоста через вронскиан

$$f_{\pm}(x; k) = W\{f_{\pm}(x; k, y), \phi(x; k, y)\} \quad \forall x$$

следует, что

$$f_{\pm}(x; k) = \lim_{y \rightarrow 0} f_{\pm}(x; k, y).$$

Решения Йоста и функции Йоста обладают свойством $f^*(x; k, y) = f(x; -k^*, y)$. Нормировочные факторы $M_n^2(x)$ или $N_n^2(x)$ волновых функций связанного состояния, как обычно, определяются решениями Йоста или регулярными решениями при $k = i\kappa_n(x)$

$$M_n^{-2}(x) = \int_0^{\infty} |f(i\kappa_n(x), y)|^2 dy, \quad N_n^{-2}(x) = \int_0^{\infty} \phi^2(i\kappa_n(x), y) dy. \quad (14)$$

Параметрическая зависимость данных рассеяния $\{\mathcal{S}(x, k), M^2(x), \mathcal{E}(x)\}$ или спектральных данных $\{\rho(x, k), N^2(x), \mathcal{E}(x)\}$ от x отражает особенность нестандартной параметрической обратной задачи. Определяя эту зависимость и применяя алгебраические методы обратной задачи рассеяния, представим широкий класс гамильтонианов,

для которых можно конструировать точно решаемые модели и, следовательно, получать решения в замкнутом аналитическом виде. Такие гамильтонианы с обобщенными баргмановскими потенциалами определяются дробно-рациональными функциями Йоста

$$f(x; k) = \overset{\circ}{f}(k) \prod \frac{k - i\alpha(x)}{k + i\beta(x)}, \quad (15)$$

параметрически зависящими от динамической переменной x через зависимость от нее спектральных характеристик $\alpha_j(x)$ и $\beta_j(x)$. Параметрическая функция Йоста (15) имеет N кривых простых полюсов $k = -i\beta_j(x)$ и N кривых простых нулей $k = i\alpha_j(x)$.

Для действительных потенциалов кривые $\alpha_j(x)$ и $\beta_j(x)$ должны располагаться симметрично относительно мнимой оси в комплексной k -плоскости. В $\alpha(x)$ существуют не только нули на мнимой полуоси, соответствующие связанным состояниям $\text{Re } \kappa_j(x) = 0$, $\text{Im } \kappa_j(x) > 0$, но также нули в нижней k -полуплоскости $\text{Im } \nu_j(x) < 0$ (число кривых простых полюсов $\beta_j(x)$ равно полному числу $\kappa_j(x)$ и $\nu_j(x)$). В этом случае матрица рассеяния и спектральная функция принимают вид

$$\begin{aligned} S(x; k) &= \overset{\circ}{S}(k) \prod \frac{(k + i\alpha(x))(k + i\beta(x))}{(k - i\beta(x))(k - i\alpha(x))}, \\ \rho(x; k) &= \overset{\circ}{\rho}(k) \prod \frac{(k - i\beta(x))(k + i\beta(x))}{(k + i\alpha(x))(k - i\alpha(x))}. \end{aligned} \quad (16)$$

Для таких $S(x; k)$ и $\rho(x; k)$ ядра интегральных уравнений параметрической задачи могут быть представлены как сумма членов с факторизованной зависимостью по переменной y :

$$Q(x; y, y') = \sum_i^N B_i(x; y) B_i(x; y').$$

Подстановка этого ядра в основное параметрическое уравнение обратной задачи

$$K(x; y, y') + Q(x; y, y') + \int_{y(0)}^{\infty(y)} K(x; y, y'') Q(x; y'', y') dy'' = 0 \quad (17)$$

приводит к тому, что ядро обобщенного сдвига также становится вырожденным:

$$K(x; y, y') = \sum_i^N K_i(x; y) B_i(x; y').$$

Как следствие система интегральных уравнений обратной задачи сводится к системе алгебраических, после чего сферически-несимметричный потенциал и соответствующие ему решения могут быть выражены в замкнутом аналитическом виде через известные решения и спектральные характеристики при использовании параметрических

уравнений обратной задачи

$$V(x, y) = \overset{\circ}{V}(y) \mp 2 \frac{d}{dy} K(x; y, y), \quad (18)$$

$$\phi(x; k, y) = \overset{\circ}{\phi}(k, y) + \int_{y(0)}^{\infty(y)} K(x; y, y') \overset{\circ}{\phi}(k, y') dy'. \quad (19)$$

Пределы интегрирования в (17), (19) и знаки в (18) зависят от постановки задачи. Пределы от y до ∞ и знак минус отвечают подходу Марченко. Пределы $[0, y]$ и знак плюс соответствуют подходу Гельфанда–Левитана.

В рамках обобщенного подхода Марченко [20] интегральные ядра $Q(x; y, y')$:

$$\begin{aligned} Q(x; y, y') = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [\overset{\circ}{S}(k) - \mathcal{S}(x; k)] \overset{\circ}{f}(k, y) \overset{\circ}{f}(k, y') dk + \\ & + \sum_n^m M_n^2(x) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y') - \\ & - \sum_n^{\overset{\circ}{m}} \overset{\circ}{M}_n^2 \overset{\circ}{f}(i\overset{\circ}{\kappa}_n, y) \overset{\circ}{f}(i\overset{\circ}{\kappa}_n, y'), \end{aligned} \quad (20)$$

конструируются по двум наборам данных рассеяния: $\{\mathcal{S}(x; k), \mathcal{E}_n(x), M_n^2(x)\}$, соответствующим уравнению (11) при параметрической зависимости от x , и обычным данным рассеяния $\{\overset{\circ}{S}(k), \overset{\circ}{\mathcal{E}}_n, \overset{\circ}{M}_n^2\}$, соответствующим (11) с $V(x; y) = 0$ и $\overset{\circ}{V}(y) \neq 0$. Предполагается следующий порядок термов $\mathcal{E}_n < \mathcal{E}_{n+1}$. Функции $\overset{\circ}{f}(k, y) \equiv \overset{\circ}{f}_+(k, y)$ – стандартные решения Йоста для уравнения с известным потенциалом $\overset{\circ}{V}(y)$. Потенциалы (18) и решения Йоста (19) определяются по ядрам $K(x; y, y')$, относительно которых при каждом x решается линейное интегральное уравнение (17).

2.1. Точно решаемые модели для параметрической обратной задачи на полуоси. Для радиальной параметрической обратной задачи или для задачи на полуоси, когда $\overset{\circ}{V}(y) = 0$ и соответственно $\overset{\circ}{S}(k) = 1$, ядро $Q(x; y, y')$ основного интегрального уравнения (17) в подходе Марченко

$$\begin{aligned} Q(x; (y + y')) = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - \mathcal{S}(x; k)] \exp[ik(y + y')] dk + \\ & + \sum_n^N M_n^2(x) \exp[-\kappa_n(x)(y + y')] \end{aligned} \quad (21)$$

с данными рассеяния (16) может быть представлено как

$$\begin{aligned} Q(x; (y + y')) = & -i \sum_n^N \text{Res } \mathcal{S}(k = i\beta_n(x)) \exp[-\beta_n(x)(y + y')] + \\ & + \sum_n^N \left\{ -i \text{Res } \mathcal{S}(k = i\kappa_n(x)) \exp[-\kappa_n(x)(y + y')] + \right. \\ & \left. + M_n^2(x) \exp[-\kappa_n(x)(y + y')] \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Следуя процедуре конструирования фазовоэквивалентных потенциалов [18, 19, 21], сведем решение обратной задачи к последовательному применению двух процедур. Если на первом этапе нормировочные функции $M_n^2(x) = \overset{\circ}{M}_n^2(x)$ выбрать равными вычетам $i \operatorname{Res} \mathcal{S}(k)$ при $k = i\kappa_n(x)$, то вторая сумма в (22) исчезает:

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{M}_n^2(x) &= i \operatorname{Res} \mathcal{S}(k)|_{k=i\kappa_n(x)} = -\frac{2\kappa_n(x)(\kappa_n(x) + \beta_n(x))}{(\kappa_n(x) - \beta_n(x))} \times \\ &\times \prod_{n' \neq n}^N \frac{(\kappa_n(x) + \beta_{n'}(x))(\kappa_n(x) + \kappa_{n'}(x))}{(\kappa_n(x) - \beta_{n'}(x))(\kappa_n(x) - \kappa_{n'}(x))}. \end{aligned} \quad (23)$$

Как результат мы получаем простое выражение для $Q(x; y, y') = \overset{\circ}{Q}(x; y, y')$:

$$\overset{\circ}{Q}(x; (y + y')) = \sum_n^N A_n(x) \exp[-\beta_n(x)(y + y')], \quad (24)$$

где

$$A_n(x) = \frac{2\beta_n(x)(\beta_n(x) + \kappa_n(x))}{(\beta_n(x) - \kappa_n(x))} \prod_{n' \neq n}^N \frac{(\beta_n(x) + \kappa_{n'}(x))(\beta_n(x) + \beta_{n'}(x))}{(\beta_n(x) - \beta_{n'}(x))(\beta_n(x) - \kappa_{n'}(x))}. \quad (25)$$

Подставляя ядро $\overset{\circ}{Q}(x; y, y')$ в параметрическое уравнение Марченко (17), получаем

$$\overset{\circ}{K}(x; y, y') + \sum_n^N A_n(x) \left\{ e^{-\beta_n(x)y} + \int_y^\infty \overset{\circ}{K}(x; y, y'') e^{-\beta_n(x)y''} dy'' \right\} e^{-\beta_n(x)y'} = 0,$$

где выражение в скобках – решение Йоста $\overset{\circ}{f}_+(k = i\beta_n(x), y)$ для искомого потенциала $\overset{\circ}{V}(x; y)$. Таким образом, $\overset{\circ}{K}(x; y, y')$ имеет вид, подобный $\overset{\circ}{Q}(x; y, y')$ (24):

$$\overset{\circ}{K}(x; y, y') = - \sum_n^N A_n(x) \overset{\circ}{f}_+(i\beta_n(x), y) \exp[-\beta_n(x)y']. \quad (26)$$

Подставляя это ядро обобщенного сдвига от свободного решения к решению Йоста в интегральное уравнение Вольтерра

$$\overset{\circ}{f}(x; k, y) = \exp(iky) + \int_y^\infty \overset{\circ}{K}(x; y, y') \exp(iky') dy', \quad (27)$$

получим при $k = i\beta_n(x)$ набор уравнений для $\overset{\circ}{f}(i\beta_n(x), y)$:

$$\overset{\circ}{f}(i\beta_n(x), y) = \sum_{n'}^N \exp[-(\beta_{n'}(x)y)] P_{n'n}^{-1}(x, y),$$

где $P_{nn'}(x; y)$ определено как

$$P_{nn'}(x; y) = \delta_{nn'} + A_n(x) \frac{\exp[-(\beta_n(x) + \beta_{n'}(x))y]}{\beta_n(x) + \beta_{n'}(x)}.$$

Тогда подстановка (26) в параметрические уравнения обратной задачи (18), (19) дает алгебраические соотношения для потенциала и решений Йоста

$$\overset{\circ}{V}(x; y) = -2 \frac{d^2}{dy^2} \ln \det \|P(x; y)\|, \quad (28)$$

$$\overset{\circ}{f}_{\pm}(x; k, y) = \exp(\pm iky) + \sum_{nn'}^N A_n(x) P_{nn'}^{-1}(x; y) \frac{\exp[-(\beta_n(x) + \beta_{n'}(x) \mp ik)y]}{(\beta_n(x) \mp ik)}. \quad (29)$$

Подобная ситуация возникает в подходе Гельфанда–Левитана только с нормировочными функциями $N_n^2(x)$, выраженными через вычеты спектральных функций $\text{Res}[f_+(x; k)f_-(x; k)]^{-1}$ при $k = i\kappa_n(x)$:

$$N_n^2(x) = 4i\kappa_n^2(x) [(df_+(x; k)/dk)|_{k=i\kappa_n(x)} f_-(i\kappa_n(x))]^{-1}.$$

Соответствующие алгебраические формулы для одномерных баргмановских потенциалов и соответствующих им решений [21] могут быть получены непосредственно из формул (23)–(29), если положить $\kappa_n(x) \equiv \kappa_n$ и $\beta_n(x) \equiv \beta_n$.

На втором этапе, используя только что полученные $\overset{\circ}{f}(x; k, y)$ как исходные решения, конструируем параметрическое семейство потенциалов и решений для произвольных нормировочных функций $M_n^2(x)$, которые не удовлетворяют условию (23): $\overset{\circ}{M}_n^2(x) < M_n^2(x)$. Так как функция рассеяния $\mathcal{S}(x; k)$ не зависит от выбора нормировок $M_n^2(x)$, имеем $\mathcal{S}(x; k) = \overset{\circ}{\mathcal{S}}(x; k)$. В результате интегральный член в обобщенном выражении (20) для $Q(x; y, y')$ исчезает. Поскольку, с другой стороны, $V(x; y)$ и $\overset{\circ}{V}(x; y)$ обладают одними и теми же термами $\mathcal{E}_n(x) = \overset{\circ}{\mathcal{E}}_n(x)$, но различными нормировочными факторами $M_n^2(x)$ и $\overset{\circ}{M}_n^2(x)$, из (20) находим $Q(x; y, y')$, а из решения (17) – $K(x; y, y')$:

$$Q(x; y, y') = \sum_n^N (M_n^2(x) - \overset{\circ}{M}_n^2(x)) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y'), \quad (30)$$

$$K(x; y, y') = - \sum_n^N (M_n^2(x) - \overset{\circ}{M}_n^2(x)) f(i\kappa_n(x), y) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y'). \quad (31)$$

Подставляя ядра $K(x; y, y')$ и $Q(x; y, y')$ в основные параметрические уравнения Марченко (18), (19), получаем соотношения для параметрического семейства потенциалов

и для решений Йоста, зависящих от N параметрических функций $M_n^2(x)$,

$$\begin{aligned} V(x; y) &= \overset{\circ}{V}(x; y) + 2 \frac{d^2}{dy^2} \ln \det \|P(x; y)\|, \\ f_{\pm}(x; k, y) &= \overset{\circ}{f}_{\pm}(x; k, y) - \sum_{n, m}^N (M_n^2(x) - \overset{\circ}{M}_n^2(x)) \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y) P_{nm}^{-1}(x; y) \times \\ &\times \int_y^{\infty} \overset{\circ}{f}(i\kappa_m(x), y') \overset{\circ}{f}_{\pm}(k, y') dy'. \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь использовано обозначение

$$P_{nm}(x; y) = \delta_{nm} + (M_n^2(x) - \overset{\circ}{M}_n^2(x)) \int_y^{\infty} \overset{\circ}{f}(i\kappa_n(x), y') \overset{\circ}{f}(i\kappa_m(x), y') dy'.$$

Явная зависимость потенциалов от “быстрых” переменных y определяется решениями Йоста (29) при $k = i\kappa_n(x)$, т. е. на кривых энергетических уровней, зависящих от параметрической переменной x . Изменение нормировочных функций $M_n^2(x)$ собственных состояний параметрического гамильтониана приводит к изменению в потенциалах, решениях Йоста, регулярных и базисных решениях параметрического уравнения (3), а также к изменению матричных элементов связи $A_{nm}(x)$ (6) для систем уравнений (5) или (9), определяющих коллективное движение квантовых систем, и поэтому сильно влияет на поведение динамических систем.

2.2. Баргмановские потенциалы с двумя термами. Рассмотрим случай с двумя потенциальными кривыми в задаче рассеяния на полуоси. Тогда функция Йоста (15) может быть записана в виде

$$f(x; k) = \frac{(k - i\kappa_1(x))(k - i\kappa_2(x))}{(k + i\beta_1(x))(k + i\beta_2(x))}, \quad \text{Im}\{\kappa_j(x)\} = \text{Im}\{\beta_j(x)\} = 0, \quad j = 1, 2, \quad (33)$$

и

$$\mathcal{S}(x; k) = \frac{(k + i\kappa_1(x))(k + i\beta_1(x))}{(k - i\beta_1(x))(k - i\kappa_1(x))} \frac{(k + i\kappa_2(x))(k + i\beta_2(x))}{(k - i\beta_2(x))(k - i\kappa_2(x))}. \quad (34)$$

Двум кривым полюсов функции $\mathcal{S}(x; k)$ из четырех соответствуют кривые нулей $k = i\kappa_j(x)$ параметрической функции Йоста $f_+(x; k)$, а двум другим кривым полюсов $\mathcal{S}(x; k)$ — полюсы $f_-(x; k)$ при $k = i\beta_j(x)$. Из того, что функция Йоста $f_+(x; k)$ была аналитической в верхней k -полуплоскости для всех x , следует, что $\beta_j(x) > 0$. Если $\kappa_j(x) > 0$, имеем кривые связанных состояний — термы $\mathcal{E}_j(x) = -\kappa_j^2(x)$. Если $\kappa_j(x) < 0$ $\forall x$, то связанных состояний нет. В принципе функции $\alpha(x)$ в (15), (16) могут изменяться от отрицательных значений $\alpha(x) = -\nu(x)$ (траектории антисвязанных состояний) до

Рис. 1

положительных значений $\alpha(x) = \kappa(x)$. Если же $\alpha_j(x) = -\nu_j(x) < 0 \quad \forall x$, то потенциал недостаточно глубокий и широкий, чтобы создать связанные состояния, и соответствует матрице рассеяния $\mathcal{S}(x, k)$ с кривыми полюсов при $k = i\beta_j(x)$.

Здесь предполагается, что $\kappa_j(x) > 0$, чтобы обеспечить существование двух потенциальных термов. Для упрощения исследований выберем нормировку волновых функций

связанных состояний в соответствии с (23):

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{M}_1^2(x) &= -\frac{2\kappa_1(x)(\kappa_1(x) + \beta_1(x))}{(\kappa_1(x) - \beta_1(x))} \frac{(\kappa_1(x) + \beta_2(x))(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))}{(\kappa_1(x) - \beta_2(x))(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))}, \\ \overset{\circ}{M}_2^2(x) &= -\frac{2\kappa_2(x)(\kappa_2(x) + \beta_2(x))}{(\kappa_2(x) - \beta_2(x))} \frac{(\kappa_2(x) + \beta_1(x))(\kappa_2(x) + \kappa_1(x))}{(\kappa_2(x) - \beta_1(x))(\kappa_2(x) - \kappa_1(x))}. \end{aligned} \quad (35)$$

Таким образом, потенциал $V(x, y)$ определяется только спектральными характеристиками $\kappa_j(x)$ и $\beta_j(x)$, $j = 1, 2$, и соответствует одному из семейства потенциалов, характеризованному одними и теми же уровнями энергии и одной и той же параметрической $\mathcal{S}(x; k)$ -матрицей (34) с четырьмя кривыми полюсов. Пример такого двумерного потенциала вместе с собственными функциями $\psi_i(x, y)$ параметрической задачи и матричным элементом неадиабатической связи $A_{12}(x) = \int \psi_1(x, y) \partial_x \psi_2(x, y) dy$, рассчитанным по аналитическим функциям, представлен на рис. 1. Спектральные данные были выбраны следующим образом:

$$\begin{aligned} \kappa_1(x) &= \frac{\sqrt{2}\kappa_1}{\text{ch}(\kappa_1 x - 5)} + 0.4, & \beta_1(x) &= \frac{\sqrt{2}\beta_1}{\text{ch}(\beta_1 x - 5)} + 0.5, \\ \kappa_2(x) &= \frac{\sqrt{2}\kappa_2}{\text{ch}(\kappa_2 x - 4.8)}, & \beta_2(x) &= \frac{\sqrt{2}\beta_2}{\text{ch}(\beta_2 x - 5)} + 0.3, \end{aligned}$$

где $\kappa_2 = 0.6$, $\beta_1 = \kappa_1 = \beta_2 = 0.7$.

Из соотношений (28), (29) получаем двумерный потенциал $V(x, y)$ (рис. 1в) и нормированные собственные функции $\psi_j(x, y) \overset{\circ}{M}_j(x) f(i\kappa_j(x), y)$, $j = 1, 2$ (представленные на рис. 1г и 1д, соответственно), отвечающие термам $\mathcal{E}_1(x)$ и $\mathcal{E}_2(x)$ (рис. 1а). Поведение матричного элемента связи $A_{12}(x) = \int \psi_1(x, y) \partial_x \psi_2(x, y) dy$ показано на рис. 1б.

Из положительной определенности нормировочных множителей $M_j^2(x)$ следует условие $\beta_2(x) \geq \kappa_2(x)$, $\beta_1(x) \geq \kappa_1(x) \geq \beta_2(x)$. Это означает, что $\mathcal{E}_2(x) \geq \beta_2^2(x) \geq \mathcal{E}_1(x)$. Если уровни $\mathcal{E}_1(x)$ и $\mathcal{E}_2(x)$ сближаются, то в какой-то точке $x = x'$ один из них или оба становятся равными $\beta_2^2(x)$. Из соотношения (35) легко видеть, что когда $\kappa_1(x') = \beta_2(x')$ или $\kappa_2(x') = \beta_2(x')$, соответствующая нормировочная функция $M_1^2(x)$ или $M_2^2(x)$ становится сингулярной. Если $\kappa_1(x') = \beta_2(x') = \kappa_2(x')$, обе нормировочные функции $M_1^2(x)$ и $M_2^2(x)$ имеют полюсы второго порядка в точке вырождения $x = x'$. Тогда из соотношений (25) и (28) немедленно следует, что потенциал $V(x; y)$ и соответствующие нормированные функции $\psi_{1,2}(x, y)$ также имеют полюс второго порядка кратности в точке $x = x'$ при всех значениях y . Как можно видеть из соотношения (23), такие же исследования с сингулярным поведением нормировочных функций справедливы для потенциалов с произвольным числом уровней при сближении каких-то двух из них. Напомним более сложные исследования нормировок в [11] при квазипересечении термов.

3. БЕЗОТРАЖАТЕЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Одномерная обратная задача на всей оси $-\infty < y < \infty$ с нулевым коэффициентом отражения, $S^{\text{ref}}(k) = 0$, описывает прозрачные (безотражательные) потенциалы вдоль

переменной y . В полной аналогии с одномерной обратной задачей параметрическая обратная задача может быть представлена как двухканальная с двумя несвязанными интегральными уравнениями. Тем не менее, поскольку $V(x, y)$ выражается как через ядро одного уравнения $K_1(x; y, y')$, так и через ядро второго уравнения $K_2(x; y, y')$, достаточно найти одно из $K_i(x; y, y')$ по формуле, совпадающей с (17). В этом случае ядро $Q^M(x; y, y')$ определяется по функциям отражения $\mathcal{S}^{\text{ref}}(x; k)$, уровням связанных состояний $\mathcal{E}_n(x)$ и их нормирующим функциям $\gamma_n^2(x)$ по формуле

$$Q^M(x; y, y') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{S}^{\text{ref}}(x; k) \exp[ik(y + y')] dk + \sum_n^m \gamma_n^2(x) \exp[-\kappa_n(x)(y + y')]. \quad (36)$$

Если функция отражения $\mathcal{S}^{\text{ref}}(x; k)$ выбрана равной нулю при всех энергиях и всех значениях переменной x , то интеграл в соотношении для $Q(x; y, y')$ исчезает, и остается только сумма по связанным состояниям. Коэффициент прохождения $\mathcal{S}^{\text{tr}}$, по абсолютному значению равный единице, есть рациональная функция

$$\mathcal{S}^{\text{tr}}(x; k) = \prod \frac{k + i\kappa(x)}{k - i\kappa(x)}, \quad (37)$$

зависящая от динамической параметрической переменной $x = x(t)$.

Соотношения для потенциалов и решений могут быть выражены через нормированные собственные функции и представлены в наиболее удобном симметричном виде. Следуя [22], введем функции

$$\lambda_n(x; y) = \gamma_n(x) \exp(-\kappa_n(x)y).$$

Тогда формула для ядра $K(x; y, y')$ может быть записана в виде

$$K(x; y, y') = - \sum_n^N \gamma_n(x) \psi_n(x; y) \exp(-\kappa_n(x)y') = - \sum_n^N \psi_n(x; y) \lambda_n(x; y'). \quad (38)$$

Для нормированных собственных функций $\psi_n(x; y)$ из (19) получаем

$$\psi_n(x; y) = \sum_j^N \lambda_j(x; y) A_{jn}^{-1}(x; y) \quad (39)$$

с матрицей $A_{jn}(x; y)$, заданной формулой

$$A_{jn}(x; y) = \delta_{jn} + \frac{\lambda_j(x; y) \lambda_n(x; y)}{\kappa_n(x) + \kappa_j(x)}. \quad (40)$$

Наконец, ядро $K(x; y, y')$ и потенциал могут быть представлены как

$$K(x; y, y') = - \sum_n^N \sum_j^N \lambda_j(x; y) A_{jn}^{-1}(x; y) \lambda_n(x; y'), \quad (41)$$

$$V(x; y) = -4 \sum_n^m \kappa_n(x) \psi_n^2(x; y).$$

Рис. 2

Отсюда очевидно, что параметрическое уравнение Шредингера (11) для безотражательных по другой координатной переменной потенциалов нелинейно. Та же ситуация имеет место при отсутствии параметрической переменной.

Напомним, что соотношения (41) получены для специфического случая нулевой функции отражения $S^{\text{ref}}(x; k) = 0 \quad \forall x$. Отметим, что симметричные прозрачные потенциалы для каждого фиксированного значения x и соответствующие волновые функции полностью определяются энергетическими уровнями [23, 24], т. к. в этом случае нормировки функций связанных состояний выражаются следующим образом:

$$\gamma_n^2(x) = 2\kappa_n(x) \prod_{m \neq n} \left| \frac{\kappa_m(x) + \kappa_n(x)}{\kappa_m(x) - \kappa_n(x)} \right|. \quad (42)$$

Ниже мы даем несколько примеров восстановления зависящих от времени безотражательных симметричных и несимметричных по y потенциалов, для которых параметрическое уравнение Шредингера имеет точное решение.

Рис. 3

3.1. Безотражательные симметричные по y потенциалы. Рассмотрим простой пример двумерной точно решаемой модели для двухуровневых систем с симметричными по y потенциалами. Симметричные безотражательные вдоль координатной переменной y потенциалы и соответствующие базисные функции определяются только энергетическими уровнями вследствие выбора нормировочных функций $\gamma_n^2(x)$ в виде (42):

$$\gamma_{1,2}^2(x) = 2\kappa_{1,2}(x) \left| \frac{\kappa_1(x) + \kappa_2(x)}{\kappa_1(x) - \kappa_2(x)} \right|.$$

Учитывая уравнения (39) для нормированных собственных функций $\psi_1(x; y)$ и $\psi_2(x; y)$ и выполняя некоторые упрощения, получаем

$$\begin{aligned} \psi_1(x; y) &= \frac{\sqrt{2\kappa_1(x)b(x)} \operatorname{ch}(\kappa_1(x)y)}{\operatorname{ch}[(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))y] + b(x) \operatorname{ch}[(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))y]}, \\ \psi_2(x; y) &= \frac{\sqrt{2\kappa_2(x)b(x)} \operatorname{sh}(\kappa_2(x)y)}{\operatorname{ch}[(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))y] + b(x) \operatorname{ch}[(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))y]}, \end{aligned} \quad (43)$$

Рис. 4

где $b(x) = |(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))/(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))|$. Принимая во внимание (43) и (41), получим выражение для потенциала $V(x; y)$ в удобном для анализа виде:

$$V(x; y) = -8b(x) \frac{\kappa_1^2(x) \operatorname{ch}^2(\kappa_1(x)y) + \kappa_2^2(x) \operatorname{sh}^2(\kappa_2(x)y)}{\{\operatorname{ch}[(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))y] + b(x) \operatorname{ch}[(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))y]\}^2}. \quad (44)$$

Очевидно, что потенциал $V(x; y)$ симметричен по y при каждом значении параметрической переменной x (рис. 2б и рис. 3). Нетрудно видеть из (43), что собственная функция основного состояния $\psi_1(x; y)$ (рис. 4) симметричная, а $\psi_2(x; y)$ (рис. 5) антисимметричная по $y \forall x$, как это требуется для задачи на всей оси $-\infty < y < \infty$ с симметричным потенциалом. Одномерный прозрачный потенциал с двумя связанными состояниями и соответствующие волновые функции немедленно получаются из более общих соотношений (38)–(44) параметрической задачи при $\kappa_i(x) = \kappa_i$.

В качестве предельного случая рассмотрим $\kappa_2(x) \rightarrow \kappa_1(x)$. Как можно видеть из (44) и (43), если $\kappa_2(x) = \kappa_1(x)$ в какой-то точке $x = x'$, то предельные значения потенциала

Рис. 5

и волновых функций равны нулю $V(x'; y) = \psi_1(x'; y) = \psi_2(x'; y) = 0 \quad \forall y$ (см. рис. 2), в то время как в рассмотренной выше задаче на полуоси $0 \leq y < \infty$ (раздел 2) потенциал и его собственные функции сингулярны при $x = x'$.

Матричные элементы обменного взаимодействия $A_{12}(x)$, индуцированные базисными функциями параметрического гамильтониана, могут быть записаны в виде

$$A_{12}(x) = 2b(x)\sqrt{\kappa_1(x)\kappa_2(x)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{y(\partial\kappa_2(x)/\partial x) \operatorname{ch}(\kappa_1(x)y) \operatorname{ch}(\kappa_2(x)y)}{G^2(x; y)} - \frac{\operatorname{ch}(\kappa_1(x)y) \operatorname{sh}(\kappa_2(x)y) (\partial G(x; y)/\partial x)}{G^3(x; y)} dy \right] \quad (45)$$

с $G(x; y) = \operatorname{ch}[(\kappa_1(x) + \kappa_2(x))y] + b(x) \operatorname{ch}[(\kappa_1(x) - \kappa_2(x))y]$. Так как $G(x; y)$ вместе со своей производной по x — четные функции y , оба подынтегральных выражения — нечетные функции y и интеграл в (45) равен нулю, т.е. $A_{12}(x) = 0 \quad \forall x$. Это означает, что нет связи между собственными состояниями $\psi_1(x; y)$ и $\psi_2(x; y)$ ни в один из моментов времени t и ни в одной из точек адиабатической переменной x для прозрачных

Рис. 6

симметричных по y потенциалов. Амплитуда перехода между связанными состояниями $\psi_1(x; y)$ и $\psi_2(x; y)$ равна нулю, поскольку определяется нулевыми матричными элементами $A_{12}(x) = 0 \quad \forall x$.

Приведем конкретный пример двумерной точно решаемой модели для двухуровневой системы с прозрачными симметричными по y потенциалами и с периодической зависимостью x от времени. Определим два терма следующим образом: $\kappa_1(x) = (1/\text{ch}(x/2) + 0.25)$, $\kappa_2(x) = 1/\text{ch}(x/3)$ с $x(t) = \bar{x}(1 - \cos(\omega t))$, где $\bar{x}$ соответствует не зависящему от времени случаю. Потенциал и соответствующие нормированные собственные функции представлены при значениях ωt , равных $0, \pi/6, \pi/3, \pi/2, \pi$, на рис. 3, 4 и 5, соответственно. Их поведение зеркально симметрично относительно линии $\omega t \in (0, \pi)$. Легко видеть, что потенциал и функции изменяются от очень простых одномерных для $\omega t = 0$ (рис. 3а, 4а и 5а) к довольно сложным двумерным при всех других значениях $\omega t \neq 0$. Функция $x(t)$ при $\omega t = \pi/2$ и $\omega t = 3\pi/2$ совпадает с $\bar{x}$, не зависящим от t , и мы получаем двумерную стационарную задачу, при $\omega t = 2\pi$ система вновь становится одномерной с

Рис. 7

первоначальными состояниями $|\psi_n(x(t); y)\rangle \equiv |\psi_n(y)\rangle$. Собственные функции $\psi_1(x; y) \forall x$ симметричны (см. рис. 4), а $\psi_2(x; y) \forall x$ антисимметричны по y (см. рис. 5). Матричные элементы обменного взаимодействия $A_{12}(x)$, рассчитанные по собственным функциям параметрического мгновенного гамильтониана, равны нулю, что подтверждает вышеупомянутое заключение.

Несимметричные прозрачные потенциалы. Покажем, что при выборе нормировочных функций $\gamma_n^2(x)$, не удовлетворяющих условию (42), теряется симметрия по y и возникает обменное взаимодействие $A_{nm}(x)$ между состояниями. Определим два энергетических термина $\mathcal{E}_1(x)$ и $\mathcal{E}_2(x)$, как и в предыдущем случае, но нормировочные функции определим в виде $\gamma_n^2(x) = 2\kappa_n(x)$. Потенциал $V(x(t), y)$ и соответствующие нормированные собственные функции $\psi_{1,2}(x(t), y)$ представлены на рис. 6, 7 и 8 для значений ωt , равных 0, $\pi/4$, $\pi/3$, $\pi/2$, π , соответственно. Легко видеть, что потенциал и функции теряют свою симметрию по y , которая имела место при выборе нормировочных функций согласно (42) (см. рис. 2, 3, 4 и 5). В результате возникает связь между состояниями, $A_{1,2}(x) \neq 0$, и существуют переходы между уровнями. Поведение

Рис. 8

матричных элементов неадиабатической связи $A_{12}(x(t))$ и $B_{12}(x(t))$ (6), вычисленных в различные моменты времени, представлено на рис. 9 и 10. При $\omega t = 0$ естественно коэффициенты A_{ij} и B_{ij} отсутствуют, поскольку нет зависимости от x . Для всех $\omega t \neq 0$ функции $A_{12}(x) = -A_{12}(-x)$ антисимметричны относительно начала координат вследствие нашего выбора спектральных данных и зависимости $x(t)$. Для всех $\omega t \neq 0$ функции $B_{12}(x) = B_{12}(-x)$ симметричны по x , поскольку получены как произведение двух антисимметричных функций: $A(x)$ и $\dot{x}(t)$. Напомним, что матричные элементы $A_{12}(x(t)) = -A_{21}(x(t))$ и $B_{12}(x(t)) = -B_{21}(x(t))$ антисимметричны по индексу состояния (здесь 1 и 2). Тенденция изменения A как функции ωt следующая: амплитуды изменения A тем больше, чем меньше ωt . Если ωt мало, второй пик справа сравним с первым пиком. С увеличением ωt второй пик уменьшается. С нашей точки зрения такое поведение обменного взаимодействия A можно объяснить взаимным влиянием состояний. При малых значениях ωt потенциальные кривые близки друг к другу на большем интервале, чем при больших значениях ωt . Интересно отметить, что $B_{12}(x)$ равно нулю при $\omega t = \pi$, несмотря на то что связь $A_{12}(x) \neq 0$, а $\dot{x}(t) = 0$.

Рис. 9

В результате нашего анализа можно сделать заключение о том, что выбор нормировочных функций собственных состояний параметрического гамильтониана сильно влияет на поведение динамических квантовых систем. Решение исходной задачи (1) получается после решения систем многоканальных уравнений (5) или (9) относительно ко-

Рис. 10

эффицентов разложения. В общем случае решения этих систем не обязательно точные.

3.2. Конструирование зависящих от времени потенциалов и волновых функций через не зависящие от времени. Преобразуем процедуру обратной задачи так, чтобы непосредственно выразить зависящие от времени потенциал и решения параметрического уравнения (3) через не зависящие от времени потенциал и решения. Решение этой задачи достигается в два этапа. На первом этапе решается стационарная задача в соответствии с (17)–(19), а именно восстанавливаются, например, потенциал $\overset{\circ}{V}(x; y)$ и соответствующие решения $\overset{\circ}{\phi}(x; k, y)$ в начальный момент времени $t = t_0$ по спектральным данным, не зависящим от времени. На втором этапе, используя полученные решения $\overset{\circ}{\phi}(x; k, y)$ как исходные, по аналогии с (18)–(19) определяем зависящие от

времени потенциал и решения из обобщенных соотношений

$$V(x(t); y) = \overset{\circ}{V}(x; y) \mp 2 \frac{d}{dy} K(x(t); y, y), \quad (46)$$

$$\phi(x(t); k, y) = \overset{\circ}{\phi}(x(t); k, y) + \int_{y(0)}^{\infty(y)} K(x(t); y, y') \overset{\circ}{\phi}(x(t); k, y') dy'. \quad (47)$$

Ядро $K(x(t); y, y')$ находится из основных уравнений Марченко или Гельфанда–Левитана (17), в которых ядро $Q(x(t); y, y')$ вычисляется по двум наборам спектральных данных: $\{\mathcal{S}(x; k), \mathcal{E}_n(x), \gamma_n^2(x)\}$, $\{\mathcal{S}(x(t); k), \mathcal{E}_n(x(t)), \gamma_n^2(x(t))\}$.

В полной аналогии с рассмотренной выше процедурой (24)–(29), когда была выбрана функция Йоста в виде (15), интегральные уравнения обратной задачи сводятся к набору алгебраических. Например, для безотражательных потенциалов $\mathcal{S}^{\text{ref}}(k) = 0$ ядро $Q(y, y')$ рассчитывается по потенциальным кривым $\mathcal{E}_n(x)$, $\mathcal{E}_n(x(t))$ и нормировочным функциям $\gamma_n^2(x)$, $\gamma_n^2(x(t))$, отвечающим потенциалам $\overset{\circ}{V}(x; y)$ и $V(x(t); y)$, соответственно:

$$\begin{aligned} Q(x(t); y, y') = & \sum_n^N \gamma_n^2(x(t)) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x(t)), y) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x(t)), y') - \\ & - \sum_n^N \gamma_n^2(x) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x), y) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x), y'). \end{aligned} \quad (48)$$

Базовые функции $\overset{\circ}{\phi}(y)$ взяты при энергиях $\mathcal{E}_n(x)$ и $\mathcal{E}_n(x(t))$. Это возможно, т. к. функции $\overset{\circ}{\phi}(k, y)$ определены при всех значениях k . Потенциал $V(x(t), y)$ и нормированные собственные функции $\psi_n(x(t))$ могут быть получены в соответствии с процедурой раздела 2. Очевидно, что при $t = t_0$ имеем $P_{nm} = \delta_{nm}$ и $\psi_n(x(t); y) = \overset{\circ}{\psi}_n(x; y)$. Матричные элементы $B_{nm}(x(t))$ (10) могут быть записаны в терминах не зависящих от t решений $\overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x(t)), y)$, взятых, однако, при $k = i\kappa_n(x(t))$. Эта постановка особенно удобна для исследования систем с медленно изменяющимися со временем спектральными функциями.

Адиабатически изменяющиеся системы. Для исследования свойств адиабатически изменяющихся квантовых систем используются уравнения (1) и (9). В соответствии с уравнением (9) переходы из начального состояния $\Psi(t_0) = \psi(x(t_0))$ в конечное состояние $\Psi(x(t))$ определяются матричными элементами оператора эволюции $\mathcal{U}(t, t_0)$, который удовлетворяет интегральному уравнению

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{nm}(t, t_0) = & \delta_{nm} + \sum_{m'} \int_{t_0}^t B_{nm'}(x(s)) \times \\ & \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^s (\mathcal{E}_n(t') - \mathcal{E}_{m'}(t')) dt' \right] \mathcal{U}_{m'm}(s, t_0) ds. \end{aligned} \quad (49)$$

Уравнение (49) решается методом итераций

$$\mathcal{U}_{nm}(t, t_0) = \delta_{nm} + \int_{t_0}^t B_{nm}(x(s)) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^s (\mathcal{E}_n(t') - \mathcal{E}_m(t')) dt' \right] ds + \dots \quad (50)$$

Амплитуды перехода в этом случае определяются матричными элементами $B_{nm}(x(t)) = A_{nm}(x(t)) \partial_t x$ обменного взаимодействия (10), которое может быть вычислено в терминах аналитических базисных функций $\psi_n(x(t))$ с использованием рассмотренной выше техники.

В тех случаях, когда спектральные функции $i\kappa_n(x(t))$ и $\gamma_n(x(t))$ — медленно и плавно изменяющиеся функции времени, возможна следующая замена:

$$B_{nm}(x(t)) \rightarrow \langle \gamma_n(x(t)) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_n(x(t)), y) \mid \partial_t (\gamma_m(x(t)) \overset{\circ}{\phi}(i\kappa_m(x(t)), y)) \rangle.$$

Параметрическая зависимость матричных элементов $B_{nm}(x(t))$ в случае, когда адиабатическая переменная представима в виде $x(t) = xg(t)$, может быть факторизована в произведение

$$B_{nm}(x(t)) = \overset{\circ}{A}_{nm}(x) \partial_t g(t),$$

где $g(t)$ — медленно изменяющаяся функция времени. После этого матричные элементы оператора эволюции принимают простой вид

$$\mathcal{U}_{nm}(t_0, t) = \delta_{nm} + \overset{\circ}{A}_{nm}(x) \int_{t_0}^t \partial_s g(s) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^s (\mathcal{E}_n(t') - \mathcal{E}_m(t')) dt' \right] ds. \quad (51)$$

В принципе возможен учет точных функций $\phi(i\kappa_n(x(t)), y)$, но такие вычисления громоздки.

Рассмотрим конкретный пример плавного изменения $x(t)$ [13]:

$$x(t) = \overset{\circ}{x}(1 + a \exp(-1/t)), \quad (52)$$

так что $x(t=0) = \overset{\circ}{x}$, $x(\infty) = (1+a)\overset{\circ}{x}$. Выберем спектральные данные так же, как в разделе 3, с термами $\mathcal{E}_1 = -(1/\operatorname{ch}(x/2) + 0.25)^2$, $\mathcal{E}_2 = -1/\operatorname{ch}^2(x/3)$, однако с функциональной зависимостью $x(t)$, определяемой с помощью (52). Для прозрачных симметричных по y потенциалов с нормировками $\gamma_n^2(x)$, заданными согласно (42), амплитуды переходов равны нулю, поскольку определяются нулевыми матричными элементами $A_{12} = -A_{21} = 0$ (пункт 3.1). Выберем теперь нормировки, как в пункте 3.2: $\gamma_n^2(x) = 2\kappa_n(x)$. Тогда при $t=0$ имеем случай, совпадающий с рассмотренным в пункте 3.2 при $\omega t = \pi/2$ (см. рис. 6г, 7г и 8г) и соответствующий не зависящему от времени гамильтониану; ситуация, когда $\omega t = \pi$ (см. рис. 6д, 7д и 8д), соответствует $t \rightarrow \infty$ при $a=1$. Из сравнения рис. 9в и рис. 9г ясно, что матричный элемент $A_{12}(t)$ изменяется очень плавно на интервале $0 \leq t < \infty$. В этом случае B_{12} представимо как

$$B_{12}(x(t)) \rightarrow \langle \overset{\circ}{\psi}(\kappa_1(x); y) \mid \partial_x \overset{\circ}{\psi}(\kappa_2(x); y) \rangle \partial_t g(t),$$

и матрицы перехода могут определяться в соответствии с (51), где $g(s) = (1 + e^{-1/s})$.

Вполне очевидно, что можно выбрать другую зависимость от времени и другие начальные спектральные данные с предписанными свойствами. В частности, для специального случая параметрической вариации спектральные характеристики могут быть взяты в факторизованном виде $\mathcal{E}_n(x) = x^2 \tilde{\mathcal{E}}_n$, где $\tilde{\mathcal{E}}_n$ – собственные значения начальной задачи (см., например, [25]). Некоторые примеры реконструирования зависящих и не зависящих от времени двумерных потенциалов и соответствующих решений рассмотрены в [23, 24, 26, 27]; настоящая статья представляет собой расширенный вариант работы [28].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный метод позволяет конструировать в замкнутом аналитическом виде широкий класс потенциалов и соответствующих решений параметрического уравнения (3) и вычислять матричные элементы обменного взаимодействия. Подход позволяет исследовать влияние параметрических спектральных данных на поведение потенциалов, решений Йоста, регулярных решений и функций базиса параметрического гамильтониана, а также на матричные элементы обменного взаимодействия. Показано, что основные черты обменного взаимодействия, определяющего гамильтониан медленной подсистемы, существенно зависят от характера параметрического гамильтониана: а именно, он задан на всей оси $-\infty < y < \infty$ или на полуоси $0 \leq y < \infty$. Как следствие проблема пересечения уровней в задаче для медленной подсистемы имеет различное решение для обеих постановок параметрической задачи. Матричные элементы $A_{nm}(x)$ не имеют сингулярностей в точках вырождения двух уровней, если параметрическая задача определена на всей оси, в то время как при радиальной параметрической задаче или задаче на полуоси потенциал вместе со своими собственными функциями, а также матричные элементы обменного взаимодействия сингулярны в точках вырождения состояний. Исследовано влияние нормирующих функций на свойства динамических систем. В частности, установлено, что при параметрической задаче на всей оси и при специальном выборе нормировочных функций (42) обменное взаимодействие между связанными состояниями двухуровневой системы отсутствует при всех значениях адиабатической переменной, даже в точках вырождения. Фактически, используя точные решения параметрического уравнения, в рамках предлагаемого подхода можно проследить за поведением матричных элементов обменного взаимодействия в любой момент времени. Мы рекомендуем использовать подход для исследования проблемы Ландау–Зинера переходов и пересечения уровней.

Авторы благодарны профессору Г. фон Герамбу и докторам М. Сандеру и Л. Яде за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] M. Berry. Proc. R. Soc. London. A. 1984. V. 392. P. 45.

- [2] *C. A. Mead.* Rev. Mod. Phys. 1992. V. 64. P. 51.
- [3] *D. Kuznezov, A. Bulgac.* Ann. Phys. 1992. V. 214. P. 180.
- [4] *M. Born, R. Oppenheimer.* Ann. Phys. 1927. V. 84. P. 457.
- [5] *M. Born, V. Fock.* Z. Phys. 1928. B. 51. S. 165.
- [6] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика. Т.3. М.: Наука, 1974; *L. D. Landau.* Phys. Z. Sov. 1932. B. 1. S. 88.
- [7] *C. Zener.* Proc. R. Soc. London. A. 1932. V. 137. P. 696.
- [8] *N. Rozen, C. Zener.* Phys. Rev. 1932. V. 40. P. 502.
- [9] *D. L. Hill, J. A. Wheeler.* Phys. Rev. 1953. V. 89. P. 1102.
- [10] *Ю. Н. Демков.* ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 195.
- [11] *Е. А. Соловьев.* УФН. 1989. Т. 157. С. 437.
- [12] *G. A. Hagedorn.* Ann. Phys. 1989. V. 196. P. 278.
- [13] *Andrei A. Kivitsinsky, Seth. Putterman.* Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 6303.
- [14] *А. А. Сузько.* ЯФ. 1993. Т. 56. С. 189.
- [15] *V. M. Dubovik, B. L. Markovski, A. A. Suzko, S. I Vinitisky.* Phys. Lett. A. 1989. V. 142. P. 133.
- [16] *С. И. Винуцкий, А. А. Сузько.* ЯФ. 1990. Т. 52. С. 442.
- [17] *J. T. Hwang, Ph. Pechukas.* J. Chem. Phys. 1977. V. 67. P. 4640.
- [18] *А. А. Сузько.* ЭЧАЯ. 1993. Т. 24. С. 1133–1213; *А. А. Suzko.* Multidimensional and Three-Body Inverse Scattering Problems in the Adiabatic Representation. In: Lect. Notes in Physics. V. 427. Proc. Int. Conf. "Quantum Inversion Theory and Applications". Ed. H. V. von Geramb. Heidelberg: Springer-Verlag, 1994. P. 67–106.
- [19] *А. А. Сузько.* ЯФ. 1992. Т. 55. С. 1359.
- [20] *H. E. Moses.* J. Math. Phys. 1979. V. 20. P. 2047–2053; *В. Н. Пивоварчик, А. А. Сузько.* Обобщение метода Марченко в обратной задаче квантовой теории рассеяния. В сб.: Эволюционные проблемы переноса энергии в неоднородных средах. Тр. Института тепло- и массообмена АН БССР. Минск: ИТМО, 1982. С. 168–177.
- [21] *B. N. Zakhariev, A. A. Suzko.* Potentials and Quantum Scattering: Direct and Inverse Problems. New York–Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 1990.
- [22] *F. Caloggero, A. Degasperis.* Spectral transform and solitons. Amsterdam–New York–Oxford: North-Holland Publishing Company, 1982.
- [23] *А. А. Сузько, Е. П. Величева.* ЯФ. 1996. Т. 59. С. 1132.
- [24] *А. А. Сузько, Е. П. Величева.* ЭЧАЯ. 1996. Т. 27. С. 923–964.
- [25] *V. Spiridonov.* Phys. Rev. A. 1995. V. 52. P. 1109.
- [26] *A. A. Suzko, E. P. Velicheva.* Exactly Solvable Quantum Models for Investigation of Nonadiabatic Transitions. In: Lect. Notes in Physics. V. 488. Proc. Int. Conf. on Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory. Heidelberg: Springer-Verlag, 1997. P. 342–353.
- [27] *A. A. Suzko.* Exactly Solvable Models for Two-Dimensional Quantum Systems. In: Lect. Notes in Physics. V. 488. Proc. Int. Conf. on Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory. Heidelberg: Springer-Verlag, 1997. P. 310–341.
- [28] *А. А. Сузько, Е. П. Величева.* Препринт Е4–97–200. Дубна: ОИЯИ, 1997.

Поступила в редакцию 2.Х.1997 г.