Точечные потенциалы в квантовой механике

ВЭИ-филиал ФГУП "РФЯЦ ВНИИТФ им. акад. Е.И.Забабахина"

А.С.Чихачев

Красноказарменная 12, 111250, Москва, Россия

Аннотация

Рассмотрены модели точечных взаимодействий, приближенно описывающих реальные взаимодействия частиц в квантовой механике. Введено понятие «точечного кластера» - комплекса зарядов, которые при нулевом размере создают возможность локализации пробной частицы в области конечного размера. Изучены состояния в одномерных системах, а также в трехмерных системах с «локальной изотропией».

Введение

Использованию точечных потенциалов для модельного описания атомных процессов посвящена обширная литература – см., например, [1], [2]. Этому обстоятельству способствует видимая простота описания при помощи δ - потенциалов, связанная с возможностью аналитического решения сложных задач. При этом, однако, обычно не изучается способ создания системы, характеризуемой нулевым радиусом взаимодействия. Можно предположить, что при реально малом размере положительного заряда определяющую роль в поведении системы играет один связанный уровень, тогда способ создания δ - потенциала оказывается не существенным. Подробному теоретическому изучению свойств точечных потенциалов посвящены работы [3], [4]. Следует упомянуть работы, рассматривающие точные решения нестационарных задач о разбегающихся δ- потенциалах – [5], [6], [7], иллюстрирующие возможности рассматриваемого модельного метода. Полное самосогласованное описание систем с точечными, или с δ - потенциалами может представлять интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. Далее изучаются взаимодействие точечных кластеров в одномерных системах и состояния точечных систем в трехмерных сферически симметричных системах.

Взаимодействие точечных кластеров

Одномерная система

Рассмотрим, сначала, одномерную систему, описываемую уравнением Шредингера следующего вида:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = V(x)\psi(x,t), \tag{1}$$

где $\psi(x,t)$ - пси-функция электрона, x, t - координата и время, используется атомная система единиц: $\hbar = m = 1$. Если потенциал имеет вид $V = -\alpha\delta(x)$, то (1) имеет решение: $\psi = \exp(-i\frac{\alpha^2 t}{2})\exp(-\alpha|x|)$, где α - глубина связанного уровня Далее будут изучаться только стационарные решения уравнения Шредингера, обозначаемые $\psi(x)$. Рассмотрим, каким образом сторонние заряды могут создать потенциал $V(x)=-\alpha\delta(x)$, , если взаимодействие является электромагнитным. Воспользуемся уравнением Пуассона, записанным в безразмерных переменных: $\Delta V(x)=-4\pi\rho(x)$, где $\rho(x)$ -линейная плотность заряда объекта, создающего δ - потенциал, этот объект далее будем называть «кластером». Плотность заряда кластера удовлетворяет соотношению: $\rho=\frac{\alpha}{4\pi}\delta''(x)$.. Это равенство означает, что полный заряд кластера q равен нулю - $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\rho(x)dx=0$, также равен нулю дипольный момент - $d_1=\int\limits_{-\infty}^{\infty}x\rho(x)dx=0$, и только квадратичный момент отличен от нуля: $d_2=\int\limits_{-\infty}^{\infty}x^2\rho(x)dx=\frac{\alpha}{2\pi}$. Из приведенных рассмотрений следует, что для удержания заряженной частицы (электрона) в ограниченной области не является обязательным наличие заряда противоположного знака в центре системы – электрон может быть локализован, если он взаимодействует с точечным кластером, характеризуемым нулевым зарядом, но имеющим отличный от нуля квадратичный момент. При этом поле кластера всюду, кроме окрестности точки $x = 0$ равно нулю.

Рассмотрим ситуацию, когда имеются два δ - центра, т.е. потенциал имеет вид:

$$V = -\alpha_1 \delta(x - x_0) - \alpha_2 \delta(x + x_0). \tag{2}$$

Решение стационарного уравнения Шредингера, характеризуемого глубиной уровня $\frac{\beta^2}{2}$, можно искать в виде:

$$\psi = a \exp\left(-\beta|x - x_0|\right) + b \exp\left(-\beta|x + x_0|\right). \tag{3}$$

Подставляя (3) в (1) с учетом (2) получим систему:

$$a\beta = \alpha_1(a + b \exp(-2\beta x_0), \qquad b\beta = \alpha_2(a \exp(-2\beta x_0) + b). \tag{4}$$

Здесь a, b - константы. Из условия наличия ненулевого решения этой системы для a, b для величины β можно получить соотношение:

$$(\beta - \alpha_1)(\beta - \alpha_2) = \alpha_1 \alpha_2 \exp(-4\beta x_0). \tag{5}$$

В случае, когда $\alpha_1 = \alpha_2$ возможны симметричное и антисимметричное решения для ψ -функции. Если $a = b$, то $\alpha = \frac{\beta}{1+\exp(-2\beta x_0)}$, а если $a = -b$, , то $\alpha = \frac{\beta}{1-\exp(-2\beta x_0)}$.

Рассмотрим, далее, воздействие поля электрона, связанного двумя центрами, на сами эти центры – точечные кластеры. Полная сила, действующая на кластер, вычисляется как интеграл следующего вида:

$$F = \int dx \rho_{cl}(x) E(x), \tag{6}$$

где ρ_{cl} - плотность заряда кластера, $E(x)$ - поле, создаваемое связанным электроном. Это поле определяется из уравнения: $div\vec{E} = 4\pi\rho_e$, где $\rho_e = |\psi|^2$. Т.е. поле должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{dE}{dx} = C_0^2 |\exp(-\beta|x - x_0| + |\exp(-\beta|x + x_0|)|^2 \tag{7}$$

Это уравнение соответствует симметричному распределению электронной плотности, C_0 - нормировочная константа. Поскольку плотность заряда кластера, находящегося в точке $x = x_0$ определяется как $\rho_{cl} = \frac{\alpha}{4\pi}\delta''(x - x_0)$, сила, действующая на этот кластер определяется равенством:

$$F = \alpha \int dx'\delta''(x' - x_0)E(x') = -\alpha \int dx'\delta'(x' - x_0)E'(x') =$$

$$-4\pi\alpha C_0^2 \int dx'\delta'(x' - x_0)(\exp(-\beta|x' - x_0|) + \exp(-\beta|x' + x_0|))^2.$$

Производная подинтегральной функции имеет разрыв в точке, вблизи которой локализован кластер:

$$\frac{d}{dx'}(\exp(-\beta|x' - x|) + \exp(-\beta|x' + x|))^2 =$$

$$-2\beta(\exp(-\beta|x' - x_0|) + \exp(-\beta|x' + x_0|))\times$$

$$(\exp(-\beta|x' - x|)sign(x' - x_0) + \exp(-\beta|x' + x|)sign(x' + x_0)).$$

Разность между значениями справа и слева от точки $x = x_0$ составляет $-2\beta(1 + \exp(-2\beta x_0))\exp(-2\beta x_0)$, что следует считать силой, действующей на кластер. При этом, однако, предполагается, что заряды, составляющие кластер, удерживаются неэлектромагнитными силами, превосходящими силы со стороны электрических зарядов. Можно, далее, показать, что полная сила, действующая на кластер, локализованный вблизи $x = -x_0$, равна по величине и противоположна по направлению силе, действующей на кластер в точке $x = x_0$ и в случае симметричной по x пси-функции электрона кластеры отталкиваются, а при антисимметричной пси-функции кластеры притягиваются друг к другу. При отсутствии симметрии системы для сил, действующих на кластеры можно получить: $|F| = 2ab\beta^2 \exp(-2\beta x_0)$. Силы равны по величине и противоположны по направлению Отметим здесь, что рассмотрение настоящей работы имеет смысл при $\beta > 0$, при этом величины $\alpha_{1,2}$ не обязательно положительны. Если $\alpha_2 = -\alpha_1$ то из (6) следует: $\alpha_1 = \frac{\beta}{\sqrt{1-\exp(-4\beta x_0)}}$. Отношение $\frac{a}{b}. = \frac{\alpha_1}{\beta-\alpha_1} \exp(-2\beta x_0)$.

Таким образом, в настоящем разделе рассмотрены проблемы теоретического описания систем с точечными потенциалами в одномерных системах. Эти проблемы изучались также в работе [8].

Интегральная модель точечного потенциала

В данном разделе предложена интегральная модель точечного потенциала в трехмерном случае. В отличие от обычно используемой модели с производной, интегральная модель допускает плавный переход состояния двух центров в состояние одного центра при уменьшении расстояния между центрами до нуля.

Отметим, что в трехмером случае обычно используется точечный потенциал с производной от ψ-функции.Оказывается, что при этом в случае, если существуют два центра, то при стремлении расстояния между ними к нулю не существует плавного перехода в состояние одного центра. В настоящем разделе предложена модель модифицированная модель точечного взаимодействия, в которой такой плавный переход возможен.

Уравнение Шредингера при наличии одного трехмерного точечного центра с производной можно записать в виде:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{1}{2}\triangle\psi=\frac{2\pi}{\alpha}(\psi+\vec{r}\nabla\psi)\delta(\vec{r}) \tag{8}$$

Здесь использована система единиц, в которой $m=\hbar$=1. Уравнение (8) описывает систему с единственным связанным состоянием:

$$\psi=\frac{const}{r}\exp\{-\alpha r\}\exp\{\frac{i\alpha^2 t}{2}\}, \tag{9}$$

где $-\frac{\alpha^2}{2}$ -энергия единственного связанного уровня. Если имеется два неподвижных δ-центра расположенных в точках $\vec{r}=\pm\vec{r}_0$, то уравнение для ψ-функции имеет вид:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{1}{2}\triangle\psi=\frac{2\pi}{\alpha}\{[\psi+(\vec{r}-\vec{r}_0)\nabla\psi]\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)+ \\ [\psi+(\vec{r}+\vec{r}_0)\nabla\psi]\delta(\vec{r}+\vec{r}_0)\}. \end{aligned} \tag{10}$$

Обычно решение (10) ищется в виде:

$$\psi=\exp\left\{\frac{i\beta^2 t}{2}\right\}\left\{\frac{\exp(-\beta|\vec{r}-\vec{r}_0|)}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}+\frac{\exp(-\beta|\vec{r}+\vec{r}_0|)}{|\vec{r}+\vec{r}_0|}\right\}. \tag{11}$$

При этом для определения глубины уровня β можно получить соотношение:

$$\alpha = \beta - \frac{\exp(-2\beta r_0)}{2r_0}. \tag{12}$$

Из (12) видно, что при $r_0 \to 0$ не существует плавного перехода к связанному состояию одного δ-центра. Этим трехмерный случай отличается от одномерного, где такой плавный переход возможен (см. предыдущий раздел). При этом в одномерном случае при слиянии двух одинаковых δ-центров происходит удвоение константы связи ($\beta = 2\alpha$). В трехмерном случае если в (12) формально положить $r_0 = 0$ то константа связи не удваивается, а, наоборот, становится в два раза меньше, что, по-видимому, не описывает реальную физическую ситуацию. Однако и к этому соотношению нет плавного перехода при $r_0 \to 0$. В связи с этим рассмотрим такое представление точечного потенциала, которое вместо производной содержит интеграл от ψ-функции. Пусть уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\triangle\psi = -\frac{\alpha}{2}\int K(\vec{r},\vec{r'})d\vec{r'}\psi(\vec{r'},t)\delta(\vec{r}), \tag{13}$$

причем будем считать, что $K(\vec{r},\vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$. Можно убедиться,что (13) имеет решение, описывающее связанное состояние, совпадающее с (9). Рассмотрим, далее, два точечных центра, расположенных в точках $\vec{r} = \pm r_0$, описываемых уравнением Шредингера:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\triangle\psi = -\frac{\alpha}{2}\int\frac{d\vec{r}'\psi(\vec{r}',t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}[\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)+\delta(\vec{r}+\vec{r}_0)]. \qquad (14)$$

При подстановке выражения (11) в (14) получим следующее уравнение:

$$-2\pi[\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)+\delta(\vec{r}+\vec{r}_0)] =$$

$$-\frac{\alpha}{2}\{\frac{4\pi}{\beta} + \int\frac{d\vec{r}'\,\mathrm{exp}(-\beta|\vec{r}'+\vec{r}_0|)}{|\vec{r}'-\vec{r}_0||\vec{r}'+\vec{r}_0|}\}[\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)+\delta(\vec{r}+\vec{r}_0)].$$

Отсюда вместо (12) следует соотношение:

$$\alpha = \frac{\beta}{1+\frac{1}{2\beta r_0}(1-\mathrm{exp}(-2\beta r_0))} \qquad (15)$$

Из (15) следует, что при $r_0 \to 0$ $\beta \to 2\alpha$, т.е. связанное состояние непрерывным образом переходит в состояние с удвоенной константой связи. Это означает, что представление точечного потенциала в виде (13) адекватно описывает рассматриваемую физическую ситуацию. Рассмотрим, далее, случай, когда точечные потенциалы описываются различными константами связи - α_1 и α_2 и определим связанное состояние такой системы. Уравнение Шредингера для такой системы записывается следующим образом:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{1}{2}\triangle\psi=-\frac{1}{2}\int\frac{d\vec{r}'\psi(\vec{r}',t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|}[\alpha_1\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)+\alpha_2\delta(\vec{r}+\vec{r}_0)]. \qquad (16)$$

Решение (16), аналогично работе [9], ищем в виде суммы четырех слагаемых:

$$\psi=\frac{a_1}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}\exp\left[\frac{i\beta_1^2t}{2}-\beta_1|\vec{r}-\vec{r}_0|\right]+$$
$$+\frac{a_2}{|\vec{r}-\vec{r}_0|}\exp\left[\frac{i\beta_2^2t}{2}-\beta_2|\vec{r}-\vec{r}_0|\right]+\frac{b_1}{|\vec{r}+\vec{r}_0|}\exp\left[\frac{i\beta_1^2t}{2}-\beta_1|\vec{r}+\vec{r}_0|\right]+$$
$$+\frac{b_2}{|\vec{r}+\vec{r}_0|}\exp\left[\frac{i\beta_2^2t}{2}-\beta_2|\vec{r}+\vec{r}_0|\right]. \qquad (17)$$

Подстановка (17) в (13) приводит к системе уравнений:

$$
\begin{aligned}
a_{1,2} &= a_{1,2}\frac{\alpha_1}{\beta_{1,2}} + b_{1,2}\frac{\alpha_2}{2\beta_{1,2}^2 r_0}(1-\exp(-2\beta_{1,2}r_0)),\\
b_{1,2} &= a_{1,2}\frac{\alpha_1}{2\beta_{1,2}^2 r_0}(1-\exp(-2\beta_{1,2}r_0)) + b_{1,2}\frac{\alpha_2}{\beta_{1,2}}.
\end{aligned} \tag{18}
$$

Условие существования ненулевого решения для a_1, b_1 совпадает с условием существования ненулевого решения для a_2, b_2 :

$$
\left(1-\frac{\alpha_1}{\beta_1}\right)\left(1-\frac{\alpha_2}{\beta_2}\right) = \frac{\alpha_1\alpha_2}{4\beta_1^4 r_0^2}\left(1-\exp(-2\beta_1 r_0)\right)^2, \tag{19}
$$

Если $r_0 \to 0$, то $\beta_1 = \beta_2 = \alpha_1 + \alpha_2$. Для двух близколежащих центров существует только один связанный уровень. Возможность существования двух уровней разной глубины определяется наличием разных решений уравнения для β:

$$\left(1-\frac{\alpha_1}{\beta}\right)\left(1-\frac{\alpha_2}{\beta}\right)=\frac{\alpha_1\alpha_2}{4\beta^4 r_0^2}\left(1-\exp(-2\beta r_0)\right), \tag{20}$$

При больших значениях r_0 имеется 2 решения: $\beta=\alpha_1$ и $\beta=\alpha_2$.

Заключение

В работе рассмотрены точечные взаимодействия в одномерной и сферически симметричной трехмерной задачах. В одномерном случае введено понятие точечного кластера и рассмотрено взаимодействие таких кластеров. Введена интегральная модель точечного взаимодействия в 3-х мерном случае адекватно описывающая слияние двух центров.

Список литературы

1.Ю.Н.Демков, В.Н.Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса действия в атомной физике. 1975, Изд-во Ленингр. Ун-та,Ленинград

2.A.I.Baz',Ya.B.Zel'dovich and A.M.Perelomov, *Scattering Reactions and Decays in Nonrelativistic Quantum Mechanics,* 2nd ed. ,(Nauka, Moscow,1971)

3.S.Albeverio, F.Gestesy, R.H.Hoegh Krohn, H.Holden. Solvable models in Quantum Mechaniks. Springer-Vrlag, 1988

4.Tarrash J.M.Roman, R.Tarrash, //J.Phys.A.Math.Gen.1996,v.29, 6071-6085.

5.Соловьев Е.А. ТМФ.т.28,240 (1976).

6.Чихачев А.С. ТМФ,т.145,т.107,№3,385 (2005).

7.Манько В.И., Чихачев А.С., ЯФ,2001,т.64,№8.с.1533.

8.Chikhachev A.S.,JMP,2015,v.6,1642-1646.

9.Chikhachev A.S. JRLR, 2005,v.26,No 4.pp.273-276.