
УДК 530.145; 517.958; 537.311.322.

Преобразования Дарбу для обобщённого уравнения Шрёдингера

А. А. Сузько¹, Е. П. Величева[†]

¹ *Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д.6, Дубна, 141980, Россия*

*Объединённый институт энергетических и ядерных исследований НАН Р. Беларусь
ул. акад. А.К. Красина, 99, Минск, 220109, Республика Беларусь*

[†] *Лаборатория ядерных проблем
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д.6, Дубна, 141980, Россия*

Преобразования Дарбу n -го порядка разрабатываются для обобщённого уравнения Шрёдингера, обладающего помимо обычного потенциала эффективной массой, зависящей от координаты, и дополнительным потенциалом, линейно зависящим от энергии. Приведён интегральный вид преобразований Дарбу и установлена их связь с преобразованиями в дифференциальной форме. Проанализированы преобразования второго порядка как при разных энергиях, так и при одной и той же энергии преобразования. Метод проиллюстрирован конкретными примерами конструирования квантовых потенциальных ям с заданным спектром.

Ключевые слова: обобщённые уравнения Шрёдингера, преобразования Дарбу.

1. Введение

В настоящее время вызывает большой интерес исследования квантово-механических систем с эффективной массой, зависящей от координатной переменной, вследствие их применения в различных областях физики. Концепция эффективной массы широко используется в физике твёрдого тела, в атомной и ядерной физике [1–5] и в других смежных областях (например, для изучения кластеров He и металлических кластеров [6–9]).

С развитием низкоразмерных наноструктур, базисными элементами которых являются квантовые ямы, квантовые точки, нити, суперрешётки сейчас связывают возможности создания новых квантовых устройств для опто- и наноэлектроники, информационных технологий нового поколения, измерительной техники. К настоящему времени технологи научились контролируемо создавать неоднородные наноструктуры (гетероструктуры) различной формы, выращивая на поверхности кристаллов одних полупроводников слои других полупроводников толщиной в несколько атомов. Такие слои характеризуются различными эффективными электронными массами. Для теоретического исследования квантово-механических свойств полупроводниковых гетероструктур используют обобщённое уравнение Шрёдингера с эффективной массой, зависящей от пространственной переменной [10–18].

Конструирование разнообразных наноструктур, обладающих нужными спектральными свойствами, — одна из наиболее важных проблем квантовой инженерии [19, 20]. Поэтому проблема восстановления квантовых потенциальных ям с предписанным энергетическим спектром очень важна для исследования низкоразмерных структур. Метод преобразований Дарбу, предложенный ещё в конце 19 столетия [21] и активно разрабатываемый в последние десятилетия (см. обзоры [22, 23]), позволяет решать задачи восстановления квантовых потенциалов с заданным спектром.

Статья поступила в редакцию 17 декабря 2010 г.
Эта работа частично поддержана грантом РФФИ 09-01-00770.

В работе [24] техника преобразований Дарбу разрабатывалась для обобщённого уравнения Шрёдингера

$$-\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\frac{d}{dx}\right]\varphi(x) + v(x)\varphi(x) = h(x)\mathcal{E}\varphi(x), \quad (1)$$

содержащего помимо обычного потенциала $v(x)$ эффективную массу $m(x)$, зависящую от пространственной переменной, и дополнительный потенциал $h(x)$ при энергетическом слагаемом. Для этого уравнения были построены преобразования Дарбу первого порядка, получены формулы алгебры суперсимметрии. В данной работе мы обобщаем результаты [24] на преобразования Дарбу n -го порядка, приводим интегральный вид преобразований, устанавливаем их связь с преобразованиями в дифференциальной форме, приводим несколько конкретных примеров конструирования потенциальных ям, которым соответствует заранее заданный спектр. Полученные обобщённые преобразования Дарбу корректно сводятся к частным случаям преобразований для уравнения Шрёдингера с эффективной массой [17], не содержащего весовую энергию, для уравнения Шрёдингера с потенциалом и с весовой энергией [25, 26], а также к хорошо известным преобразованиям для обычного уравнения Шрёдингера.

2. Обобщённые преобразования Дарбу первого порядка

В целях упрощения изложения и для лучшего понимания используемой здесь техники соотношений сплетения [17, 22, 26]) в данном параграфе мы вкратце повторим вывод преобразований Дарбу первого порядка, представленный в [24]. Дополнительно в этом параграфе мы решаем проблему получения решений при энергии преобразования, устанавливая тем самым соответствие между пространствами решений исходного и преобразованного уравнений.

Рассмотрим два обобщённых уравнения Шрёдингера

$$\mathcal{H}\varphi = \mathcal{E}\varphi, \quad \mathcal{H} = -\frac{1}{h(x)}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\frac{d}{dx}\right] + \frac{v(x)}{h(x)}, \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_1\varphi_1 = \mathcal{E}\varphi_1, \quad \mathcal{H}_1 = -\frac{1}{h(x)}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\right)\frac{d}{dx}\right] + \frac{v_1(x)}{h(x)}, \quad (3)$$

где гамильтонианы \mathcal{H} и \mathcal{H}_1 отличаются только потенциалами v и v_1 . Предполагаем, что решения уравнения (2) с гамильтонианом \mathcal{H} известны. Будем конструировать гамильтониан \mathcal{H}_1 , спектр которого отличается от спектра уравнения с гамильтонианом \mathcal{H} только одним связанным состоянием, на основе техники соотношений сплетения

$$\mathcal{L}_1\mathcal{H} = \mathcal{H}_1\mathcal{L}_1, \quad (4)$$

$$\varphi_1 = \mathcal{L}_1\varphi. \quad (5)$$

Сплетающий оператор \mathcal{L}_1 ищем в виде линейного дифференциального оператора первого порядка $\mathcal{L}_1 = B(K + \partial_x)$, где $B = B(x)$ и $K = K(x)$ определяем из первого соотношения сплетения (4). Подставляя \mathcal{L}_1 и явный вид гамильтонианов \mathcal{H} и \mathcal{H}_1 в (4), а также предполагая линейную независимость φ и её производных, после преобразований получим систему уравнений для определения B , K и потенциала v_1 :

$$B = \frac{\beta}{\sqrt{hm}}, \quad (6)$$

$$v_1 = v + \frac{B''}{mB} + \frac{2(BK)'}{mB} + \left(\frac{1}{m}\right)' \frac{B'}{B} - h \left[\frac{1}{h} \left(\frac{1}{m}\right)' \right]', \quad (7)$$

$$-\frac{1}{hm} K'' + \frac{2}{hm} K' K - \left(\frac{v}{h}\right)' + \left(\frac{1}{hm}\right)' (K^2 - K') - \left[\frac{1}{h} \left(\frac{1}{m}\right)' K \right]' = 0, \quad (8)$$

где β — произвольная константа, которую без потери общности можно положить равной единице, штрих обозначает производную по x . С учётом (6) соотношение для нового потенциала (7) преобразуется к виду

$$v_1 = v + 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \frac{K}{\sqrt{mh}} - \sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{h} \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{h}{m}} \right) \right]. \quad (9)$$

Потенциал v_1 будет окончательно определён после нахождения функции K . Чтобы вычислить K , перепишем уравнение (8) в виде

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{hm} (-K' + K^2) \right] - \frac{d}{dx} \left(\frac{v}{h} \right) - \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{h} \left(\frac{1}{m}\right)' K \right] = 0,$$

из которого следует уравнение Риккати

$$\frac{1}{hm} (-K' + K^2) - \frac{v}{h} - \frac{1}{h} \left(\frac{1}{m}\right)' K = -\lambda, \quad (10)$$

где λ — произвольная константа интегрирования. Уравнение Риккати можно линеаризовать, если ввести новую функцию $\mathcal{U} = \mathcal{U}(x)$:

$$K = -\frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}}. \quad (11)$$

Подставляя K в (10), получим уравнение для \mathcal{U}

$$-\frac{1}{m} \mathcal{U}'' - \left(\frac{1}{m}\right)' \mathcal{U}' + v\mathcal{U} = h\lambda\mathcal{U}, \quad (12)$$

которое тождественно начальному уравнению (2) при $\mathcal{E} = \lambda$. Поскольку решения (2) известны при всех энергиях, то известно и решение \mathcal{U} при энергии преобразования $\mathcal{E} = \lambda$. Как и для обычного уравнения Шрёдингера назовём функцию \mathcal{U} функцией преобразования, поскольку она определяет преобразованные потенциал и решения. Действительно, как только \mathcal{U} задана, находим функцию K , новый потенциал v_1 , дифференциальный оператор \mathcal{L}_1 , преобразующий решения одного уравнения в решения другого и, наконец, решения φ_1 нового преобразованного уравнения

$$v_1 = v + 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}\sqrt{mh}} \right] - \sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{h} \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{h}{m}} \right) \right], \quad (13)$$

$$\mathcal{L}_1 = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} + K \right) = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} - \frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}} \right), \quad (14)$$

$$\varphi_1 = \mathcal{L}_1 \varphi = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left[\frac{d}{dx} - \frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}} \right] \varphi. \quad (15)$$

Из анализа соотношений (13)–(15) следует, что новый потенциал v_1 и решения φ_1 зависят не только от исходных известных потенциала v и решений \mathcal{U} и φ , но и

от дополнительных потенциалов m и h . Отметим, соотношение (15) связывает решения для двух уравнений (2) и (3) при произвольной энергии $\mathcal{E} \neq \lambda$. Очевидно, что при $\mathcal{E} = \lambda$ действие преобразования Дарбу (14) на функцию \mathcal{U} и на решения, линейно зависящие к \mathcal{U} , даёт $\mathcal{L}_1\mathcal{U} = 0$. Решение уравнения (3) при энергии преобразования $\mathcal{E} = \lambda$ можно получить, если использовать вместо \mathcal{U} решение $\hat{\mathcal{U}}$ линейно независимое к \mathcal{U} . Такое линейно независимое решение можно построить следующим образом: домножим уравнение (12) для $\hat{\mathcal{U}}$, слева на функцию, сопряжённую к \mathcal{U} . Далее используем уравнение для \mathcal{U} сопряжённого, домноженное на $\hat{\mathcal{U}}$ справа. Вычитая результаты и предполагая, что m , h и \mathcal{U} — действительные функции, получим: $\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{m} (\mathcal{U}\hat{\mathcal{U}}' - \mathcal{U}'\hat{\mathcal{U}}) \right] = 0$. Интегрирование последнего уравнения даёт

$$\frac{1}{m} (\mathcal{U}\hat{\mathcal{U}}' - \mathcal{U}'\hat{\mathcal{U}}) = C, \quad (16)$$

где C — произвольная константа, которая может быть выбрана равной единице. Из (16) получим аналог формулы Лиувилля для определения второго линейно независимого решения

$$\hat{\mathcal{U}} = \mathcal{U} \int_{x_0}^x dx' \frac{m(x')}{|\mathcal{U}(x')|^2}. \quad (17)$$

Пределы интегрирования зависят от выбора граничных условий. Нетрудно проверить, что $\hat{\mathcal{U}}$ удовлетворяет (16). Прямая подстановка $\hat{\mathcal{U}}$ в (2) показывает, что $\hat{\mathcal{U}}$ действительно есть решение обобщённого уравнения Шрёдингера, если \mathcal{U} является его решением. Действие \mathcal{L} на функцию $\hat{\mathcal{U}}$ даёт нам решение преобразованного уравнения (3) с новым потенциалом v_1 при энергии преобразования λ

$$\eta = \mathcal{L}\hat{\mathcal{U}} = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\hat{\mathcal{U}}}. \quad (18)$$

Как только найдено η , можно, используя ещё раз обобщённую формулу Лиувилля (17), получить второе решение $\hat{\eta}$ уравнения (3) при энергии λ . Для этого в (17) заменим \mathcal{U} функцией η и с учётом (18) получим

$$\hat{\eta} = \eta \int_{x_0}^x dx' \frac{m(x')}{|\eta(x')|^2} = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\hat{\mathcal{U}}} \int_{x_0}^x dx' h(x') |\mathcal{U}(x')|^2. \quad (19)$$

В заключение отметим, что знание всех решений первоначального уравнения (2) обеспечивает знание всех решений преобразованного уравнения (3), включая решения при энергии λ . Анализ полученных соотношений показывает, что в частном случае постоянной массы $m(x) = m_0$ обобщённое уравнение Шрёдингера (2) переходит в уравнение Шрёдингера с весовой энергией, а обобщённые формулы преобразований Дарбу первого порядка (13)–(15) и (18), (19) переходят в формулы преобразований Дарбу, полученные в [25, 26]. В случае, когда $h(x) = 1$ и $m(x) \neq \text{const}$, соотношения для потенциала и решений (13)–(15) и (18), (19) переходят в аналогичные соотношения для уравнения с эффективной массой [14, 17], наконец, если $m(x) = m_0$ и $h(x) = 1$, соотношения (13)–(19) дают преобразования Дарбу 1-го порядка для стандартного уравнения Шрёдингера (см., например, [22]). Отметим, что если функция \mathcal{U} отвечает связанному состоянию \mathcal{H} , то функция η , определяемая (18) при энергии преобразования, не может быть нормирована (предполагается, что h не обращается в нуль на заданном интервале изменения x). В этом состоит причина того, что λ не принадлежит дискретному

спектру преобразованного гамильтониана \mathcal{H}_1 и два гамильтониана \mathcal{H} и \mathcal{H}_1 имеют спектры, отличающиеся на одно связанное состояние при $\mathcal{E} = \lambda$.

3. Преобразования Дарбу второго порядка и цепь преобразований

Преобразования Дарбу первого порядка связывают два гамильтониана \mathcal{H} и \mathcal{H}_1 и отвечающие им решения φ и φ_1 . Если исходный гамильтониан был точно решаем, то и преобразованный гамильтониан \mathcal{H}_1 будет допускать точные решения. Полученный преобразованный гамильтониан \mathcal{H}_1 может играть роль начального гамильтониана для следующего преобразования. При этом получим новый точно решаемый гамильтониан \mathcal{H}_2 . Повторяя процедуру n раз, получаем цепь точно решаемых гамильтонианов для обобщённого уравнения Шрёдингера с потенциалами v_1, v_2, \dots, v_n подобно тому, как это имеет место для стандартного уравнения Шрёдингера.

Определим преобразования Дарбу 2-го порядка как последовательность двух преобразований

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1, \quad (20)$$

где \mathcal{L}_1 дано как в (14) с той разницей, что K заменяем на K_1 , \mathcal{U} на \mathcal{U}_1 и λ на λ_1 ; оператор \mathcal{L}_2 определим следующим образом:

$$\mathcal{L}_2 = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} + K_2 \right), \quad K_2 = -\frac{\chi_1'}{\chi_1}. \quad (21)$$

Здесь $\chi_1 \equiv \chi_1(x, \lambda_2)$ — решение (3) при энергии λ_2 , полученное при применении преобразования первого порядка к решению \mathcal{U}_2 уравнения (2) с энергией λ_2

$$\chi_1 = \mathcal{L}_1 \mathcal{U}_2 = \frac{1}{\sqrt{m} \hbar} \left(\frac{d}{dx} + K_1 \right) \mathcal{U}_2, \quad K_1 = -\frac{\mathcal{U}_1'}{\mathcal{U}_1}. \quad (22)$$

Ясно, что χ_1 — решение преобразованного уравнения с потенциалом v_1 , определённым как в (9), и χ_1 можно выбрать в качестве новой функции преобразования для гамильтониана \mathcal{H}_1 , чтобы генерировать новый потенциал

$$v_2 = v_1 + 2\sqrt{\frac{\hbar}{m}} \frac{d}{dx} \frac{K_2}{\sqrt{mh}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{\hbar} \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m}} \right) \right], \quad (23)$$

и соответствующие решения

$$\varphi_2 = \mathcal{L}_2 \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} + K_2 \right) \varphi_1, \quad \varphi_1 = \mathcal{L}_1 \varphi. \quad (24)$$

Функция φ_1 определяется как в (15) и является собственной функцией гамильтониана \mathcal{H}_1 . Другими словами, действие оператора второго порядка (20) на решения φ приводит к решениям обобщённого уравнения с гамильтонианом \mathcal{H}_2 : $\varphi_2 = \mathcal{L} \varphi = \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1 \varphi$. Повторение этой процедуры n раз по отношению к исходному оператору \mathcal{H} приводит к оператору \mathcal{H}_n , который удовлетворяет соотношению сплетения $\mathcal{L} \mathcal{H} = \mathcal{H}_n \mathcal{L}$. В результате имеем

$$v_n = v_{n-1} + 2\sqrt{\frac{\hbar}{m}} \frac{d}{dx} \frac{K_n}{\sqrt{mh}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{\hbar} \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m}} \right) \right], \quad (25)$$

$$\varphi_n = \mathcal{L} \varphi = \mathcal{L}_n \varphi_{n-1} = \mathcal{L}_n \mathcal{L}_{n-1} \dots \mathcal{L}_1 \varphi, \quad (26)$$

где \mathcal{L} — дифференциальный оператор n -го порядка:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_n \mathcal{L}_{n-1} \dots \mathcal{L}_1, \quad \mathcal{L}_n = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} + K_n \right), \quad K_n = -\chi'_{n-1} \chi_{n-1}^{-1}. \quad (27)$$

Таким образом, цепь, состоящая из n преобразований Дарбу первого порядка, даёт в итоге цепь точно решаемых гамильтонианов $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_1 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{H}_n$. Обобщённые преобразования (25)–(27) сводятся в частных случаях к уже известным преобразованиям Дарбу. Например, когда $h(x) = 1$ из соотношений (25)–(27) следуют преобразованиями Дарбу для уравнения Шрёдингера с эффективной массой [17]. При $m(x) = m_0 = \text{const}$ и $h(x) \neq 1$ формулы (25)–(27) становятся преобразованиями Дарбу для уравнения Шрёдингера с весовой энергией [25, 26]. В частном случае постоянной массы $m(x) = m_0$ и $h(x) = 1$ соотношения (25)–(27) переходят в хорошо известные преобразования Дарбу для стандартного уравнения Шрёдингера.

Окончательные формулы для потенциала и решений любого порядка могут быть получены через начальные гамильтониан и решения без использования промежуточных выражений для потенциалов и решений, если они нас не интересуют. Рассмотрим преобразования второго порядка более детально. Подставим явный вид для потенциала v_1 , полученный в результате преобразования первого порядка (9), в формулу (23) для потенциала v_2

$$v_2 = v + 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \frac{K}{\sqrt{mh}} - 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{h} \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{h}{m}} \right) \right], \quad K = K_1 + K_2. \quad (28)$$

Преобразуем теперь $K = -\mathcal{U}'_1/\mathcal{U}_1 - \chi'_1/\chi_1$, представляя χ_1 в виде

$$\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{W_{1,2}}{\mathcal{U}_1}, \quad (29)$$

где $W_{1,2} = \mathcal{U}_1 \mathcal{U}'_2 - \mathcal{U}'_1 \mathcal{U}_2$ вронскиан функций \mathcal{U}_1 and \mathcal{U}_2 . Подставляя (29) в соотношение (21) для K_2 , получим

$$K_2 = -\frac{\chi'_1}{\chi_1} = -\frac{d}{dx} \left[\ln \left(\frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{W_{1,2}}{\mathcal{U}_1} \right) \right] \quad (30)$$

и, учитывая выражение для K_1 , найдём $K = -\frac{d}{dx} \left[\ln \frac{W_{1,2}}{\sqrt{mh}} \right]$. С учётом последнего выражения после некоторых преобразований потенциал v_2 можно представить в виде:

$$v_2 = v - 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left[\sqrt{\frac{m}{h}} \frac{d}{dx} \left(\frac{W_{1,2}/m}{W_{1,2}} \right) \right]. \quad (31)$$

Получим теперь выражение для соответствующих решений φ_2 . Для этого преобразуем соотношение (24). По аналогии с χ_1 функцию φ_1 представим в виде:

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{W_{1,\varepsilon}}{\mathcal{U}_1}, \quad (32)$$

где $W_{1,\varepsilon} = \mathcal{U}_1 \varphi' - \mathcal{U}'_1 \varphi$. Вычислим производную функции φ_1

$$\varphi'_1 = (\mathcal{L}_1 \varphi)' = \left(\frac{1}{\sqrt{mh} \mathcal{U}_1} \right)' W_{1,\varepsilon} + \frac{1}{\sqrt{mh}} \varphi'' - \frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{\mathcal{U}''_1}{\mathcal{U}_1} \varphi.$$

Подставляя последнее выражение и соотношение (30) в (24), после ряда преобразований получим

$$\varphi_2 = \frac{1}{mh} \left(\varphi'' - \frac{\mathcal{U}_1''}{\mathcal{U}_1} \varphi \right) - \frac{d}{dx} \left(\ln W_{1,2} \right) \frac{1}{mh} \frac{W_{1,\varepsilon}}{\mathcal{U}_1}. \quad (33)$$

Из соотношений (31) и (33) видно, что потенциал и решения, полученные в результате преобразований Дарбу второго порядка, выражаются через потенциалы и решения исходного уравнения без использования соотношений для v_1 и φ_1 , найденных на промежуточной стадии с помощью преобразований Дарбу первого порядка. Очевидно, что следующий этап преобразования можно выполнить, выбрав в качестве новой функции преобразования вспомогательную функцию, соответствующую потенциалу v_2 . Её можно найти посредством действия оператора $\mathcal{L} = \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1$ на решения \mathcal{U}_3 уравнения (2), взятую при энергии преобразования λ_3 :

$$\chi_2 = \frac{1}{mh} \left(\mathcal{U}_3'' - \frac{\mathcal{U}_1''}{\mathcal{U}_1} \mathcal{U}_3 \right) - \frac{d}{dx} \left(\ln W_{1,2} \right) \frac{1}{mh} \frac{W_{1,3}}{\mathcal{U}_1}.$$

Эту вспомогательную функцию можно использовать для получения нового оператора преобразования $\mathcal{L}_3 = d/dx + K_3$, $K_3 = -\chi_2' \chi_2^{-1}$, с помощью которого можно генерировать новые потенциал v_3 и решения φ_3 в аналитическом виде, и так далее в соответствии с (25)–(27).

4. Интегральная форма преобразований Дарбу

В этом разделе преобразования Дарбу в дифференциальной форме представим в интегральном виде, что бывает важно, например, при определении граничных условий, для конструирования точно-решаемых моделей при энергии преобразования λ , а также при построении фазово-эквивалентных гамильтонианов.

Получим интегральный вид преобразованных решений первого (32) и второго (33) порядков. Домножая уравнение (2) для функции φ на \mathcal{U}_1 , и вычитая из полученного выражения уравнение (12) для функции \mathcal{U}_1 , умноженное на φ , имеем

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m} W_{1,\varepsilon} \right) = (\lambda_1 - \varepsilon) h \mathcal{U}_1 \varphi. \quad (34)$$

Проинтегрируем последнее выражение

$$W_{1,\varepsilon} = m \left((\lambda_1 - \varepsilon) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \varphi(x') dx' + C \right). \quad (35)$$

Здесь C и x_0 — константы интегрирования. Подставляя вронскиан (35) в формулу (32) для решений φ_1 , получим преобразованные решения 1-го порядка в интегральном виде

$$\varphi_1 = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\mathcal{U}_1} \left(C + (\lambda_1 - \varepsilon) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \varphi(x') dx' \right). \quad (36)$$

Это же справедливо для вспомогательных решений χ_1 , взятых при энергии $\varepsilon = \lambda_2$

$$\chi_1 = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\mathcal{U}_1} \left(C + (\lambda_1 - \lambda_2) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x') dx' \right). \quad (37)$$

Здесь было использовано

$$W_{1,2} = m \left((\lambda_1 - \lambda_2) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x') dx' + C \right). \quad (38)$$

По аналогии, применяя эту технику к преобразованным решениям 2-го порядка, получим их интегральное представление. Например, соотношение (24) для решений φ_2 , записанное в терминах преобразованных решений первого порядка φ_1 и χ_1 , подобно (36), представим в виде

$$\varphi_2 = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\chi_1} \left(C + (\lambda_2 - \mathcal{E}) \int_{x_0}^x h(x') \chi_1(x') \varphi_1(x') dx' \right). \quad (39)$$

В принципе решения φ_2 мы уже определили, поскольку φ_1 и χ_1 выражены в терминах известных решений исходной задачи (см. (36) и (37)). Очевидно, что решения 2-го порядка можно выразить непосредственно через решения исходного уравнения. Для этого преобразуем соотношение (33) к виду

$$\begin{aligned} \varphi_2 &= (\lambda_1 - \mathcal{E})\varphi - \frac{\mathcal{U}_2(\lambda_1 - \lambda_2)W_{1,\mathcal{E}}}{m[C + (\lambda_1 - \lambda_2) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x') dx']} = \\ &= (\lambda_1 - \mathcal{E})\varphi - \frac{\mathcal{U}_2 \left[C + (\lambda_1 - \mathcal{E}) \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \varphi(x') dx' \right]}{C_1 + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x') dx'}, \end{aligned}$$

где $C_1 = C/(\lambda_1 - \lambda_2)$. Включая не зависящий от координаты фактор $(\lambda_1 - \mathcal{E})$ в φ , окончательно получим

$$\varphi_2 = \varphi - \frac{\mathcal{U}_2 \left[C + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \varphi(x') dx' \right]}{C_1 + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x') dx'}. \quad (40)$$

Пределы интегрирования зависят от граничных условий. В частности, для регулярных решений, удовлетворяющих условиям $\varphi(x=0) = 0$, $\varphi'(x)|_{x=0} = 1$, нижний предел x_0 равен нулю, а верхний равен x . Используя интегральное представление для вронскиана (38) в соотношении (28), преобразованный потенциал v_2 представим в виде

$$v_2 = v - 2\sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{h\mathcal{U}_1\mathcal{U}_2}{C_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}_1(x') \mathcal{U}_2(x')} \right). \quad (41)$$

Итак, мы получили интегральный вид преобразований Дарбу первого и второго порядка для потенциалов и решений. При этом спектр для гамильтониана \mathcal{H}_2 с потенциалом v_2 на два связанных состояния отличается от спектра гамильтониана \mathcal{H} . Рассмотрим теперь преобразования второго порядка при энергии, при которой осуществлялось преобразование первого порядка, $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$. Преобразование второго порядка можно сделать, построив вспомогательное решение из линейной комбинации решений η и $\hat{\eta}$, полученных в рамках процедуры первого

порядка (18) и (19)

$$\chi_1 = c_1 \eta + \hat{\eta} = \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\mathcal{U}} \left(c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x') \right). \quad (42)$$

Очевидно, что решение χ_1 удовлетворяет уравнению (3), поскольку η и $\hat{\eta}$ являются его решениями. Чтобы найти новый потенциал v_2 и решения φ_2 , вычислим с этим χ_1 операторы преобразований K_2 и K

$$K_2 = \frac{\mathcal{U}'}{\mathcal{U}} - \frac{\frac{d}{dx} \sqrt{\frac{m}{h}} \left(c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x') \right)}{\sqrt{\frac{m}{h}} \left(c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x') \right)},$$

$$K = -\frac{d}{dx} \left(\ln \sqrt{\frac{m}{h}} \right) - \frac{h \mathcal{U}^2}{\sqrt{\frac{m}{h}} \left(c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x') \right)}.$$

Подставляя последнее выражение в формулу для потенциала (28), найдём

$$v_2 = v - 2 \sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{h \mathcal{U}^2}{c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x')} \right). \quad (43)$$

Поддействуем оператором \mathcal{L}_2 с функцией преобразования χ_1 , определённой в (37), на функцию φ_1 , представленную в интегральном виде (36). После ряда преобразований получим

$$\varphi_2 = \varphi - \frac{\mathcal{U}}{c_1 + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}^2(x') dx'} \left[C + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}(x') \varphi(x') dx' \right]. \quad (44)$$

Соотношения для потенциала v_2 и решений φ_2 можно получить непосредственно из соотношений (41) и (40), если учесть, что $\mathcal{U}_1 = \mathcal{U}_2 = \mathcal{U}$, $c_1 = C_1$. Без потери общности можно переопределить вспомогательную функцию χ_1 следующим образом: $\chi_1 = \eta + \Gamma \hat{\eta}$, где Γ — константа. Тогда потенциал v_2 и решения φ_2 переписуются в виде

$$v_2 = v - 2 \sqrt{\frac{h}{m}} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\sqrt{mh}} \frac{h \Gamma \mathcal{U}^2}{1 + \Gamma \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x')} \right), \quad (45)$$

$$\varphi_2 = \varphi - \frac{\Gamma \mathcal{U}}{1 + \Gamma \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}^2(x') dx'} \left[C + \int_{x_0}^x h(x') \mathcal{U}(x') \varphi(x') dx' \right], \quad (46)$$

где $\Gamma = (1/c_1)$. Постоянная Γ теперь может выступать в роли нормировочной константы для связанного состояния λ или разницы между нормировочными константами для потенциалов v_2 и v , соответственно. В первом случае спектры двух гамильтонианов \mathcal{H}_2 и \mathcal{H} отличаются на одно связанное состояние. Во втором случае два гамильтониана \mathcal{H}_2 и \mathcal{H} отличаются только нормировками и являются фазово-эквивалентными. Решения (46) построены при произвольной энергии

$\mathcal{E} \neq \lambda$. Решение обобщённого уравнения с потенциалом (45) при энергии преобразования λ получим, действуя оператором преобразования \mathcal{L}_2 на решения η (18) уравнения (3) с потенциалом $v_1\eta_2 = \mathcal{L}_2\eta = \frac{1}{\sqrt{mh}} \left(\frac{d}{dx} - \frac{\chi_1'}{\chi_1} \right) \sqrt{\frac{m}{h}} \frac{1}{\mathcal{U}}$, где предполагается, что χ_1 определено как в (37). Окончательно имеем

$$\eta_2 = - \frac{\mathcal{U}}{c_1 + \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x')}$$

или

$$\eta_2 = - \frac{\Gamma \mathcal{U}}{1 + \Gamma \int_{x_0}^x dx' h(x') \mathcal{U}^2(x')}. \quad (47)$$

Отметим, что выбор произвольных констант x_0 и c_1 или Γ позволяет избежать проблем, связанных с сингулярностью знаменателя. Другими словами, можно строить преобразования на произвольных связанных состояниях, не только на основном, и конструировать потенциалы без дополнительных сингулярностей, если потенциальные функции $m(x)$ и $h(x)$ не приводят к сингулярностям. Предполагается, что $m(x)$ и $h(x)$ дважды непрерывно дифференцируемые функции. Если предположить, что функция преобразования \mathcal{U} взята при энергии связанного состояния λ , которое мы хотим добавить в начальный спектр, и $\Gamma = N^2$ есть соответствующая нормировочная константа, то формулы (45)–(47) дают возможность конструировать потенциал с новым связанным состоянием при $\mathcal{E} = \lambda$. Если спектры для потенциалов v_2 и v совпадают и отличаются только нормировками одного из связанных состояний $\Gamma = N_2^2 - N^2$, например λ , то эти соотношения позволяют строить семейства фазово-эквивалентных гамильтонианов. Отметим, что соответствующие фазово-эквивалентные потенциалы имеют разную форму, они могут быть глубже и уже или более мелкими и широкими, и в то же время обладают одинаковыми спектральными свойствами, за исключением нормировок выбранного состояния. Последовательно применяя преобразования Дарбу, можно конструировать гамильтонианы с заранее заданными спектральными свойствами.

5. Приложение

В качестве примера рассмотрим задачу конструирования потенциалов и решений в рамках преобразований Дарбу первого и второго порядка. Для исходного уравнения (2) выберем следующие потенциальные функции: $v(x) = 1/4x$, $m(x) = 1/x$, $h(x) = x$. Уравнение (2) с такими потенциалами решается точно.

Общее решение имеет вид: $\varphi(x) = \frac{C_1 \sin(kx)}{k\sqrt{x}} + \frac{C_2 \cos(kx)}{k\sqrt{x}}$. Выбирая в качестве

начального решения частное решение $\varphi(x) = \frac{C_1 \sin(kx)}{k\sqrt{x}}$, а в качестве функции

преобразования $\mathcal{U} = \frac{C_2 \cosh(\kappa x)}{\kappa\sqrt{x}}$, из соотношений преобразований Дарбу первого

порядка (13) и (15) получим потенциал и решения в аналитическом виде

$$v_1(x) = \frac{1}{4x} - 2x\kappa^2 (1 - \text{th}^2(\kappa x)), \quad \varphi_1(x) = \frac{C_1 \cos(kx)}{\sqrt{x}} - \frac{C_1 \kappa \sin(kx) \text{th}(\kappa x)}{k\sqrt{x}}.$$

На рис. 1(а) приведены примеры нескольких разных потенциалов v_1 , отличающихся от исходного v одним связанным состоянием, взятым при разных энергиях. На рис. 1(б) представлено несколько точных решений φ_1 , рассчитанных для соответствующих гамильтонианов с полученными потенциалами v_1 . Функция η при

энергии преобразования $\lambda = -\kappa^2$ определяется с использованием (18) следующим образом: $\eta = \frac{\kappa}{C_2\sqrt{x} \cosh(\kappa x)}$.

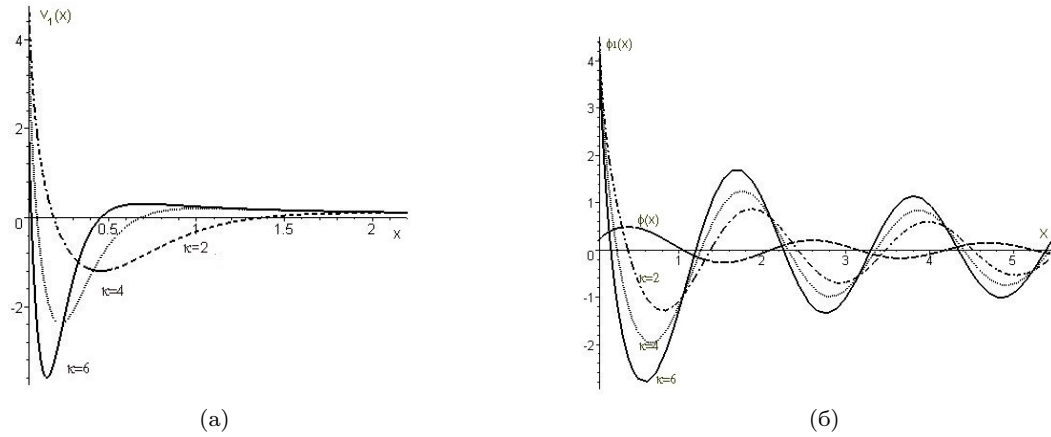


Рис. 1. (а) потенциалы $v_1(x)$; (б) соответствующие решения $\varphi_1(x)$ и начальное решение $\varphi(x)$

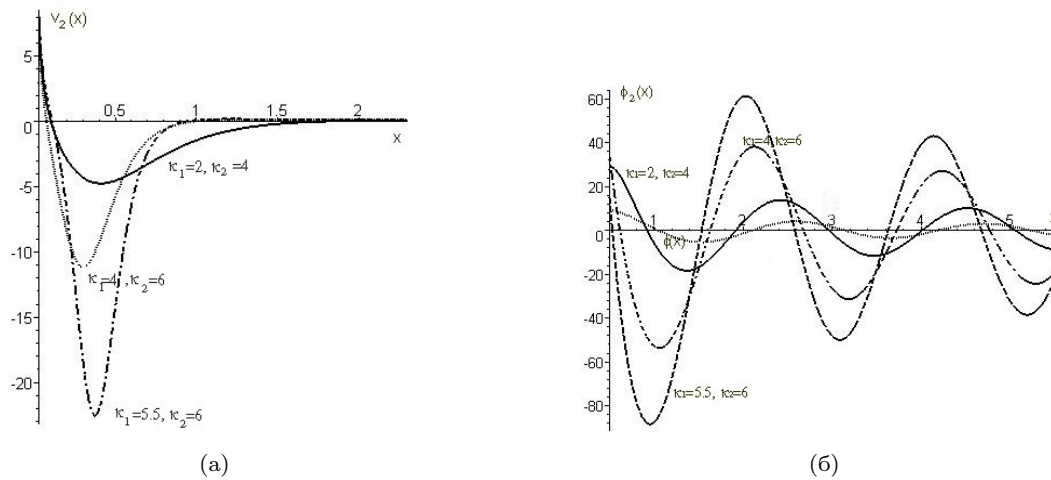


Рис. 2. (а) потенциалы $v_2(x)$; (б) соответствующие решения $\varphi_2(x)$ при $k = 3$ и начальное решение $\varphi(x)$

Построим потенциалы v_2 и аналитические решения φ_2 в рамках второго преобразования Дарбу. Из соотношений (31) и (33) получим $v_2 = \frac{9}{4x} - 2x \frac{d^2}{dx^2} \ln W_{1,2}$, где

$$W_{1,2} = \frac{C_2^2}{\kappa_2 \kappa_1 x} \left(\kappa_2 \cosh(\kappa_1 x) \cosh(\kappa_2 x) - \kappa_1 \sinh(\kappa_2 x) \sinh(\kappa_1 x) \right)$$

и

$$\varphi_2 = \frac{\kappa_1 \sqrt{x}}{C_2 \cosh(\kappa_1 x)} \left(\frac{d}{dx} W_{1,\varepsilon} - \frac{d}{dx} (\ln W_{1,2}) W_{1,\varepsilon} \right),$$

где $W_{1,\varepsilon} = \frac{C_1 C_2}{k \kappa_1 x} \left(k \cosh(\kappa_1 x) \cos(kx) - \kappa \sinh(\kappa_1 x) \sin(kx) \right)$.

На рис. 2(а) приведены примеры потенциалов v_2 , отличающиеся от исходного v двумя связанными состояниями $\lambda_1 = -\kappa_1^2$, $\lambda_2 = -\kappa_2^2$. Соответствующие точные решения φ_2 даны на рис. 2(б). Таким образом, получены новые точно решаемые модели в рамках первого и второго преобразований Дарбу.

6. Заключение

Техника преобразований Дарбу произвольного порядка обобщена на уравнение Шрёдингера с эффективной массой, зависящей от пространственной переменной, и с потенциалом, линейно зависящим от энергии. Выведена интегральная форма преобразований Дарбу. На конкретных примерах показано, как полученные преобразования Дарбу можно применять для конструирования потенциалов с заданным спектром. Эта техника может быть использована для моделирования нано-структур с заранее заданными спектральными параметрами.

Литература

1. Ring P., Schuck P. The Nuclear Many Body Problem. — New York: Springer, 1980. — 211 p.
2. Razavy M., Field G., Levinger J. S. Analytical Solutions for Velocity-Dependent Nuclear Potentials // Phys. Rev. — 1962. — Vol. 125. — Pp. 269–272.
3. Бабиков В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. — М.: Наука, 1976. — 224 с. [Babikov V. V. Metod fazovihkh funkciy v kvantovoy mekhanike. — М.: Nauka, 1976. — 224 s.]
4. Vinitsky S. I. et al. Effective adiabatic Approximation in the Problem of Three Bodies Coupled via Short-range Potentials // Physics of Atomic Nuclei. — 2001. — Vol. 64. — Pp. 27–37.
5. Jaghoub M. I. Perturbation Theory for Isotropic Velocity-dependent Potentials: Scattering case // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 74. — Pp. 032702–032702–8.
6. Arias de Saavedra F. et al. Effective Mass of One ^4He Atom in Liquid ^3He // Phys. Rev. B. — 1994. — Vol. 50. — Pp. 4248–4251.
7. Barranko M. et al. Structure and Energetics of Mixed $^4\text{He} - ^3\text{He}$ drops // Phys. Rev. B. — 1997. — Vol. 56. — Pp. 8997–9003.
8. Brack M. Multipole Vibrations of Small Alkali-metal Spheres in a Semiclassical Discription // Phys. Rev. B. — 1989. — Vol. 39. — Pp. 3533–3542.
9. Puente A., Serra L., Casas M. Dipole Excitation of Na Clusters with a Non-local Energy density Functional // Z. Phys. D. — 1994. — Vol. 31. — Pp. 283–286.
10. Bastard G. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure. — France: Les Editions de Physique, Les Ulis, 1988. — 366 p.
11. Morrow R. A., Brownstein K. R. Model Effective-mass Hamiltonians for Abrupt Heterojunctions and Associated Wave-function Matching Conditions // Phys. Rev. B. — 1984. — Vol. 30. — Pp. 678–680.
12. Einevoll G. T., Hemmer P. C., Thomesn J. Operator Ordering in Effective-mass Theory for Heterostructures. I. Comprason with Exact Result for Superlattices, Quantum Wells and Localized Potentials // Phys. Rev. B. — 1990. — Vol. 42. — Pp. 3485–3496.
13. Plastino A. R. et al. Supersymmetric Approach to Quantum Systems with Position-Dependent Effective Mass // Phys. Rev. A. — 1999. — Vol. 60. — Pp. 4318–4325.
14. Milanović V., Iconić Z. Generation of Isospectral Combinations of the Potential and the Effective-mass Variations by Supersymmetric Quantum Mechanics // J. Phys. A: Math. Gen. — 1999. — Vol. 32. — Pp. 7001–7015.
15. Roy B., Roy P. A Lie Algebraic Approach to Effective mass Schrödinger Equations // J. Phys. A. — 2002. — Vol. 35. — Pp. 3961–3969.

16. Коç R., Коса M. A Systematic Study on the Exact Solution of the Position Dependent mass Schrödinger Equation // J. Phys. A. — 2003. — Vol. 36. — Pp. 8105–8112.
17. Suzko A. A., Schulze-Halberg A. Intertwining Operator Method and Supersymmetry for Effective mass Schrödinger Equations // Phys. Lett. A. — 2008. — Vol. 372. — Pp. 5865–5871.
18. Suzko A. A., Schulze-Halberg A. Darboux Transformations and Supersymmetry for the Generalized Schrödinger Equations in (1 + 1) Dimensions // J. Phys. A. — 2009. — Vol. 42. — Pp. 295203–295203–14.
19. Goser K., Glösekötter P., Dienstuhl J. Nanoelectronics and Nanosystems. From Transistors to Molecular and Quantum Devices. — Berlin: Springer-Verlag, 2004. — 284 p.
20. Low-dimensional Systems // Special issue of Physica E. — 2002. — Vol. 14, No 1/2. — Pp. 5865–5871.
21. Darboux M. G. // Comptes Rendus Acad. Sci. Paris. — 1882. — Vol. 94. — Pp. 1456–1459.
22. Matveev V. B., Salle M. A. Darboux Transformations and Solitons. — Berlin: Springer, 1991. — 123 p.
23. Gu C., Hu H., Zhou Z. Darboux Transformations in Integrable Systems. — Dordrecht: The Netherlands: Mathematical Physics Studies 26, Springer, 2005. — 310 p.
24. Suzko A. A., Schulze-Halberg A., Velicheva E. P. Supersymmetry and Darboux Transformations for the Generalized Schrödinger Equations // Physics of Atomic Nuclei. — 2009. — Vol. 72. — Pp. 858–865.
25. Suzko A. A., Giorgadze G. Darboux Transformations for the Generalized Schrödinger Equations // Physics of Atomic Nuclei. — 2007. — Vol. 70, No 3. — Pp. 607–610.
26. Suzko A. A., Tralle I. Reconstruction of Quantum Well Potentials via the Intertwining Operator Technique // Acta Physica Polonica B. — 2008. — Vol. 39, No 3. — Pp. 1001–1023.

UDC 530.145; 517.958; 537.311.322.

Darboux Transformations for the Generalized Schrödinger Equation

A. A. Suzko¹, E. P. Velicheva[†]

¹ *Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie, Dubna, 141980, Russia;*

*Joint Institute for Power and Nuclear Research, National Academy of Sciences of Belarus
99, acad. A.K. Krasin str., 220109, Minsk, Republic of Belarus*

[†] *Laboratory of Nuclear Problems
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot Curie, Dubna, 141980, Russia*

The Darboux transformations of the n -th order is elaborated for a generalized Schrödinger equation with a position-dependent effective mass and with a linearly energy-dependent potential. The Darboux transformations are given also in an integral form. A correspondence between the differential Darboux transformations and the integral ones has been established. The second-order Darboux transformations are analyzed both at different energies and at the same transformation energy. The method is illustrated by several examples of constructing quantum potential wells with a given spectrum.

Key words and phrases: generalized Schrödinger equations, Darboux transformations.