УДК 517.984

© М. А. Клочков

ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ПРИ ОДНОРАНГОВЫХ ВОЗМУЩЕНИЯХ

Введение

Задачи управления квантовомеханическими системами имеют большое прикладное значение. Их решение позволяет создавать вещества с заданными свойствами и характеристиками. Одним из инструментов изучения данной задачи является теория псевдопотенциала. Предлагается одно из возможных решений задачи конструирования волновой функции электронной подсистемы, в результате чего определяется явный вид эффективного потенциала, действующего на каждый электрон.

§ 1. Постановка задачи

Уравнение Шрёдингера для гармонического осциллятора принимает следующий вид

$$\frac{h^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - U)\psi = 0, \tag{1}$$

где $U = \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2$, ω_0 — собственная частота (циклическая) осциллятора, μ — масса частицы, h — постоянная Планка. Для решения задачи отыскания стационарных состояний, то есть спектра собственных значений энергии E_n и соответствующих собственных функций ψ_n, используется дополнительное условие нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$. Вводя обозначение $x_0 = \sqrt{\frac{h}{\mu\omega_0}}$, запишем решение спектральной задачи

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}, \tag{2}$$

$$E_n = h\omega_0(n + 1/2), \; n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{3}$$

где $H_n(x)$ — полином Чебышева–Эрмита. Задачу об изменении функции электронной плотности сформулируем в следующем виде. Уравнение (1) запишем в виде $(T - K)\psi = E\psi$, где K — одноранговое возмущение (возмущающий потенциал)

$$T\psi = -\frac{h^2}{2\mu}\psi'' + \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2\psi, \tag{4}$$

$$K\psi = a(x)\int_{-\infty}^{\infty} \psi(s)b(s)ds, \tag{5}$$

Справедлива следующая теорема.

Т е о р е м а 1. *Пусть T — дифференциальный оператор вида (4) с дополнительным условием нормировки, действующий в пространстве $L^2(-\infty, \infty)$. Для того чтобы сдвинуть заданное подмножество собственных значений $\Omega = \left\{E_{l_1}, \ldots, E_{l_m}\right\}$, $l_1 < l_2 < \cdots < l_m$ в* *произвольно заданное множество* $\Theta = \{\kappa_1, \ldots, \kappa_m\}$ $(\Theta \cap \Omega = \emptyset)$ *с помощью однорангового возмущения вида* (5)*, где*

$$a(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \nu_j \psi_j(x), \quad b(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{\beta}_j \psi_j(x) \tag{6}$$

здесь $\{\nu_i\}_{i\geqslant 0}, \{\beta_i\}_{i\geqslant 0}$ *— две квадратично суммируемые последовательности комплексных чисел, необходимо и достаточно, чтобы последовательности* $\{\nu_i\}_{i\geqslant 0}, \{\beta_i\}_{i\geqslant 0}$ *удовлетворяли следующим условиям:*

а) $\nu_j \beta_j = 0$ *для индексов* j*, не принадлежащих множеству* $\Lambda = \{l_1, \ldots, l_m\}$*;*

б) $\nu_{l_i}\beta_{l_i} = \frac{P(E_{l_i})}{\prod\limits_{j=1, j\neq i}^{m}\left(E_{l_i} - E_{l_j}\right)}$, $\quad i = \overline{1, m}$*, где* $P(\lambda) = \prod\limits_{j=1}^{m}(\lambda - \kappa_j)$.

Функцию электронной плотности возьмем в виде $\rho(x) = \sum\limits_{i=1}^{m} |\psi_i(x)|^2$. В работе [2] показано как изменяются собственные функции невозмущенной задачи в зависимости от вида однорангового возмущения. В данном случае нас интересует вид оператора (5) при условии $\int\limits_{-a}^{a} \rho(s)ds = C \leqslant 1$, где C — некоторая заданная константа, $a \in (-\infty, \infty)$.

§ 2. Решение задачи

Допустим, необходимо сдвинуть первые $m = 5$ собственных значений оператора T. По теореме 1 зададим $\Omega = \left\{E_0, \ldots, E_4\right\}$, $\kappa_i = h\omega_0(i+1)$. Возьмем $h = 1.05 * 10^{-34}$, $\mu = 0.9 * 10^{-30}$, $\omega_0 = 1$, тогда $x_0 = 0.011$. Собственные функции $\tilde{\psi}_i$, соответствующие «новым» собственным значениям κ_i, примут следующий вид

$$\tilde{\psi}_i = \sum_{n=0}^{4} \frac{\nu_{l_n}}{E_n - \kappa_i}\psi_n = \sum_{n=0}^{4} \frac{\nu_{l_n}}{E_n - \kappa_i} \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_k\left(\frac{x}{x_0}\right)}{\sqrt{x_0 2^n n! \sqrt{\pi}}}, \; i = 0, \ldots, 4.$$

Теперь после сдвига собственных значений мы знаем как выглядит измененная функция электронной плотности, а именно

$$\tilde{\rho}(x) = \sum_{i=0}^{4} \left| \sum_{n=0}^{4} \frac{\nu_{l_n}}{E_n - \kappa_i} \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_k\left(\frac{x}{x_0}\right)}{\sqrt{x_0 2^n n! \sqrt{\pi}}} \right|^2.$$

Таким образом, задав некоторое число $C \leqslant 1$, предел интегрирования a и решая уравнение $\int\limits_{-a}^{a} \tilde{\rho}(s)ds = C$, возможно вычислить значения ν_{l_n}. Следовательно, мы получаем возможность подбирать вид возмущения (5), чтобы интеграл от функции электронной плотности принимал наперед заданные значения.

Список литературы

1. Клочков М. А. Оценки нормы одноранговых возмущений // Вестник Удмуртского университета. Математика. 2005. № 1. С. 75–90.
2. Клочков М. А. Определение базисных функций оператора, возмущенного одноранговым// Вестник Удмуртского университета. Математика. 2006. № 1. С. 75–80.

Клочков Михаил Аркадьевич
Удмуртский государственный ун-т,
Россия, Ижевск
e-mail: mike919@udmlink.ru