

УДК 537.534.7: 621.319.7

© А. С. Бердников

ФОРМУЛА ЛАНДАУ ДЛЯ ДВУХСТОРОННЕГО ПРОФИЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ОДНОМЕРНОГО МЕХАНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА С ЗАДАННОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ПЕРИОДА ОТ ЭНЕРГИИ

Рассматривается формула Ландау, позволяющая по заданной зависимости периода одномерного осциллятора от энергии восстанавливать симметричный профиль потенциальной ямы, характеризующий данный осциллятор. Показано, как можно обобщить указанный подход для синтеза одномерных осцилляторов с несимметричными потенциальными ямами без разрыва гладкости двух ветвей потенциала в точке стыковки. Обосновывается утверждение о принципиальном отсутствии идеально-изохронных осцилляторов (т. е. осцилляторов, у которых период осцилляций не зависит от энергии по крайней мере в некотором диапазоне энергий) в классе распределений потенциала с плоским дном и / или с немонотонным поведением потенциала. Обсуждается применение указанных результатов к электростатическим времяпролетным масс-спектрометрам и электростатическим ловушкам для фурье-масс-спектрометрии.

Кл. сл.: осцилляторы, изохронность, времяпролетные масс-спектрометры, фурье-масс-спектрометры, электростатические ионные ловушки, электронные зеркала

ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор — точечную частицу, совершающую колебания в потенциальном силовом поле, описываемом распределением потенциала вида "потенциальной ямы" (рис. 1). В силу наличия потенциальных барьеров на границах потенциальной ямы, превышающих полную энергию частицы она не может выйти за пределы ограниченной области внутри потенциальной ямы. В силу закона сохранения энергии после возвращения частицы к прежней координате ее скорость будет иметь прежнее значение (т. е. будет равна скорости, с которой из данной точки пространства частица начала свое движение). В силу единственности решения уравнения движения при заданных начальных координате и скорости следующий цикл движения частицы будет в точности повторять предыдущий. В результате движение частицы будет строго периодическим.

Без ограничения общности можно считать, что точка равновесия (минимум потенциальной ямы $U(x)$) расположена в точке $x = 0$ и что в этой точке $U(0) = 0$. Кроме того, $U'(0) = 0$, поскольку $x = 0$ — точка равновесия. Мы будем называть потенциальную яму $U(x)$ монотонной, если $U(x)$ является строго убывающей при $x < 0$ и строго возрастающей при $x > 0$. В [1] Л.Д. Ландау получена формула, позволяющая по зависимости $T(E)$

периода колебаний T от полной энергии частицы E восстанавливать профиль монотонной потенциальной ямы $U(x)$. Профили потенциала, обеспечивающие заданную зависимость $T(E)$ (в частности, строго изохронный случай $T(E) = \text{const}$, при котором частицы с разными энергиями

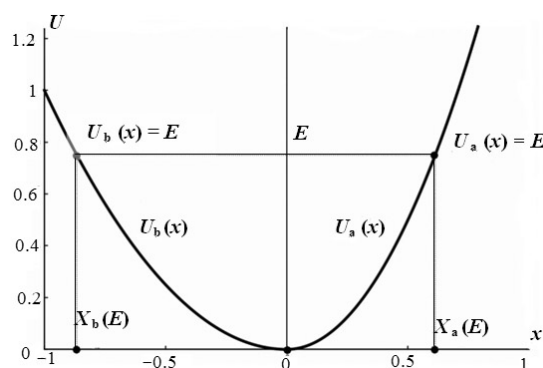


Рис. 1. Одномерное монотонное распределение потенциала $U(x)$.

$U_a(x)$ — восходящая (правая) ветвь потенциальной ямы; $U_b(x)$ — нисходящая (левая) ветвь потенциальной ямы; E — уровень, соответствующий полной энергии осцилляций; $X_a(E)$ и $X_b(E)$ — точки поворота

имеют один и тот же период возвращения к исходной точке), имеют большое значение, например, для разработки времяпролетных масс-спектрометров [2].

Формула, предложенная в [1], не вполне удобна с точки зрения практических задач синтеза односторонних и двухсторонних электронных зеркал для времяпролетных масс-спектрометров — в исходной форме она порождает либо строго симметричные потенциальные ямы, либо как альтернативу — правую ветвь потенциальной ямы при заданной левой ветви потенциальной ямы, но без гарантии гладкости стыковки ветвей в точке равновесия $x = 0$. В данной работе рассматриваются модификации этой формулы, позволяющие гарантированно строить такие несимметричные монотонные потенциальные ямы с заданным законом $T(E)$, у которых две ветви сопрягаются между собой в точке равновесия $x = 0$ аналитически точно.

1. ФОРМУЛА ЛАНДАУ

Рассмотрим движение частицы в монотонной потенциальной яме, показанной на рис. 1. Пусть распределение потенциала при $x \geq 0$ описывается строго возрастающей функцией $U_a(x)$, а при $x \leq 0$ — строго убывающей функцией $U_b(x)$. Кроме того, удобно "отразить" ветвь $x \leq 0$ на ветвь $x \geq 0$ и ввести строго возрастающую функцию $U_c(x) = U_b(-x)$, определенную при $x \geq 0$. В силу монотонности функций $U_a(x)$, $U_b(x)$ и $U_c(x)$ существуют обратные к ним функции $X_a(u)$, $X_b(u)$ и $X_c(u)$, определенные при $u \geq 0$, где функции $X_a(u)$ и $X_c(u)$ — строго возрастающие и положительные, а $X_b(u) = -X_c(u)$ — строго убывающая и отрицательная. Поскольку предполагается, что

$$U_a(0) = U_b(0) = U_c(0) = U(0) = 0,$$

то $X_a(0) = X_b(0) = X_c(0) = 0$.

Разделим движение на две части — движение в области восходящей ветви $x \geq 0$ и движение в области спадающей ветви $x \leq 0$. Если E — полная энергия частицы, двигающейся в данной потенциальной яме, то $X_a(E)$ и $X_b(E) = -X_c(E)$ — точки поворота, ограничивающие движение заряженной частицы справа и слева (рис. 1). Движение "вперед" и движение "назад" в каждой половине потенциальной ямы строго симметрично, поэтому достаточно рассмотреть только движение от цен-

тра к соответствующему краю потенциальной ямы. Бесконечно малые отрезки dx частица с полной энергией E проходит со скоростью $v(x) = \sqrt{2(E - U(x))}/m$ (следствие закона сохранения энергии). В результате время движения частицы в одну сторону вдоль каждой из двух половинок потенциальной ямы определяется как

$$\begin{aligned} T_a(E) &= \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{X_a(E)} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^E \frac{dX_a(u)/du}{\sqrt{E - u}} du, \\ T_c(E) &= \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^{X_c(E)} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2}} \int_0^E \frac{dX_c(u)/du}{\sqrt{E - u}} du, \end{aligned}$$

а полный период однократной осцилляции частицы в потенциальной яме равен

$$\begin{aligned} T(E) &= 2(T_a(E) + T_b(E)) = \\ &= \sqrt{2m} \int_0^E \left(\frac{dX_a(u)}{du} + \frac{dX_c(u)}{du} \right) \frac{du}{\sqrt{E - u}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Уравнение (1) является частным случаем интегрального уравнения типа Абеля [3] относительно неизвестной функции

$$Y(u) = dX_a(u)/du + dX_c(u)/du$$

при заданной правой части $T(E)$. Его решение ([3], уравнение 36) записывается как

$$X_a(u) + X_c(u) = \frac{1}{\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T(e)de}{\sqrt{u - e}}. \quad (2)$$

Это интегральное соотношение не дает возможности определить функции $X_a(E)$ и $X_c(E)$ по отдельности. Однако для симметричной потенциальной ямы $X_a(u) = X_c(u) = X(u)$, так что интегральное соотношение

$$X(u) = \frac{1}{2\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T(e)de}{\sqrt{u - e}} \quad (3)$$

позволяет для любой априорно заданной функции $T(E)$ однозначным образом восстановить профиль симметричной потенциальной ямы, для которой зависимость периода осцилляций от времени описывается заданной функцией.

Исключениями являются:

а) случаи, когда подынтегральное выражение в формуле (3) расходится;

б) случаи, когда вычисленная по формуле (3) функция $X(u)$ не является монотонно возрастающей и, следовательно, обратная функция $U_a(x) = U_b(x) = (X(u))^{-1}$ не может быть восстановлена. Однако если существует предел $\lim_{e \rightarrow 0} T(e) = t_0 > 0$, то существует и интервал $u \in [0, u_0]$, на котором функция $X(u)$ будет монотонно возрастающей и тем самым по крайней мере частично профиль $U(x)$ для симметричной потенциальной ямы может быть восстановлен (хотя, возможно, и не для всех энергий и / или потенциалов, для которых мы хотели бы его построить).

Как уже отмечалось, важным частным случаем является случай $T(E) = T_0 = \text{const}$, когда период осцилляций не зависит от энергии (изохронные осцилляции). Из формулы (3), порождающей решение $X(u) \sim \sqrt{u}$, следует, что единственный симметричный профиль потенциала, обеспечивающий точную изохронность — это линейный гармонический осциллятор с квадратичным потенциалом $U(x) \sim x^2$.

Если отбросить предположение, что потенциальная яма $U(x)$ является симметричной, то существует множество искомых потенциальных ям, удовлетворяющих требуемой зависимости периода осцилляций от энергии. Так, например, следуя [1], можно фиксировать произвольным образом одну из ветвей потенциала (например, функцию $U_a(x)$ или, что то же самое, функцию $X_a(u)$) и из уравнения (2) определить недостающую часть потенциального профиля. Недостатком этого приема является, однако, то что две полученные ветви распределения потенциала $U_a(x)$ и $U_b(x) = U_c(-x)$ не обязательно стыкуются друг с другом с необходимой гладкостью и поэтому полученный ответ не обязательно будет аналитической функцией переменной x . Однако условие аналитичности $U(x)$ во всех точках, включая точку $x = 0$, является важным для задач ионной оптики, поскольку распределение электрического потенциала на оси устройства — всегда аналитическая функция.

Задача о восстановлении профиля одномерной потенциальной ямы по заданным характеристикам осцилляций частицы сейчас уже подробно исследована математиками. Наиболее исчерпывающее исследование данного вопроса может быть найде-

но в работах японского математика Minoru Urabe [4–8], которые можно найти в Сети, однако интегральные уравнения, используемые при его подходе, в большинстве случаев имеют более сложный вид, чем интегральное соотношение Ландау. Краткий обзор результатов и ссылки на основные публикации для частного случая данной задачи — поиску идеально изохронных систем, можно найти в [9, 10].

2. ГЛАДКОСТЬ СТЫКОВКИ ДВУХ ВЕТВЕЙ СИММЕТРИЧНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Вопрос гладкости стыковки двух ветвей потенциального распределения, вычисляемого по формуле Ландау, даже и для случая симметричной потенциальной ямы требует отдельного изучения. Рассмотрим его более подробно. Пусть существует предел $\lim_{E \rightarrow 0} T(E) = T_0 > 0$, а поведение функции $T(E)$ в окрестности точки $E = 0$ в достаточной степени регулярно, чтобы ее можно было разложить в нормированный ряд Тейлора

$$T(E) \approx T_0 \left(1 + t_1 (E/E_0) + t_2 (E/E_0)^2 / 2! + t_3 (E/E_0)^3 / 3! + t_4 (E/E_0)^4 / 4! + \dots \right).$$

Подставив это выражение в (3), получим

$$\begin{aligned} \frac{2\pi\sqrt{2m/E_0}}{T_0} X(u) &\approx \\ &\approx \sqrt{\frac{u}{E_0}} \left(2 + t_1 \frac{4u}{3E_0} + t_2 \frac{8u^2}{15E_0^2} + \right. \\ &\quad \left. + t_3 \frac{16u^3}{105E_0^3} + t_4 \frac{32u^4}{945E_0^4} + \dots \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Из этого соотношения можно в окрестности точки $x = 0$ восстановить ряд Тейлора для функции $U(x)$, обратной к функции $X(u)$:

$$U(x) \approx E_0 \left(u_0 + u_1 \frac{x}{L} + u_2 \frac{x^2}{L^2} + u_3 \frac{x^3}{L^3} + u_4 \frac{x^4}{L^4} + \dots \right),$$

где нормировочный множитель выбирается как $L = (T_0/4\pi)\sqrt{2E_0/m}$. После подстановки в формулу (4) вместо переменной u формального ряда для $U(x)$ и переменной x вместо функции $X(u)$, приравнявая нулю коэффициенты при одинаковых степенях переменной x , получим цепочку рекуррентных соотношений, из которых вычисляются

неизвестные коэффициенты разложения $U(x)$ в ряд Тейлора:

$$u_0 = 0, u_1 = 0, u_3 = 0, u_5 = 0, u_7 = 0, \dots,$$

$$u_2 = \frac{1}{4}, u_4 = -\frac{t_1}{12}, u_6 = -\frac{t_2}{120} + \frac{7t_1^2}{144}, u_8 = -\frac{t_3}{1680} + \frac{t_1 t_2}{80} - \frac{5t_1^3}{144}, \dots$$

Как легко видеть, в разложении $U(x)$ в ряд Тейлора присутствуют только четные степени переменной x . Этот факт доказывается и без явного вычисления коэффициентов разложения $U(x)$ в ряд — он получается после многократного последовательного дифференцирования по x в точке $x=0$ тождества $x^2 = U(x) \cdot \Phi^2(U(x))$, вытекающего из условия (4) (потребуется только аналитичность функций $U(x)$ и $\Phi(U)$ в точке ноль, а также тот факт, что $\Phi(0) \neq 0$).

Тем самым можно считать доказанным, что при сделанных предположениях две симметричные ветви потенциала, полученные из соотношения (3), стыкуются аналитически точно в точке $x=0$. Справедливо и обратное утверждение: если $U(x)$ симметрична и разлагается в ряд по четным степеням x в точке $x=0$, а коэффициент ряда при x^2 больше нуля, то $T(E)$ в точке $E=0$ является аналитической функцией, раскладываемой в классический ряд Тейлора, поскольку в этом случае функция $X(u)$ представима как

$$X(u) \approx \sqrt{u} (x_0 + x_1 u + x_2 u^2 / 2! + \dots).$$

(см. следующий раздел) и из условия (1) можно вычислить $T(E)$ в виде ряда.

Следует отметить, что как условие наличия предела $\lim_{E \rightarrow 0} T(E) = T_0 > 0$, так и условие регулярности функции $T(E)$ в окрестности точки $E=0$ не являются необходимыми для существования потенциальной ямы с требуемой зависимостью $T(E)$. Например, легко проверить прямой подстановкой в формулу (3), что при $T(E) \sim E$ получается решение $X(u) \sim u^{3/2}$ и соответственно $U(x) \sim |x|^{2/3}$; при $T(E) \sim E^2$ решением являются $X(u) \sim u^{5/2}$ и $U(x) \sim |x|^{2/5}$; при $T(E) \sim \sqrt{E}$ решением являются $X(u) \sim u$ и $U(x) \sim |x|$; при

$T(E) \sim 1/\sqrt[4]{E}$ решением являются $X(u) \sim u^{1/4}$ и $U(x) \sim x^4$. Однако, например, при $T(E) \sim 1/\sqrt{E}$ решением является $X(u) = \text{const}$, и обратная функция $U(x)$ не существует; при $T(E) \sim 1/E^{3/4}$ решением является $X(u) \sim u^{-1/4}$, и обратная функция $U(x) = 1/x^4$ не является профилем потенциальной ямы; а при $T(E) \sim 1/E$ не существует и функции $X(u)$.

3. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОФИЛЯ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ ПО ЗАДАННОЙ СВОБОДНОЙ КООРДИНАТНОЙ ФУНКЦИИ

Как уже было указано, при произвольном задании одной из ветвей потенциальной ямы вторая ветвь, рассчитанная по формуле (2), может и не стыковаться с первой ветвью аналитически точно (то есть с совпадением правых и левых производных сколь угодно высокого порядка). Чтобы гарантированно получить идеально гладкую стыковку несимметричных ветвей, поступим следующим образом. Пусть ветви потенциальной ямы сопрягаются в точке $x=0$ аналитически точно. Тогда $U_a(x) = U(x)$ и $U_c(x) = U(-x)$, где $U(x) = x^2 V(x)$ — функция, аналитическая в точке $x=0$ и удовлетворяющая условию $V(0) = V_0 = D^2 > 0$ (если $U(x) = a_4 x^4 + \dots$, то $\lim_{E \rightarrow 0} T(E) = +\infty$ [5], а при $V_0 < 0$ в окрестности точки $x=0$ вместо ямы имеем горб). Отсюда следует, в частности, что в этом случае четные коэффициенты разложения функций $U_a(x)$ и $U_c(x)$ в точке $x=+0$ в ряд Тейлора совпадают, а нечетные — меняют знак.

Нахождение функции $X_a(u)$ сводится к решению уравнения $\sqrt{u} = x \cdot H_a(x)$ относительно переменной x , где функция $H_a(x) = \sqrt{V(x)} = \sqrt{D^2 + W(x)}$ будет аналитической в точке $x=0$ из-за условия $W(0) = 0$. Нахождение функции $X_c(u)$, обратной к функции $U_c(x) = U(-x) = x^2 \cdot V(-x)$ на интервале $x \geq 0$, сводится к решению уравнения $\sqrt{u} = x \cdot H_c(x)$, где функция $H_c(x) = \sqrt{V(-x)} = \sqrt{D^2 + W(-x)}$ — также аналитическая в точке $x=0$.

Пусть $x = P(\tau^2) + \tau Q(\tau^2)$ является решением уравнения $\tau = x \cdot H(x)$, которое представлено в виде ряда по переменной τ со сгруппированными отдельно четными и нечетными степенями τ (такое представление решения возможно в силу аналитичности функции $H(x)$ в точке $x=0$ и условия $H(0) \neq 0$). Тогда $x = -P(\tau^2) + \tau Q(\tau^2)$ будет решением уравнения $\tau = x \cdot H(-x)$, т. е. эквивалентного уравнения $-\tau = (-x) \cdot H(-x)$ (новое решение получается из старого заменой $x \rightarrow -x$, $\tau \rightarrow -\tau$). Кроме того, поскольку при $\tau=0$ решением будет $x=0$, то $P(0)=0$ и можно сделать подстановку $P(\tau^2) = \tau^2 R(\tau^2)$. В результате получаем, что $X_a(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) + u \cdot R(u)$, а $X_c(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) - u \cdot R(u)$, где $R(u)$ и $Q(u)$ — функции, аналитические в точке $u=0$. Проведя те же самые рассуждения в обратном направлении, получим, что если $X_a(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) + u \cdot R(u)$, $X_c(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) - u \cdot R(u)$, где $R(u)$ и $Q(u)$ — произвольным образом выбранные функции, аналитические в точке $u=0$, то односторонние ветви потенциала $U_a(x)$ и $U_c(x)$, сконструированные как функции, обратные к функциям $X_a(u)$ и $X_c(u)$, порождают двухстороннюю функцию $U(x)$, аналитическую в точке $x=0$.

Пусть $X(u) = (X_a(u) + X_c(u))/2$ — симметричная часть, а $D(u) = (X_a(u) - X_c(u))/2$ — антисимметричная часть решения, построенного на основании формулы (2) и обеспечивающего аналитически точную стыковку ветвей потенциала. В таком случае $X(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u)$, а $D(u) = u \cdot R(u)$, где $R(u)$ и $Q(u)$ — функции, аналитические в точке $u=0$. При этом функция $X(u) = (X_a(u) + X_c(u))/2$ должна удовлетворять соотношению (3) и может быть из него найдена однозначным образом по заданной функции $T(E)$.

В случае функции $T(E)$, разложимой в ряд Тейлора в точке $E=0$, а также удовлетворяющей условию $\lim_{E \rightarrow 0} T(E) = T_0 > 0$, представимость решения $X(u)$ в форме $X(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u)$ с некоторой аналитической подходящей функцией $Q(u)$ будет

выполнена автоматически (см. предыдущий раздел),¹⁾ так что $X(u)$ можно записать в виде нормированного ряда с известными коэффициентами как:

$$X(u) \approx L \cdot \sqrt{\frac{u}{E_0}} \left(1 + x_1 \frac{u}{E_0} + x_2 \frac{1}{2!} \frac{u^2}{E_0^2} + x_3 \frac{1}{3!} \frac{u^3}{E_0^3} + x_4 \frac{1}{4!} \frac{u^4}{E_0^4} + \dots \right).$$

Функция же $D(u)$ пока остается неопределенной, также представленной в виде обезразмеренного ряда Тейлора, но с неизвестными коэффициентами:

$$D(u) \approx L \cdot \frac{u}{E_0} \left(d_0 + d_1 \frac{u}{E_0} + d_2 \frac{1}{2!} \frac{u^2}{E_0^2} + d_3 \frac{1}{3!} \frac{u^3}{E_0^3} + d_4 \frac{1}{4!} \frac{u^4}{E_0^4} + \dots \right).$$

Поскольку функция $X_a(u)$ имеет вид $X_a(u) = X(u) + D(u)$, причем для функции $X(u)$ имеется приведенное выше разложение в ряд по u в окрестности точки $u=0$, из данного соотношения можно рекуррентным образом найти коэффициенты для разложения в нормированный ряд Тейлора обратной функции $U_a(x)$:

$$U_a(x) = E_0 \left(\frac{x}{L} \right)^2 \left(1 + u_{a1} \frac{x}{L} + u_{a2} \frac{x^2}{L^2} + u_{a3} \frac{x^3}{L^3} + u_{a4} \frac{x^4}{L^4} + \dots \right).$$

Тем самым коэффициенты u_{ak} будут выражены явным и однозначным образом через коэффициенты x_i и d_j функций $X(u)$ и $D(u)$, записанных ранее в виде соответствующих рядов:

$$\begin{aligned} u_{a1} &= -2d_0, & u_{a2} &= 5d_0^2 - 2x_1, \\ u_{a3} &= -14d_0^3 - 2d_1 + 12d_0x_1, \\ u_{a4} &= 42d_0^4 + 14d_0d_1 - 56d_0^2x_1 + 7x_1^2 - x_2, \dots \end{aligned}$$

¹⁾ Как следует из следующего раздела, когда $X_a(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) + u \cdot R(u)$, $X_c(u) = \sqrt{u} \cdot Q(u) - u \cdot R(u)$, где $R(u)$ и $Q(u)$ — аналитические функции, $T(E)$ необходимым образом будет аналитической и разложимой в ряд Тейлора в точке $E=0$.

Поскольку $X_c(u) = X(u) - D(u)$, а $U_c(x) = U_a(-x)$ ($U_a(x)$), представленная в виде ряда, может быть аналитически продолжена и на область $x \leq 0$, то разложение функции $U_c(x)$ в нормированный ряд Тейлора

$$U_c(x) = E_0 \left(\frac{x}{L} \right)^2 \left(1 - u_{b1} \frac{x}{L} + u_{b2} \frac{x^2}{L^2} - u_{b3} \frac{x^3}{L^3} + u_{b4} \frac{x^4}{L^4} + \dots \right),$$

извлекаемое из асимптотического представления для $X_c(u)$, должно получаться из аналогичного разложения для функции $U_a(x)$ заменой $d_j \rightarrow -d_j$ и $x \rightarrow -x$. Легко проверить, что и в самом деле полученные из уравнения $X_c(u) = X(u) - D(u)$ коэффициенты разложения $U_c(x)$ в ряд удовлетворяют условию $u_{ak} \equiv u_{bk}$.

Тем самым при произвольно выбранной функции $D(u)$, удовлетворяющей условию $D(0) = 0$ и аналитической в точке $u = 0$, и при функции $X(u)$, вычисленной из интегрального соотношения (3), из условий

$$X_a(u) = X(u) + D(u), \quad X_c(u) = X(u) - D(u) \quad (5)$$

получаются функции $U_a(x)$ и $U_c(x)$, обеспечивающие аналитически точное сопряжение двух ветвей потенциальной ямы и гарантирующие выполнение закона $T(E)$ для зависимости периода осцилляций от энергии. Отметим, однако, что здесь аналитическая функция $D(u)$ не может быть совсем уж произвольной, а должна выбираться таким образом, чтобы функции $X(u) + D(u)$ и $X(u) - D(u)$ были монотонно возрастающими по крайней мере в некоторой окрестности точки $u = 0$ — иначе восстановить обратные функции $U_a(x)$ и $U_c(x)$ будет невозможно.

Уравнения (5) будут работать как средство восстановления профиля несимметричной потенциальной ямы и в более общем случае, без предположения об аналитичности функций $T(E)$ и $D(u)$. Однако в этом случае аналитичность стыковки двух ветвей потенциала, скорее всего, уже не будет выполняться.

4. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОФИЛЯ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ ПО ЗАДАННОЙ ВРЕМЕННОЙ АСИММЕТРИЧНОСТИ

Если заданы по отдельности времена движения $T_a(E)$ и $T_c(E)$ для каждой из половин потенциальной ямы:

$$\begin{aligned} T_a(E) &= \sqrt{2m} \int_0^E \frac{dX_a(u)}{du} \frac{du}{\sqrt{E-u}}, \\ T_c(E) &= \sqrt{2m} \int_0^E \frac{dX_c(u)}{du} \frac{du}{\sqrt{E-u}}, \end{aligned} \quad (6)$$

то по формулам

$$\begin{aligned} X_a(u) &= \frac{1}{\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T_a(e)de}{\sqrt{u-e}}, \\ X_c(u) &= \frac{1}{\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T_c(e)de}{\sqrt{u-e}} \end{aligned}$$

можно восстановить по отдельности правую и левую ветви потенциала $U_a(x)$ и $U_c(x)$. Однако, как и раньше, при произвольно выбранных функциях $T_a(E)$ и $T_c(E)$ эти две ветви, скорее всего, не будут сопрягаться друг с другом аналитически точно в точке $x = 0$. Поэтому, для того чтобы без хлопот получать аналитически точно сопрягаемые ветви потенциала, надо использовать дополнительный "трюк".

Как показано в предыдущем разделе, при аналитически точном сопряжении ветвей $U_a(x)$ и $U_c(x)$ потенциальной ямы обратные функции $X_a(u)$ и $X_c(u)$ могут быть представлены в нормированном виде как

$$\begin{aligned} X_a(u) &= L \left(\sqrt{u/E_0} \cdot Q(u/E_0) + (u/E_0) \cdot P(u/E_0) \right), \\ X_c(u) &= L \left(\sqrt{u/E_0} \cdot Q(u/E_0) - (u/E_0) \cdot P(u/E_0) \right), \end{aligned}$$

где $P(u)$ и $Q(u)$ — функции, аналитические в точке $u = 0$. Разлагая функции $P(u)$ и $Q(u)$ в ряды Тейлора

$$\begin{aligned} P(u) &\approx p_0 + p_1 u + p_2 \frac{u^2}{2!} + p_3 \frac{u^3}{3!} + p_4 \frac{u^4}{4!} + \dots, \\ Q(u) &\approx q_0 + q_1 u + q_2 \frac{u^2}{2!} + q_3 \frac{u^3}{3!} + q_4 \frac{u^4}{4!} + \dots, \end{aligned}$$

из соотношений (6) можно получить для функций $T_a(E)$ и $T_c(E)$ выражения

$$T_a(E) = T_0 \left\{ \pi \left[\frac{q_0}{2} + \frac{3q_1}{4} \frac{E}{E_0} + \frac{15q_2}{32} \left(\frac{E}{E_0} \right)^2 + \frac{35q_3}{192} \left(\frac{E}{E_0} \right)^3 + \frac{105q_4}{2048} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4 + \dots \right] + \sqrt{\frac{E}{E_0}} \left[2p_0 + \frac{8p_1}{3} \frac{E}{E_0} + \frac{8p_2}{5} \left(\frac{E}{E_0} \right)^2 + \frac{64p_3}{105} \left(\frac{E}{E_0} \right)^3 + \frac{32p_4}{189} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4 + \dots \right] \right\},$$

$$T_c(E) = T_0 \left\{ \pi \left[\frac{q_0}{2} + \frac{3q_1}{4} \frac{E}{E_0} + \frac{15q_2}{32} \left(\frac{E}{E_0} \right)^2 + \frac{35q_3}{192} \left(\frac{E}{E_0} \right)^3 + \frac{105q_4}{2048} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4 + \dots \right] - \sqrt{\frac{E}{E_0}} \left[2p_0 + \frac{8p_1}{3} \frac{E}{E_0} + \frac{8p_2}{5} \left(\frac{E}{E_0} \right)^2 + \frac{64p_3}{105} \left(\frac{E}{E_0} \right)^3 + \frac{32p_4}{189} \left(\frac{E}{E_0} \right)^4 + \dots \right] \right\}.$$

Вычислим теперь полный период осцилляций $T(E) = 2(T_a(E) + T_b(E))$ и временную асимметрию осцилляций $\Delta T(E) = 2(T_a(E) - T_b(E))$. Из приведенных выше выражений следует, что $T(E) = G(E)$, а $\Delta T(E) = \sqrt{E} \cdot H(E)$, где $G(E)$ и $H(E)$ — аналитические в точке $E=0$ функции. При этом коэффициенты разложения в ряд Тейлора функции $Q(u)$ взаимно-однозначно определяют коэффициенты разложения в ряд Тейлора функции $T(E)$, а коэффициенты разложения в ряд Тейлора функции $P(u)$ взаимно-однозначно определяют коэффициенты разложения в ряд Тейлора функции $\Delta T(E)$.

Найдя функции $T(E)$ и $\Delta T(E)$, можно вычислить функции $T_a(E) = (T(E) + \Delta T(E))/2$ и $T_c(E) = (T(E) - \Delta T(E))/2$. Окончательно получаем следующее интегральное представление для

двух ветвей потенциальной ямы:

$$X_a(u) = \frac{1}{2\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T(e) + H(e)\sqrt{e/E_0}}{\sqrt{u-e}} de,$$

$$X_c(u) = \frac{1}{2\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T(e) - H(e)\sqrt{e/E_0}}{\sqrt{u-e}} de,$$
(7)

где функция $T(E)$ задает зависимость периода осцилляций от энергии, а произвольная функция $H(E)$, имеющая размерность времени и аналитическая в точке $E=0$, управляет несимметричностью времени движения частицы в правой и левой половинах потенциальной ямы в зависимости от энергии. Очевидным образом для монотонности функций $X_a(u)$ и $X_b(u)$ необходимы условия $T(e) + H(e)\sqrt{e/E_0} > 0$ и $T(e) - H(e)\sqrt{e/E_0} > 0$ — время движения частицы в каждой из двух половин потенциальной ямы должно быть положительным, однако эти условия не являются достаточными.

Как и в предыдущем разделе, уравнения (7) можно использовать как инструмент для восстановления профиля несимметричной потенциальной ямы и без требования аналитичности для функций $T(E)$ и $H(E)$. Однако в этом случае аналитичность стыковки двух ветвей потенциала, скорее всего, уже не будет выполнена.

5. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРОФИЛЯ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ ПРИ ПОМОЩИ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

Пусть имеется монотонная несимметричная потенциальная яма $U(x)$. Сделаем такую замену переменных $x = F(p)$, чтобы несимметричная потенциальная яма $(x, U(x))$ в новых координатах $(p, V(p)) = (p, U(F(p)))$ стала симметричной. В таком случае можно ожидать, что симметричное распределение потенциала $V(p)$ будет определяться по заданному закону $T(E)$ с помощью интегрального соотношения типа (3), а если управлять заменой переменных $x = F(p)$, то мы сможем управлять несимметричностью получаемой на выходе потенциальной ямы.

Для реализации этой программы действий выделим по отдельности правую и левую ветви $U_a(x)$ и $U_c(x)$ из монотонного профиля $U(x)$ распределения потенциала и определим для каж-

дой из монотонных ветвей обратные монотонно растущие функции $X_a(u)$ и $X_c(u)$, имеющие смысл при $u \geq 0$. Введем новые функции $P(u)$ и $Q(u)$, для которых выполнено $X_a(u) = P(u) + Q(u)$, $X_c(u) = P(u) - Q(u)$ — эти функции $P(u)$ и $Q(u)$ вычисляются по очевидным формулам $P(u) = (X_a(u) + X_c(u))/2$, $Q(u) = (X_a(u) - X_c(u))/2$. В силу монотонного роста функции $p = P(u)$, вытекающего из монотонного роста функций $X_a(u)$ и $X_c(u)$, имеется обратная функция $u = V(p)$, определенная на интервале $p \geq 0$, принимающая значения на интервале $u \geq 0$ и монотонно возрастающая с ростом параметра p .

Рассмотрим замену переменных $p = P(u)$. Определим функцию $R(p) = Q(V(p))$. Заданные в параметрической форме на плоскости (x, u) кривые

$$\begin{aligned}\Gamma_a &= \{x, U_a(x)\} = \{X_a(u), u\} = \{p + R(p), V(p)\}, \\ \Gamma_c &= \{x, U_c(x)\} = \{X_c(u), u\} = \{p - R(p), V(p)\},\end{aligned}$$

это — правая и левая ветви потенциальной ямы, но записанные с применением разных способов параметризации геометрических кривых:

- при выборе в качестве параметризующей переменной проекции на ось OX ,
- при выборе в качестве параметризующей переменной проекции на ось OU ,
- при выборе в качестве параметризующей переменной параметра $p = P(u)$.

При этом в соответствии с условиями $X_a(u) = P(u) + Q(u)$, $X_c(u) = P(u) - Q(u)$ из соотношения (2) следует, что функция $P(u)$ должна удовлетворять уравнению (3):

$$P(u) = \frac{1}{2\pi\sqrt{2m}} \int_0^u \frac{T(e)de}{\sqrt{u-e}}. \quad (8)$$

Частный случай выбора $X_a(u) = P(u)$, $X_c(u) = P(u)$ соответствует симметричной потенциальной яме, однозначно восстанавливаемой по заданной зависимости $T(E)$, и очевидным образом совпадает с решением (3). В разделе 3 было показано, что все возможные (несимметричные) потенциальные ямы, соответствующие заданной зависимости $T(E)$, получаются из обращения со-

отношений $X_a(u) = P(u) + Q(u)$, $X_c(u) = P(u) - Q(u)$ для фиксированной функции $P(u)$, вычисляемой из (8), и для достаточно произвольной функции $Q(u)$. При этом для функции $Q(u)$, аналитической в точке $u = 0$, из этих соотношений получается двухсторонняя потенциальная яма $U(x)$, удовлетворяющая заданной зависимости $T(E)$ и характеризующая аналитически точным сопряжением между собой в точке $x = 0$ двух ветвей распределения потенциала.

Но если $Q(u)$ — почти произвольная функция, то и $R(p) = Q(V(p))$ — тоже почти произвольная функция. Как легко проверить, единственное ограничение, накладываемое на $R(p)$ из-за аналитичности всех используемых функций — это то, что в окрестности точки $p = +0$ она разлагается в ряд Тейлора с участием только четных степеней переменной p (следствие аналогичного свойства для функции $u = V(p)$, обратной к функции $p = P(u)$, которое доказывается в разделе 2 в предположении, что $T(E)$ — аналитическая функция). В силу этого $R(p)$ — это правая половина произвольной четной аналитической функции, удовлетворяющая условию $R(0) = 0$. Однако, если аналитичности стыковки двух ветвей потенциала в точке $x = 0$ не требуется, функция $R(p)$ может быть произвольной непрерывной функцией, обеспечивающей обратимость функций $p \pm R(p)$ и удовлетворяющей условию $R(0) = 0$.

Легко проверить, что справедливо и обратное утверждение: семейство параметрически заданных с помощью параметра $p \geq 0$ пар кривых

$$\begin{aligned}\Gamma_a &\rightarrow (x = p + R(p), u = V(p)) \text{ и} \\ \Gamma_c &\rightarrow (x = p - R(p), u = V(p)),\end{aligned}$$

где

- функция $u = V(p)$ — это функция, обратная к фиксированной функции $p = P(u)$, вычисляемой в соответствии с условием (8);
- функция $R(p)$ — произвольная четная функция, удовлетворяющая условию $R(0) = 0$ и сохраняющая монотонный рост функций $p + R(p)$ и $p - R(p)$ по крайней мере на некоторой части интервала $p \geq 0$,

порождает потенциальные ямы, соответствующие нужной нам зависимости $T(E)$. Действительно, после замены переменных $p = P(u)$ интеграл (1), определяющий полный период осцилляций в потенциальной яме, приобретает вид

$$\begin{aligned} t(E) &= \sqrt{2m} \int_0^E \left(\frac{dX_a(u)}{du} + \frac{dX_c(u)}{du} \right) \frac{du}{\sqrt{E-u}} = \\ &= \sqrt{2m} \int_0^{P(E)} \left[\left(\frac{dX_a(p)}{dp} + \frac{dX_c(p)}{dp} \right) \frac{dp}{\sqrt{E-V(p)}} \right] \times \\ &\quad \times \frac{V'(p) dp}{\sqrt{E-V(p)}} = \\ &= \sqrt{2m} \int_0^{P(E)} (1 + R'(p) + 1 - R'(p)) \times \frac{dp}{\sqrt{E-V(p)}} = \\ &= 2\sqrt{2m} \int_0^E \frac{P'(u) du}{\sqrt{E-u}}, \end{aligned}$$

т. е. равен $T(E)$ в силу уравнения (8). Легко заметить, что в этих выкладках никак не использовалось разложение функции $R(p)$ в ряд именно по четным степеням p — как указывалось ранее, данное свойство функции $R(p)$ требуется для аналитичности стыковки двух ветвей потенциала (выполнение этого условия может быть проверено отдельно); а не для равенства периода осцилляций нужному значению.

Заключительный "штрих" данного раздела состоит в следующем. Доопределим функцию $V(p)$ антисимметричным образом для интервала $p \leq 0$, функцию $R(p)$ симметричным образом для интервала $p \leq 0$ и функцию $P(u)$ антисимметричным образом для интервала $u \leq 0$:

$$\begin{aligned} V_*(p) &= \begin{cases} V(p) & \text{при } p \geq 0, \\ -V(-p) & \text{при } p < 0; \end{cases} \\ R_+(p) &= \begin{cases} R(p) & \text{при } p \geq 0, \\ R(-p) & \text{при } p < 0; \end{cases} \\ P_*(u) &= \begin{cases} P(u) & \text{при } u \geq 0, \\ -P(-u) & \text{при } u < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Кроме того, симметрично доопределим функцию $V(p)$:

$$V_+(p) = \begin{cases} V(p) & \text{при } p \geq 0, \\ V(-p) & \text{при } p < 0, \end{cases}$$

и составим из двух функций $X_a(u)$ и $X_b(u) = -X_c(u)$ единую монотонно растущую функцию $X_*(u)$:

$$X_*(u) = \begin{cases} X_a(u) & \text{при } u \geq 0, \\ -X_c(-u) & \text{при } u < 0. \end{cases}$$

Можно убедиться, что, поскольку $X_a(u) = P(u) + Q(u)$, $-X_c(u) = -P(u) + Q(u)$, суперпозиция $X_*(V_*(p))$ функций $X_*(u)$ и $V_*(p)$ как на интервале $p \in (0, +\infty)$, так и на интервале $p \in (-\infty, 0)$ совпадает с функцией $p + R_+(p)$. При этом все вновь введенные функции являются непрерывными и обращаются в нуль, когда их аргумент равен нулю. Функции $V_*(p)$, $P_*(u)$, $X_*(u)$, доопределенные антисимметрично, в точке ноль имеют разрыв по старшим производным. В то же время, как легко видеть, функции $V_+(p)$ и $R_+(p)$ сопрягаются со своими значениями на отрицательной части оси аналитически точно, поскольку в точке $p = 0$ они разлагаются в ряд Тейлора только с участием четных членов разложения.

Функция $P_*(u)$ является монотонно растущей, отрицательной при $u < 0$, положительной при $u > 0$ и взаимно-однозначно отображает двухстороннюю окрестность точки $u = 0$ (в идеале — всю числовую ось) на двухстороннюю окрестность точки $p = 0$ с сохранением порядка следования точек. То же самое справедливо для функции $V_*(p)$, являющейся, как легко видеть, обратной функцией для монотонной функции $P_*(u)$.

Для упрощения выкладок будем считать,²⁾ что и переменная u , и переменная p меняются в диапазоне $(-\infty, +\infty)$. В силу монотонности функции $P_*(u)$ при перемещении переменной u вдоль числовой оси $OU = (-\infty, +\infty)$ точка $p = P_*(u)$

²⁾ При строгих выкладках нужно аккуратно выделить допустимые интервалы $u \in [-E_{\max}, E_{\max}]$, $p \in [-P_{\max}, P_{\max}]$, соответствующие таким диапазонам потенциалов/энергий и координат, при которых имеет смысл потенциальная яма $U(x)$, показанная на рис. 1, и которые отображаются друг на друга взаимно-обратными монотонно растущими функциями $p = P_*(u)$ и $u = V_*(p)$.

синхронно движется вдоль числовой оси $OP = (-\infty, +\infty)$. Когда переменная u пробегает интервал $u \in (0, +\infty)$, точка $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\}$ двигается по правой ветви потенциальной ямы $U(x)$: при $u \geq 0$ $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\} = \{X_a(u), V(P(u))\} = \{X_a(u), u\}$. Когда переменная u пробегает интервал $u \in (-\infty, 0)$, точка $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\}$ двигается по левой ветви потенциальной ямы $U(x)$: при $u \leq 0$ $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\} = \{-X_b(|u|), V(P(|u|))\} = \{-X_b(|u|), |u|\}$. В результате, когда переменная u пробегает всю ось $u \in (-\infty, +\infty)$, точка $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\}$ движется без разрывов вдоль графика потенциала потенциальной ямы $U(x)$, от левого края и до правого.

Монотонная взаимно-однозначная замена параметра $u = V_*(p)$ очевидным образом не меняет этого поведения точки $\{X_*(u), V_+(P_*(u))\}$, просто заставляет ее двигаться вдоль графика $u = U(x)$ по другому закону. Как было отмечено ранее, $X_*(V_*(p)) \equiv p + R_+(p)$ и $V_+(P_*(V_*(p))) \equiv V_+(p)$. Интересным фактом является, однако, то, что, поскольку функция $V_+(p)$ симметрична по переменной p , то это означает, что после взаимно-однозначной замены переменных по закону $x = X_*(V_*(p))$ график функции $u = U(x)$ становится симметричным, как и было обещано в начале этого раздела.

Подведем итоги. По заданной зависимости $T(E)$ строится симметричная³⁾ функция $V_+(p)$, используя для этого обращение вычисляемой по формуле (8) функции $P(u)$. После этого конструируется семейство параметрических кривых $x = p + R_+(p)$, $u = V_+(p)$, $p \in (-\infty, +\infty)$, где в ка-

честве $R_+(p)$ выбирается любая симметричная функция, для которой $R_+(0) = 0$ и которая сохраняет монотонный рост функции $p + R_+(p)$ по крайней мере в некоторой окрестности точки $p = 0$. В силу такого выбора $R_+(p)$ уравнение $x = p + R_+(p)$ будет разрешимо относительно p и вместо параметрической кривой может быть построена явная зависимость $u = U(x)$. Семейство параметрических кривых $x = p + R_+(p)$, $u = V_+(p)$, возникающее при переборе всех возможных четных функций $R_+(p)$, удовлетворяющих условию $R_+(0) = 0$ и сохраняющих монотонность функций $p + R_+(p)$, порождает искомое семейство монотонных потенциальных ям $u = U(x)$, обеспечивающих заданную зависимость $T(E)$ периода осцилляций от энергии.

Если функция $R_+(p)$ — аналитическая в точке $p = 0$, то и получаемое на выходе распределение потенциала $U(x)$ будет аналитическим (разложимым в ряд Тейлора) в точке $x = 0$. Справедливо и обратное утверждение: любая потенциальная яма с аналитически точно сопряженными ветвями соответствует параметризации указанного вида с надлежащим образом выбранной аналитической функцией $R_+(p)$. Частный случай $R_+(p) \equiv 0$ соответствует симметричной потенциальной яме с распределением потенциала $U(x) \equiv V_+(x)$, что, как легко видеть, совпадает с решением, получаемым из уравнения (3).

Следует отметить, что часто лишь часть геометрической кривой, описываемой выбранной однопараметрической зависимостью, порождает корректное распределение потенциала $U(x)$. А именно годятся только те участки, для которых движение точки вдоль кривой линии при возрастании аргумента p соответствует возрастанию координаты x при проекции на ось OX . Точки поворота соответствуют сингулярностям потенциального силового поля и ограничивают допустимый диапазон координат и энергий, при которых может быть построена корректная двухсторонняя потенциальная яма (см. пример из следующего раздела).

6. ИДЕАЛЬНЫЕ ИЗОХРОННЫЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ

Рассмотрим в качестве примера случай изохронных осцилляций, представляющий особый

³⁾ Как было показано ранее, если $T(E)$ — аналитическая функция, разложимая в ряд Тейлора в окрестности $E = 0$ и $T'(0) > 0$, то $V(p)$ разлагается в окрестности точки $p = 0$ в ряд Тейлора только с четными степенями переменной p . Тем самым $V_+(p)$ — естественное аналитическое продолжение функции $V(p)$ на интервал $p \leq 0$, оказывающееся симметричной функцией.

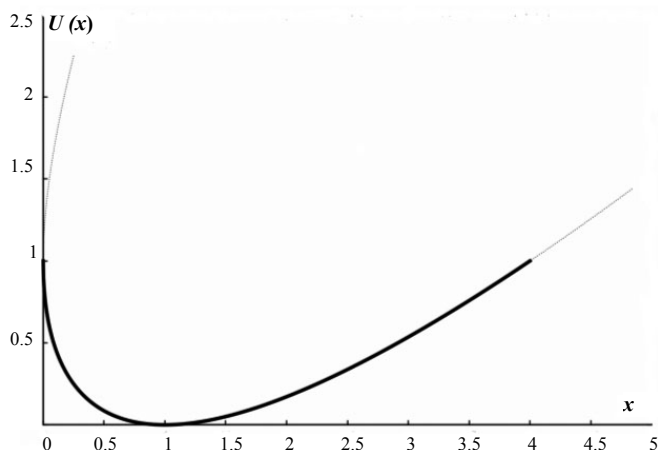


Рис. 2. Изохронное нормированное распределение потенциала $u(x) = (\sqrt{x} - 1)^2$, соответствующее параметрическому представлению $x(p) = 2p + p^2 + 1$, $u(p) = p^2$.

Пунктиром показана заданная в параметрической форме кривая $(x(p), u(p))$, жирной линией показан график функции $u(x)$. В точке $x=0$ имеется сингулярность потенциала, за пределы которой потенциальная яма не может быть продолжена

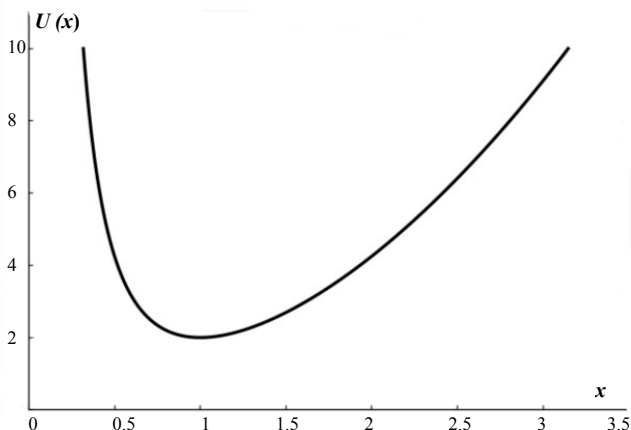


Рис. 3. Изохронное нормированное распределение потенциала $u(x) = x^2 + 1/x^2$, соответствующее параметрическому представлению $x(p) = (p + \sqrt{4 + p^2})/2$, $u(p) = p^2 + 2$.

Параметрическая кривая не имеет точек поворота и порождает полноценную монотонную потенциальную яму. Однако при этом распределение потенциала все равно имеет сингулярную точку при $x=0$, за пределы которой потенциал нельзя продолжить

интерес. Уравнение (8) дает нам для этого случая

$$\text{зависимость } P(u) = \frac{T_0 \sqrt{2E_0/m}}{2\pi} \sqrt{\frac{u}{E_0}}, \quad u \geq 0, \quad \text{где}$$

E_0 — дополнительный нормировочный коэффициент. Обратная функция, естественным образом доопределенная до всей числовой оси

$$p \in (-\infty, +\infty), \quad \text{имеет вид } V(p) = \frac{1}{2} E_0 \left(\frac{p}{L} \right)^2, \quad \text{где}$$

нормировочный коэффициент L определен как

$$L = \frac{1}{2\pi} T_0 \sqrt{E_0/m}. \quad \text{Получили прежний результат:}$$

симметричная потенциальная яма, удовлетворяющая условию изохронности осцилляций — это линейный гармонический осциллятор $U(x) =$

$$= \frac{1}{2} E_0 \left(\frac{x}{L} \right)^2 \quad \text{с квадратичным потенциалом.}$$

Полный набор изохронных распределений потенциала получается исключением параметра p из параметрических зависимостей $x(p) = p + R(p^2)$,

$U(p) = \frac{1}{2} E_0 \left(\frac{p}{L} \right)^2$, когда $R(p)$ удовлетворяет условию $R(0) = 0$ и обеспечивает монотонность функции $p + R(p^2)$ и разрешимость уравнения $x = p + R(p^2)$ по переменной p в некоторой окрестности точки $x = 0$, $p = 0$. Это выражение не является чем-то новым и в точности совпадает с классическим результатом для одномерных изохронных распределений потенциала [5, 9, 10].

Рассмотрим частный случай $x(p) = p + Cp^2$ (один из немногих примеров, когда параметр p можно выразить через x в виде явной формулы). Можно считать, что $C > 0$ (если это не так, достаточно заменить знак у переменных p и x на противоположный). За счет масштабирующей замены $x \rightarrow x/X_0$, $p \rightarrow p/P_0$ функцию $x(p) = p + Cp^2$ можно привести к виду $x(p) = 2p + p^2$, а при масштабировании потенциала $u \rightarrow U/U_0$ — добиться зависимости $u(p) = p^2$. Решением уравне-

ния $x = 2p + p^2$ являются $p = -1 - \sqrt{1+x}$ и $p = -1 + \sqrt{1+x}$, из которых только $p = -1 + \sqrt{1+x}$ проходит через точку $x = 0$, $p = 0$. При смещении положения равновесия $x = 0$ в точку $x = 1$ параметрическое соотношение приобретает вид $p = \sqrt{x} - 1$. Полученное нормированное изохронное распределение потенциала $u(x) = (\sqrt{x} - 1)^2$ с точкой равновесия $x = 1$ и точкой сингулярности $x = 0$ показано на рис. 2 — оно соответствует хорошо известному случаю нелинейных изохронных колебаний плазмы [11]. Следует отметить, что при этом только часть параметрической кривой $u = p^2$, $x = 1 + 2p + p^2$ (параметрическая кривая показана на рис. 2 пунктиром) имеет смысл одномерного распределения потенциала $U(x)$.

Другим примером изохронных колебаний в одномерной потенциальной яме является потенциал $U(x) = \omega^2 x^2 + c^2/x^2$ [12]. В нормированном виде он приобретает вид $U(x) = x^2 + 1/x^2$ с точкой равновесия $x = 1$ и значением потенциала в точке равновесия $U = 2$. Легко проверить, что выбор функции $R(p) = \sqrt{4+p} - 2$ для параметризованного представления изохронных потенциалов $x(p) = p + R(p^2)$, $u(p) = p^2$ порождает решение $u(x) = (x/2 + 1)^2 + 1/(x/2 + 1)^2 - 2$, представляющее из себя потенциал $U(x) = x^2 + 1/x^2$, записанный в эквивалентной форме. Данное распределение потенциала показано на рис. 3. При этом следует отметить еще одно замечательное свойство потенциала $U(x) = \omega^2 x^2 + c^2/x^2$: период осцилляций не зависит от значения коэффициента c , он полностью определяется параметром ω [12].

Следует отметить, что рассматриваемые в данной статье формулы принципиально ориентированы на распределения потенциала типа монотонной потенциальной ямы, т. е. когда левая ветвь распределения потенциала является монотонно спадающей, а правая ветвь — монотонно растущей. Хотя те же самые формулы применимы и к времени движения частицы в одностороннем электростатическом зеркале, но и в этом случае речь идет о принципиально монотонных функциях. Немонотонные распределения потенциала типа зеркал Явора [2, 16–19] не подпадают под рассматриваемую здесь теорию и не могут быть описаны предложенными формулами (см. рис. 4 в качестве иллюстрации подобного распределения потенциала). Тем самым утверждение, что предложенные фор-

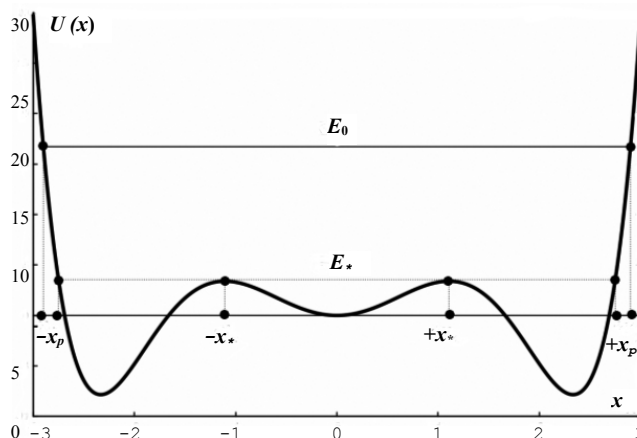


Рис. 4. Симметричная потенциальная яма с немонотонным распределением потенциала.

E_0 — уровень полной энергии, соответствующий нормальным осцилляциям частицы; E_* — критический уровень полной энергии, соответствующий "застреванию" частицы; $\pm x_p$ — координаты точек поворота частицы; $\pm x_*$ — координаты внутренних точек с локальными максимумами потенциала, в которых "застревает" частица

мулы позволяют описывать "все" возможные распределения потенциала с требуемыми временными характеристиками, является в определенной степени натяжкой: под словом "все" подразумеваются "все монотонные распределения потенциала", и совсем даже не исключен случай, что найдутся немонотонные распределения потенциала, которые никак не могут быть описаны предложенными формулами, с теми же или с бесконечно близкими временными характеристиками движения заряженных частиц.

Однако из этого утверждения имеется важное исключение. А именно, если речь идет об идеально изохронных системах, то можно с уверенностью утверждать, что подобные системы имеет смысл искать только в классе монотонных потенциальных ям. Следовательно, рассмотренные ранее формулы $x(p) = p + R(p^2)$, $u(p) = p^2$ действительно описывают все возможные распределения потенциала $U(x)$ с идеально изохронными свойствами.

Для доказательства этого факта рассмотрим потенциальную яму с немонотонным распределением потенциала (рис. 4). Время $T(E)$ движения частицы от края до края потенциальной ямы является аналитической функцией параметра E , и, как всякая аналитическая функция, она может быть аналитически продолжена за пределы изначально-

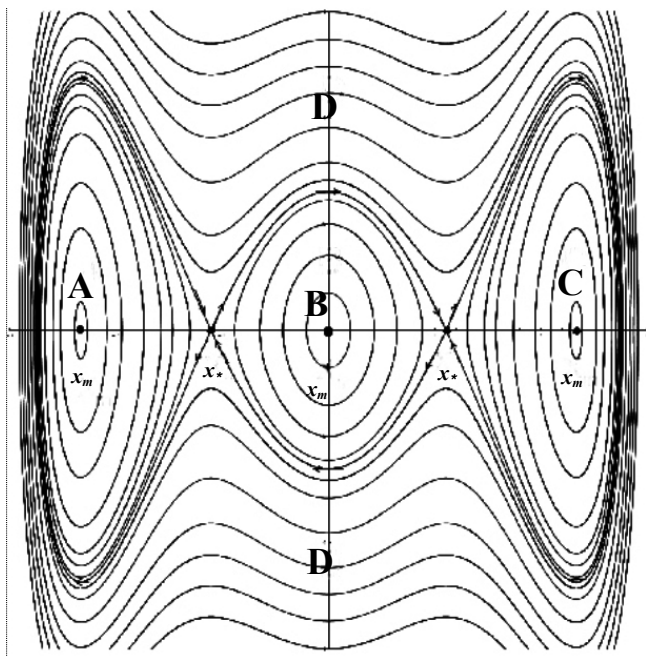


Рис. 5. Фазовые траектории на фазовой плоскости (x, v_x) при движении частицы в одномерном силовом поле с потенциалом, показанном на рис. 4. Область, помеченная как А — колебания в окрестности левого минимума потенциала с энергией меньше E_* . Область, помеченная как С — колебания в окрестности левого минимума потенциала с энергией меньше E_* . Область, помеченная как В — колебания в окрестности центрального минимума (точка $x=0$) потенциала с энергией меньше E_* . Область, помеченная как D — колебания от левой до правой границы потенциальной ямы и обратно с полной энергией больше E_* . Жирными точками помечены положения равновесия: устойчивые x_m — соответствующие минимумам потенциала, и неустойчивые x_* — соответствующие максимумам потенциала. Фазовая линия, помеченная стрелками и проходящая через точки x_* — сепаратриса, разделяющая области с различными режимами движения. Сепаратриса составлена из 4 различных фазовых траекторий, соответствующих критической энергии E_* . Эти особые траектории начинаются и заканчиваются в точках x_* , причем начало каждой траектории соответствует моменту времени $t=-\infty$, конец — моменту времени $t=+\infty$, стрелки показывают направление движения точки при возрастании времени от $t=-\infty$ до $t=+\infty$, а частице требуется бесконечное время, чтобы пройти фазовую траекторию целиком от начала к концу. Время же полного прохода точки по любой другой замкнутой фазовой траектории, показанной на рисунке, строго конечно

го континуального отрезка, на котором была определена. В частности, если $T(E) = \text{const}$ на каком-то интервале энергий, то отсюда необходимым образом следует, что $T(E) = \text{const}$ для всех возможных энергий: аналитическим продолжением функции $T(E) = \text{const}$ за пределы исходного интервала энергий является функция $T(E) = \text{const}$ и никакая другая.

Однако для потенциальной ямы, показанной на рис. 4, условие $T(E) = \text{const}$ никак не может быть выполнено для всех энергий. Действительно, при понижении энергии частицы до уровня, когда она "касается" промежуточного максимума, время движения $T(E)$ должно стремиться к бесконечности. Это можно показать с помощью вычисления интеграла типа (1), выделив в отдельный интеграл время движения в пределах ε -окрестности каждой внутренней точки с локальным максимумом потенциала (на рис. 4 это точки $\pm x_*$). Когда потенциал в точке максимума приблизительно квадратичен, время $t(E)$ движения по ε -интервалу вокруг точки максимума стремится к бесконечности как $\sim -\varepsilon \log(E - E_*)$ при $E \rightarrow E_*$, а при более "гладкой" вершине максимума $t(E)$ будет стремиться к бесконечности еще быстрее. Отсюда следует, что распределение потенциала с внутренним локальным максимумом не может иметь зависимость $T(E) = \text{const}$ для сколь бы ни было малого континуального отрезка значений энергии.

То, что $T(E)$ стремится к бесконечности при $E \rightarrow E_*$, можно обосновать и из чисто физических соображений. Если уровень полной энергии равен высоте промежуточного максимума (уровень E_* на рис. 4), то скорость частицы в точке промежуточного максимума равна нулю (следствие закона сохранения энергии). Если поместить в такую точку максимума частицу с нулевой начальной скоростью, то частица должна будет находиться в данном (неустойчивом) положении равновесия неопределенно долгое время. Тем самым на фазовой плоскости (x, v_x) для траектории-сепаратрисы с $E = E_*$ время достижения частицей предельной точки равновесия $x = x_p$, $v_x = 0$ (где $x = x_p$ — локальный максимум) равно бесконечности и частица, двигающаяся с начальной полной энергией $E = E_*$, никогда не сможет преодолеть точку $x = x_p$ и достигнуть противоположного края потенциальной ямы (рис. 5). Когда же уровень пол-

ной энергии приближается сверху к критическому уровню энергии E_* , время движения частицы вдоль фиксированного отрезка в окрестности максимума стремится к бесконечности: скорость частицы при прохождении этого участка стремится к нулю, и, как результат, полное время движения частицы от края до края потенциальной ямы тоже стремится к бесконечности.

Аналогичное утверждение справедливо и для потенциальных ям с "плоским дном". В [5–7] рассматривается лемма: если потенциальная функция ведет себя в точке равновесия как $U(x) \approx a^2 x^{2n} + \dots$ с показателем $n > 1$, то время осцилляций $T(E)$ при $E \rightarrow 0$ стремится к бесконечности. Для наших целей отсюда следует, что идеальных изохронных свойств не может быть в системах, имеющих в средней части дрейфовое бесполое пространство — точнее, имеющих локальные участки с приближенно-дрейфовым ("плоским") распределением потенциала, где потенциал ведет себя как $U(x) \approx a^2 x^{2n} + \dots$, т. к. функция $T(E)$, стремящаяся при каких-то значениях энергии E к бесконечности, никак не может быть результатом аналитического продолжения функции, которая на некотором континуальном отрезке ведет себя как $T(E) = \text{const}$.

7. ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ЗАДАНЫМИ ВРЕМЕННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Профили осевых распределений электрического потенциала, обеспечивающие заданные временные характеристики движения заряженных частиц, близкие к изохронным, являются важным инструментом для разработки времяпролетных масс-анализаторов [2, 13–19]. В частности, идеально изохронные симметричные профили, соответствующие квадратичному распределению потенциала и обеспечивающие идеальные времяпролетные свойства зеркала, с успехом используются в патентах [20, 23, 25]. При этом осесимметричное электрическое поле с квадратичным распределением потенциала вдоль оси, используемое в электростатической ловушке Orbitrap™ [20–22], предназначенной для фурье-масс-спектрометрии, является единственным электрическим полем такого рода. Однако, если отказаться от строгой осесимметричности электрического поля, можно найти самые разнообразные решения [23–26], обеспечивающие идеальные времяпролетные свойства вдоль одной из осей. Теория синтеза электрических полей наиболее общего вида с квадратичным

поведением электрического потенциала вдоль одной из осей, которые тем самым обеспечивают идеальные времяпролетные свойства прибора, подробно рассматривается в [26].

Можно было бы ожидать, что несимметричные одномерные распределения потенциала $x(p) = p + R(p^2)$, $u(p) = p^2$, обеспечивающие идеальную изохронность, могут привести к не менее интересным решениям. К сожалению, это не так. Кроме зависимости времени пролета от энергии частицы не менее существенным фактором является зависимость времени пролета от координат и углов, характеризующих смещение траектории заряженной частицы вблизи оси [2]. Если же распределение электрического потенциала вдоль оси отлично от симметричного изохронного закона $\sim z^2$, исчерпывающе проанализированного в [26], то расщепления движения вдоль оси и движения перпендикулярно к оси не происходит и время движения заряженной частицы начинает существенным образом зависеть от пространственных координат и углов, характеризующих возмущение движения заряженной частицы по сравнению со строго осевым движением. Поэтому, по всей видимости, электрические поля с распределением электрического потенциала типа $\sim z^2$ вдоль одной из осей являются единственными, обеспечивающими идеальные времяпролетные свойства электростатического зеркала.

Несмотря на это соображение, инструменты для целенаправленного синтеза электрических полей с заданными временными характеристиками по энергии могут быть весьма полезными при разработке времяпролетных масс-спектрометрических приборов. Конструктивные алгоритмы синтеза электрических полей, которые можно разработать на основании такого подхода, будут являться предметом дальнейших исследований.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОODY

В работе показано, как можно модифицировать известную формулу Ландау [1], позволяющую в общем случае синтезировать распределения потенциалов типа потенциальной ямы с заданным законом зависимости периода осцилляций от энергии. Предложенные в этой работе формулы позволяют рассчитывать аналитически гладкие несимметричные монотонные распределения потенциалов с требуемыми временными свойствами для движения заряженных частиц. Обосновано важное утверждение, что идеально изохронные (относительно полной энергии частиц) одномерные распределения потенциалов могут быть найдены только в классе монотонных потенциальных

ям с квадратичным "дном" в окрестности положения равновесия.

При выполнении данного исследования активно использовались программы [27] и [28].

Рассчитываемые на основании предложенных формул монотонные одномерные профили электрических потенциалов могут быть полезными при синтезе электронных зеркал с хорошими изохронными свойствами, необходимыми для времяпролетной масс-спектрометрии. Разработка на этой основе конкретных и практически работающих алгоритмов целенаправленного синтеза электрических конфигураций с желаемыми времяпролетными характеристиками определенно требует отдельных серьезных исследований, которые, возможно, станут предметом последующих публикаций.

Я благодарен д-ру В. Щепунову за ссылки на работы К. Кестера, использованные здесь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика, сер. Теоретическая физика. М.: Физматлит, 2004. (§11 и 12).
2. Yavor M.I. Optics of charged particle analyzers // *Advances of Imaging and Electron Physics*. Elsevier, 2009. V. 157. P. 293–316.
3. Полянин А.Д., Манжиров А.В. Справочник по интегральным уравнениям: точные решения. М.: Факториал, 1998. 432 с.
4. Urabe M. geometrical study of nonlinear autonomous oscillations // *Funkcialaj Ekvacioj*. 1958. V. 1. P. 1–50.
5. Urabe M. Potential forces which yield periodic motions of a fixed period // *Journal of Mathematics and Mechanics*. 1961. V. 10. P. 569–578.
6. Urabe M. The potential force yielding a periodic motion whose period is an arbitrary continuously differentiable function of the amplitude // *Journal of Science of the Hiroshima University*. 1962. Ser. A-I (Mathematics). V. 26. P. 93–109.
7. Urabe M. The potential force yielding a periodic motion with arbitrary continuous half-periods // *Journal of Science of the Hiroshima University*. 1962. Ser. A-I (Mathematics). V. 26. P. 111–122.
8. Urabe M. Relations between periods and amplitudes of periodic solutions of $\ddot{x} + g(x) = 0$ // *Funkcialaj Ekvacioj*. 1964. V. 6. P. 63–88.
9. Амелькин В.В., Калигин Б.С. Изохронные и импульсные колебания двумерных динамических систем. М.: Комкига, 2006. 208 с.
10. Амелькин В.В., Калигин Б.С. Нелинейные изохронные и импульсные колебания в динамических системах второго порядка. Минск: БГУ, 2008. 147 с.
11. Заславский Г.М., Сагдеев Р.З. Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. (гл. 1, §4).
12. Chalykh O.A., Veselov A.P. A remark on rational isochronous potentials // *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*. 2005. V. 12, Supplement 1. P. 179–183.
13. Verentchikov A.N., Yavor M.I. Multi-reflecting time-of-flight mass spectrometer and a method of use. 2004. Patent application US2007/0029473.
14. Verentchikov A.N., Yavor M.I. Multi-reflecting time-of-flight mass spectrometer with isochronous curved ion interface. 2006. Patent application US2006/214100.
15. Verentchikov A.N., Yavor M.I. Quasi-planar multi-reflecting time-of-flight mass spectrometer. 2010. Patent application WO2010/008386.
16. Явор М.И., Веренчиков А.Н. Планарный многоотражательный времяпролетный масс-анализатор, работающий без ограничения диапазона масс // *Научное приборостроение*. 2004. Т. 14, № 2. С. 38–45.
17. Хасин Ю.И., Веренчиков А.Н., Гаврик М.А., Явор М.И. Планарный времяпролетный анализатор в режиме многократных отражений и высокого разрешения // *Научное приборостроение*. 2005. Т. 15, № 2. С. 112–120.
18. Yavor M.I., Verentchikov A.N., Hasin Yu.I. et al. Planar multi-reflecting time-of-flight mass analyzer with a jagged ion path // *Physics Procedia*. 2008. V. 1, N 1. P. 391–400.
19. Помозов Т.В., Явор М.И., Веренчиков А.Н. Рефлектроны с ортогональным ускорением ионов на основе планарных бессеточных зеркал // *Журнал технической физики*. 2012. Т. 82, вып. 4. С. 124–130.
20. Makarov A. Mass spectrometer. 1999. U.S. Patent 5,886,346.
21. Makarov A. Electrostatic axially harmonic orbital trapping: A high-performance technique of mass analysis // *Analytical Chemistry*. 2000. V. 72. P. 1156–1162.
22. Hu O., Noll R.J., Li H., Makarov A. et al. The Orbitrap: a new mass spectrometer // *Journal of Mass Spectrometry*. 2005. V. 40. P. 430–443.
23. Köster C. A mass spectrometer comprising an electrostatic ion trap. 2007. Patent application GB 2448413.
24. Köster C. The concept of electrostatic non-orbital harmonic ion trapping // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2009. V. 287. P. 114–118.
25. Golikov U., Solovyev K., Sudakov M. et al. A multi-reflecting ion optical device. 2007. Patent application WO 2009/001909.
26. Голиков Ю.К., Соловьев К.В. Электростатические ионные ловушки. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского политехнического университета, 2008. 152 с.
27. Программа для аналитических вычислений *Mathematica*. URL: (<http://www.wolfram.com>).
28. Программа для создания графиков *GnuPlot*. URL: (<http://www.gnuplot.info>).

**Институт аналитического приборостроения РАН,
г. Санкт-Петербург**

Контакты: Бердников Александр Сергеевич,
asberd@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 4.09.2012

**LANDAU RELATIONSHIP FOR THE TWO-SIDE PROFILE
OF THE ONE-DIMENSIONAL POTENTIAL DISTRIBUTION
OF THE MECHANICAL OSCILLATOR WITH THE PREDEFINED
DEPENDENCE OF THE PERIOD OF OSCILLATIONS FROM ENERGY**

A. S. Berdnikov

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg

The Landau relationship is considered which enables to reconstruct the symmetrical potential well for the one-dimensional mechanical oscillator using the predefined dependence of its period from energy as the input data. It is shown how this expression can be modified to produce non-symmetrical smooth potential wells for the same purpose. It is confirmed that there are no one-dimensional potential distributions with flat bottoms and/or with non-monotonic behavior which produce the ideally isochronous oscillators (i.e., the oscillators where the period of oscillations is the same for any energy at least for some energy ranges). The application of these results to time-of-flight mass spectrometers and FTR-MS electrostatic traps is discussed.

Keywords: one-dimensional oscillators, isochronism, time-of-flight mass spectrometers, Fourier transform mass spectrometers, electrostatic ion traps, electrostatic mirrors