

Индекс Маслова для степенных потенциалов

А. М. Ишханян^{+*}, В. П. Крайнов^{×1)}

⁺Институт физических исследований НАН Армении, 0203 Аштарак, Армения

^{*}Физико-технический институт, Национальный Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

[×]Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 7 ноября 2016 г.

В квазиклассическом правиле квантования Бора–Зоммерфельда рассчитан индекс Маслова для степенных одномерных потенциалов вида $V(x) = -V_0/x^s$, $x > 0$, $0 < s < 2$. Для потенциала $V(x) = -V_0/x^{1/2}$ результат сравнивается с недавно полученным точным решением. Рассмотрен также случай центрального степенного потенциала.

DOI: 10.7868/S0370274X1701009X

1. Введение. Индекс Маслова γ [1, 2] в простейшем одномерном случае представляет собой добавку к квантовому числу n в правиле квантования Бора–Зоммерфельда ($\hbar = m = 1$):

$$\int_a^b \sqrt{2(E_n - V(x))} dx = \pi(n + \gamma). \quad (1)$$

Такая добавка имеет смысл, так как, хотя $n \gg 1$, точность квазиклассического приближения более высокая $-1/n^2 \ll 1$. Для потенциалов, не имеющих особенностей в классически доступной области $a < x < b$, добавка хорошо известна [3]: $\gamma = 1/2$. Индекс Маслова не равен $1/2$ в случае, если в точках поворота или в других точках потенциал имеет сингулярность. В общем случае значение индекса Маслова, очевидно, можно ограничить областью $-1 < \gamma < 1$. В настоящей работе эта добавка вычисляется для одномерных потенциалов вида

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{V_0}{x^s}, & x > 0, \\ \infty, & x < 0 \end{cases} \quad (2)$$

и аналогичного центрального потенциала. Здесь $0 < s < 2$ (при $s > 2$ имеет место падение на центр [3]: все дискретные уровни опускаются в минус бесконечность). Без ограничения общности можно далее считать $V_0 = 1$. Потенциал (2) имеет сингулярность в начале координат. Ее учет известен лишь для случая $s = 1$, соответствующего кулоновскому потенциалу $\gamma = 0$ [4].

2. Методика расчета. Итак, рассмотрим уравнение Шредингера

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{1}{x^s} \psi = E_n \psi; \quad x > 0, \quad n \gg 1, \quad |E_n| \ll 1. \quad (3)$$

Обозначим правую точку поворота $x_0 = |E_n|^{-1/s} \gg 1$. В области $x \ll x_0$ можно пренебречь правой частью уравнения (3), и оно примет вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2}{x^s} \psi = 0. \quad (4)$$

Условие применимости квазиклассического приближения

$$\frac{d\lambda}{dx} \sim x^{s/2-1} \ll 1 \quad (5)$$

не выполняется при $x \ll 1$, так что требуется найти точное решение уравнения (4). Квазиклассическое приближение для уравнения (4) выполняется лишь в области $1 \ll x \ll x_0$, где оно имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim x^{s/4} \cos \left(\int_0^x p(x') dx' - \delta \right) = \\ &= x^{s/4} \cos \left(\frac{2^{3/2}}{2-s} x^{1-s/2} - \delta \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Этот вид наводит на следующую подстановку независимой переменной для точного решения уравнения (4): $z = \frac{2^{3/2}}{2-s} x^{1-s/2}$. Тогда получаем

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - \frac{\alpha}{z} \frac{d\psi}{dz} + \psi = 0; \quad \alpha = \frac{s}{2-s}. \quad (7)$$

Замена зависимой переменной $\psi(z) = z^{(1+\alpha)/2} \varphi(z)$ сводит (7) к уравнению для функции Бесселя:

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\varphi}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) \varphi = 0, \quad \nu = \frac{\alpha + 1}{2}. \quad (8)$$

¹⁾e-mail: vpkrainov@mail.ru

Решение уравнения (8), удовлетворяющее условию $\varphi(0) = 0$, будет следующее: $\varphi(z) \sim J_\nu(z)$. При $z \gg 1$ приходим к асимптотическому выражению

$$\varphi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{z}} \cos\left(z - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (9)$$

так что волновая функция в области $1 \ll x \ll x_0$ приобретает асимптотический вид

$$\psi(x) \sim x^{s/4} \cos\left(\frac{2^{3/2}}{2-s} x^{1-s/2} - \frac{s\pi}{4(2-s)} - \frac{\pi}{2}\right). \quad (10)$$

Сравнивая уравнения (6) и (10), находим

$$\delta = \frac{s\pi}{4(2-s)} + \frac{\pi}{2}. \quad (11)$$

Далее рассмотрим квазиклассическую волновую функцию в области $1 \ll x < x_0$, начиная с правой точки поворота:

$$\psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\int_x^{x_0} p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right),$$

$$p(x) = \sqrt{2\left(\frac{1}{x^s} - \frac{1}{x_0^s}\right)}. \quad (12)$$

Представляя $\int_x^{x_0} \dots = \int_0^{x_0} \dots - \int_0^x \dots$, получим в области $1 \ll x \ll x_0$ следующие выражения для интегралов в (12):

$$\int_0^{x_0} \sqrt{2\left(\frac{1}{x^s} - \frac{1}{x_0^s}\right)} dx = \frac{\sqrt{2\pi} \Gamma\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)}{2s \Gamma\left(\frac{1}{s} + 1\right)} |E_n|^{1/2-1/s}, \quad (13)$$

$$\int_0^x \sqrt{2\left(\frac{1}{x'^s} - \frac{1}{x_0^s}\right)} dx' \approx \frac{2^{2/3}}{2-s} x^{1-s/2}. \quad (14)$$

Волновая функция (12) в области $1 \ll c \ll x_0$ принимает вид

$$\psi(x) \sim x^{s/4} \times \cos\left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{s}\right)} |E_n|^{1/2-1/s} - \frac{2^{3/2}}{2-s} x^{1-s/2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (15)$$

Правило квантования Бора–Зоммерфельда получается из условия, что волновые функции (10) и (15) совпадают друг с другом с точностью до фазового множителя, т.е. сумма аргументов косинусов должна быть кратна π :

$$E_n = - \left\{ \frac{\sqrt{2\pi} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{s}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)} \left(n + \left[\frac{s-1}{2(2-s)} \right] \right) \right\}^{\frac{2s}{s-2}}. \quad (16)$$

Для индекса Маслова находим

$$\gamma = \left[\frac{s-1}{2(2-s)} \right]. \quad (17)$$

Квадратные скобки в (16) и (17) означают дробную часть числа. В частности, для случая $s = 1$, соответствующего кулоновскому потенциалу, получаем $\gamma = 0$ и $E_n = -1/2n^2$. График выражения (17) представлен на рис. 1.

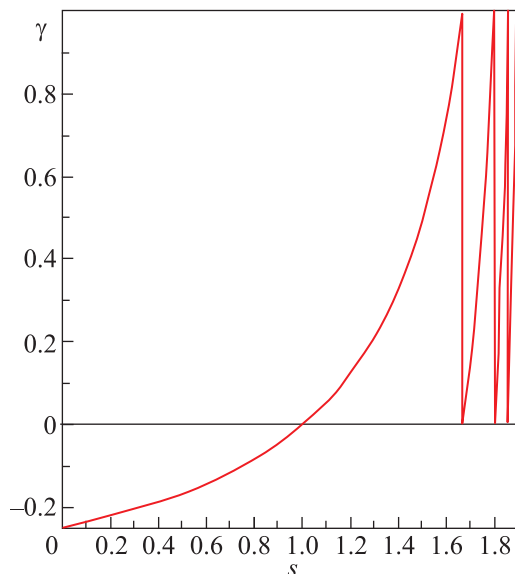


Рис. 1. (Цветной онлайн) Индекс Маслова для степенных потенциалов вида $-1/x^s$

Для основного состояния при $s = 1$, соответствующего кулоновскому потенциалу, энергия равна $-1/2$, как и должно быть. При $s = 0$ энергия основного состояния равна -1 в соответствии с приведенной ниже формулой (22). При $s = 1/2$ квазиклассическая энергия основного состояния равна -0.565 (см. далее (18)). Точное численное значение составляет -0.552 [5]. Таким образом, квазиклассические энергии хорошо воспроизводят точные значения энергии даже для основного состояния. Отметим, что максимальное значение энергии основного состояния равно -0.4892 и достигается при $s = 0.8795$. При приближении к значению $s = 2$ энергия основного состояния быстро опускается в минус бесконечность, отражая падение на центр.

3. Случай $s = 1/2$. Из (17) при $s = 1/2$ находим $\gamma = -1/6$, а из (16) – квазиклассические энергии связанных состояний:

$$E_n = - \left(n - \frac{1}{6} \right)^{-2/3} / 2. \quad (18)$$

Этот случай интересен тем, что у него есть точное аналитическое решение для энергии в неявной форме [5]:

$$\sqrt{2a}H_{a-1}(-\sqrt{2a}) = -H_a(-\sqrt{2a}); \quad a = (-2E_n)^{3/2}. \quad (19)$$

При $a = 1$ это уравнение, очевидно, удовлетворяется тождественно, но собственная волновая функция равна нулю. Собственные функции выражаются через линейную комбинацию функции Эрмита и вырожденной гипергеометрической функции [5]. Аргумент $z = -\sqrt{2a}$ функций Эрмита $H(z)$ в уравнении (19) отрицателен и при больших $a \gg 1$ принадлежит к переходной области, где $z \approx -\sqrt{2\nu + 1}$. Подходящее асимптотическое разложение в этой области следующее [6]:

$$H_\nu(z) = \exp\left(\frac{z^2}{2}\right) 2^{\nu/2+1/4} \pi^{1/4} \nu^{-1/12} \sqrt{\Gamma(\nu+1)} \times \\ \times \{\cos(\pi\nu)\text{Ai}(t) - \sin(\pi\nu)\text{Bi}(t)\}; \quad (20) \\ t = -2^{1/2} \nu^{1/6} (z + \sqrt{2\nu+1}).$$

где Ai и Bi – функции Эйри. Используя разложение функций Эйри в окрестности нуля (при больших значениях параметра a аргументы функций Эйри близки к нулю): $t \approx \pm a^{-1/3}/2$ для $\nu = a - 1$ и $\nu = a$, в пределе $a \rightarrow \infty$ с учетом $\text{Bi}(0) = 3^{1/2}\text{Ai}(0)$ уравнение (19) преобразовываем к простому виду $\cos(\pi a) + \sqrt{3}\sin(\pi a) = 0$, откуда получается спектр (18) с индексом Маслова, равным $-1/6$.

4. Предельные случаи. Пусть $s = 2 - \beta$, $\beta \ll 1$. Тогда из общей формулы (16) получим следующие значения квазиклассических энергий:

$$E_n = - \left(\frac{2\sqrt{2}}{\pi n \beta} \right)^{4/\beta}. \quad (21)$$

Из (21) следует, что уровни делятся на два типа: при $n > \frac{2\sqrt{2}}{\pi\beta}$ энергии уровней стремятся к нулю, а при $n < \frac{2\sqrt{2}}{\pi\beta}$ они устремляются в минус бесконечность, отражая приближение к падению на центр при $s = 2$. Существует резкая граница между двумя типами уровней.

Другой предел – это $s \ll 1$. Из общей формулы (16) находим:

$$E_n = - \left(n - \frac{1}{4} \right)^{-s}. \quad (22)$$

Значения энергий близки к -1 , и только при громадных квантовых числах порядка $n \sim \exp(1/s)$ они начинают подниматься.

Так как при $s \ll 1$ имеем $-x^{-s} = -\exp(-s \ln x) \approx -1 + s \ln x$, то в соответствии с (22) индекс Маслова равен $-1/4$ и для предельного случая: логарифмического потенциала $V(x) = V_0 \ln(x/x_0)$, $V_0 > 0$. Из правила квантования Бора–Зоммерфельда находим квазиклассические энергии в этом потенциале:

$$E_n = V_0 \ln \left[\frac{\hbar}{x_0} \sqrt{\frac{2\pi}{mV_0}} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right], \quad (23)$$

здесь присутствуют масса частицы и постоянная Планка. Эти энергии могут быть как положительными, так и отрицательными. Выражение (23) следует и из (16), если для потенциала $V(x) = -\lambda x^{-s}$ взять предел $\lambda s = V_0$; $\lambda \rightarrow \infty$; $s \rightarrow 0$. Если применять $V_0 = \hbar^2/2mx_0^2 = 1$, то для квазиклассической энергии основного состояния из (23) получим $E_1 = \ln(2\sqrt{\pi}/2) = 0.978$. Точное численное значение равно в этом случае 1.044 [8], что хорошо согласуется с аналитическим предсказанием квазиклассического приближения (23).

5. Центральные потенциал. Полученные результаты автоматически переносятся и на состояния с нулевым орбитальным моментом в центральном потенциале $V(r) = -V_0/r^s$. Хорошо известным примером является кулоновский потенциал ($s = 1$), где индекс Маслова равен нулю, а квазиклассическая энергия совпадает с точным значением. Рассмотрим далее состояния с ненулевым орбитальным моментом. Радиальное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dr^2} - \frac{1}{r^s} \psi + \frac{l(l+1)}{2r^2} \psi = E_n \psi; \quad n \gg 1, \quad |E_n| \ll 1. \quad (24)$$

При $r \ll r_0 = (-2E_n)^{1/s}$ оно переходит в уравнение Malmstén [7]:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dr^2} - \frac{1}{r^s} \psi + \frac{l(l+1)}{2r^2} \psi = 0 \quad (25)$$

с регулярным при $r = 0$ решением

$$\psi(r) \sim \sqrt{r} J_\nu \left(\frac{2\sqrt{2}}{2-s} r^{1-s/2} \right); \quad \nu = \frac{2l+1}{2-s}. \quad (26)$$

Отметим, что в данном случае сингулярность лежит в классически запрещенной области. Асимптотика этого решения при $r \gg 1$ следующая:

$$\psi(r) \sim r^{s/4} \cos \left(\frac{2^{3/2}}{2-s} r^{1-s/2} - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (27)$$

Сшивая его с решением (15), стартующим с правой точки поворота, получим выражения для собственных значений и индекса Маслова:

$$E_n = - \left\{ \frac{\sqrt{2\pi}\Gamma\left(\frac{1}{s}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)} (n + \gamma) \right\}^{\frac{2s}{s-2}}; \quad (28)$$

$$\gamma = \left[\frac{s-1+2l}{2(2-s)} \right]. \quad (29)$$

При $s = 1$ имеем $\gamma = 0$, как и должно быть. Другим способом выражения (28), (29) были получены в [8].

6. Задача рассеяния. Имеет смысл рассмотреть также задачу квазиклассического s -рассеяния на указанном потенциале для частицы с малой (квазиклассической) положительной энергией $E \ll (m/\hbar^2)^{\frac{s}{2-s}} V_0^{\frac{2}{2-s}}$. Аналогично (12) запишем волновую функцию в квазиклассической области:

$$\psi(r) \sim \frac{1}{\sqrt{p(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p(r') dr' - \lambda \right);$$

$$p(r) = \sqrt{2m \left(\frac{V_0}{r^s} + \frac{1}{r_0^s} \right)}; \quad r \gg 1. \quad (30)$$

Здесь $r_0 = E^{-1/s} \gg 1$ (в безразмерных единицах). Чтобы определить λ , необходимо волновую функцию (30) сплечь с функцией (10) в области совместной применимости $1 \ll r \ll r_0$:

$$\psi(r) \sim r^{s/4} \sin \left(\frac{2^{3/2}}{2-s} r^{1-s/2} - \frac{s\pi}{4(2-s)} \right). \quad (31)$$

Получаем:

$$\lambda = \frac{s\pi}{4(2-s)}. \quad (32)$$

Квазиклассическая фаза рассеяния определяется как разность фазы в (30) и фазы, когда потенциал стремится к нулю (при $1 < s < 2$, так как уже в кулоновском потенциале $s = 1$ имеется известная логарифмическая расходимость фазы рассеяния; при $s \leq 1$ расходятся все фазы с любым моментом [3]):

$$\delta_0(E, s) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \left(\frac{V_0}{E} \right)^{1/s} \int_0^\infty \left[\sqrt{\frac{1}{x^s} + 1} - 1 \right] dx. \quad (33)$$

Вычисляя интеграл, находим нулевую фазу рассеяния:

$$\delta_0(E, s) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \left(\frac{V_0}{E} \right)^{1/s} \frac{\Gamma\left(\frac{2}{s}-1\right) \Gamma\left(1-\frac{1}{s}\right)}{2^{2/s-1} \Gamma\left(\frac{1}{s}\right)} \gg 1, \quad (34)$$

вклад которой в сечение составляет $\sigma_0 = \pi\hbar^2/mE$. Полное сечение равно бесконечности при суммировании по большим орбитальным моментам [3].

Полученные решения могут быть полезны при изучении связанных состояний кварка и антикварка [8]. Работа поддержана Минобрнауки России (проект # 3.679.2014/К), Государственным комитетом по науке Министерства образования и науки Республики Армении (грант 15Т-1С323), а также проектом “Ведущие исследовательские университеты России” (грант FT_24_2016 Томского политехнического университета). Аворы благодарят В.В. Киселева за ценные советы.

1. В. П. Маслов, *Асимптотические методы и теория возмущений*, Наука, М. (1988).
2. В. П. Маслов, М. В. Федорюк, *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*, Наука, М. (1976).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, М. (2004).
4. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, Наука, М. (1992), задача 9.5.
5. А. М. Ishkhanyan, *EPL* **112**, 10006 (2015).
6. Г. Сеге, *Ортогональные многочлены*, ГИФМЛ, М. (1962).
7. В. М. Karnakov and V. P. Krainov, *WKB-Approximation in Atomic Physics*, Springer, Berlin (2013).
8. С. Quigg and J. L. Rosner, *Phys. Rep.* **56**, 167 (1979).