Письма в ЖЭТФ, том 39, вып.2, стр. 84 – 86 *25 января 1984 г.*

УРАВНЕНИЕ МИЛНА И ВЫСШИЕ ПОРЯДКИ ВКБ ПРИБЛИЖЕНИЯ

Е.А.Соловьев

Получено линейное уравнение третьего порядка, эквивалентное уравнению Милна. С помощью этого уравнения сформулирован новый вариант ВКБ приближения, в котором разложение имеет максимально простую структуру. Получен критерий применимости поправок высокого порядка ВКБ разложения.

Как известно, общее решение одномерного уравнения Шредингера

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

можно представить в виде [1]

$$\psi(x) = aw(x)\sin\left\{\frac{1}{h}\int_{x_0}^{x}\frac{dx'}{w^2(x')} + b\right\},$$

где a и b — произвольные постоянные, а $w(x)$ — решение уравнения Милна

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2w}{dx^2} + (V(x) - E)\,w = -\frac{1}{2mw^3}. \tag{2}$$

В последнее время появилось большое число работ, посвященных применению этого преобразования как для нужд численного расчета, так и для получения различных аналитических результатов (исследование модели Томаса – Ферми, построение ВКБ приближения, вычисление фаз рассеяния и матрицы плотности и т.д.). Обзор этих работ имеется, например, в [2]. Существенным недостатком уравнения Милна является его нелинейность, что затрудняет его использование для получения аналитических результатов. Ниже мы получим линейное уравнение третьего порядка, эквивалентное сразу обоим уравнениям (1) и (2), которое позволяет, в частности, сформулировать новый вариант ВКБ разложения, имеющего максимально простую структуру.

Линейное уравнение получается из уравнения Милна, если домножить уравнение (2) на w^3, затем перейти к новой неизвестной функции $f = w^2$ и продифференцировать получившееся уравнение по x. В результате для $f(x)$ получается следующее уравнение

$$-\frac{h^2}{4m}\frac{d^3f}{dx^3} + 2(V(x) - E)\frac{df}{dx} + \frac{dV}{dx}f = 0. \tag{3}$$

Это же уравнение получается из уравнения Шредингера, если от ψ перейти к $\psi^2 (f = \psi^2)$. Три линейно независимых решения уравнения (3) можно выбрать так, что два из них связаны с решениями уравнения Шредингера (решения ρ-типа: $\rho_1 = \psi_1^2$ $\rho_2 = \psi_2^2$) и одно с решением уравнения Милна (решение λ-типа: $\lambda = w^2$). В ВКБ приближении решения ρ-типа имеют существенно особую точку при $h \to 0$, поэтому разложение по h строится для логарифмической производной от ρ так же, как и стандартное разложение для волновой функции и мы на нем не будем останавливаться. Решения λ-типа такой особенности не имеют и непосредственно разлагаются в степенной ряд по h.

Рассмотрим ВКБ разложение для решений λ-типа. Нулевое приближение λ_0 получается, если в уравнении (3) отбросить третью производную: $\lambda_0 = 1/p(x)$ $(p(x) = \sqrt{2m(E - V)})$. Для получения следующих поправок подставим λ в уравнение (3) в виде

$$\lambda(x) = \sum_{n=0}^{\infty} h^{2n}\lambda_n(x). \tag{4}$$

Приравнивая нулю коэффициенты при разных степенях h, получаем

$$-\frac{1}{4m}\frac{d^3\lambda_{n-1}}{dx^3}+2(V(x)-E)\frac{d\lambda_n}{dx}+\frac{dV}{dx}\lambda_n=0. \qquad (5)$$

Рекуррентное соотношение (5) имеет очень простую структуру; оно связывает между собой только поправки n-го и $n-1$-го порядков, линейно по λ_i и не зависит явно от n. Выразим из (5) λ_n через λ_{n-1}

$$\lambda_n=\hat{L}\lambda_{n-1}+\frac{c_n}{p(x)}\ ; \quad \hat{L}\equiv-\frac{1}{4p(x)}\int_{x_0}^{x}dy\,\frac{1}{p(y)}\frac{d^3}{dy^3}. \qquad (6)$$

Как видно из формулы (6), при вычислении очередной поправки λ_n возникает неопределенная постоянная c_n, связанная с неопределенностью нижнего предела интегрирования x_0. Для определения c_n следует разложение для λ подставить в нелинейное уравнение.Милна и из него найти эти константы. На первый взгляд, здесь мы опять возвращаемся к необходимости решать нелинейные рекуррентные соотношения, но уже для коэффициентов c_n и тем самым теряется основное преимущество данного подхода. Однако, как мы сейчас покажем, эта проблема решается просто и не создает дополнительных трудностей. Обозначим через λ_n^0 поправки вычисленные, когда все $c_n=0$, т.е. $\lambda_n^0=\hat{L}\lambda_{n-1}^0=\hat{L}^n\lambda_0$. В общем случае поправки λ_n будут выражаться через λ_n^0 и c_n следующим образом:

$$\lambda_n=\lambda_n^0+\sum_{l=0}^{n-1}c_{n-l}\lambda_l^0. \qquad (7)$$

Подставляя (7) в (4), нетрудно убедиться, что при каждом коэффициенте $h^{2n}c_n$ получается один и тот же ряд и зависимость от λ_n^0 и c_n в разложении для λ факторизуется

$$\lambda=C\lambda^0,\ C\equiv\sum_{n=0}^{\infty}h^{2n}c_n,\quad \lambda^0\equiv\left(\sum_{n=0}^{\infty}h^{2n}\hat{L}^n\right)\lambda_0. \qquad (8)$$

Подставляя $w(x)$ в уравнение (2) в виде $w=(C\lambda^0)^{1/2}$, находим C

$$C=\left\{\frac{h^2}{2}\left[\lambda^0\frac{d^2\lambda^0}{dx^2}-\frac{1}{2}\left(\frac{d\lambda^0}{dx}\right)^2\right]+2m(E-V)(\lambda^0)^2\right\}^{-1/2}. \qquad (9)$$

Правую часть в (9) можно, вообще говоря, разложить по степеням h и явно выделить все коэффициенты c_n, однако это делать нецелесообразно. Таким образом, если разложение λ^0 уже найдено, то для определения коэффициентов c_n практически не требуется дополнительных вычислений.

В известных подходах, когда ВКБ разложение строится для действия $S=ih\ln\psi$ или для w, исходное уравнение для этих функций получается нелинейным и в рекуррентном соотношении для поправки n-го порядка запутываются все предыдущие поправки. Вопросу систематизации поправок и разработке диаграммной техники для таких сильно ветвящихся разложений посвящено большое число работ (см., например, [3] и имеющиеся там ссылки). Как видно из полученных выше результатов, все эти проблемы исчезают, если строить разложение для величины λ, имеющей при $h\to 0$ смысл длины волны частицы. Это разложение имеет максимально простую структуру; оно содержит только четные степени h и представляет собой геометрическую прогрессию от оператора $\hat{L}$ (формула (8)).

В качестве примера рассмотрим ВКБ разложения для частицы с нулевой энергией в степенном потенциале $V = -\alpha^2 x^{2\nu}/\ 2m$ Этот пример интересен тем, что он описывает все типы нарушения ВКБ приближения за счет степенных особенностей. Обычной точке поворота соответствует значение $\nu = 1/2$. Из рекуррентного соотношения (6) нетрудно получить общий член разложения

$$\lambda_n = \frac{(-1)^n\,\Gamma\left(n + \frac{\nu}{2(\nu+1)}\right)\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n + \frac{\nu+2}{2(\nu+1)}\right)}{\alpha\, n!\,\Gamma\left(\frac{\nu}{2(\nu+1)}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\nu+2}{2(\nu+1)}\right)}\left(\frac{\nu+1}{\alpha x^{\nu+1}}\right)^{2n} x^{-\nu}. \qquad (10)$$

Из выражения (9) видно, что при $\nu < -1$ ВКБ приближение нарушается при $x \to \infty$, а при $\nu > -1$ в точке $x = 0$, соответственно точным квазиклассическое приближение становится при $x = 0$ в первом случае и при $x \to \infty$ во втором. Когда $\nu = -1 \pm 1/(2q+1)$ $(q = 0, 1, 2, ...)$ разложение обрывается при $n = q$ и первые q членов ВКБ разложения дают точное решение. Разложение (10) является асимптотическим и расходится $(\lambda_n \sim (n!)^2)$, поэтому поправки λ_n можно учитывать только до тех пор, пока они не начинают расти. Номер порядка N, на котором разложение следует оборвать, определяется из условия равенства нулю производной от λ_n по n. При больших n, используя (10), получаем условие $N = \alpha x^{\nu+1}/h(\nu+1)$, которое можно переписать в виде

$$N = \frac{1}{h}\left|\int_{x_0}^{x} p(x')dx'\right|, \qquad (11)$$

где x_0 — точка, в которой нарушается ВКБ приближение ($x_0 = 0$ если $\nu > -1$, $x_0 = \infty$ если $\nu < -1$). Таким образом число членов ВКБ разложения N определяется величиной классического действия до особой точки. Критерий применимости ВКБ разложения (11) имеет инвариантный вид и получен для широкого класса потенциалов, поэтому можно думать, что он справедлив и в более общем случае.

Приведенное выше рассмотрение принципиально облегчает исследование высших порядков ВКБ приближения, все преобразования чрезвычайно просты и удивительно, что такой способ построения ВКБ разложения не был обнаружен раньше. Линейное уравнение (3) должно оказаться полезным и для других задач, в которых используется преобразование Милна. С его помощью можно, например, получить простые интегральные представления для $\psi^2(x)$, когда решение уравнения Шредингера выражается через гипергеометрическую функцию.

Автор глубоко благодарен И.С.Шапиро и участникам его семинара за полезное обсуждение.

Литература

1. *Milne W.E.* Phys. Rev., 1930, **35**, 863.
2. *Korsch H.J., Laurent H.J.* J. Phys. B, 1981, **14**, 4213.
3. *Fröman N., Fröman P.O.* Nuovo Cim., 1974, **20**, 121.

Ленинградский
государственный университет
им. А.А.Жданова

Поступила в редакцию
1 декабря 1983 г.