ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2020. Т. 51. ВЫП. 4. С. 494–500

ПРАВИЛО КВАНТОВАНИЯ БОРА–ЗОММЕРФЕЛЬДА В СЛУЧАЕ ДВУМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ УБЫВАЮЩЕГО СТЕПЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА

В. В. Пупышев *

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Исследуется двумерное движение квантовой частицы в поле потенциала $V(r) = -V_0 r^{-\beta}$ с параметрами $V_0 > 0$ и $\beta \in (0, 2)$. Дан анализ асимптотического уравнения, эквивалентного правилу квантования Бора–Зоммерфельда. В результате для энергий слабосвязанных состояний такой частицы получено простое и явное приближение.

We study the finite two-dimensional movement of a quantum particle in the field of the potential $V(r) = -V_0 r^{-\beta}$ with the parameters $V_0 > 0$ and $\beta \in (0, 2)$. We analyze the asymptotic equation which is equivalent to the Bohr–Zommerfeld quantization rule. As a result, we derive a simple and explicit approximation for the energies of weakly bound states of this particle.

PACS: 03.65.-w; 03.65.Ge; 02.30.Mv

ВВЕДЕНИЕ

Начнем с предположений. Предположим, что квантовая частица p_1 имеет массу m_1 и, обладая полной отрицательной энергией E, движется в двумерной плоскости $\mathcal{P}$. Пусть точка O принадлежит этой плоскости и является силовым центром, воздействующим на частицу p_1 посредством степенного притягивающего потенциала

$$V(r) = -V_0\, r^{-\beta}, \quad V_0 > 0, \quad 0 < \beta < 2, \tag{1}$$

где r — расстояние от точки O до частицы p_1.

Наши главные цели: вывести простое приближение для энергий слабосвязанных состояний частицы p_1, доказать и исследовать правило квантования Бора–Зоммерфельда.

*E-mail: pupyshev@theor.jinr.ru

1. РАДИАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ НА СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

В плоскости $\mathcal{P}$ введем стандартным образом полярную систему координат $S_2(r,\varphi)$ с начальной точкой O и двумя координатами: расстоянием $r \geqslant 0$ и азимутальным углом $\varphi \in [0, 2\pi)$. По определению потенциал (1) зависит только от расстояния r. Поэтому квантовая частица p_1 имеет два сохраняющихся квантовых числа [1]. Ими являются полная энергия E и собственное значение $m = 0, \pm 1, \ldots$ оператора поворота $-\imath\partial_\varphi$ в плоскости $\mathcal{P}$.

Теперь сформулируем исходную радиальную задачу на связанные состояния частицы p_1 в потенциальном поле (1). Радиальная волновая функция $\tilde{u}_m(r,E)$ связанного состояния $|E,m\rangle$ частицы p_1 с квантовыми числами E и m удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера [1]

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\partial_r^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} \right] + \frac{V_0}{r^\beta} + E \right\} \tilde{u}_m(r,E) = 0, \tag{2}$$

$$r > 0\,,\ \lambda \equiv |m| - \frac{1}{2},$$

условию

$$\tilde{u}_m(r,E) = O(r^{\lambda+1}), \quad r \to 0, \tag{3}$$

и условию

$$\tilde{u}_m(r,E) = O(\exp{(-\rho)}), \quad \rho = kr \to \infty, \quad k \equiv \sqrt{-2m_1 E/\hbar^2}. \tag{4}$$

Теперь переформулируем исходную задачу на связанные состояния (2)–(4) в наиболее удобном для наших исследований виде.

Для этого сначала определим единицу d измерения расстояния r, положительный параметр ν, безразмерные волновое число q и аргументы y и ρ. Пусть

$$\begin{gathered} d \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2m_1 V_0} \right)^{1/(2-\beta)}, \quad \nu \equiv \frac{2-\beta}{\beta}, \\ q \equiv kd, \quad y \equiv q^{2/\beta}\,\frac{r}{d}, \quad \rho = q^{-\nu} y. \end{gathered} \tag{5}$$

Теперь представим полную энергию E через безразмерное волновое число q:

$$E = -\frac{1}{2m_1} \left(\frac{\hbar q}{d} \right)^2 = -D\,q^2, \quad D \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2m_1} \right)^{\beta/(\beta-2)} V_0^{2/(2-\beta)}, \tag{6}$$

и определим функцию $\tilde{p}^2(y,\tilde{s})$ и ее второй аргумент $\tilde{s}$ равенствами

$$\tilde{p}^2(y,s) \equiv \left(\frac{1}{y} \right)^\beta - \left(\frac{\tilde{s}}{y} \right)^2 - 1, \quad \tilde{s} = q^\nu \sqrt{\lambda(\lambda+1)}. \tag{7}$$

Наконец, используя подстановку

$$r = q^{-2/\beta}\, y\, d, \quad \tilde{u}_m(r,k) = u_m(y,q), \tag{8}$$

сведем уравнение Шредингера (2) к операторному уравнению

$$\hat{A}\, u_m(y,q) = 0, \quad \hat{A} \equiv \left[q^{2\nu}\, \frac{d^2}{dy^2} + \tilde{p}^2(y,\tilde{s}) \right], \quad y > 0, \tag{9}$$

а из граничных условий (3) и (4) выведем условие

$$u_m(y,q) = O\left(y^{\lambda+1}\right), \quad q^{2/\beta}\, y \to 0, \tag{10}$$

и условие

$$u_m(y,q) = O\left(\exp\left(-\rho\right)\right), \quad \rho = q^{-\nu} y \to \infty. \tag{11}$$

Сформулируем важное определение и его следствие. Состояние $|E, m\rangle$ частицы p_1 с квантовыми числами $|E| \ll D$ и $m = 0, \pm 1, \ldots$ называется слабосвязанным. В силу соотношения $E = -D\, q^2$ безразмерное волновое число q слабосвязанного состояния мало: $q \ll 1$.

2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ ЭНЕРГИИ СЛАБОСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Как известно из теории дифференциальных уравнений [2], при каждом значении параметра $\lambda = |m| - 1/2$, $m = 0, \pm 1, \ldots$, задача (9)–(11) имеет нетривиальное единственное решение при определенных значениях $q = q_n$, причем таких, что $q_{n+1} < q_n$, $n = 0, \ldots$, и $q_n \to 0+$, $n \to \infty$. Поэтому волновое число q_n слабосвязанного состояния имеет большой номер n.

Положим $q \to 0+$. В этом пределе задача (9)–(11) содержит малый параметр q^ν и является проблемой вычисления малых собственных значений q_n оператора $\hat{A}$ в пространстве функций $u_m(y,q)$, удовлетворяющих граничным условиям (10) и (11). Решим эту проблему известным асимптотическим методом [2].

Сначала в определении (7) функции $\tilde{p}^2$ и в уравнении (9) выполним три замены:

$$\lambda(\lambda+1) \to \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)^2 = m^2, \quad \tilde{p}^2(y,\tilde{s}) \to p^2(y,s) = \left(\frac{1}{y}\right)^\beta - \left(\frac{s}{y}\right)^2 - 1,$$
$$\tilde{s} \to s = q^\nu |m|.$$

Затем символами $y_1(s)$ и $y_2(s)$ обозначим положительные нули функции $p(y,s)$ и запишем асимптотическое $(n \to \infty)$ уравнение

$$\frac{1}{q^\nu}\, b(s) = \pi \left(n + \frac{1}{2}\right) + O\left(\frac{1}{n}\right), \quad s = q^\nu\, |m|, \quad n \gg 1, \tag{12}$$

в котором по определению

$$b(s) \equiv \int\limits_{y_1(s)}^{y_2(s)} p(y,s)\,dy. \tag{13}$$

Искомые малые собственные значения q_n оператора $\hat{A}$ являются корнями уравнения (12).

Решим это уравнение в случае малых значений переменой s, а именно таких, что $s = q^\nu\,|m| \ll 1$. Сначала известным способом [3] сведем интеграл $b(s)$ и его производную $b'(s)$ в точке $s = 0$ к табличным интегралам. В результате получим два явных представления

$$b(s) = \frac{1}{2}\,B\left(\frac{2-\beta}{2\beta}, \frac{1}{2}\right), \quad b'(s) = -\frac{\pi}{2-\beta}, \quad s = 0,$$

где символом B обозначена бета-функция. Затем, используя эти представления, в правой части исследуемого уравнения (12) заменим функцию $b(s)$ ее рядом Маклорена

$$b(s) \approx b(0) + s\,b'(0) = \frac{1}{2}\,B\left(\frac{2-\beta}{2\beta}, \frac{1}{2}\right) + \frac{\pi\,|m|\,q^\nu}{\beta-2}, \quad s = q^\nu\,m \ll 1.$$

Таким образом получим алгебраическое уравнение. Решим его. Найденные корни q_n представим приближенной формулой

$$q_n \approx \left[\frac{1}{2\pi}B\left(\frac{2-\beta}{2\beta}, \frac{1}{2}\right)\frac{1}{n+1/2+|m|/(2-\beta)}\right]^{1/\nu}. \tag{14}$$

Согласно этой формуле использованное условие $s = q^\nu m \ll 1$ выполняется для корня $q = q_n$, если $m \ll n$ и $n \gg 1$. Теперь, используя формулы (6) и (14), найдем соответствующее волновому числу $q = q_n$ приближение энергии E_n слабосвязанного состояния $|E_n, m\rangle$:

$$E_n \approx -D\,\left[\frac{1}{2\pi}B\left(\frac{2-\beta}{2\beta}, \frac{1}{2}\right)\frac{1}{n+1/2+|m|/(2-\beta)}\right]^{2/\nu}. \tag{15}$$

Это приближение справедливо, если выполняются три условия: $\beta \in (0,2)$, $n \gg 1$ и $|m| \ll n$.

Стоит отметить, что в кулоновском случае ($\beta = 1$) правая часть формулы (15) при любых целых $n = 0, 1, \ldots$ и $m = 0, \pm 1, \ldots$ воспроизводит точные значения энергий всех связанных состояний квантовой частицы p_1. Как давно известно [1], в этом случае

$$E_n = -\frac{D}{(n+1/2+|m|)^2}, \quad n = 0, 1, \ldots, \quad m = 0, \pm 1, \ldots \tag{16}$$

Выявим еще одно следствие формулы (15). Для этого предположим, что в исходной задаче на связанные состояния (2)–(4) параметр λ равен целому числу $\ell = 0, 1, \ldots$ Тогда $|m| = \ell + 1/2$, а задача (2)–(4) становится задачей для радиальной волновой функции связанного состояния $|E, \ell\rangle$ частицы p_1, движущейся в трехмерном пространстве в поле центрального потенциала (1). Следовательно, после замены $|m| \to \ell + 1/2$ в формуле (15) получается приближение энергии E_n трехмерного слабосвязанного состояния ($n \gg 1$) с конечным ($\ell \ll n$) угловым моментом ℓ. Представим такое приближение формулой

$$E_n \approx -D \left\{ \frac{1}{2\pi} B\left(\frac{2-\beta}{2\beta}, \frac{1}{2} \right) \frac{1}{n + 1/2 + (\ell + 1/2)/(2-\beta)} \right\}^{2/\nu} \tag{17}$$

и отметим, что эта же формула ранее получена в работе [4], но другим способом.

3. ПРАВИЛО КВАНТОВАНИЯ БОРА–ЗОММЕРФЕЛЬДА

Вернемся к исходной задаче на связанные состояния (2)–(4) и исследуем ее известным в курсе квантовой механики [5] классическим методом Венцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ). Ограничимся критическим обсуждением основных этапов реализации этого метода.

Сначала в уравнении (2) выполним замену Лангера

$$\lambda(\lambda + 1) \to (\lambda + 1/2)^2 = m^2,$$

символами r_1 и r_2 обозначим простые нули функции $E - W(r)$, в которой эффективный потенциал $W(r)$ определен формулой

$$W(r) = \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{m^2}{r^2} - \frac{V_0}{r^\beta}.$$

Затем два линейно независимых решения $\tilde{u}_m^+(r, E)$ и $\tilde{u}_m^-(r, E)$ исходного радиального уравнения Шредингера (2) представим экспоненциальными функциями

$$\tilde{u}_m^{\pm}(r, E) = \exp\left[\pm \frac{\imath}{\hbar} S(r, E) \right], \quad S(r, E) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n S_n(r, E).$$

Заметим, что фазы $S(r, E)$ этих функций являются рядами по целым степеням константы Планка $\hbar$. Эта константа не является малым параметром.

Поэтому для обеих функций $\tilde{u}_m^{\pm}$ невозможно получить явную оценку точности стандартного ВКБ-приближения

$$\tilde{u}_m^{\pm}(r,E) \approx v_m^{\pm}(r,E)\,, \quad v_m^{\pm}(r,E) \equiv \exp\left\{ \pm\frac{\imath}{\hbar}\left[\, S_0(r,E) + \hbar\, S_1(r,E)\,\right] \right\}.$$

Продолжим реализацию метода ВКБ в рамках этого приближения. Для этого заменим искомую волновую функцию $\tilde{u}_m$ линейной комбинацией функций $v_m^{\pm}$. Затем убедимся в том, что из таких комбинаций только одна удовлетворяет граничным условиям и является непрерывной в точках $r = r_1$ и $r = r_2$ тогда и только тогда, когда выполняется следующее правило квантования: энергия E близка к корню E_n уравнения

$$\frac{1}{\hbar}\int\limits_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m_1\left[\, E - W(r)\,\right]}\, dr = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \gg 1. \tag{18}$$

Сделаем два замечания. В классическом методе ВКБ нет малого параметра, поэтому точность приближения $E \approx E_n$ по номеру n установить нельзя. Сформулированное выше правило квантования логично назвать правилом квантования Бора–Зоммерфельда в случае двумерного движения квантовой частицы в поле степенного потенциала (1).

Теперь докажем правило квантования Бора–Зоммерфельда (18) другим способом, основанным на асимптотическом уравнении (12), в котором в отличие от классического метода ВКБ имеется малый параметр q^{ν}.

В этом уравнении перейдем к размерным переменным r и E. Для этого положим $y = q^{2/\beta}(r/d)$ и $q = \sqrt{E/D}$ и используем представления $r_1 = q^{-2/\beta}\, y_1(s)\, d$ и $r_2 = q^{-2/\beta}\, y_2(s)\, d$. В итоге получим уравнение для искомой энергии $E = E_n$ связанного состояния $|E_n, m\rangle$ с данными квантовыми числами $n \gg 1$ и m. Представим это уравнение в виде уравнения

$$\frac{1}{\hbar}\int\limits_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m_1\left[\, E - W(r)\,\right]}\, dr = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) + O\left(\frac{1}{n}\right), \quad n \gg 1. \tag{19}$$

Отметим, что уравнение (19) содержит явную оценку $O(1/n)$ остаточного слагаемого. Если эту оценку отбросить, то получится правило квантования Бора–Зоммерфельда (18).

Предложенный выше вывод правила квантования Бора–Зоммерфельда (18) из асимптотического уравнения (12) с малым параметром q^{ν} является альтернативным доказательству этого правила классическим методом ВКБ. Вследствие равенства $E_n = -Dq_n^2$ имеется взаимно-однозначное соответствие между корнями q_n и E_n уравнений (12) и (18). Следовательно, эти уравнения эквивалентны друг другу с точностью порядка $O(1/n)$.

Стоит отметить, что обезразмеривающей подстановкой $r = q^{-2/\beta} yd$, $E = -Dq^2$ правило квантования Бора–Зоммерфельда (18) сводится к асимптотическому уравнению (12) с отброшенным остаточным членом $O(1/n)$. Поэтому полученное таким способом уравнение является обезразмеренным правилом квантования Бора–Зоммерфельда в рассматриваемом случае убывающего степенного потенциала (1).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечислим главные результаты наших исследований. Мы вывели явное приближение (15) энергий E_n, $n \gg 1$, слабосвязанных состояний $|E_n, m\rangle$, $m \ll n$, квантовой частицы p_1 в случае ее двумерного движения в поле убывающего степенного потенциала (1). В этом случае мы доказали правило квантования Бора–Зоммерфельда (18) двумя способами. Мы показали, что это правило является следствием асимптотического уравнения (12).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Friedrich H.* Scattering Theory // Lect. Notes Phys. Berlin: Springer, 2013. V. 872.
2. *Федорюк М. В.* Асимптотические методы для линейных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1983.
3. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2019. Т. 199, № 3. С. 405–428.
4. *Ишханян А. М., Крайнов В. П.* // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 105, вып. 1. С. 34.
5. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.