Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. А. Приходько, Асимптотика информационной энтропии для двумерного аналога релятивистского атома водорода в модели Козлова–Никишина, *Матем. заметки*, 2005, том 78, выпуск 5, 727–744

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm2636>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 17:32:11

УДК 517.958

АСИМПТОТИКА ИНФОРМАЦИОННОЙ ЭНТРОПИИ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО АНАЛОГА РЕЛЯТИВИСТСКОГО АТОМА ВОДОРОДА В МОДЕЛИ КОЗЛОВА–НИКИШИНА

М. А. Приходько

Для двумерной лоренц-инвариантной модели атома водорода получены волновые функции связанных состояний в координатном представлении, а для невозбужденных по времени состояний и в импульсном представлении. Для них исследована коротковолновая асимптотика информационной энтропии.

Библиография: 12 названий.

1. Введение. Состояние квантово-механической системы описывается волновой функцией $\Psi(\vec{q})$, определенной в конфигурационном пространстве и удовлетворяющей уравнению Шрёдингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

где самосопряженный оператор $\hat{H}$ – это гамильтониан системы, а E – ее энергия. Уравнение Шрёдингера служит выражением закона сохранения энергии.

Связанным состояниям системы соответствуют интегрируемые с квадратом решения этого уравнения. Тогда $|\Psi|^2$ представляет собой плотность распределения частиц в конфигурационном пространстве (после соответствующей нормировки).

Переход к импульсному представлению $\Psi(\vec{q}) \rightarrow \Psi^*(\vec{q}^*)$ осуществляет преобразование Фурье. Важную роль во всей квантовой механике играет принцип неопределенности Гейзенберга, который в безразмерных величинах имеет вид

$$\Delta q \cdot \Delta q^* \geq \frac{1}{2},$$

где q – одна из обобщенных координат,

$$(\Delta q)^2 = \langle (q - \langle q \rangle)^2 \rangle,$$

и аналогичное выражение справедливо для Δq^* . При этом

$$\langle q \rangle = \int q |\Psi|^2 d\vec{q}.$$

С другой стороны для изучения меры неопределенности плотности вероятности используется так называемая информационная энтропия Больцмана–Шеннона

$$S_{\Psi} = - \int \ln |\Psi|^2 \cdot |\Psi|^2 d\vec{q}.$$

В работе [1] было доказано неравенство

$$S_{\Psi} + S_{\Psi^*} \geq (\ln \pi + 1) \cdot \mathfrak{D},$$

где $\mathfrak{D}$ – размерность конфигурационного пространства.

Это неравенство также описывает неопределенность квантово-механической системы и возможно является более точной мерой неопределенности.

Исследование энтропии и энтропийного соотношения неопределенности различных систем привлекает все большее внимание.

Существует множество работ, написанных на эту тему (см., например, [2]–[5]), однако все они ограничиваются нерелятивистским случаем. Один из способов исследования релятивистского случая предложили В. В. Козлов и Е. М. Никишин [6] для пространства Минковского с тремя пространственными и одной временной координатами, т.е. для $D = 3$, где D в дальнейшем – число пространственных координат.

В настоящей статье рассмотрен случай релятивистского двумерного атома водорода (одного электрона в кулоновском поле), т.е. $D = 2$.

Основное внимание в работе уделяется радиальным функциям, так как решение для разных размерностей будет отличаться только порядком входящей в него сферической функции. Этим и оправдано исследование двумерного случая, так как уже в нем проявляются все те свойства, которые характерны и всем другим высшим размерностям.

В работе получено общее решение уравнения и вид волновой функции в координатном пространстве, а также вид волновой функции в импульсном пространстве и значения их энтропий, что является новыми результатами по сравнению с работой [6].

Кроме того, полученные в работе энтропийные соотношения неопределенности сравниваются с принципом Гейзенберга.

2. Частица в центрально-симметричном поле. Рассмотрим релятивистское уравнение Шрёдингера, описывающее движение одной частицы с массой m_0 в центрально-симметричном поле:

$$\left(-E + \frac{\hbar^2}{2m_0 c^2} \square + U(\rho) \right) \Phi = 0, \quad (1)$$

где

$$\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

– оператор Даламбера, т.е. кинетическая энергия частицы, $U(\rho) = U(\sqrt{x^2 + y^2 - c^2 t^2})$ – потенциальная энергия, E – полная энергия частицы (не включающая в себя внутреннюю энергию), $\hbar$ – постоянная Планка, c – скорость света.

Перейдем к безразмерной системе единиц: $c = 1$, $\hbar = 1$, $2m_0 = 1$. Тогда рассматриваемое уравнение примет вид

$$(-E + \square + U(\rho)) \Phi = 0. \quad (2)$$

Отметим, что потенциальное поле $U(\rho)$ зависит только от координаты $\rho = \sqrt{x^2 + y^2 - t^2}$, а не от координаты $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, как это считалось в других моделях, например, в модели Клейна–Гордона. Это одно из отличий модели Козлова–Никишина от ранее рассматриваемых моделей, которое обеспечивает инвариантность уравнения относительно преобразований Лоренца.

Будем рассматривать решения уравнения в пространственно-подобной области

$$\mathcal{K} = \{(x^2 + y^2) - t^2 > 0\}.$$

Рассмотрение пространственно-подобных, а не времениподобных, мировых линий – другая отличительная особенность модели Козлова–Никишина. Она объясняется тем, что величина t не есть собственное время электрона, это – рассогласование времен электрона и ядра.

Дадим краткую физическую интерпретацию, процитировав некоторые пояснения из комментария Козлова [7] к работе [6].

Попытка релятивистски-инвариантного описания системы взаимодействующих частиц была сделана впервые в квантовой электродинамике, в работах П. А. М. Дирака, В. А. Фока и Б. Подольского 1932 года [8]. Каждой частице приписывается свое время, отдельное время сопоставляется также электромагнитному полю.

После предложенного в 1946–1948 годах Томонагой и Швингером полевого подхода к квантовой электродинамике многовременной формализм Дирака–Фока–Подольского отошел на второй план. Несмотря на преимущества и успехи полевой теории, в классической релятивистской механике сохранилась проблема непротиворечивого описания динамики взаимодействующих частиц, потому что на этом пути возникают трудности принципиального характера.

В работе [6] предложена релятивистски-инвариантная гамильтонова механика для описания динамики многих частиц. В качестве примера решена задача двух тел с кулоновским потенциалом. Существенное отличие от классической ситуации заключается в том, что теперь точки дискретного спектра становятся бесконечно вырожденными.

Будем искать связанные состояния частицы, т.е. решения уравнения (2), для которых

$$\int_{\mathcal{K}} |\Phi|^2 d\mu < \infty,$$

где $d\mu = dx dy dt$ – элемент объема. Каждой функции Φ из гильбертова пространства $\mathcal{M} = L^2(\mathcal{K})$ можно придать вероятностный смысл. После соответствующей нормировки $|\Phi(x, y, t)|^2$ означает плотность вероятности обнаружения электрона в точке с относительными координатами x, y и с собственным временем, отличающимся на t от времени ядра.

Все вычисления волновых функций в координатном представлении будем производить в полной аналогии с вычислениями, выполненными в работе [6].

В уравнении (2) произведем замену переменных, переходя к сферическо-гиперболическим координатам:

$$x = \rho \operatorname{ch} \psi \cos \varphi, \quad y = \rho \operatorname{ch} \psi \sin \varphi, \quad t = \rho \operatorname{sh} \psi,$$

где $\rho > 0$, $-\infty < \psi < \infty$, $-\infty < \varphi < \infty \pmod{2\pi}$.

В новых переменных уравнение принимает вид

$$\left\{ -E - \left[\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2 \operatorname{ch} \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \operatorname{ch} \psi \frac{\partial}{\partial \psi} + \frac{1}{\rho^2 \operatorname{ch}^2 \psi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + U(\rho) \right\} \Phi(\rho, \psi, \varphi) = 0.$$

Мы будем решать это уравнение методом разделения переменных. Для этого положим $\Phi(\rho, \psi, \varphi) = B(\rho, \psi)Y(\varphi)$ и подставим в уравнение. После простых преобразований получим

$$\frac{Y''(\varphi)}{Y(\varphi)} = -m^2,$$

$$\rho^2 \operatorname{ch}^2 \psi \left(U - E - \frac{1}{B(\rho, \psi)} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2 \operatorname{ch} \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \operatorname{ch} \psi \frac{\partial}{\partial \psi} \right) B(\rho, \psi) \right) = -m^2,$$

где $-m^2$ – постоянная разделения.

Тогда

$$Y(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Продолжим метод разделения переменных и будем искать функцию $B(\rho, \psi)$ в виде

$$B(\rho, \psi) = \tilde{T}(\psi) \cdot \tilde{A}(\rho).$$

Тогда функции $\tilde{T}(\psi)$ и $\tilde{A}(\rho)$ будут удовлетворять соответственно уравнениям

$$\left[\frac{1}{\operatorname{ch} \psi} \frac{d}{d\psi} \operatorname{ch} \psi \frac{d}{d\psi} + \frac{m^2}{\operatorname{ch}^2 \psi} \right] \tilde{T} = \lambda \tilde{T}, \quad (3)$$

$$\left[\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{d}{d\rho} - \left(\frac{\lambda}{\rho^2} + U(\rho) - E \right) \right] \tilde{A} = 0, \quad (4)$$

где λ – константа разделения.

Замена $T = \tilde{T} \sqrt{\operatorname{ch} \psi}$ приводит уравнение (3) к виду

$$\frac{d^2}{d\psi^2} T + \left[\frac{(m - 1/2)(m + 1/2)}{\operatorname{ch}^2 \psi} - \left(\lambda + \frac{1}{4} \right) \right] T = 0.$$

Полученное уравнение на функцию T имеет вид одномерного уравнения Шрёдингера с потенциалом Пошля–Теллера [9]. Спектр уравнения состоит из дискретной части в области $\lambda + 1/4 > 0$ и непрерывной части, заполняющей всю полуось $\lambda + 1/4 \leq 0$. Введем новый спектральный параметр $\nu^2 = \lambda + 1/4$, $\nu > 0$. Дискретный спектр состоит из точек $\nu = 1/2, 3/2, \dots, |m| - 1/2$. Без ограничения общности можно считать, что $m > 0$. Тогда собственные функции имеют вид

$$T_{\nu, m-1/2}(\psi) = \frac{1}{(\operatorname{ch} \psi)^\nu} \sum_{k=0}^{m-1/2-\nu} \frac{(\nu - m + 1/2)_k (\nu + m + 1/2)_k}{(\nu + 1)_k k!} \frac{1}{(e^{2\psi} + 1)^k}, \quad (5)$$

где $(p)_k = p(p+1) \cdots (p+k-1)$ – символ Похгаммера.

В дальнейшем непрерывный спектр мы рассматривать не будем и ограничимся рассмотрением только дискретного спектра. Кроме того, необходимо отметить, что при

$m = 0$ дискретный спектр вообще отсутствует. А в случае $m \neq 0$ спектр состоит из конечного числа точек.

Если ввести обозначение $l = m - 1/2$, то полученные функции в точности совпадают с собственными функциями для размерности $D = 3$. Кроме того, как и в случае $D = 3$, где D – число пространственных координат, замена, приводящая уравнение к необходимому нам виду, одновременно обеспечивает интегрируемость в квадрате полученного решения. Действительно, в сферическо-гиперболических координатах $d\mu = \rho^2 \operatorname{ch} \psi d\rho d\psi d\varphi$. Таким образом, $\|\Phi\|^2 = \|Y\|^2 \|\tilde{T}\|^2 \|\tilde{A}\|^2$, где

$$\begin{aligned} \|Y\|^2 &= \int_0^{2\pi} |Y|^2 d\varphi, \quad \|\tilde{T}\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch} \psi d\psi = \int_{-\infty}^{\infty} |T|^2 d\psi, \\ \|\tilde{A}\|^2 &= \int_0^{\infty} |\tilde{A}|^2 \rho^2 d\rho = \int_0^{\infty} |A|^2 d\rho, \end{aligned}$$

при этом $A(\rho) = \rho \tilde{A}(\rho)$.

Для функции $A(\rho)$ из (4) получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} A(\rho) - \left[\frac{(\nu - 1/2)(\nu + 1/2)}{\rho^2} + U(\rho) - E \right] A(\rho) = 0.$$

Оно имеет вид одномерного уравнения Шрёдингера с эффективным потенциалом:

$$U_{\text{эфф}} = U + U_{\text{центр}},$$

где $U_{\text{центр}} = (\nu - 1/2)(\nu + 1/2)/\rho^2$ – потенциал центробежных сил.

Таким образом, для любого центрально-симметричного поля волновые функции Y и T не зависят от потенциала, вид которого влияет только на функцию A .

В свою очередь полученное уравнение на функцию A полностью повторяет аналогичное уравнение в случае большей размерности $D = 3$, что еще раз подтверждает модельность случая $D = 2$ и оправдывает его исследования.

3. Решение уравнения в кулоновском поле. Пусть потенциал $U(\rho)$ имеет вид

$$U(\rho) = \frac{-\kappa}{\rho},$$

где κ – положительная постоянная взаимодействия. В размерных величинах $\kappa = Ze_0^2$, где e_0 – заряд электрона, Z – число протонов в ядре водородоподобного атома. В безразмерных величинах считаем $\kappa = 2$. Тогда уравнение на радиальную составляющую имеет вид

$$\frac{d^2}{d\rho^2} A(\rho) - \left[\frac{(\nu - 1/2)(\nu + 1/2)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - E \right] A(\rho) = 0.$$

При $E > 0$ нет нетривиальных суммируемых с квадратом решений. При $E < 0$ введем обозначение $n = 1/\sqrt{-E}$. Тогда уравнение имеет суммируемое с квадратом решение при $n - \nu - 1/2 = k$, где $k = 0, 1, 2, \dots$. Это решение имеет вид

$$A_{n,\nu}(\rho) = \rho^{\nu+1/2} e^{-\rho/n} L_k^{(2\nu)} \left(\frac{2\rho}{n} \right), \quad (6)$$

где $L_k^{(2\nu)}$ – многочлен Лагерра [10].

Таким образом, уровни энергии дискретного спектра вычисляются по формуле Бора

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

В соответствии с общепринятой терминологией n – *главное квантовое число*, m – *магнитное квантовое число*, $m \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, k – *радиальное квантовое число*, ν – *квантовое число*, не имеющее аналога в классическом случае и *связанное с временной координатой*.

Как и в случае большей размерности $D = 3$, рассмотренном в работе [6], имеется бесконечное вырождение уровней энергии $E = E_n$. Это означает, что одному уровню энергии E_n соответствует бесконечное число связанных состояний с определенными значениями величин m и ν .

Подводя итог, сформулируем следующее

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *Дискретный спектр уравнения (2) с кулоновским потенциалом $U(\rho) = -2/\rho$ состоит из энергетических уровней*

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

а соответствующие им собственные функции имеют вид

$$\Phi_{n,\nu,m}(\rho, \psi, \phi) = \frac{C_A}{\rho} A_{n,\nu}(\rho) \cdot \frac{C_T}{\sqrt{\text{ch } \psi}} T_{\nu,m-1/2}(\psi) \cdot C_Y Y_m(\phi),$$

где

$$\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}, \quad m = \pm \left(\nu + \frac{1}{2} \right), \pm \left(\nu + \frac{3}{2} \right), \dots,$$

при этом $Y_m(\phi) = e^{im\phi}$, функции $T_{\nu,m-1/2}(\psi)$ и $A_{n,\nu}(\rho)$ определены формулами (5) и (6) соответственно, а C_A , C_T и C_Y – нормировочные постоянные.

4. Импульсное представление в центрально-симметричном поле. Рассмотрим теперь задачу вычисления преобразования Фурье найденных решений, т.е. найдем выражение волновой функции в импульсном представлении

$$F(\Phi) \equiv \Phi^*(p_x, p_y, p_t) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^{D+1} \int_{\mathcal{K}} \Phi(x, y, t) e^{-i(xp_x + yp_y - tp_t)} d\mu,$$

где p_x, p_y – импульсы, а p_t – энергия.

Для вычисления этого интеграла перейдем к сферическо-гиперболическим координатам в сопряженном пространстве:

$$p_x = p \text{ch } \psi' \cos \varphi', \quad p_y = p \text{ch } \psi' \sin \varphi', \quad p_t = p \text{sh } \psi'.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \Phi^*(p_x, p_y, p_t) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^3 \int_{\mathcal{K}} \tilde{A}(\rho) \tilde{T}(\psi) e^{-ip\rho(\text{ch}(\psi) \text{ch}(\psi') \cos(\varphi - \varphi') - \text{sh}(\psi) \text{sh}(\psi'))} \\ &\quad \times C_Y e^{im\varphi} \rho^2 \text{ch } \psi d\rho d\psi d\varphi, \end{aligned}$$

где

$$\tilde{A}(\rho) = \frac{C_A}{\rho} A_{n,\nu}(\rho), \quad \tilde{T}(\psi) = \frac{C_T}{\sqrt{\text{ch } \psi}} T_{\nu, m-1/2}(\psi)$$

(см. предложение 1).

По формуле Бесселя [11]

$$\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{-ip\rho \text{ch } \psi \text{ch } \psi' \cos(\varphi - \varphi')} d\varphi = e^{im\varphi'} 2\pi (-i)^m J_m(p\rho \text{ch } \psi \text{ch } \psi').$$

В данной работе мы ограничимся случаем $\nu = m - 1/2$ (невозбужденное состояние); тогда

$$T_{\nu,\nu}(\psi) = \text{ch}^{-\nu} \psi, \quad \nu \equiv l = m - \frac{1}{2}.$$

Введем обозначения $a = p\rho \text{ch } \psi'$, $b = p\rho \text{sh } \psi'$; тогда получим интеграл

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \text{ch}^{-m} \psi J_m(p\rho \text{ch } \psi' \text{ch } \psi) \text{ch } \psi e^{ip\rho \text{sh } \psi \text{sh } \psi'} d\psi \\ &= 2 \int_0^{\infty} \text{ch}^{-m+1} \psi J_m(a \text{ch } \psi) \cos(b \text{sh } \psi) d\psi. \end{aligned}$$

Сделаем замену $\text{sh } \psi = \zeta$ и воспользуемся следующим равенством:

$$J_{-1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos z.$$

Тогда получим

$$\sqrt{2\pi b} \int_0^{\infty} (\zeta^2 + 1)^{-m/2} J_m(a\sqrt{\zeta^2 + 1}) J_{-1/2}(b\zeta) \sqrt{\zeta} d\zeta$$

– так называемый разрывный интеграл Сонина–Гегенбауэра [11], равный

$$\sqrt{2\pi} \frac{1}{\text{ch}^m \psi'} \frac{J_{m-1/2}(p\rho)}{\sqrt{p\rho}}.$$

Таким образом, мы получили ядро для интегрирования функции A , которое не зависит от конкретного вида выбранного потенциала.

А именно, доказано

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. При $\nu = m - 1/2$ волновые функции в импульсном представлении имеют вид

$$\Phi_{n,\nu,m}^*(p, \psi', \phi') = (-i)^m \frac{C_A}{p} A_{n,\nu}^*(p) \cdot \frac{C_T}{\sqrt{\text{ch } \psi'}} T_{\nu,\nu}(\psi') \cdot C_Y Y_m(\phi'),$$

где $A_{n,\nu}^*(p)$ есть преобразование Фурье–Бесселя

$$A_{n,\nu}^*(p) = \int_0^{\infty} A_{n,\nu}(\rho) J_{m-1/2}(p\rho) \sqrt{p\rho} d\rho.$$

Строго говоря, исходя из физических соображений мы должны были бы решать задачу на собственные числа оператора (2) не в гильбертовом пространстве $\mathcal{M} = L^2(\mathcal{K})$, а в более узком гильбертовом пространстве $\mathcal{H} \subset \mathcal{M}$, состоящем из функций $f \in \mathcal{M}$, Фурье-преобразование которых $F(f)$ имеет носитель в пространственно-подобной области $\mathcal{K}^* = \{p_x^2 + p_y^2 - p_t^2 > 0\}$ пространства импульсов. Тогда преобразование Фурье будет унитарным оператором вида $F: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^* = F\mathcal{H}$. Но определенное подобным образом пространство $\mathcal{H}$ включает в себя все волновые функции $\Phi_{n,\nu,m}$.

Действительно, формула Сонина–Гегенбауэра гарантирует нам, что преобразование Фурье $F(\Phi)$ полученного решения будет равно нулю вне $\mathcal{K}^*$, так как выход за пределы этой области в сопряженном пространстве будет означать перестановку параметров a и b , но при $a < b$ значение интеграла Сонина–Гегенбауэра будет равно нулю. Поэтому волновые функции Φ для любого центрально-симметричного поля U принадлежат классу $\mathcal{H}$, что, впрочем, следует также из лоренц-инвариантной записи преобразования Фурье.

Дальнейшие вычисления зависят от вида решения $A(\rho)$, и в частности, от вида потенциала. Поэтому рассмотрим частный случай – кулоновский потенциал.

5. Преобразование Фурье радиальных волновых функций. Согласно предложениям 1 и 2 нахождение радиальной составляющей преобразования Фурье сводится к вычислению интеграла Фурье–Бесселя:

$$I(p) = \int_0^\infty \frac{e^{-\rho/n} \rho^{\nu+1/2} L_k^{(2\nu)}(2\rho/n)}{\rho} \frac{J_{m-1/2}(p\rho)}{\sqrt{p\rho}} \rho^2 d\rho. \quad (7)$$

Сделаем замену переменных $z = 2\rho/n$ и вспомним, что $\nu = m - 1/2$. Тогда интеграл преобразуется к виду

$$I(p) = \left(\frac{n}{2}\right)^{m+2} \int_0^\infty e^{-z/2} z^{m+1} L_k^{(2m-1)}(z) \frac{J_{m-1/2}(bz)}{\sqrt{bz}} dz,$$

где $k = n - \nu - 1/2$, $b = np/2$.

Воспользуемся интегральным представлением функции Бесселя в виде интеграла Пуассона [11]. Тогда

$$\begin{aligned} I(p) &= \left(\frac{n}{2}\right)^{m+2} \frac{1}{\Gamma(m)} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{b}{2}\right)^{m-1/2} \frac{1}{\sqrt{b}} \\ &\times \int_{-1}^1 dt (1-t^2)^{m-1} \int_0^\infty e^{-z/2} z^{2m} L_k^{(2m-1)}(z) e^{-qz} dz, \end{aligned}$$

где $q = -ibt$.

Внутренний интеграл можно представить в виде преобразования Лапласа. Мы будем использовать так называемые стандартизованные многочлены Лагерра, которые могут быть определены следующей формулой Родрига:

$$L_k^{(\alpha)}(x) x^\alpha e^{-x} = \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx}\right)^k \{x^{\alpha+k} e^{-x}\}. \quad (8)$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty z^{2m} L_k^{(2m-1)}(z) e^{-(q+1/2)z} dz \\ &= \frac{1}{k!} \frac{\Gamma(2m+k)}{\Gamma(2m)} \Gamma(2m+1) \frac{1}{(q+1/2)^{2m+1}} {}_2F_1\left(-k, 2m+1, 2m, \frac{1}{q+1/2}\right) \\ &= \frac{2m}{k!} \Gamma(2m+k) \frac{2^{2m+1}(-1)^k}{m} \frac{(1+2ibt)^k}{(1-2ibt)^{2m+k}} \frac{k+m+2ibtm}{1+4b^2t^2}. \end{aligned}$$

Перепишем $I(p)$ с учетом полученного результата:

$$I(p) = \frac{2n^{m+2}b^{m-1}(-1)^k \Gamma(2m+k)}{\sqrt{2\pi}k!\Gamma(m)} \cdot \tilde{I}(p),$$

где

$$\tilde{I}(p) = \int_{-1}^1 (1-t^2)^{m-1} \frac{(1+2ibt)^k}{(1-2ibt)^{2m+k}} \frac{k+m+2ibtm}{1+4b^2t^2} dt.$$

Перейдем к новой переменной ϕ :

$$e^{2i\phi} = \frac{1+2ibt}{1-2ibt}, \quad \operatorname{tg} \phi = 2bt;$$

тогда

$$\tilde{I}(p) = \frac{b}{(4b^2)^m} \int_{-\phi_0}^{\phi_0} (\operatorname{tg}^2 \phi_0 - \operatorname{tg}^2 \phi)^{m-1} e^{2in\phi} \cos^{2m-1} \phi ((n+m)e^{i\phi} + (n-m)e^{-i\phi}) d\phi, \quad (9)$$

где $n = k + m$, $\operatorname{tg} \phi_0 = 2b$.

Дальнейшее решение задачи может проходить по двум направлениям. Во-первых, можно изучать асимптотическое поведение решений при $n \rightarrow \infty$. Такое асимптотическое представление волновой функции необходимо для изучения системы в квазиклассическом приближении. Во-вторых, можно поставить вопрос о точном вычислении интеграла. Такие результаты необходимы для изучения основного невозбужденного состояния атома (и, возможно, нескольких первых возбужденных состояний).

В рамках данной работы нас прежде всего будет интересовать поведение системы в квазиклассическом приближении. Поэтому вначале мы остановимся на первом направлении. В конце раздела мы приведем некоторые результаты и по второму направлению исследований.

Проинтегрируем полученный интеграл m раз по частям. Легко видеть, что за счет первого множителя подынтегральной функции подстановка в концах отрезка интегрирования будет давать 0. А значит, первый ненулевой член и даст нам искомую асимпто-тику.

Запишем

$$\tilde{I}(p) = \frac{b \cos^2 \phi_0}{\sin^{2m} \phi_0} \int_{-\phi_0}^{\phi_0} (\sin(\phi_0 - \phi) \sin(\phi_0 + \phi))^{m-1} e^{2in\phi} \cos \phi ((n+m)e^{i\phi} + (n-m)e^{-i\phi}) d\phi.$$

Введем обозначения

$$P = \sin(\phi_0 - \phi) \sin(\phi_0 + \phi), \quad Q = \cos \phi((n+m)e^{i\phi} + (n-m)e^{-i\phi}).$$

Тогда, учитывая предыдущее замечание об интегрировании по частям, имеем

$$\tilde{I}(p) = \frac{b \cos^2 \phi_0}{\sin^{2m} \phi_0} \left(\frac{-1}{2in} \right)^{m-1} \int_{-\phi_0}^{\phi_0} e^{2in\phi} \frac{d^{m-1}}{d\phi^{m-1}} (P^{m-1} Q) d\phi.$$

Проинтегрируем полученный интеграл по частям еще раз:

$$\begin{aligned} \hat{I}(p) &= \int_{-\phi_0}^{\phi_0} e^{2in\phi} \frac{d^{m-1}}{d\phi^{m-1}} (P^{m-1} Q) d\phi \\ &= \frac{1}{2in} e^{2in\phi} \frac{d^{m-1}}{d\phi^{m-1}} (P^{m-1} Q) \Big|_{-\phi_0}^{\phi_0} - \frac{1}{2in} \int_{-\phi_0}^{\phi_0} e^{2in\phi} \frac{d^m}{d\phi^m} (P^{m-1} Q) d\phi. \end{aligned}$$

Нас интересует первый член полученной разности, так как он определяет асимптотику всего интеграла.

Легко видеть, что единственным ненулевым слагаемым полученной производной после подстановки в концах интегрирования будет

$$\frac{d^{m-1}}{d\phi^{m-1}} (P^{m-1} Q) = (m-1)! (P')^{m-1} Q.$$

После несложных вычислений в случае четного m окончательно получаем

$$I_{\text{четн.}}(p) \approx \frac{2n^{m+2}(-1)^k \Gamma(2m+k)}{\sqrt{2\pi} k!} \frac{\cos^2 \phi_0}{\sin 2\phi_0} \left(\frac{-1}{2in} \right)^{m-1} \frac{-4n \cos^2 \phi_0}{2in} \cos 2n\phi_0.$$

Аналогичная формула имеет место и для нечетных m :

$$I_{\text{нечетн.}}(p) \approx \frac{2n^{m+2}(-1)^k \Gamma(2m+k)}{\sqrt{2\pi} k!} \frac{\cos^2 \phi_0}{\sin 2\phi_0} \left(\frac{-1}{2in} \right)^{m-1} \frac{4in \cos^2 \phi_0}{2in} \sin 2n\phi_0.$$

Осталось умножить полученные выражения на нормировочную константу C_A , чтобы получить окончательный ответ.

Константа C_A находится из условия нормировки

$$C_A^2 \int_0^\infty |\tilde{A}|^2 \rho^2 d\rho = 1,$$

где

$$\tilde{A}(\rho) = \frac{C_A}{\rho} A_{n,\nu}(\rho)$$

и $A_{n,\nu}(\rho)$ определена формулой (6). Воспользовавшись формулой Родрига (8), используя соотношения ортогональности для многочленов Лагерра и формулу интегрирования по частям, после несложных вычислений получаем

$$C_A^2 = \frac{2^{2m}}{n^{2m+2}} \frac{(n-m)!}{(n+m-1)!}.$$

Тогда

$$\tilde{A}_{n,\nu}^*(p) \approx i^m (-1)^k \frac{4}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{n^{m-2}} \sqrt{\frac{(n+m-1)!}{(n-m)!} \frac{\cos^4 \phi_0}{\sin 2\phi_0}} j_{n,m}(\phi_0),$$

где

$$j_{n,m}(\phi_0) = \begin{cases} 2 \cos(2n\phi_0), & m \text{ четное,} \\ -2i \sin(2n\phi_0), & m \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (10)$$

Осталось воспользоваться формулой Стирлинга. Тогда получим

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3. Для радиальной волновой функции в импульсном представлении равномерно на всем промежутке $0 < p < +\infty$ при $n \rightarrow \infty$ справедлива асимптотическая формула

$$\tilde{A}_{n,\nu}^*(p) = (-i)^m (-1)^n \frac{4}{\sqrt{2\pi}} n^{3/2} \frac{\cos^4 \phi_0}{\sin 2\phi_0} j_{n,m}(\phi_0) \left[1 + O\left(\frac{1}{n}\right) \right],$$

где $j_{n,m}(\phi_0)$ определена формулой (10) и $\phi_0 = \arctg(np)$.

Если же стоит задача точного вычисления интеграла (7), мы можем в формуле (9) разложить $(\operatorname{tg}^2 \phi_0 - \operatorname{tg}^2 \phi)^{m-1}$ по степеням $\operatorname{tg}^2 \phi$ и воспользоваться следующим результатом:

$$\begin{aligned} \int \operatorname{tg}^p \phi \cos^q \phi e^{ir\phi} d\phi &= \frac{i}{q-r} e^{ir\phi} (1 - e^{2i\phi})^{-p} (1 + e^{2i\phi})^{p-q} \\ &\times F_1\left(\frac{r-q}{2}, p-q, -p, \frac{r-q}{2} + 1, -e^{2i\phi}, e^{2i\phi}\right) \cos^q \phi \operatorname{tg}^p \phi, \end{aligned}$$

где F_1 – гипергеометрическая функция Ашеля.

Таким образом, полученный интеграл полностью вычисляется.

Рассмотрим простейший частный случай.

Положим $m = 1$. Тогда интеграл примет вид

$$I(p) = \left(\frac{n}{2}\right)^3 \int_0^\infty e^{-z/2} z^2 L_k^{(1)}(z) \frac{J_{1/2}(bz)}{\sqrt{bz}} dz.$$

Записывая $J_{1/2}(z) = \sqrt{2/(\pi z)} \sin z$ и используя формулу для преобразования Лапласа, получаем

$$\tilde{A}_{n,\nu}^*(p) = (-1)^{n-1} \frac{8}{\sqrt{2\pi}} n^{3/2} \frac{\cos^4 \phi_0 \sin 2n\phi_0}{\sin 2\phi_0},$$

что совпадает с главным членом асимптотики.

Теперь мы можем зафиксировать вакуумные волновые функции Φ_V и Φ_V^* для основного состояния, т.е. при $n = 1$, $\nu = 1/2$, $m = \pm 1$ в координатном и импульсном представлениях соответственно.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4. В основном состоянии

$$\Phi_V = 2e^{-\rho} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\operatorname{ch} \psi} \frac{e^{\pm i\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \Phi_V^* = \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(1+p^2)^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\operatorname{ch} \psi'} \frac{e^{\pm i\varphi'}}{\sqrt{2\pi}}.$$

6. Вычисление энтропии в координатном представлении. Если волновая функция Φ нормирована: $\|\Phi\|^2 = 1$, то информационная энтропия Больцмана–Шеннона определяется формулой

$$S_\Phi = - \int_{\mathcal{K}} |\Phi|^2 \ln |\Phi|^2 d\mu.$$

Представим волновую функцию в виде $\Phi = \tilde{A}(\rho) \cdot \tilde{T}(\psi) \cdot \tilde{Y}(\varphi)$ (см. предложение 1).

Тогда $S_{\Phi} = S_Y + S_T + S_A$, где

$$S_Y = - \int_0^{2\pi} |\tilde{Y}|^2 \ln |\tilde{Y}|^2 d\varphi, \quad S_T = - \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \ln |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch} \psi d\psi,$$

$$S_A = - \int_0^{\infty} |\tilde{A}|^2 \ln |\tilde{A}|^2 \rho^2 d\rho.$$

Легко видеть, что

$$S_Y = - \int_0^{2\pi} C_Y^2 \ln C_Y^2 d\varphi = \ln 2\pi.$$

Для дальнейших вычислений введем обозначение

$$N(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^{\tau} \operatorname{ch} \psi d\psi;$$

тогда

$$S_T = -2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln N(\tau) \Big|_{\tau=2}.$$

Этот метод вычисления энтропии детально обоснован в работах [2], [12].

Вычислим $N(\tau)$:

$$N(\tau) = 2C_T^{\tau} \int_0^{\infty} \operatorname{ch}^{1-m\tau} \psi d\psi.$$

Для нахождения интеграла сделаем замену переменных $z = 1/\operatorname{ch}^2 \psi$; тогда интеграл преобразуется к виду

$$N(\tau) = 2C_T^{\tau} \int_0^1 z^{(m\tau-1)/2} \frac{dz}{2z\sqrt{1-z}} = C_T^{\tau} \int_0^1 z^{(m\tau-3)/2} (1-z)^{-1/2} dz$$

$$= C_T^{\tau} B\left(\frac{m\tau-1}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

Следовательно,

$$S_T = \ln \frac{1}{C_T^2} + m \left(\psi(m) - \psi\left(m - \frac{1}{2}\right) \right)$$

$$= \ln B\left(m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + m \left(\psi(m) - \psi\left(m - \frac{1}{2}\right) \right).$$

Здесь B и ψ – бета-функция и логарифмическая производная гамма-функции соответственно.

Аналогично, если

$$N(\tau) = \int_0^{\infty} |\tilde{A}|^{\tau} \rho^2 d\rho, \tag{11}$$

то

$$S_A = -2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln N(\tau) \Big|_{\tau=2}.$$

Для вычисления интеграла воспользуемся асимптотическим выражением многочленов Лагерра. Нам понадобится равномерная асимптотика типа Планшереля–Ротаха на интервале осцилляций. Вкратце напомним вывод этой формулы с целью получить асимптотику в удобном для нас виде. Для этого представим многочлен Лагерра

$$L_k^{(2m-1)}(x) = x^{-(2m-1)} e^x \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \{ x^{k+2m-1} e^{-x} \}$$

с помощью формулы Коши в виде

$$L_k^{(2m-1)}(x) = \frac{e^x}{x^{2m-1}} \cdot \frac{1}{2\pi i} \oint_{(x)} \frac{\xi^{k+2m-1} e^{-\xi} d\xi}{(\xi - x)^{k+1}}.$$

Положим $\Lambda_n(x) = L_k^{(2m-1)}(4nx)$. Тогда

$$\Lambda_n(x) = \frac{e^{4nx}}{x^{2m-1}} \cdot \frac{1}{2\pi i} \oint_{(x)} \frac{\xi^{k+2m-1} e^{-4n\xi} d\xi}{(\xi - x)^{k+1}},$$

где $n = k + m$.

Воспользуемся методом перевала. Введем обозначения

$$F = \frac{\xi e^{-4\xi}}{\xi - x}, \quad G = \ln F, \quad f = \frac{\xi^{2m-1} e^{-4m\xi}}{\xi - x}$$

и вычислим критические точки, в которых

$$\frac{\partial}{\partial \xi} G = \frac{1}{\xi} - 4 - \frac{1}{\xi - x} = 0.$$

Отсюда находим

$$\xi_* = \frac{x + \sqrt{x(x-1)}}{2}, \quad \sqrt{x(x-1)} \sim x \quad \text{при } x \rightarrow \infty.$$

Тогда

$$\Lambda_n(x) = \frac{e^{4nx}}{x^{2m-1}} \cdot \frac{1}{2\pi i} \cdot F_*^{n-m} \cdot \sqrt{-\frac{2\pi}{nG_*''}} \left(f_* + O\left(\frac{1}{n}\right) \right) \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

$$F_* = F|_{\xi=\xi_*} = -\frac{(x + \sqrt{x(x-1)})^2}{x} e^{-2(x + \sqrt{x(x-1)})},$$

$$G_*'' = G''|_{\xi=\xi_*} = \frac{16}{x} \sqrt{x(x-1)}, \quad f_* = -\frac{x^{m-1} (\sqrt{x} + \sqrt{(x-1)})^{2m} e^{-2m(x + \sqrt{x(x-1)})}}{2^{2m-2}},$$

откуда окончательно и получаем асимптотическое выражение для Λ_n :

$$\Lambda_n(x) \sim (-1)^{n-m} \frac{1}{4\sqrt{2\pi n}} \frac{\sqrt{x}(\sqrt{x} + \sqrt{x-1})^{2n}}{\sqrt{\sqrt{x(x-1)}}} e^{2n(x - \sqrt{x(x-1)})} \frac{1}{x^m 2^{2m-2}},$$

$$n \rightarrow \infty, \quad x \in \mathbb{C} \setminus [0, 1].$$

Пусть $x \in (0, 1)$; тогда если $x = x + i \cdot 0$, то $\sqrt{x-1} = i\sqrt{1-x}$. Положим $x = \cos^2 \frac{\phi}{2}$, $0 < \phi < \pi$; тогда $\sqrt{1-x} = \sin(\phi/2)$. Окончательно имеем

$$\Lambda_n(x) \sim (-1)^{n-m} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\cos \frac{\phi}{2} \right)^{1/2-2m} \left(\sin \frac{\phi}{2} \right)^{-1/2} e^{2n \cos^2(\phi/2)} \\ \times \frac{1}{2^{2m-2}} 2 \cos \left\{ n(\phi - \sin \phi) - \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Это формула типа Планшереля–Ротаха.

Для волновой функции $\tilde{A}(\rho)$ имеем

$$\tilde{A}(\rho) = C_A e^{-\rho/n} \rho^{m-1} L_k^{(2m-1)} \left(\frac{2\rho}{n} \right).$$

В интеграле (11) сделаем замену переменных $x = 2\rho/n$. Тогда

$$N(\tau) = C_A^\tau \left(\frac{n}{2} \right)^{(m-1)\tau+3} \cdot \tilde{N}(\tau) dx,$$

где

$$\tilde{N}(\tau) = \int_0^\infty \left| e^{-x/2} x^{m-1} L_k^{(2m-1)}(x) \right|^\tau x^2 dx.$$

Далее, $\tilde{N}(\tau) = (4n)^{3+\tau(m-1)} \cdot \overline{N}(\tau) dx$, где

$$\overline{N}(\tau) = \int_0^\infty |e^{-2nx} x^{m-1} \Lambda_n(x)|^\tau x^2 dx.$$

Воспользуемся полученным ранее асимптотическим выражением для многочлена Лагерра:

$$\overline{N}(\tau) \approx \left\{ \frac{1}{2^{2m-1} \sqrt{2\pi n}} \right\}^\tau \int_0^\pi \left(\cos \frac{\phi}{2} \right)^{5-3\tau/2} \left(\sin \frac{\phi}{2} \right)^{1-\tau/2} \left| \cos \left(n\gamma - \frac{\pi}{4} \right) \right|^\tau d\phi,$$

где $\gamma = \gamma(\phi) = \phi - \sin \phi$.

Пусть

$$N^*(\tau) = \int_0^\pi \left(\cos \frac{\phi}{2} \right)^{5-3\tau/2} \left(\sin \frac{\phi}{2} \right)^{1-\tau/2} \left| \cos \left(n\gamma - \frac{\pi}{4} \right) \right|^\tau d\phi, \\ g_\tau(\phi) = \left(\cos \frac{\phi}{2} \right)^{5-3\tau/2} \left(\sin \frac{\phi}{2} \right)^{1-\tau/2}, \\ G(\tau) = \int_0^\pi g_\tau(\phi) \frac{d\phi}{\pi}, \quad C(\tau) = \int_0^\pi |\cos \phi|^\tau \frac{d\phi}{\pi}.$$

Тогда по лемме из работы [12] $N^*(\tau) \rightarrow \pi \cdot G(\tau) \cdot C(\tau)$ при $n \rightarrow \infty$. По формуле Стирлинга

$$C_A \sim \frac{2^m}{n^{2m} \sqrt{n}} \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

Окончательно,

$$N(\tau) \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{n^3} \right)^\tau 8n^6 \pi G(\tau) C(\tau) \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

Вычислим значения $G(\tau)$ и $C(\tau)$, входящие в формулу:

$$G(\tau) = \frac{1}{\pi} B\left(3 - \frac{3\tau}{4}, 1 - \frac{\tau}{4}\right), \quad C(\tau) = \frac{1}{\pi} B\left(\frac{\tau+1}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

Тогда

$$S_A = -2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln N(\tau) \Big|_{\tau=2} = 6 \ln n - \ln 2 + \ln \pi + o(1).$$

Таким образом, нами доказано

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 5. 1) При $\nu = m - 1/2$ волновая функция в координатном представлении $\Phi_{n,\nu,m}$ имеет следующую информационную энтропию:

$$S(\Phi_{n,\nu,m}) = S_Y + S_T + S_A,$$

где

$$S_Y = \ln 2\pi, \quad S_T = \ln B\left(m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + m \left(\psi(m) - \psi\left(m - \frac{1}{2}\right) \right).$$

2) Информационная энтропия радиальной волновой функции имеет следующую коротковолновую асимптотику:

$$S_A = 6 \ln n - \ln 2 + \ln \pi + o(1) \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

3) Информационная энтропия вакуума равна

$$S(\Phi_V) = \ln 2 + 2 \ln \pi + 3.$$

Утверждение 3) является прямым следствием предложения 4.

Ниже мы вычислим энтропию в импульсном представлении и проинтерпретируем полученные результаты в связи с принципом неопределенности.

7. Вычисление энтропии в импульсном представлении. Вычислим энтропию

$$S_{\Phi^*} = - \int_{\mathcal{K}^*} |\Phi^*|^2 \ln |\Phi^*|^2 d\mu^*.$$

Волновая функция имеет вид $\Phi^* = \tilde{A}^*(p) \cdot \tilde{T}^*(\psi') \cdot \tilde{Y}^*(\varphi')$ (см. предложение 2).

Тогда $S_{\Phi^*} = S_{Y^*} + S_{T^*} + S_{A^*}$, где

$$S_{Y^*} = S_Y, \quad S_{T^*} = T_Y, \quad S_{A^*} = - \int_0^\infty |\tilde{A}^*|^2 \ln |\tilde{A}^*|^2 p^2 dp.$$

Пусть

$$N(\tau) = \int_0^\infty |\tilde{A}^*|^\tau p^2 dp;$$

тогда

$$S_{A^*} = -2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln N(\tau) \Big|_{\tau=2}.$$

Воспользуемся предложением 3. Пусть сначала m нечетное. Тогда

$$N(\tau) \approx \left(\frac{4}{\sqrt{2\pi}} n^{3/2} \right)^\tau \int_0^\infty \left| \frac{\cos^4 \phi}{\sin 2\phi} 2 \sin 2n\phi \right|^\tau p^2 dp, \quad \phi = \arctg np.$$

Следовательно,

$$N(\tau) \approx \left(\frac{4}{\sqrt{2\pi}} n^{3/2} \right)^\tau n^{-3} \int_0^{\pi/2} (\sin \phi)^{2-\tau} |\sin 2n\phi|^\tau (\cos \phi)^{3\tau-4} d\phi.$$

Введем обозначение

$$N^*(\tau) = \int_0^{\pi/2} (\sin \phi)^{2-\tau} |\sin 2n\phi|^\tau (\cos \phi)^{3\tau-4} d\phi.$$

Последний интеграл при $n \rightarrow \infty$ можно представить в виде

$$N^*(\tau) \rightarrow \frac{\pi}{2} \int_0^\pi (\sin \phi)^\tau \frac{d\phi}{\pi} \cdot \int_0^\pi (\sin \phi)^{2-\tau} |\cos \phi|^{3\tau-4} \frac{d\phi}{\pi}.$$

Тогда

$$N^*(\tau) \sim \frac{1}{2\pi} B\left(\frac{\tau+1}{2}, \frac{1}{2}\right) B\left(\frac{3-\tau}{2}, \frac{3\tau-3}{2}\right),$$

а значит,

$$S_{A^*} = -3 \ln n + 3 \ln 2 + \ln \pi - 5.$$

Очевидно, что для четных m результат будет тем же.

Тем самым, справедливо

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6. 1) При $\nu = m - 1/2$ волновая функция в импульсном представлении $\Phi_{n,\nu,m}^*$ имеет следующую информационную энтропию:

$$S(\Phi_{n,\nu,m}^*) = S_{Y^*} + S_{T^*} + S_{A^*},$$

где $S_{Y^*} = S_Y$, $S_{T^*} = S_T$.

2) Информационная энтропия радиальной волновой функции имеет следующую коротковолновую асимптотику:

$$S_{A^*} = -3 \ln n + 7 \ln 2 + \ln \pi - 5 + o(1) \quad \text{при } n \rightarrow \infty.$$

3) Информационная энтропия вакуума равна

$$S(\Phi_V^*) = 6 \ln 2 + 3 \ln \pi - \frac{10}{3}.$$

В заключение обсудим энтропийные соотношения неопределенности [1]

$$S_\Phi + S_{\Phi^*} \geq (D+1)(1 + \ln \pi),$$

где $D + 1$ – полная размерность всего пространства, а D – число пространственных координат.

Рассмотрим это условие в случае $n = 1$. Для этого воспользуемся точными значениями энтропий из предложений 5 и 6:

$$S_{\Phi_V} = 3 + \ln 2 + 2 \ln \pi, \quad S_{\Phi_V^*} = 3 \ln \pi + 6 \ln 2 - \frac{10}{3}.$$

Таким образом,

$$S_{\Phi_V} + S_{\Phi_V^*} = 5 \ln \pi + 7 \ln 2 - \frac{1}{3} \approx 10.2423.$$

Очевидно, что

$$S_{\Phi_V} + S_{\Phi_V^*} \geq 3(1 + \ln \pi) \approx 6.4342.$$

Сравним полученные результаты с принципом неопределенности Гейзенберга, который в данном случае утверждает, что

$$\Delta \rho \cdot \Delta p \geq \frac{3}{2}, \quad (12)$$

где

$$(\Delta \rho)^2 = \langle \rho^2 \rangle = \int_{\mathcal{X}} \rho^2 |\Phi_V|^2 d\mu, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \int_{\mathcal{X}^*} p^2 |\Phi_V^*|^2 d\mu^*.$$

Простые вычисления показывают, что

$$\Delta \rho = \sqrt{3}, \quad \Delta p = 1.$$

Таким образом, неравенство Гейзенберга (12) безусловно выполнено.

Сравним, насколько велико отклонение величин $\Delta \rho \cdot \Delta p$ с одной стороны, и $S_{\Phi} + S_{\Phi^*}$ с другой от своих минимальных значений. Мы видим, что

$$\frac{\Delta \rho \cdot \Delta p}{3/2} \approx 1.1547, \quad \frac{S_{\Phi} + S_{\Phi^*}}{(D+1)(1+\ln \pi)} \approx 1.5919.$$

Итак, второе отношение больше, а это означает, что энтропия сильнее реагирует на неопределенность квантово-механической системы, чем принцип неопределенности Гейзенберга.

Если же $n \rightarrow \infty$, то

$$S_{\Phi} + S_{\Phi^*} \sim 3 \ln n \rightarrow \infty,$$

а значит, очевидным образом

$$S_{\Phi} + S_{\Phi^*} \geq 3(1 + \ln \pi)$$

при больших n .

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Bialynicki-Birula I., Mycielski J. Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics // *Cumm. Math. Phys.* 1975. V. 44. P. 129–132.
- [2] Dehesa J. S., Yáñez R. J., Aptekarev A. I., Buyarov V. Strong asymptotics of Laguerre polynomials and information entropies of two-dimensional harmonic oscillator and one-dimensional Coulomb potentials // *J. Math. Phys.* 1998. V. 39. № 6. P. 3050–3060.
- [3] Yáñez R. J., Van Assche W., Dehesa J. S. Position and momentum information entropies of the D -dimensional harmonic oscillator and hydrogen atom // *Phys. Rev. A.* 1994. V. 50. P. 3065–3079.
- [4] Dehesa J. S., Martinez-Finkelshtein A., Sorokin V. N. Quantum-information entropies for highly excited states of single-particle systems with power-type potentials // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 66. P. 2109.
- [5] Dehesa J. S., Martinez-Finkelshtein A., Sorokin V. N. Asymptotics of information entropies of some Toda-like potentials // *J. Math. Phys.* 2003. V. 44. № 1. P. 36–47.
- [6] Козлов В. В., Никишин Е. М. Релятивистский вариант гамильтонова формализма и волновые функции водородоподобного атома // *Вестн. МГУ. Сер. 1. Матем., мех.* 1986. № 5. С. 11–20.
- [7] Козлов В. В. Релятивистская задача многих тел и ее квантование // *Избранные вопросы математического анализа* / ред. Е. М. Никишин. Доклады по математике и ее приложениям. Т. 3. Вып. 1. М.–Тула, 1990. С. 430–431.
- [8] Фок В. А. Работы по квантовой теории поля. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1957.
- [9] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974.
- [10] Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Специальные функции математической физики (2-е изд.). М.: Наука, 1984.
- [11] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1965.
- [12] Аптекарев А. И., Буяров В. С., Дегеза Х. С. Асимптотическое поведение L^p -норм и энтропии для общих ортогональных многочленов // *Матем. сб.* 1995. Т. 82. С. 373–395.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
E-mail: spex19@mail.ru

Поступило
07.02.2005
Исправленный вариант
30.03.2005