Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. И. Поляков, Теория возмущений для частицы в одномерном, центрально- и аксиально-симметричном полях, *ТМФ*, 1997, том 112, номер 1, 119–123

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1032>

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: 35.173.219.12

26 апреля 2023 г., 15:49:51

Ю. И. Поляков*

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОМ, ЦЕНТРАЛЬНО- И АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЯХ

Получена теория возмущений, в которой все поправки к невозмущенному состоянию определяются волновой функцией этого состояния. Сформулировано новое условие применимости теории возмущений. На простом примере рассмотрена связь с теорией возмущений Рэлея–Шредингера, откуда, в частности, следует аналитическое выражение для фигурирующего в ней ряда.

В теории возмущений Рэлея–Шредингера для вычисления поправок к состоянию $|n\rangle$ с энергией E_n необходимо знать волновые функции и энергии всех остальных невозмущенных состояний. В рассматриваемых в дальнейшем случаях одномерного, центрально-симметричного или аксиально-симметричного полей уравнение Шредингера сводится к уравнению вида

$$\hat{\mathcal{L}}y = y'' + \varphi(x)y = 0, \quad (1)$$

а поправки по теории возмущений определяются уравнением

$$\hat{\mathcal{L}}y = f(x, \alpha). \quad (1')$$

При этом в f входят в качестве параметров α соответствующие поправки для энергии. Как известно, все решения неоднородного уравнения (1') определяются всего одним решением однородного уравнения (1), поэтому и все поправки должны выражаться только через волновую функцию невозмущенного состояния. Эта идея развита в работе [1] для центрально-симметричного поля. Мы используем другой подход, включающий также случай одномерного и аксиально-симметричного полей. Невозмущенная функция удовлетворяет граничным условиям

$$y_0(a) = y_0(\infty) = 0,$$

где $a = -\infty$ для одномерного поля, а в двух других случаях $a = 0$.

*Софийский университет Святого Климента Охридского, София, Болгария

1. Одно специальное решение *y , удовлетворяющее начальным условиям $y(\xi) = y'(\xi) = 0$, дает принцип Дюамеля:

$${}^*y(x, \xi) = \int_{\xi}^x u(x, x') f(x', \alpha) dx', \quad u(x, x') = y_{02}(x)y_{01}(x') - y_{01}(x)y_{02}(x'). \quad (2)$$

Здесь $y_{01} = y_0$ и y_{02} — два линейно независимых решения (1) с единичным вронскианом, откуда следует, что

$$y_{02}(x) = y_0(x) \int_{\bar{x}}^x \frac{dx''}{y_0^2(x'')} \quad \forall x. \quad (3)$$

Учитывая (3), можно переписать решение (2) в виде

$${}^*y(x, \xi) = y_0(x) \int_{\xi}^x \frac{dx''}{y_0^2(x'')} \int_{\xi}^{x''} y_0(x') f(x', \alpha) dx'. \quad (2')$$

Общее решение уравнения (1') с учетом (2) записывается следующим образом:

$$y(x, p, q) = -y_{01}(x) \int_p^x dx' y_{02}(x') f(x', \alpha) + y_{02}(x) \int_q^x dx' y_{01}(x') f(x', \alpha), \quad (3')$$

где p и q — произвольные постоянные. При этом ${}^*y(x, \xi) = y(x, \xi, \xi)$.

2. Рассмотрим теперь граничную задачу

$$\widehat{\mathcal{L}}y = f(x, \alpha), \quad y(a) = y(\infty) = 0 \quad (4)$$

и предположим, что y_0 удовлетворяет обоим граничным условиям, а y_{02} — ни одному из них. Это предположение определяет постоянную q , которая равна a , и параметр α в (3'):

$$\int_a^{\infty} dx' y_0(x') f(x', \alpha) = 0. \quad (5)$$

Решение задачи (4) имеет вид

$$y(x, p, a) = -y_{01}(x) \int_p^x dx' y_{02}(x') f(x', \alpha) - y_{02}(x) \int_x^{\infty} dx' y_{01}(x') f(x', \alpha). \quad (6)$$

3. Уравнение Шредингера в рассматриваемых полях сводится к одномерному. Пусть поле имеет вид $V = V_0 + \varepsilon v$, где εv — малое возмущение. Для фиксированного состояния, индекс которого n для краткости опускаем, $E = E^0 + \varepsilon E^{(1)} + \varepsilon^2 E^{(2)} + \dots$, $y = y_0 + \varepsilon y^{(1)} + \varepsilon^2 y^{(2)} + \dots$, где E — энергия, а y , $x^{1/2}y$ и $x^{-1}y$ — волновые функции одномерного и соответственно радиальных уравнений (в последних двух случаях x — радиальная координата). Уравнения для $E^{(k)}$ и $y^{(k)}$ имеют вид (1') с $\varphi = \frac{2m}{\hbar^2}(E^0 - V_0) - U_c(x)$ (U_c — центробежный потенциал [2]) и $f = f_k$:

$$\begin{aligned} f_1 &= 2\Delta v y_0, & f_2 &= 2\Delta v y^{(1)} - 2E^{(2)} y_0, & \dots, \\ \Delta v &= v(x) - E^{(1)} = v(x) - \langle y_0 | v | y_0 \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Функция y_0 нормирована, а на y наложено условие $\langle y_0 | y \rangle = 1$, откуда следует, что

$$\langle y_0 | y^{(k)} \rangle = \int_a^\infty dx y_0(x) y^{(k)}(x) = 0, \quad k > 0, \quad (8)$$

$$E^{(k)} = \langle y_0 | v | y^{(k-1)} \rangle. \quad (9)$$

Теория возмущений Рэлея–Шредингера основана на разложении $y^{(k)}$ по всем функциям $y_{0n'}$ невозмущенных состояний n' . В нашем случае решения для $y^{(k)}$ и $E^{(k)}$ даются формулами (6)–(9) и выражаются только через y_0 . Согласно (6)

$$y^{(1)}(x) = -2 \left[y_0(x) \int_p^x dx' y_0(x') y_{02}(x') \Delta v(x') + y_{02}(x) \int_x^\infty dx' y_0^2(x') \Delta v(x') \right], \quad (10)$$

а постоянная p определяется условием (8). В центральных полях первый интеграл в (10) имеет смысл при $p = a = 0$, если $\lim_{x \rightarrow 0} x^2 v(x) = 0$. Поэтому в соответствии с (10) имеем

$$y^{(1)}(x) = c y_0(x) + {}^* y^{(1)}(x, 0) = y_0(x) [c + F_1(x)], \quad (10')$$

где

$$F_1(x) = \int_0^x \frac{F(x') dx'}{y_0^2(x')}, \quad F(x) = 2 \int_0^x y_0^2(x') \Delta v(x') dx'. \quad (11)$$

Из (5) следует, что $F(\infty) = 0$. Постоянная c определяется условием (8) при $k = 1$, так что

$$y^{(1)}(x) = y_0(x) \Delta F_1(x), \quad \Delta F_1(x) = F_1(x) - \overline{F}_1, \quad \overline{F}_1 = \int_0^\infty y_0^2(x) F_1(x) dx. \quad (12)$$

Согласно (9) для $k = 2$ имеем

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= \langle y_0 | v | y^{(1)} \rangle = \int_0^\infty y_0^2(x) v(x) (F_1(x) - \overline{F}_1) dx = \int_0^\infty y_0^2(x) \Delta v(x) F_1(x) dx = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty F'(x) F_1(x) dx = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{F^2(x) dx}{y_0^2(x)} < 0. \end{aligned} \quad (13)$$

4. Рассмотрим одномерный случай: $a = -\infty$. Обычно произведение $y_0 y_{02}$ отлично от 0 при $x \rightarrow -\infty$ [3], так что (10) не имеют смысла при $p = -\infty$. Поэтому положим $p = x_0$, где x_0 – произвольная точка в области локализации y_0 , и запишем (10) в виде

$$\begin{aligned} y^{(1)}(x) &= y_0(x) \left[c - 2 \int_{x_0}^x dx' y_0(x') y_{02}(x') \Delta v(x') \right] + y_{02}(x) F(x), \\ F(x) &= 2 \int_{-\infty}^x dx' y_0^2(x') \Delta v(x'). \end{aligned}$$

Преобразуем первый интеграл, полагая $y_{02} = z y_0$, где z определяется с помощью (3'):

$$\begin{aligned} -2 y_0 \int_{x_0}^x dx' z(x') y_0^2(x') \Delta v(x') &= -y_0 \int_{x_0}^x z(x') dF = \\ &= -y_{02} F + y_0 (F z)_{x=x_0} + y_0 \int_{x_0}^x \frac{F(x') dx'}{y_0^2(x')}. \end{aligned}$$

Включая $(zF)_{x=x_0}$ в c , получим

$$y^{(1)}(x) = y_0(x)[c + F_1(x)], \quad F_1(x) = \int_{x_0}^x \frac{F(x')dx'}{y_0^2(x')}, \quad (14)$$

или, определяя c из (13) при $k = 1$,

$$\begin{aligned} y^{(1)}(x) &= y_0(x)\Delta F_1(x), \quad \Delta F_1(x) = F_1(x) - \bar{F}_1, \\ \bar{F}_1 &= \langle y_0 | F_1 | y_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} y_0^2(x) F_1(x) dx. \end{aligned} \quad (14')$$

Повторяя вывод формулы (13), находим

$$E^{(2)} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F^2(x)dx}{y_0^2(x)}. \quad (15)$$

Эта формула, как и (14'), не зависит от выбора x_0 . Аналогично получаются все поправки. Они выражаются только через y_0 .

Формулы типа (12)–(15) особенно важны, когда набор y_n не образует полной системы и традиционная теория возмущений неприменима. Однако и в противном случае сравнение этих формул с соответствующими рядами дает аналитическое представление для последних (см. ниже (18)).

5. Получим условие применимости теории возмущений. Пусть L – характерный размер области локализации y_0 в единицах, в которых $m = \hbar = \bar{V}_0 = 1$ ($\bar{V}_0$ – характерная величина V_0). Из условия нормировки следует, что $y_0 \sim L^{-1/2}$, а из единичности вронскиана имеем $y_{02} \sim L^{3/2}$ при $x \sim L$. При $x \sim L$ должно быть $\varepsilon y^{(1)} \ll y_0$ и, оценивая первый интеграл в (10), находим $L^2 \varepsilon \bar{v} \ll 1$ или в обычных единицах

$$\frac{mL^2 \varepsilon \bar{v}}{\hbar^2} \ll 1.$$

Это условие имеет простой физический смысл: εv должно быть мало по сравнению с неопределенностью потенциальной энергии V_0 , вызванной локализацией частицы в области $x \sim L$.

6. В заключение в качестве примера рассмотрим трехмерный изотропный осциллятор и вычислим возмущение основного состояния с $l = 0$ при $v = x^3$. Радиальные функции $y_{0n} = \sqrt{2}\psi_{2n+1}$, где ψ_k – волновые функции одномерного осциллятора (ψ_{2n} не удовлетворяют граничному условию при $x = 0$; введение множителя $\sqrt{2}$ связано с тем, что отбрасывается полюс $x < 0$). В рассматриваемом случае

$$y_0 = cx \exp(-x^2/2), \quad c^2 = 4/\sqrt{\pi} \quad (m = \hbar = \omega = 1).$$

Найдем $y^{(1)}$ по формуле (12) и по теории Рэлея–Шредингера.

Так как

$$\langle y_0 | x^3 | y_n \rangle = 2 \int_0^\infty x^3 \psi_1(x) \psi_{2n+1}(x) dx = \frac{4}{\sqrt{\pi}} (-1)^n \frac{(2n+1)!}{2^n n!^2} \neq 0$$

(из-за нечетности возмущения), то по теории Рэлея–Шредингера получаем

$$y^{(1)} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n+1)!}{2^n n! 2^n} H_{2n+1}(x), \quad (16)$$

где $H_k(x)$ – полиномы Эрмита.

При использовании формулы (12) имеем: $E^{(1)} = c^2$,

$$\begin{aligned} F &= 2c^2 \int_0^x dt t^2 e^{-t^2} (t^3 - c^2) = 2c^2 (J_5 - c^2 J_2), \\ F_1 &= 2 \int_0^x \frac{dt}{t^2} e^{t^2} (J_5(t) - c^2 J_2(t)), \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$J_n(x) = \int_0^x t^n e^{-t^2} dt = \frac{n-1}{2} J_{n-2}(x) - \frac{1}{2} x^{n-1} e^{-x^2},$$

так что

$$\begin{aligned} J_0(x) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(x), \quad J_1(x) = \frac{1}{2} (1 - e^{-x^2}), \\ J_2(x) &= \frac{1}{2} (J_0 - x e^{-x^2}), \quad J_5(x) = 2J_1 - x^2 \left(1 + \frac{1}{2} x^2 \right) e^{-x^2}. \end{aligned}$$

Соответственно формула (17) после интегрирования по частям дает

$$F_1(x) = 4 \int_0^x e^{t^2} \operatorname{erfc}(t) dt + \frac{2}{x} \left(1 - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} - e^{x^2} \operatorname{erfc}(x) \right) - 2x - \frac{x^3}{3},$$

откуда

$$y^{(1)} = \frac{2x}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2} [F_1(x) - \overline{F}_1], \quad \overline{F}_1 = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} F_1(x) dx. \quad (18)$$

Сравнение с (16) дает аналитическое выражение для записанного там ряда.

Список литературы

- [1] В. С. Поликанов. ЖЭТФ. 1967. Т. 52. № 5. С. 1326.
- [2] А. Мессиа. Квантовая механика. Гл. XVI. М.: Наука, 1979.
- [3] М. В. Федорюк. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Гл. 7. М.: Наука, 1985.

Поступила в редакцию 25.III.1996 г.,
после доработки 10.I.1997 г.

Yu. I. Polyakov

PERTURBATION THEORY FOR PARTICLE IN ONE-DIMENSIONAL, CENTRAL- OR AXIAL-SYMMETRIC FIELDS

Perturbation theory for which all corrections to a nonperturbed state are defined by its wave function is obtained. A new applicability condition for this theory is formulated. By considering a simple example comparison with the Rayleigh–Schrödinger perturbation theory giving an analytical expression for the corresponding series is performed.