Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. А. Приходько, Информационная энтропия релятивистской модели Козлова–Никишина, *ТМФ*, 2006, том 148, номер 3, 444–458

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2326>

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: 52.23.180.231

26 апреля 2023 г., 16:42:57

© 2006 г.

М. А. Приходько*

ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭНТРОПИЯ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МОДЕЛИ КОЗЛОВА–НИКИШИНА

Вычислены волновые функции в импульсном представлении для связанных состояний релятивистской модели Козлова–Никишина. Исследовано асимптотическое поведение энтропии в координатном и импульсном представлениях при различных предельных переходах.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, волновая функция, координатное и импульсное представления, связанное состояние, информационная энтропия, асимптотика, релятивистский атом водорода.

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. В работе [1] Козлов и Никишин предложили следующую релятивистскую квантовую модель.

Конфигурационное пространство системы – четырехмерное пространство Минковского $\{s = (ct, x, y, z)\}$ с индефинитной метрикой

$$s^2 = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2.$$

Здесь c – скорость света, x, y, z – пространственные координаты одной бесспиновой частицы относительно другой бесспиновой частицы (ядра), t – рассогласование собственных времен частиц. Для того чтобы они могли взаимодействовать, рассогласование времен должно быть “достаточно мало”. Формально это условие сводится к тому, что точка s принадлежит пространственноподобному конусу

$$\mathcal{K} = \{s: s^2 < 0\}.$$

Таким образом, состояние квантовой системы описывает волновая функция $\Phi: \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{C}$, удовлетворяющая лоренц-инвариантному уравнению Шредингера

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

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: spex19@mail.ru

где

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

– оператор Даламбера, т. е. кинетическая энергия, U – потенциальная энергия, E – полная энергия (не включающая в себя внутреннюю энергию $m_0 c^2$). Здесь $\hbar$ – постоянная Планка, m_0 – масса. Полагаем, что взаимодействие частиц описывается по кулоновскому закону

$$U = -\frac{\varkappa}{\rho}, \quad \rho > 0,$$

где $\rho^2 = -s^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 > 0$, а $\varkappa = Ze_0^2$ – постоянная взаимодействия, Ze_0 – противоположный по знаку e_0 заряд ядра. В дальнейшем пользуемся системой единиц $\hbar = e_0 = m_0 = 1$, также полагаем $Z = 1$, $c = 1$.

Ищутся связные состояния квантовой системы, т. е. решения уравнения (1), интегрируемые с квадратом: $\Phi \in L^2(\mathcal{K})$. Для волновых функций, нормированных условием

$$\int_{\mathcal{K}} |\Phi|^2 d\mu = 1, \quad d\mu = dx dy dz dt,$$

величина $|\Phi|^2$ будет плотностью распределения вероятности обнаружения электрона в данной точке пространственноподобного конуса.

В работе [1] были вычислены энергетические уровни E_n всех связных состояний и найдены соответствующие им собственные подпространства волновых функций.

1.2. Информационной характеристикой вероятностной меры $|\Phi|^2 d\mu$ служит энтропия Больцмана–Шеннона

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

Информационная энтропия различных физических систем изучалась в работах [2]. В настоящей работе мы решим эту задачу для модели Козлова–Никишина.

При изучении физических систем энтропия волновых функций вычисляется как в координатном, так и в импульсном представлениях. Переход к сопряженному пространству импульсов осуществляет преобразование Фурье

$$\Phi^*(s^*) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^4 \int_{\mathcal{K}} \Phi(s) e^{-iss^*} d\mu(s), \quad ss^* = tp_t - xp_x - yp_y - zp_z. \quad (2)$$

Важной характеристикой является суммарная энтропия, для которой справедлив принцип неопределенности [3]:

$$S_\Phi + S_{\Phi^*} \geq 4(1 + \ln \pi).$$

В дополнение к работе [1] мы вычислим волновые функции связных состояний в импульсном представлении.

Цель нашей работы состоит в изучении асимптотического поведения суммарной энтропии в модели Козлова–Никишина при различных предельных переходах.

2. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ СВЯЗНЫХ СОСТОЯНИЙ В КООРДИНАТНОМ И ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ

2.1. В работе [1] было показано, что уровни энергии связанных состояний вычисляются по формуле Бора

$$E_n = -\frac{1}{n^2}.$$

Соответствующие волновые функции были найдены методом разделения переменных в псевдосферических координатах.

В уравнении (1) произведем замену переменных, переходя к псевдосферическим координатам:

$$\begin{aligned} t &= \rho \operatorname{sh} \psi, & 0 < \rho < +\infty, \\ z &= \rho \operatorname{ch} \psi \cos \theta, & -\infty < \psi < +\infty, \\ y &= \rho \operatorname{ch} \psi \sin \theta \cos \varphi, & 0 \leq \theta \leq \pi, \\ x &= \rho \operatorname{ch} \psi \sin \theta \sin \varphi, & -\infty < \varphi < +\infty \pmod{2\pi}, \end{aligned} \quad (3)$$

элемент объема в которых равен

$$d\mu = \rho^3 \operatorname{ch}^2 \psi \sin \theta d\rho d\psi d\theta d\varphi.$$

Волновые функции зависят от набора четырех квантовых чисел

$$\Phi_{n,\nu,l,m} = \tilde{A}_{n,\nu}(\rho) \tilde{T}_{\nu,l}(\psi) \tilde{Y}_{l,m}(\theta, \varphi),$$

где n – главное квантовое число,

$$\nu = n - \frac{1}{2}, n - \frac{3}{2}, \dots, \quad \nu > 0,$$

– квантовое число, связанное с временной координатой,

$$l = \nu, \nu + 1, \dots \quad (4)$$

– орбитальное квантовое число,

$$m = -l, -l + 1, \dots, l$$

– магнитное квантовое число.

Радиальная составляющая выражается через многочлен Лагерра:

$$\tilde{A}_{n,\nu}(\rho) = \frac{C_A}{\rho^{3/2}} A_{n,\nu}(\rho), \quad A_{n,\nu}(\rho) = \rho^{\nu+1/2} e^{-\rho/n} L_k^{(2\nu)}\left(\frac{2\rho}{n}\right), \quad (5)$$

где $k = n - \nu - 1/2 = 0, 1, 2, \dots$

Временная составляющая выражается через собственные функции потенциала Пешля–Теллера [4]:

$$\frac{d^2}{d\psi^2} T + \frac{l(l+1)}{\operatorname{ch}^2 \psi} T = \nu^2 T,$$

а именно

$$\tilde{T}_{\nu,l}(\psi) = \frac{C_T}{\operatorname{ch} \psi} T_{\nu,l}(\psi),$$

где

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

и $(p)_k = p(p+1) \dots (p+k-1)$ – символ Похгаммера.

Угловая составляющая – это сферическая функция

$$\tilde{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) = \tilde{\Theta}_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}, \quad \tilde{\Theta}_{l,m}(\theta) = C_Y \sin^{|m|} \theta C_{l-|m|}^{|m|+1/2}(\cos \theta),$$

где $C_{l-|m|}^{|m|+1/2}$ – многочлен Гегенбауэра.

Здесь C_A , C_T , C_Y – положительные нормировочные постоянные такие, что

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |C_A A_{n,\nu}(\rho)|^2 d\rho &= 1, & \int_{-\infty}^\infty |C_T T_{\nu,l}(\psi)|^2 d\psi &= 1, \\ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\tilde{Y}_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi &= 1. \end{aligned}$$

В работе [1] были выделены два случая – периодических и антипериодических по координате φ решений. В первом случае квантовое число m – целое, а главное квантовое число n принимает значения $3/2, 5/2, \dots$.

Во втором случае m – полуцелое и $n = 1, 2, 3, \dots$, что в точности соответствует классической формуле Бора. Антипериодические решения также имеют физический смысл. В настоящей работе мы будем рассматривать именно этот случай.

Отметим, что появление нового квантового числа ν и необходимость введения антипериодических решений не являются следствием релятивистской теории, а обусловлены лишь размерностью конфигурационного пространства. С другой стороны, как следует из формулы (4), энергетические уровни релятивистского атома имеют бесконечное вырождение. Это следствие индефинитности метрики. Квантовое число ν , как и числа l и m , связано с оператором момента. В индефинитной метрике проекция момента l больше полного момента ν .

2.2. Пусть Φ – произвольная волновая функция вида $\Phi = \tilde{A}(\rho) \tilde{T}(\psi) \tilde{\Theta}(\theta) e^{im\varphi}$. В пространстве импульсов также перейдем к псевдосферическим координатам p , ψ' , θ' , φ' . Тогда в соответствии с формулой (2) волновая функция в импульсном представлении имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi^* &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^4 \int_0^\infty \tilde{A}(\rho) \rho^3 d\rho \int_{-\infty}^\infty \tilde{T}(\psi) e^{-i\rho p \operatorname{sh} \psi \operatorname{sh} \psi'} \operatorname{ch}^2 \psi d\psi \times \\ &\quad \times \int_0^\pi \tilde{\Theta}(\theta) e^{i\rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi' \cos \theta \cos \theta'} \sin \theta \mathcal{J}_m(\rho, \psi, \theta, p, \psi', \theta', \varphi') d\theta, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\mathcal{J}_m(\rho, \psi, \theta, p, \psi', \theta', \varphi') = \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{i\rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi' \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')} d\varphi.$$

Если m – целое число, то по формуле Бесселя [5] последний интеграл равен

$$\mathcal{J}_m = 2\pi e^{im\varphi'} e^{m\pi i/2} J_m(\rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi' \sin \theta \sin \theta'), \quad (7)$$

где J_m – функция Бесселя первого рода.

Если m – полуцелое число, то мы не можем использовать интеграл (2) для перехода к импульсному представлению, поскольку функция Φ становится многозначной. В этом случае определим преобразование $\Phi \rightarrow \Phi^*$ интегральным оператором (6) с ядром (7).

Вычислим интеграл (6) для $\Phi = \Phi_{n,\nu,l,m}$, где без ограничения общности $m > 0$. Обозначим $z = \rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi'$ и рассмотрим интеграл

$$\int_0^\pi e^{iz \cos \theta \cos \theta'} J_m(z \sin \theta \sin \theta') C_{l-m}^{m+1/2}(\cos \theta) (\sin \theta)^{m+1} d\theta.$$

Это интеграл Гегенбауэра [6], равный

$$\sqrt{\frac{2\pi}{z}} i^{l-m} (\sin \theta')^m C_{l-m}^{m+1/2}(\cos \theta') J_{l+1/2}(z).$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \Phi^* &= i^l \tilde{Y}_{l,m}(\theta', \varphi') \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \tilde{A}_{n,\nu}(\rho) \rho^3 d\rho \times \\ &\times \int_{-\infty}^\infty \tilde{T}_{\nu,l}(\psi) e^{-i\rho p \operatorname{sh} \psi \operatorname{sh} \psi'} \frac{J_{l+1/2}(\rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi')}{\sqrt{\rho p \operatorname{ch} \psi \operatorname{ch} \psi'}} \operatorname{ch}^2 \psi d\psi. \end{aligned} \quad (8)$$

2.3. Полученный интеграл от функции $\tilde{T}_{\nu,l}(\psi)$ является обобщением интеграла Сонина–Гегенбауэра.

ЛЕММА. *Справедлива формула*

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{T_{\nu,l}(\psi)}{\operatorname{ch} \psi} \frac{J_{l+1/2}(a \operatorname{ch} \psi)}{\sqrt{a \operatorname{ch} \psi}} e^{-ib \operatorname{sh} \psi} \operatorname{ch}^2 \psi d\psi = (-1)^{[(l-\nu)/2]} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\operatorname{ch} \psi'}} T_{\nu,l}(\psi') \frac{J_\nu(\rho p)}{\sqrt{\rho p}},$$

где

$$a = \rho p \operatorname{ch} \psi', \quad b = \rho p \operatorname{sh} \psi'.$$

Мы приведем комбинаторное доказательство леммы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для функции Бесселя произвольного порядка M верны два следующих представления:

$$\begin{aligned} J_M(x) &= \sum_{\alpha=0}^k \binom{k}{\alpha} (-1)^\alpha \frac{\prod_{m=\alpha+1}^k 2(M-m)}{x^{k-\alpha}} J_{M-k-\alpha}(x), \\ J_M(x) &= \sum_{\alpha=0}^k \binom{k}{\alpha} (-1)^\alpha \frac{\prod_{m=\alpha+1}^k 2(M+m)}{x^{k-\alpha}} J_{M+k+\alpha}(x), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\binom{k}{\alpha}$ – биномиальные коэффициенты, а пустое произведение по определению полагаем равным 1.

При этом первое разложение в виде суммы $k + 1$ функций Бесселя с меньшими индексами будем называть *разложением с понижением индекса порядка k* , а второе разложение в виде суммы $k + 1$ функций Бесселя с большими индексами – *разложением с повышением индекса порядка k* .

Формулы (9) легко доказываются методом математической индукции, последовательным повторением известного рекуррентного соотношения для функций Бесселя

$$J_M(x) = \frac{2(M-1)}{x} J_{M-1}(x) - J_{M-2}(x). \quad (10)$$

Представим функцию $T_{\nu,l}(\psi)$ в виде

$$T_{\nu,l}(\psi) = \frac{\hat{C}_T}{\text{ch}^\nu \psi} C_{l-\nu}^{\nu+1/2} \left(\frac{\text{sh } \psi}{\text{ch } \psi} \right),$$

где $C_{l-\nu}^{\nu+1/2}$ – многочлен Гегенбауэра.

В явном виде его можно представить как

$$C_{l-\nu}^{\nu+1/2} \left(\frac{\text{sh } \psi}{\text{ch } \psi} \right) = \sum_{j=0}^{[(l-\nu)/2]} a_j \left(\frac{\text{sh } \psi}{\text{ch } \psi} \right)^{l-\nu-2j},$$

где

$$a_j = \frac{(-1)^j (\nu + 1/2)_{l-\nu-j}}{j!(l-\nu-2j)!} 2^{l-\nu-2j}.$$

Введем обозначения $k = l - \nu$, $q = [(l - \nu)/2]$. Тогда

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_{\nu,l}(\psi)}{\text{ch } \psi} \frac{J_{l+1/2}(a \text{ch } \psi)}{\sqrt{\text{ch } \psi}} \text{ch}^2 \psi e^{-ib \text{sh } \psi} d\psi = \\ = C_T \int_{-\infty}^{\infty} (\text{ch } \psi)^{-\nu+1/2} \sum_{j=0}^q a_j (\text{th } \psi)^{k-2j} J_{l+1/2}(a \text{ch } \psi) \cos(b \text{sh } \psi) d\psi. \end{aligned}$$

Для простоты проведем доказательство в случае $k = 2q$, т. е. когда все степени будут четными.

Введем для удобства вычислений следующие обозначения:

$$m = \nu + \frac{1}{2}, \quad M = l + \frac{1}{2} = \nu + 2q + \frac{1}{2} = m + 2q,$$

а также $z = \text{sh } \psi$.

Заметим, что

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

Воспользуемся рекуррентным соотношением (9) для функций Бесселя. Тогда интеграл можно представить в виде суммы:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_{\nu,l}(\psi)}{\operatorname{ch} \psi} \frac{J_{l+1/2}(a \operatorname{ch} \psi)}{\sqrt{\operatorname{ch} \psi}} \operatorname{ch}^2 \psi e^{-ib \operatorname{sh} \psi} d\psi = \\ = C_T \sqrt{2\pi b} \sum_{j=0}^q a_j \sum_{\alpha=0}^j \sum_{\beta=0}^{q-j} \int_0^{\infty} B_{\alpha}^j D_{\beta}^{q-j} \times \\ \times (z^2 + 1)^{-(M-2j)/2} z^{2q-2j+1/2} J_{M-j-\alpha}(a\sqrt{z^2+1}) J_{-1/2+q-j+\beta}(bz) dz = \\ = C_T \sqrt{2\pi} \frac{(p\rho)^{\nu}}{a^{\nu+1/2}} \sum_{j=0}^q a_j \sum_{\alpha=0}^j \sum_{\beta=0}^{q-j} \tilde{B}_{\alpha}^j \tilde{D}_{\beta}^{q-j} \frac{b^{2\beta}}{a^{2q-2\alpha}} (p\rho)^{q-(\alpha+\beta)} J_{\nu+q-(\alpha+\beta)}(p\rho), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\alpha}^j &= \binom{j}{\alpha} (-1)^{\alpha} \prod_{s=\alpha+1}^j 2(M-s), \\ \tilde{D}_{\beta}^{q-j} &= \binom{q-j}{\beta} (-1)^{\beta} \prod_{s=\beta+1}^k 2\left(-\frac{1}{2} + s\right). \end{aligned}$$

Как видно из полученной формулы, интеграл представляет собой сумму функций Бесселя с индексами от ν до $\nu + q$. Зафиксируем произвольные значения α и β и рассмотрим коэффициент при функции Бесселя $J_{\nu+q-(\alpha+\beta)}$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=\alpha}^{q-\beta} a_j \tilde{B}_{\alpha}^j \tilde{D}_{\beta}^{q-j} &= (-1)^{\alpha+\beta} \sum_{j=\alpha}^{q-\beta} a_j \binom{j}{\alpha} \binom{q-j}{\beta} \prod_{s=\alpha+1}^j 2\left(l + \frac{1}{2} - s\right) \prod_{s=\beta+1}^{q-j} 2\left(-\frac{1}{2} + s\right) = \\ &= (-1)^{\alpha+\beta} \frac{(2l-2\alpha-1)!!}{2^q(2\nu-1)!!(2\beta-1)!!} \sum_{j=\alpha}^{q-\beta} \frac{(-1)^j \binom{j}{\alpha} \binom{q-j}{\beta}}{j!(q-j)!}. \end{aligned}$$

Полученная сумма равна нулю для любых фиксированных значений α и β таких, что $\alpha + \beta < q$; это следует из формулы бинома Ньютона.

Осталось рассмотреть случай $\alpha + \beta = q$, когда рассматриваемая сумма очевидно равна

$$\sum_{j=\alpha}^{q-\beta} a_j \tilde{B}_{\alpha}^j \tilde{D}_{\beta}^{q-j} = (-1)^q a_{\alpha}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T_{\nu,l}(\psi)}{\operatorname{ch} \psi} \frac{J_{l+1/2}(a \operatorname{ch} \psi)}{\sqrt{\operatorname{ch} \psi}} \operatorname{ch}^2 \psi e^{-ib \operatorname{sh} \psi} d\psi = \\ = C_T \sqrt{2\pi} \frac{(p\rho)^{\nu}}{a^{\nu+1/2}} \sum_{j=0}^q a_j (-1)^q \frac{b^{2q-2j}}{a^{2q-2j}} J_{\nu}(p\rho) = \\ = (-1)^q \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\operatorname{ch} \psi'}} T_{\nu,l}(\psi') \frac{J_{\nu}(p\rho)}{\sqrt{\rho p}}. \end{aligned}$$

Доказательство леммы в случае $l - \nu = 2q + 1$ проводится аналогично. Лемма доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Выше мы привели вычисление волновой функции Φ^* в пространственноподобном конусе $\mathcal{K}^*$ сопряженного пространства импульсов. Во времениподобном конусе функция Φ^* тождественно равна нулю. Действительно, в этом конусе вводятся свои псевдосферические координаты, которые отличаются от (3) перестановкой $\text{sh } \psi'$ и $\text{ch } \psi'$. Тогда имеем $a < b$, и разрывный интеграл Сони́на–Гегенбауэра тождественно равен нулю.

Из формулы (8) и леммы следует

ТЕОРЕМА 1. *Волновые функции в импульсном представлении имеют вид*

$$\Phi_{n,\nu,l,m}^* = \pm i^l \tilde{A}_{n,\nu}^*(p) \tilde{T}_{\nu,l}(\psi') \tilde{Y}_{l,m}(\theta', \varphi'),$$

где

$$\tilde{A}_{n,\nu}^*(p) = \int_0^\infty \tilde{A}_{n,\nu}(\rho) \frac{J_\nu(\rho p)}{\rho p} \rho^3 d\rho. \quad (11)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Теорема 1 справедлива для любого центрально-симметричного поля. При этом только радиальная функция $\tilde{A}_{n,\nu}(\rho)$ зависит от вида потенциала $U(\rho)$.

2.4. Для функций (5) из формулы (11) легко получить равномерную асимптотику волновых функций $\tilde{A}_{n,\nu}^*(p)$ при $n \rightarrow \infty$. Эта задача была решена нами в работе [7] для двумерной модели Козлова–Никишина, но полученные там результаты по существу справедливы для любой размерности. А именно, справедливо следующее предложение.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *При $n \rightarrow \infty$ имеет место равномерная асимптотическая формула*

$$\tilde{A}_{n,\nu}^*(p) = (-1)^n \frac{8}{\sqrt{\pi}} n^2 \frac{\cos^5 \phi}{\sin^{3/2} 2\phi} \cos\left(2n\phi + \frac{\nu\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \left[1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right], \quad (12)$$

где

$$\phi = \arctg(np).$$

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

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. *В основном состоянии*

$$\begin{aligned} \Phi_V &= \frac{2e^{-\rho}}{\sqrt{\rho}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{ch}^{3/2} \psi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\sin \theta} \frac{e^{\pm i\varphi/2}}{\sqrt{2\pi}}, \\ \Phi_V^* &= \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{p}(1+p^2)^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{ch}^{3/2} \psi'} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\sin \theta'} \frac{e^{\pm i\varphi'/2}}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned}$$

3. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ЭНТРОПИИ

3.1. Аналогично работам, в которых изучался нерелятивистский атом, нас прежде всего будут интересовать следующие предельные переходы.

1. Квантовые числа m, l, ν фиксированы, а $n \rightarrow \infty$, что соответствует ультракоротковолновой асимптотике сильно возбужденного атома. В этом случае задача сводится к изучению только радиальных волновых функций.

2. Фиксировано m , а $l \rightarrow \infty$, т. е. растет глубина потенциальной ямы Пешля–Теллера. В этой ситуации наиболее интересными являются следующие два крайних случая:

2а) пусть $\nu = 1/2$, что соответствует максимальной осцилляции временных волновых функций; тогда нет необходимости рассматривать радиальные волновые функции, а нужно вычислить суммарную энтропию временной и угловых составляющих;

2б) пусть $\nu = l$, что соответствует основному состоянию потенциала Пешля–Теллера; в этом случае радиальные волновые функции своеобразно зависят от большого параметра ν ; их асимптотическое поведение мы исследуем при $n = \nu + 1/2$, т. е. для наименьшего возможного уровня энергии.

В обоих случаях мы без ограничения общности считаем, что m фиксировано, поскольку m входит только в сферические функции, а их поведение в различных предельных переходах хорошо изучено.

Случай 1 был нами подробно исследован в работе [7] для двумерного атома, но результаты легко распространяются на случай любой размерности. А именно, из формулы Планшереля–Ротаха [7] для многочленов Лагерра и асимптотической формулы (12) следует

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3. *Имеют место следующие асимптотические выражения для энтропии радиальной составляющей волновой функции:*

$$S_{\tilde{A}_{n,\nu}} = 8 \ln n - 2 \ln 2 + \ln \pi + 1 + o(1), \quad n \rightarrow \infty,$$

$$S_{\tilde{A}_{n,\nu}^*} = -4 \ln n + 3 \ln 2 + \ln \pi - 6 + o(1), \quad n \rightarrow \infty.$$

3.2. Вычислим энтропию волновой функции $\tilde{T}$ в случае 2а, т. е. при $\nu = 1/2$, $l \rightarrow \infty$.

Функция $T_{\nu,l}$ имеет вид

$$T_{1/2,l} = \frac{2\sqrt{\operatorname{ch} \psi}}{2l+1} \sin \left((2l+1) \arcsin \frac{1}{\sqrt{1+e^{2\psi}}} \right),$$

а функция $\tilde{T}$, напомним, вычисляется по формуле

$$\tilde{T} = \frac{C_T}{\operatorname{ch} \psi} T_{1/2,l}.$$

Как было доказано в п. 2.3, верно

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4. *Функцию $\tilde{T}$ можно выразить через многочлены Гегенбаузера:*

$$\tilde{T} = \frac{\tilde{C}_T}{\operatorname{ch}^{\nu+1} \psi} C_{l-\nu}^{\nu+1/2}(\operatorname{th} \psi).$$

Данное выражение в случае $\nu = 1/2$ упрощается до вида

$$\tilde{T} = \frac{\tilde{C}_T}{\operatorname{ch}^{3/2} \psi} C_{l-1/2}^1(\operatorname{th} \psi) = \frac{\tilde{C}_T}{\operatorname{ch}^{3/2} \psi} U_N(\operatorname{th} \psi),$$

где U_N – многочлены Чебышева второго рода, а именно

$$U_N(\cos z) = \frac{\sin(N+1)z}{\sin z}, \quad N = l - \frac{1}{2}.$$

Вычислим теперь нормировочную константу $\tilde{C}_T$ из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi = 1.$$

Для этого сделаем замену переменных

$$t = \operatorname{th} \psi, \quad \theta = \arccos t,$$

тогда

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \tilde{C}_T^2 U_N^2(\cos \theta) \, d\theta.$$

Перейдем теперь к интегрированию по окружности $z = e^{i\theta}$, тогда

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi = \frac{\tilde{C}_T^2}{2i} \int_{|z|=1} \frac{(z^{2N+2} - 1)^2}{(z^2 - 1)^2} \frac{dz}{z^{2N+1}}.$$

Данный интеграл легко вычисляется с помощью теоремы о вычетах:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^2 \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi = \frac{\tilde{C}_T^2}{2i} 2\pi i \operatorname{res}_{z=0} \left\{ \frac{(z^{2N+2} - 1)^2}{(z^2 - 1)^2} \frac{1}{z^{2N+1}} \right\} = \tilde{C}_T^2 \pi(N+1),$$

откуда легко получить искомую нормировочную константу

$$\tilde{C}_T = \frac{1}{\sqrt{\pi(N+1)}}.$$

Теперь вычислим энтропию. Положим

$$S_T = - \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left\{ |\tilde{T}(\psi)|^2 \right\} |\tilde{T}(\psi)|^2 \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi.$$

После проведения аналогичных замен получим

$$S_T = - \int_0^\pi \ln \left\{ \frac{1}{\pi(N+1)} \sin^3 \theta \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} \right\} \frac{1}{\pi(N+1)} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta,$$

откуда

$$\begin{aligned} S_T &= \ln(\pi(N+1)) - \frac{1}{\pi(N+1)} \int_0^\pi \ln \left\{ \sin \theta \sin^2(N+1)\theta \right\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta = \\ &= \ln(\pi(N+1)) - \frac{1}{\pi(N+1)} \tilde{I}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\tilde{I} &= \int_0^\pi \ln \{|\sin \theta \sin^2(N+1)\theta|\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta = \\ &= \int_0^\pi \ln \{|\sin \theta|\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta + 2 \int_0^\pi \ln \{|\sin(N+1)\theta|\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta.\end{aligned}$$

Вычислим первый интеграл, перейдя к интегрированию по окружности $|z| = 1$, где $z = e^{i\theta}$:

$$\begin{aligned}\int_0^\pi \ln \{|\sin \theta|\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta &= \frac{1}{2} \int_{|z|=1} \ln \left\{ \left| \frac{z - 1/z}{2i} \right| \right\} \frac{[(z^{N+1} - 1/z^{N+1})/(2i)]^2 dz}{[(z - 1/z)/(2i)]^2 iz} = \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \frac{1}{i} \int_{|z|=1} \ln \left\{ \frac{1 - z^2}{2} \right\} \left(\frac{z^{2N+2} - 1}{z^2 - 1} \right)^2 \frac{dz}{z^{2N+1}} = \\ &= \operatorname{Re} \pi \operatorname{res}_{z=0} \left\{ \ln \left(\frac{1 - z^2}{2} \right) \left(\frac{z^{2N+2} - 1}{z^2 - 1} \right)^2 \frac{1}{z^{2N+1}} \right\} = \\ &= \pi \left\{ \ln \left(\frac{1 - z^2}{2} \right) \left(\frac{z^{2N+2} - 1}{z^2 - 1} \right)^2 \right\}_{z^{2N}} = \\ &= \pi \left\{ \left(\ln \frac{1}{2} - q - \frac{q^2}{2} - \dots \right) (1 + q + \dots + q^N)^2 \right\}_{q^N} = \\ &= \pi \left((N+1) \ln \frac{1}{2} - \left(N + \frac{N-1}{2} + \dots + \frac{1}{N} \right) \right),\end{aligned}$$

где $q = z^2$, а через $\{\dots\}_{q^N}$ мы обозначаем коэффициент при q^N ряда, стоящего в скобках.

Аналогично легко видеть, что

$$\int_0^\pi \ln \{|\sin(N+1)\theta|\} \frac{\sin^2(N+1)\theta}{\sin^2 \theta} d\theta = \pi(N+1) \ln \frac{1}{2}.$$

Таким образом, доказано

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 5. *Имеет место следующее выражение для энтропии временной составляющей волновой функции в случае $\nu = 1/2$, $l \rightarrow \infty$:*

$$\begin{aligned}S_T = S_{T^*} &= \ln(\pi(N+1)) + 3 \ln 2 + \frac{1}{N+1} \left(N + \frac{N-1}{2} + \dots + \frac{1}{N} \right) = \\ &= 2 \ln l + \ln \pi + 3 \ln 2 + \gamma - 1 + o(1),\end{aligned}$$

где γ – постоянная Эйлера.

3.3. Вычислим энтропию волновой функции $\tilde{T}$ в случае 2б, т. е. при $\nu = l$. Тогда временная составляющая будет иметь вид

$$\tilde{T} = \tilde{T}_{\nu, \nu} = \frac{C_T}{\operatorname{ch}^{\nu+1} \psi}.$$

Положим

$$N(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{T}|^{\tau} \operatorname{ch}^2 \psi \, d\psi.$$

Нормировочная константа C_T находится из условия $N(2) = 1$, а энтропия вычисляется по формуле

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

Легко видеть, что

$$N(\tau) = C_T^{\tau} B\left(\frac{(\nu+1)\tau-2}{2}, \frac{1}{2}\right),$$

где B – бета-функция, откуда находим

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

Следовательно,

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

где ψ – пси-функция (логарифмическая производная гамма-функции). Применяя формулу Стирлинга, получаем

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 6. *Имеет место следующая асимптотика энтропии временной составляющей волновой функции в случае $\nu = l \rightarrow \infty$:*

$$S_T = S_{T^*} = \frac{1}{2} \ln \frac{\pi e^2}{\nu} + o(1).$$

Вычислим энтропию радиальной составляющей:

$$\tilde{A} = \tilde{A}_{n,n-1/2} = C_A \rho^{n-3/2} e^{-\rho/n}.$$

Здесь $n = \nu + 1/2$, как оговаривалось ранее.

Положим

$$N(\tau) = \int_0^{\infty} |\tilde{A}|^{\tau} \rho^3 \, d\rho.$$

Имеем

$$N(\tau) = C_A^{\tau} \left(\frac{n}{\tau}\right)^{(n-3/2)\tau+4} \Gamma\left(\left(n - \frac{3}{2}\right)\tau + 4\right),$$

где Γ – гамма-функция, откуда находим

$$C_A^{-2} = \left(\frac{n}{2}\right)^{2n+1} \Gamma(2n+1)$$

и, далее,

$$S_A = \ln\left(\left(\frac{n}{2}\right)^{2n+1} \Gamma(2n+1)\right) - (2n-3) \ln \frac{n}{2} + (2n+1) - (2n-3)\psi(2n+1).$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 7. Асимптотически при $n = \nu + 1/2 \rightarrow \infty$

$$S_A = \frac{15}{2} \ln n + \frac{1}{2} \ln e\pi + o(1).$$

Вычислим энтропию радиальной волновой функции в импульсном представлении, для чего сначала найдем функцию $\tilde{A}_{n,\nu}^*$:

$$\tilde{A}_{n,n-1/2}^* = \int_0^\infty \tilde{A}_{n,n-1/2} \frac{J_\nu(p\rho)}{p\rho} \rho^3 d\rho.$$

Данный интеграл легко вычисляется [8]:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{n,n-1/2}^* &= \frac{C_A}{p\sqrt{p}} \int_0^\infty \rho^{\nu+1/2} e^{-\rho/n} J_\nu(p\rho) \sqrt{p\rho} d\rho = \\ &= C_A^* \frac{p^{n-3/2}}{(1+n^2p^2)^{n+1}}, \end{aligned}$$

где нормировочная константа

$$C_A^* = 2^{n+1} n^{n+1/2} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\sqrt{\pi}\Gamma(n+1/2)}}.$$

Положим

$$N(\tau) = \int_0^\infty |\tilde{A}_{n,n-1/2}^*|^\tau \rho^3 d\rho.$$

Имеем

$$N(\tau) = \left(\frac{C_A^*}{n^n}\right)^\tau \frac{1}{n^{4-3\tau/2}} \int_0^\infty z^{n\tau-3\tau/2+3} (1+z^2)^{-(n+1)\tau} dz,$$

где $z = n\rho$. Сделаем теперь еще одну замену $z = \operatorname{tg} \varphi$, тогда

$$N(\tau) = \left(\frac{C_A^*}{n^n}\right)^\tau \frac{1}{n^{4-3\tau/2}} \frac{1}{2} B\left(\frac{n\tau}{2} - \frac{3\tau}{4} + 2, \frac{n\tau}{2} + \frac{7\tau}{4} - 2\right),$$

где B – бета-функция. И, далее,

$$\begin{aligned} S_{A^*} &= -1 - \frac{6}{2n+1} - 3 \ln n + \frac{\ln \pi}{2} - 2 \ln \left(2^{n+1} \sqrt{n} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+1/2)}} \right) - \\ &\quad - 2(n+1) \left(\psi\left(n + \frac{1}{2}\right) - \psi(2n+2) \right). \end{aligned}$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 8. Асимптотически при $n = \nu + 1/2 \rightarrow \infty$

$$S_{A^*} = -\frac{7}{2} \ln n - \frac{\ln \pi}{2} + o(1).$$

Из предложений 3–8 следует

ТЕОРЕМА 2. Для асимптотики волновой функции в координатном и импульсном представлениях верны следующие выражения.

1. При $n \rightarrow \infty$, $l = \nu = m = 1/2$

$$S_{\Phi} = 8 \ln n + 2 \ln 2 + 4 \ln \pi + \frac{1}{2} + o(1),$$

$$S_{\Phi^*} = -4 \ln n + 7 \ln 2 + 4 \ln \pi - \frac{13}{2} + o(1).$$

2а. При $l \rightarrow \infty$, $\nu = m = 1/2$, $n = 1$

$$S_{\Phi} = 2 \ln l + 3 \ln 2 + 2 \ln \pi + \frac{5}{2} + o(1),$$

$$S_{\Phi^*} = 2 \ln l + 9 \ln 2 + 3 \ln \pi + \gamma - \frac{17}{3} + o(1).$$

2б. При $\nu = l \rightarrow \infty$, $n = \nu + 1/2$

$$S_{\Phi} = 7 \ln l + 3 \ln 2 + 2 \ln \pi + \frac{1}{2} + o(1),$$

$$S_{\Phi^*} = -4 \ln l + 3 \ln 2 + \ln \pi + o(1).$$

4. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

В заключение обсудим энтропийные соотношения неопределенности [3]

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

где $D + 1$ – размерность пространства-времени.

Рассмотрим сперва это условие для вакуумных состояний, т. е. в случае фиксированных значений квантовых чисел: $n = 1$, $l = \nu = m = 1/2$. Для этого вычислим точные значения энтропий:

$$S_{\Phi_V} = 4 - \gamma + \ln 2 + 3 \ln \pi,$$

$$S_{\Phi_V^*} = 4 \ln \pi + 7 \ln 2 - \frac{25}{6}.$$

Таким образом,

$$S_{\Phi_V} + S_{\Phi_V^*} = 7 \ln \pi + 8 \ln 2 - \frac{1}{6} - \gamma \approx 12.4811.$$

Очевидно, что

$$S_{\Phi_V} + S_{\Phi_V^*} \geq 4(1 + \ln \pi) \approx 8.57892.$$

Рассмотрим теперь асимптотическое поведение суммарной энтропии при различных предельных переходах.

Пусть $n \rightarrow \infty$, но фиксированы все остальные квантовые числа. Тогда

$$S_{\Phi} + S_{\Phi^*} \sim 4 \ln n.$$

Осталось рассмотреть случай $l \rightarrow \infty$. Как уже говорилось, здесь возможны два варианта. Во-первых, квантовое число $\nu = 1/2$. Тогда

$$S_{\Phi} + S_{\Phi^*} \sim 4 \ln l.$$

Если же $\nu = l \rightarrow \infty$ и $n = \nu + 1/2$, то

$$S_{\Phi} + S_{\Phi^*} \sim 3 \ln l.$$

Список литературы

- [1] В. В. Козлов, Е. М. Никишин, *Вестн. Моск. Univ. Сер. 1. Матем. Мех.*, 1986, № 5, 11–20.
- [2] J. S. Dehesa, R. J. Yanez, A. I. Aptekarev, V. Buyarov, *J. Math. Phys.*, **39**:6 (1998), 3050–3060; R. J. Yanez, W. Van Assche, J. S. Dehesa, *Phys. Rev. A*, **50** (1994), 3065–3079; J. S. Dehesa, A. Martinez-Finkelshtein, V. N. Sorokin, *Phys. Rev. A*, **66** (2002), 1–7; *J. Math. Phys.*, **44**:1 (2003), 36–47.
- [3] I. Białyński-Birula, J. Mycielski, *Commun. Math. Phys.*, **44** (1975), 129–132.
- [4] З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, М., 1974.
- [5] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, М., 1965.
- [6] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Camb. Univ. Press, Cambridge, 1922.
- [7] М. А. Приходько, *Матем. заметки*, **78**:5 (2005), 727–744.
- [8] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Таблицы интегральных преобразований*, Наука, М., 1970.

Поступила в редакцию 16.11.2005,
после доработки 30.03.2006