Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Лобашев, Н. Н. Трунов, Интегральный квазиклассический метод расчета спектров центрально-симметричных задач, *ТМФ*, 2000, том 124, номер 3, 463–480

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf651>

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., 16:30:43

© 2000 г.

А. А. Лобашев*, Н. Н. Трунов†

ИНТЕГРАЛЬНЫЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА СПЕКТРОВ ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫХ ЗАДАЧ

Развит новый подход к квазиклассическим условиям квантования. Он основан на общих точных свойствах волновых уравнений и их спектров и не использует асимптотические разложения. Условия квантования для центрально-симметричных потенциалов зависят только от совокупности интегралов, включающих степени классического импульса. Значения уровней энергий, вычисленные с помощью этих условий, находятся в хорошем согласии с численными данными.

1. ВВЕДЕНИЕ

Отсутствие аналитических решений уравнения Шредингера для большинства потенциалов делает актуальным развитие приближенных методов для расчета спектров. Такие методы должны сочетать простоту и конструктивность с физической содержательностью. В первую очередь речь идет о центрально-симметричных потенциалах, имеющих широкое применение в физике атома, ядра, кваркония и т. д.

Важнейшим и наиболее универсальным из этих методов остается квазиклассический, который часто отождествляется с конкретной схемой реализации – ВКБ-представлением волновой функции в виде экспоненты с последующим асимптотическим разложением этой экспоненты по степеням малого параметра $\hbar$. При этом возникают фиктивные особенности в точках поворота, что заставляет дополнять метод шивкой с точными решениями. Кроме того, поскольку фактическим параметром является $i\hbar\nabla$, метод ухудшает аналитические свойства волновой функции, включая в следующих порядках многократные дифференцирования потенциала и предъявляя неоправданные требования к его гладкости. Это затрудняет оценки точности ведущего приближения, которым обычно и ограничиваются.

Между тем существует ряд точных результатов для спектров и решений волновых уравнений безотносительно к знанию аналитических решений. Сюда относятся возрас-

*Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д. И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: lobashev@friedman.usrlgu.spb.su

†Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д. И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: kukhar@onti.vniim.spb.su

тание энергии уровней по мере роста одного из значений орбитального или радиального квантового числа при сохранении другого, асимптотически точные оценки для чисел связанных состояний в задачах разной размерности с данным потенциалом, своеобразные соотношения симметрии решений волновых уравнений для пар степенных потенциалов и т. д. Вышеупомянутая процедура оставляет возможность сколь угодно большого отклонения приближенных результатов от этих свойств.

Мы же предлагаем положить требование выполнения этих точных свойств в основу построения приближенного условия квантования. Наличие многих “опорных точек”, к которым отнесем и совпадения с точными результатами для кулоновского и осцилляторного потенциалов, исключает значительные погрешности.

В данной статье применяется только главное приближение, игнорирующее градиенты потенциала; соответственно условие квантования включает интегрально зависящие от потенциала параметры — комбинации чисел состояний, отвечающие вышеуказанным условиям. При этом в рамках того же приближения по $\hbar$ появляются внутренние критерии точности, зависящей от количества этих параметров и оптимальности их выбора.

Для центрально-симметричных задач уже простейшие одно- или двухпараметрические условия квантования при правильном выборе значений параметров дают высокую точность определения порядка уровней и спектров. Например, для степенных потенциалов правильно указывается порядок расщепления уровней при сколь угодно малом отклонении от осцилляторного потенциала и в то же время единообразно получаются достаточно точные значения уровней для всех значений показателей вплоть до бесконечного, которому соответствует неаналитический потенциал — прямоугольная яма.

Ниже частично используется аналитический аппарат [1], которому даются независимое обоснование и оценка точности. В отличие от работы [1], где изучалось появление новых состояний (с нулевой энергией) при увеличении амплитуды потенциала, в дальнейшем в нашей статье внимание сосредоточено на полном спектре при фиксированном потенциале. Обсуждаются возможное развитие метода квантования и его применение в других задачах вычислительной математики.

Используется атомная система единиц, часто встречающиеся числа ν , λ принимают положительные полуцелые значения.

2. ПОЛУЧЕНИЕ ЛИНЕЙНОГО УСЛОВИЯ КВАНТОВАНИЯ

Покажем, что как общий вид квазиклассического условия квантования, так и его линейный по орбитальному квантовому числу вариант для центрально-симметричных потенциалов могут быть получены на основе следующих точных утверждений, известных или элементарно проверяемых.

2.1. Конкретизация общих выражений для асимптотических оценок числа N_p состояний [2, § XIII.15] на случай центрально-симметричных потенциалов $V(r) = bv(r)$ с одной классически доступной областью дает для числа состояний с энергиями, не превышающими E , значение

$$N_p(E, b|v) = \frac{M_p(E, b|v)}{2^{p-2}p^2\Gamma^2(\frac{p}{2})}, \quad (1)$$

где

$$M_p = \int \frac{dr}{r} [2r^2(E - V(r))]^{\frac{p}{2}}. \quad (2)$$

Здесь интегрирование идет между точками поворота, p – размерность задачи, аргументы в N_p , M_p (и далее в ϕ_p) часто опускаем. Очевидно, что N_p и M_p можно употреблять на равных основаниях, причем M_p определен и при нецелых значениях p .

Асимптотическое равенство

$$\lim_{N_p \rightarrow \infty} \frac{N_p}{\tilde{N}_p} = 1,$$

где $\tilde{N}_p$ – точное число состояний, фактически выполняется очень хорошо при малых N_p . Это, видимо, связано с тем, что исходные оценки справедливы при очень слабых условиях (отсутствие центральной симметрии и гладкости потенциала, наличие произвольного сочетания многих классически доступных и недоступных областей), причем метод получения оценок (вилка Дирихле–Неймана) не предполагает ВКБ-приближений. Мы же применяем оценки в благоприятном случае центрально-симметричного, гладкого потенциала с одной классически доступной областью и слабой (не сильнее кулоновской) сингулярностью в центре.

2.2. Уравнение Шредингера для широкого класса степенных потенциалов

$$V(r) = bv(r), \quad v(r) = r^\mu, \quad (3)$$

с $-2 < \mu < \infty$, $b\mu > 0$, инвариантно относительно преобразования входящих в него параметров ($\lambda = l + 1/2$):

$$\begin{pmatrix} E \\ b \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E' = -\sigma^2 b \\ b' = -\sigma^2 E \\ \lambda' = \sigma \lambda \\ \mu' \end{pmatrix}, \quad (2 + \mu)(2 + \mu') = 4, \quad \sigma \equiv \left| \frac{\mu'}{\mu} \right|, \quad (4)$$

при этом волновая функция умножается на положительную функцию [3].

Если $\mu > 0$, то из (4) следует $-2 < \mu' < 0$. В частности, воспроизводится известная сопряженность осцилляторного $\mu = 2$ и кулоновского $\mu' = -1$ потенциалов.

2.3. Ниже нам потребуются свойства M_p (2) для конкретной функциональной формы $V(b, \lambda|v) = bv(r) + \lambda^2/r^2$ с постоянными b, λ ; в явном виде можно записать, что

$$M_p(E, b, \lambda|v) = \int dr r^{p-1} \left[2(E - bv(r)) - \frac{\lambda^2}{r^2} \right]^{\frac{p}{2}}. \quad (5)$$

Преобразование (4), примененное к M_p (5), дает для степенных потенциалов (3)

$$M_p(E', b', \lambda'|\mu') = \sigma^{p-1} M_p(E, b, \lambda|\mu), \quad (6)$$

где для краткости пишем аргумент μ вместо r^μ . Учтем также однородность $M_p(E, b, \lambda|v)$ относительно аргументов, в частности

$$M_p(a^2 E, a^2 b, a\lambda|\mu) = a^p M_p(E, b, \lambda|\mu) \quad (7)$$

при любой $a = \text{const} > 0$.

2.4. Потребуем, чтобы квазиклассическое условие квантования в степенных потенциалах (3) удовлетворяло точным соотношениям (4). Это с неизбежностью требует участия центробежного потенциала в виде λ^2/r^2 (а не $l(l+1)/r^2$). Фактически мы имеем одномерную радиальную задачу с потенциалом $V(b, \lambda, r) \equiv V(b, \lambda|r^\mu)$; определяя для нее из (1) полное число состояний $N_1 = M_1/\pi$, получим

$$N_1(E, b, \lambda|\mu) = \frac{1}{\pi} M_1(E, b, \lambda|\mu) = n_r + C. \quad (8)$$

Здесь $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – радиальное квантовое число, а C – поправка, учитывающая асимптотический характер N_1 .

2.5. Условие (8) дает точный спектр для осциллятора и сопряженного ему кулоновского потенциала при $C = 1/2$. Примем это значение C для всех конечных $\mu > -2$. При $\mu = \infty$ получаем неаналитический потенциал – прямоугольную яму; учет непроницаемой стенки, так же как и в разделе 3 (см. ниже), приведет к известному значению $C = 3/4$.

Для осциллятора

$$M_1(E, b, \lambda|2) = M_1(E, b, 0|2) + \pi\phi\lambda \quad (9)$$

со значением фазы $\phi = 1/2$ независимо от E, b . Для потенциалов $v \sim r^\mu$ с произвольными μ линейность M_1 по λ выполняется при $\lambda \rightarrow 0$.

Согласно вышесказанному предположим, что линейность по λ (9) сохраняется с достаточной точностью для всех потенциалов, тогда условие квантования (8) примет вид

$$\frac{1}{\pi} M_1(E, b|v) = \nu + \phi(E, b)\lambda, \quad \nu = n_r + \frac{1}{2}. \quad (10)$$

Поставим целью выразить фазу ϕ через интегральные характеристики $M_p \equiv M_p(E, b, 0|v)$ (согласно определениям (2), (5)). Для этого снова обратимся к степенным потенциалам. Инвариантность при преобразовании (4) значений M_1 (согласно (6) при $p = 1$), входящих в соотношение (9), ведет к инвариантности $\phi(\mu)\lambda = \phi(\mu')\lambda'$. Учитывая еще (7), получим требование к фазе

$$\begin{aligned} \sigma\phi(E', b'|\mu') &= \phi(E, b|\mu), \\ \phi(a^2 E, a^2 b|\mu) &= \phi(E, b|\mu) = \phi(E/b, 1|\mu). \end{aligned} \quad (11)$$

Учитывая мультипликативный характер соотношений инвариантности (6), (7), (11), будем искать ϕ в виде

$$\phi = C_{p,q} M_p^\alpha M_q^\beta \equiv \phi_{p,q} \quad (12)$$

с неопределенными параметрами $\alpha, \beta, p, q, C_{p,q}$. Требование совместности (6), (7), (11) приводит к уравнениям

$$\alpha p + \beta q = 0, \quad \alpha + \beta = 1, \quad (13)$$

оставляющим произвольными две из четырех, входящих в (13), величин.

Потребуем, чтобы для осциллятора было $\phi_{p,q} \equiv 1/2$ при всех p, q . Пользуясь явным выражением (2) для степенных потенциалов, а также соотношениями (12) и (13), найдем для всех μ

$$\phi_{p,q} = \left[\frac{\left(\frac{M_p}{m_p}\right)^q}{\left(\frac{M_q}{m_q}\right)^p} \right]^{\frac{1}{q-p}} = \phi_{q,p}, \quad m_p = B\left(\frac{1}{2}, \frac{p}{2}\right), \quad (14)$$

где B – бета-функция (показатель μ входит в интегралы M_p).

Как будет видно из дальнейшего, целесообразно выбрать p, q из пар чисел $(1, 2)$ или $(1, 3)$. Тогда мы придем к двум возможным значениям

$$\phi = \phi_{1,2} = \frac{2}{\pi^2} \frac{M_1^2}{M_2}, \quad \phi = \phi_{1,3} = \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \frac{M_1^{\frac{3}{2}}}{M_3^{\frac{1}{2}}}, \quad (15)$$

совпадающим для осциллятора. Для других значений μ величина

$$R = \frac{\phi_{1,2} - \phi_{1,3}}{\phi_{1,3}} \quad (16)$$

характеризует погрешность метода и оказывается малой (порядка $1 \div 2\%$, см. далее раздел 4).

В потенциалах с неограниченным ростом чисел состояний, например кулоновском при $E \rightarrow 0$, растут и значения ϕ_p при каждом $p \neq 0$. Однако при этом остаются конечными их отношения $\phi_{p,q}$ (14), в частности $\phi_{1,2}, \phi_{1,3}$.

Далее мы распространяем условие (10) с фазами (15) на все потенциалы. Для этого есть несколько аргументов. Во-первых, потенциал входит в M_p и ϕ_p только функционально. Во-вторых, значения R оказываются столь же малыми для всех реальных потенциалов. В-третьих, эти последние можно представить в виде степенных с медленно меняющимся значением показателя (см. ниже (24)). Отметим, что формулы (15) совпадают с выражениями [1], полученными совершенно иным путем – сравнением чисел состояний, найденных разными способами.

Все вышеизложенное справедливо и для двумерной центрально-симметричной задачи; при том же потенциале v единственное отличие – замена λ на $|m|$, где m – магнитное число. Пары состояний (n_r, m) и $(n_r, -m)$ соответствует в трехмерной задаче только один набор $(n_r, \lambda = |m|)$. Поэтому полное число состояний двумерной задачи N_2 из (1) вдвое больше количества оболочек трехмерной задачи: $N_{sh} = N_2/2$.

Теперь ясен физический смысл всех M_n в условиях квантования и фазах: $N_1 = M_1/\pi$ (при любой размерности) определяет максимальное радиальное квантовое число, $N_{sh} = M_2/4$ – число оболочек, т.е. групп состояний с разными наборами (n_r, l) , $N_3 = 2M_3/3\pi$ – полное число связанных состояний (все M_n с энергиями состояний, не превышающими E). Условие квантования (10), (15) использует минимальную информацию – одно значение M_n , кроме исходного M_1 в (10).

В пренебрежении малой величиной R можно отождествить $\phi_{1,2}$ и $\phi_{1,3}$ из (14), что позволяет выразить условие квантования через любую пару M_n . В частности, в форме

$$N_{\text{sh}} = \left(\frac{9\phi}{8} \right)^{\frac{1}{3}} N_3^{\frac{2}{3}}$$

это условие непосредственно связывает число оболочек N_{sh} с полным числом связанных состояний в потенциале (с энергиями, не превосходящими E). Такая форма особенно удобна при анализе периодической системы элементов, где $N_3 = Z/2$ (спиновое удвоение даст атомный номер Z).

3. КВАНТОВАНИЕ СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

Отдельного рассмотрения заслуживает случай $l = 0$, который может рассматриваться двояко: во-первых, как частный случай вышеизложенного при $\lambda = 1/2$; во-вторых, как модифицированный одномерный: точный спектр s -состояний в потенциале $V(r)$ совпадает со спектром одномерной задачи на полуоси в потенциале $V_1(x) = V(x)$ при $x > 0$ и $V_1(x) = \infty$ при $x = 0$ (т.е. при обращении волновой функции одномерной задачи в нуль при $x = 0$) [4, с. 91].

В нашем подходе по аналогии с изложенным в разделе 2 условие квантования должно принять вид

$$\frac{1}{\pi} M_1 = \frac{1}{\pi} \int \sqrt{2(E - V(r))} dr = n_r + c + g\phi_{p,q}, \quad (17)$$

где константы c, g и параметры p, q подлежат определению. Соотношения (4) теперь неприменимы (хотя бы потому, что содержат переменный параметр λ). Поскольку в трехмерной задаче физический смысл имели величины M_n с $n \leq d = 3$, естественно ожидать, что в одномерной задаче $\phi_{p,q}$ будет содержать M_n с $n = 0, 1$. Как видно из (14), возможен только вариант, когда

$$\phi_{01} = \lim_{p \rightarrow 0} \frac{M_p}{m_p} = \phi_0,$$

при этом $\phi_1^0 = M_1^0 = 1$ выпадает. Величина ϕ_0 из-за расходимости M_p и m_p определяется только асимптотическим поведением M_p при $r \rightarrow 0$ и у (правой) точки поворота r' , эта величина была вычислена в [1]. В задачах с асимптотикой $V \sim r^\mu$ при $r \rightarrow 0$ и стандартным линейным поведением $V(r)$ при $r \simeq r'$ имеем

$$\phi_0 = \frac{1}{2} \quad (\mu \geq 0), \quad \phi_0 = \frac{1}{2 + \mu} \quad (\mu \leq 0) \quad (18)$$

независимо от значения E . Требуя для кулоновского потенциала ($\phi_0 = 1$) и осциллятора ($\phi_0 = 1/2$) совпадения вычисленного по (17) s -спектра с точным, найдем $c = g = 1/2$; при этом условие (17) совпадает с получаемыми из сшивки точных и ВКБ-решений [5, § 3,2] условиями.

Как видно из предыдущего, соотношения (10) и (17) должны рассматриваться самостоятельно. Однако для удобства использования мы объединим условия (10) и (17), положив в (10)

$$\phi = \phi_0, \quad l = 0, \quad \phi = \phi_{1,3}, \quad l > 0. \quad (19)$$

Очевидно, что для осциллятора и кулоновского потенциала $\phi_0 = \phi_{1,3}$. В общем же случае наблюдается расхождение. Так, для степенных потенциалов $\phi_0 = 1/2$ независимо от $\mu > 0$. В то же время $\phi_{1,3}$ пробегает при росте μ в интервале $(0, \infty)$ все значения в интервале $(0.643, 0.390)$.

Для некоторых потенциалов могут быть найдены точные решения только для s -потенциалов (см. ниже раздел 5). Они подтверждают необходимость использования именно ϕ_0 , а не $\phi_{1,3}$ при $l = 0$ (хотя в большинстве случаев при малой разности $\phi_0 - \phi_{1,3}$ и при использовании $\phi_{1,3}$ получаются хорошие результаты, т.к. при этом в (17) возникает множитель $\lambda = 1/2$).

В заключение раздела сделаем несколько общих замечаний. Разрывный характер (19) полностью соответствует физической ситуации: при сколь угодно малом $l > 0$, рассматриваемом как непрерывный параметр, одно из точных решений радиальной задачи становится сингулярным в нуле, а применению стандартного варианта метода ВКБ препятствует быстрое изменение де-бройлевской длины при малых r . Условие квантования, включающее λ вместо исходного $l(l+1)$, в обычном подходе появляется как результат перехода к переменной $x = \ln r$ с одновременным преобразованием волновой функции, обеспечивающим отсутствие первой производной, получением ВКБ-условия для этой функции и возвратом к прежней переменной. Требование инвариантности (4) автоматически вводит в условие параметр λ и тем самым выделяет переход к $r = \exp x$ среди всех возможных преобразований, обеспечивающих применимость метода ВКБ (в отличие от точного спектра, ВКБ-приближение неинвариантно, вообще говоря, относительно таких замен).

Отметим, наконец, что в некоторых задачах, например о появлении новых связанных состояний с энергией $E = 0$ в атомах, точка поворота может уходить на бесконечность. Если $V \sim r^{-\alpha}$, $\alpha > 2$ при $r \rightarrow \infty$, то при $E = 0$ в ϕ_0 (18) добавляется вклад $\phi_> = (\alpha - 2)^{-1}$. Интегральные величины $\phi_{1,2}$, $\phi_{1,3}$ всегда являются плавными функциями энергии.

4. ПРИМЕНЕНИЕ ЛИНЕЙНОГО УСЛОВИЯ

Условие квантования, выраженное через M_p (2), примет вид

$$\frac{1}{\pi} M_1 = \nu + \lambda \phi, \quad \nu \equiv n_r + \frac{1}{2}, \quad (20)$$

где в качестве ϕ фигурирует $\phi_{1,3}$ из (15).

Широкий класс потенциалов представляют степенные потенциалы $v = r^\mu$ (3), причем в силу п. 2.2 раздела 2 достаточно рассматривать $\mu > 0$. В этом случае расчет M_p (2) дает

$$M_p = \frac{(2E)^{\frac{p}{2}}}{\mu} \left(\frac{E}{b} \right)^{\frac{p}{\mu}} B \left(\frac{p}{\mu}, \frac{p}{2} + 1 \right). \quad (21)$$

Таблица 1

l	n_r	$E^{(\text{ex})}$	$E^{(l)}/E^{(\text{ex})}$	$E^{(n)}/E^{(\text{ex})}$
0	0	1.8558	1.0115	1.0050
0	1	3.2446	1.0068	1.0015
0	2	4.3817	1.0047	1.0007
1	0	2.6678	1.0039	1.0012
1	1	3.8768	1.0072	1.0007
1	2	4.9270	1.0068	1.0004
2	0	3.3718	1.0003	1.0005
2	1	4.4683	1.0057	1.0003
10	0	7.5834	0.9937	1.0003
10	1	8.3411	0.9980	1.0001

Факторизация E и b в (21) приводит при всех μ к независимости фаз $\phi_{p,q}$ (в частности, $\phi_{1,2}$ и $\phi_{1,3}$) от энергии и амплитуды потенциала, что следует из соотношений симметрии раздела 2.

Для уровней энергии $E^{(l)}(\nu, \lambda)$ в линейном по λ приближении для всех степенных потенциалов (3) с $\mu > 0$ получим

$$E^{(l)}(\nu, \lambda) = b^{\frac{2}{2+\mu}} \left[(\nu + \phi\lambda) \frac{\mu\pi}{\sqrt{2}B\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{\mu}\right)} \right]^{\frac{2\mu}{2+\mu}}, \quad (22)$$

где

$$\phi = \phi_{1,3} = \frac{1}{\mu\pi\sqrt{2}} \frac{B^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{\mu}, \frac{3}{2}\right)}{B^{\frac{1}{2}}\left(\frac{3}{\mu}, \frac{5}{2}\right)}.$$

В табл. 1–3 приведены сравнения вычисленных нашим методом и в результате численных расчетов [6] значений энергии для трех потенциалов. В табл. 1 приведены результаты для потенциала $V(r) = r$, даны отношения вычисленных спектров к точному значению $E^{(\text{ex})}$ для линейного приближения $E^{(l)}$ (22) с $\phi_{1,3} = 0.544$ и нелинейного приближения $E^{(n)}$ (51). В табл. 2 приведены результаты для потенциала $V(r) = r^4/4$, даны отношения вычисленных спектров к точному значению $E^{(\text{ex})}$ для линейного приближения $E^{(l)}$ (22) с $\phi_{1,3} = 0.460$ и нелинейного приближения $E^{(n)}$ (51). В табл. 3 приведены результаты для потенциала прямоугольной ямы: $V(r) = 0$ при $r \leq R$, $V(r) = \infty$ при $r > R$, даны отношения вычисленных амплитуд $A = R\sqrt{2E}$ к точным, определяемым условием $J_\lambda(A^{(\text{ex})}) = 0$ для линейного приближения $A^{(l)}$ с $E^{(l)}$ (22) и $\phi_{1,3} = 0.390$, для нелинейного приближения $A^{(n)}$ с $E^{(n)}$ (51). В данном случае $\nu = n_r + 3/4$ (см. п. 2.5 раздела 2). Видно хорошее совпадение результатов.

Таблица 2

l	n_r	$E^{(\text{ex})}$	$E^{(l)} / E^{(\text{ex})}$	$E^{(n)} / E^{(\text{ex})}$
0	0	1.5079	0.9526	0.9715
0	1	4.6212	0.9820	0.9947
0	2	8.4285	0.9892	0.9982
0	3	12.7383	0.9923	0.9992
1	0	2.8210	0.9770	0.9900
1	1	6.3626	0.9768	0.9962
1	2	10.4570	0.9813	0.9984
1	3	14.9907	0.9847	0.9993
2	0	4.3028	0.9904	0.9953
2	1	8.1924	0.9783	0.9970
2	2	12.5463	0.9789	0.9983
10	0	19.9638	1.0194	1.0014
10	1	25.5651	1.0011	0.9999
10	2	31.3926	0.9914	0.9993

Величина R (16), а с ней и относительная погрешность, очевидно, в классе $v = r^\mu$ растут вместе с отклонением μ от 2; однако даже в предельно неблагоприятном случае прямоугольной ямы $\mu \rightarrow \infty$, когда ухудшаются аналитические свойства V , величина R не превышает 4% и метод дает хорошие результаты, обычно же $R \sim 1\%$.

С помощью соотношений симметрии (4) или непосредственным расчетом M_p получим аналогичные результаты для потенциалов атомного типа $-2 < \mu' < 0$, имеющих нулевую асимптотику при $r \rightarrow \infty$:

$$|E^{(l)}(\nu, \lambda)| = |b|^{\frac{2}{2-|\mu'|}} \left[\frac{1}{\nu + \phi\lambda} \frac{\sqrt{2}B\left(\frac{3}{2}, \frac{2-|\mu'|}{2|\mu'|}\right)}{|\mu'|\pi} \right]^{\frac{2|\mu'|}{2-|\mu'|}}, \quad (23)$$

со значением фазы $\phi = \phi_{1,3}(\mu')$ для данного μ' . Непосредственно видно, что (23) и (22) переходят друг в друга при преобразовании (4). Как видно из (23), значение $E = 0$ возможно лишь в пределе $\nu, \lambda \rightarrow \infty$, так что полное число уровней бесконечно. Изученная в [1] задача об определении параметров потенциала, при которых появляется очередной уровень с $E = 0$, относилась к быстро убывающим на бесконечности потенциалам (в первую очередь, экранированным кулоновским потенциалам).

Наш метод, основанный на величине $\phi_{1,3}$ как интегральной характеристике задачи, дает правильный порядок близких уровней с $n_r + l/2 = \text{const}$, вырожденных для осциллятора ($\mu = 2$). Известные методы ВКБ-анализа, приписывая (в наших обозначениях)

Таблица 3

l	n_r	$A^{(\text{ex})}$	$A^{(l)}/A^{(\text{ex})}$	$A^{(n)}/A^{(\text{ex})}$
0	0	3.1416	0.9449	0.9838
0	1	6.2832	0.9725	0.9938
1	0	4.4934	0.9332	0.9899
1	1	7.7253	0.9495	0.9945
2	0	5.7635	0.9401	0.9918
2	1	9.0950	0.9411	0.9957
3	0	6.9879	0.9506	0.9929
3	1	10.4171	0.9393	0.9963
5	0	9.3558	0.9718	0.9954
5	1	12.9665	0.9435	0.9967
7	0	11.6570	0.9901	0.9986
7	1	15.4313	0.9515	0.9968
10	0	15.0335	1.0121	1.0040
10	1	19.0259	0.9649	0.9975

всем регулярным в нуле потенциалам значение $\phi = \phi_0 = 1/2$, отождествляют эти уровни при всех μ [3, 6]. Как видно, отличие $\phi_{1,3}$ от $1/2$ получается в главном приближении (и не содержит параметра малости порядка $\hbar^2$).

Рассмотрим вопрос об изменении энергии уровня δE и фазы $\delta\phi$ при малом изменении потенциала δV . Для степенных потенциалов r^μ и возмущений $\delta V = \alpha r^\sigma$, где $\mu, \sigma, \alpha > 0$, вариация (20) выражается через бета-функции и приводит к $\delta\phi > 0$ при $\sigma < \mu$. В то же время величина $\delta E > 0$ в более широком интервале $\sigma < \sigma_0$, где граничное значение σ_0 удовлетворяет уравнению

$$\frac{3B(\frac{3}{2}, \frac{\sigma_0+3}{\mu})B(\frac{3}{2}, \frac{1}{\mu})}{B(\frac{5}{2}, \frac{3}{\mu})B(\frac{1}{2}, \frac{\sigma_0+1}{\mu})} = 1.$$

Выполнение неравенств $\delta E > 0$ при $\delta V > 0$ утверждается теоремой Хелманна–Фейнмана [7]. За пределами интервала $\sigma < \sigma_0$, т.е. при слишком быстром возрастании $\max_r \delta V(r)/V(r)$ в классически доступной области при $E \rightarrow \infty$, линейное приближенное условие квантования (20) не обеспечивает выполнение теоремы Хелманна–Фейнмана. Нелинейное же условие раздела 6 удовлетворяет этой теореме при любых возмущениях.

Потенциал $V(r)$ общего вида приведет к некоторой зависимости фазы от энергии. Как правило, эта зависимость будет весьма медленной, т.к. типичный потенциал можно представить в виде степенного с показателем $k(V)$, медленно меняющимся вместе с V

(монотонно, если эта зависимость физически отражает экранирование). Например, для всех экранированных кулоновских потенциалов $\phi \rightarrow 1$ для самого глубокого уровня, а при $E \rightarrow 0$ определяется данными таблицы из статьи [1]. Так, для потенциала Тайца $V = -(r[1 + r^2])^{-1}$ значение $\phi_{1,3} \rightarrow 2$ при $E \rightarrow 0$. Перейдем к функции $r(V)$ и монотонному $V(r)$. Основной вклад в M_n , а с ним и в $\phi_{1,3}$, даст окрестность $V \simeq V_m$, где $r^2(V_m)(E - V_m) = \max$ (ср. с выводом соотношений (42), (43), полученных далее), т.е.

$$E = V_m \left(1 + \frac{k(V_m)}{2} \right), \quad k = \frac{r}{V} \left(\frac{dV}{dr} \right). \quad (24)$$

Для степенных потенциалов $k(V) \equiv \mu$, так что k может рассматриваться как обобщение понятия показателя. В качестве примера рассмотрим потенциал

$$V = (1 + r^2)^{\frac{\mu}{2}} - 1$$

с асимптотиками $V \sim r^2$ при $r \rightarrow 0$ и $V \sim r^\mu$ при $r \rightarrow \infty$, считаем, что $\mu > 2$. Из (24) имеем

$$k(V) = \mu \frac{(1 + V)^{1 - \frac{2}{\mu}}}{V} [(1 + V)^{\frac{2}{\mu}} - 1], \quad (25)$$

откуда $k(0) = 2$, $k(\infty) = \mu$. Система (24), (25) определяет $V_m(E)$; подставляя в $\phi_{1,3}$ (22) значение $\mu = k[V_m(E)]$, получим хорошее приближение для $\phi_{1,3}(E)$ с точными пределами при $E \rightarrow 0, \infty$.

5. ИНФОРМАЦИЯ О СПЕКТРЕ

Развитый выше метод позволяет получать информацию на трех различных уровнях, причем на каждом – в прямом и обратном вариантах.

5.1. Порядок следования уровней определяется непосредственно возрастанием эффективного квантового числа (равного правой части условия (20))

$$T \equiv \nu + \phi \lambda \equiv \left(n_r + \frac{1}{2} \right) + \phi \left(l + \frac{1}{2} \right) \equiv T(n_r, l) \quad (26)$$

по известной величине $\phi = \phi_{1,3}$ или с большей точностью по паре величин $(\phi_0, \phi_{1,3}(E))$ (19). Обратно, знание реального порядка следования уровней позволяет получить границы для $\phi_{1,3}$ и ϕ_0 ; однотипность этого порядка во всех областях спектра означает малую зависимость $\phi_{1,3}$ от энергии.

Аналогична задача о появлении новых уровней при фиксированной энергии ($E = 0$), но увеличении мощности потенциала b ; она решалась в работах [1, 8].

5.2. Изучение локальных свойств спектра позволяет найти относительное энергетическое расстояние близлежащих уровней по $\phi(E)$ без использования M_1 из (2) и тем самым без использования явного вида $V(r)$. Для последовательных уровней 1, 2, 3

с энергиями E и квантовыми числами ν, λ , нумеруемыми теми же индексами, аппроксимируя зависимость $M_1(E)$ и $\phi(E)$ линейной зависимостью в интервале (E_1, E_3) , получим

$$\begin{aligned} DE_{12} &= \nu_{12} + \phi(E_2)\lambda_{12}, \\ DE_{32} &= \nu_{32} + \phi(E_2)\lambda_{32}, \\ D &= \frac{1}{\pi} \frac{dM_1(E_2)}{dE} - \lambda_2 \frac{d\phi(E_2)}{dE}, \end{aligned} \quad (27)$$

где $E_{nm} = E_n - E_m$. Аналогичные соотношения можно записать для ν, λ . Почленное деление двух уравнений системы (27) дает относительную разность интервалов E_{12}/E_{13} как функцию только ϕ и квантовых чисел.

Обратно, при известных $E_{nm}, \lambda_{nm}, \nu_{nm}$ исключение из системы (27) величины D позволяет определить

$$\phi(E_2) = \frac{\nu_{32}E_{12} - \nu_{12}E_{32}}{\lambda_{12}E_{32} - \lambda_{32}E_{12}} \quad (28)$$

при условии конечности знаменателя (вообще говоря, для этого достаточно, чтобы $\lambda_{12} - \lambda_{32} \neq 0$). Применение (28) к последовательным тройкам уровней позволяет восстановить медленную функцию $\phi(E)$ (при необходимости с последующим сглаживанием).

В двухпараметрическом приближении $(\phi_0, \phi_{1,3})$ необходимо исключить в (28) состояния с $l = 0$. Значение ϕ_0 (не зависящее от энергии) получим аналогично (27):

$$\phi_0 = 2 \frac{E_{32}(\lambda_1\phi + \nu_{12}) - E_{12}(\lambda_3\phi + \nu_{32})}{E_3 - E_1}. \quad (29)$$

Здесь предполагается, что s -уровнем является только средний уровень с энергией E_2 и номером ν_2 , к этой же энергии относится $\phi = \phi_{1,3}$.

5.3. Наконец, зная $V(r)$, можно определить $M_1, \phi_0, \phi_{1,3}$ и найти спектр в целом.

Развитый метод позволяет восстановить весь спектр, если для данного потенциала известны решения при $l = 0$. Из вида условия квантования (10) следует, что энергия уровня E и потенциал $V = bv(r)$ фиксируют зависимость E от b и ν, λ с точностью до функции f , определяемой видом $v(r)$:

$$f\left(\frac{E_{n_r l}}{b}\right) = \frac{T(n_r, l)}{\sqrt{2b}}, \quad E_{n_r l} = bF\left(\frac{T(n_r, l)}{\sqrt{2b}}\right). \quad (30)$$

Здесь F — функция, обратная f , число $T(n_r, l)$ берется из (26). Оно же входит в выражение для энергий уровней (22), (23).

Сравним (30) с видом точных решений, известных для потенциалов

$$V = \frac{b}{\text{ch}^2 r}, \quad (31a)$$

$$V = -\frac{b}{e^r - 1} \quad (31b)$$

только при $l = 0$ и $n_r = 0, 1, \dots$. Имеем

$$E_{n_r 0} = -b \left(\sqrt{1 - \frac{1}{8b}} - 2u \right)^2, \quad u \equiv \frac{n_r + \frac{3}{4}}{\sqrt{2b}}, \quad (32a)$$

$$E_{n_r 0} = -\frac{b(1 - u^2)^2}{2u^2}, \quad u \equiv \frac{n_r + 1}{\sqrt{2b}}. \quad (32b)$$

Выражение (32a) получим как нечетные состояния в одномерном потенциале [4, с. 60], (32b) взято из работы [9]. Обращает на себя внимание в формуле (32a) множитель $\sqrt{1 - 1/(8b)}$, нарушающий функциональную зависимость (30), в то время как вид (32b) точно соответствует (30). Следует ожидать поэтому, что для формулы (32b) точные и ВКБ-решения совпадают при $l = 0$, а для (32a) различаются заменой радикала на единицу; это действительно имеет место.

Далее, из (32) следует, что потенциалам (31) при $l = 0$ (т.е. $\lambda = 1/2$) действительно нужно приписать фазы

$$\phi = \phi_0 = \frac{1}{2}, \quad (33a)$$

$$\phi = \phi_0 = 1, \quad (33b)$$

отличные от фаз $\phi_{1,2}$ и $\phi_{1,3}$.

Явные формулы типа (32) позволяют распространить результаты на спектр при всех $l \neq 0$. Для этого необходимо выполнить в (32) замену

$$n_r \rightarrow n_r + \frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2} \right) \phi_{1,3} - \frac{\phi_0}{2}. \quad (34)$$

6. НЕЛИНЕЙНОЕ УСЛОВИЕ КВАНТОВАНИЯ

Для повышения точности линейных условий учтем возможную нелинейность M_1 из (8):

$$M_1(\lambda) = M_1(0) - A\Delta(\lambda), \quad \Delta(\lambda) = \int_0^\lambda \phi(\Lambda) d\Lambda, \quad (35)$$

где опущены несущественные аргументы и обозначено

$$A^2 = \max_r \widetilde{W}(E, r), \quad \widetilde{W}(E, r) = 2r^2(E - V(r)), \quad 0 \leq \Lambda = \frac{\lambda}{A} \leq 1, \quad (36)$$

Λ рассматривается как непрерывная переменная в промежуточных вычислениях; при $\phi(\Lambda) = \text{const}$ возвращаемся к линейным соотношениям (9), (10). Обратим внимание на то, что в данном разделе объектом изучения является именно обобщенный потенциал $\widetilde{W}$ (36), а не исходный потенциал $V(r)$. Меллиновский образ ϕ_p/p функции $\phi(\Lambda)$ просто связан с M_p [1] соотношением

$$\phi_p = p \int_0^1 \phi(\Lambda) \Lambda^{p-1} d\Lambda = \frac{M_p}{A^p m_p} \quad (37)$$

с тем же m_p , что и в (14). Справедливы следующие общие свойства:

$$\phi_0 = \phi(\Lambda = 0), \quad \phi_\infty = \phi(\Lambda = 1). \quad (38)$$

Для изученных потенциалов функции ϕ_p и $\phi(\Lambda)$ являются монотонными. В частности, для степенных потенциалов (3) ($\mu > 0$) имеем

$$\phi_p = \frac{(\mu + 2)^{\frac{p}{\mu} + \frac{p}{2}} B(\frac{p}{\mu}, \frac{p}{2} + 1)}{2^{\frac{p}{\mu}} \mu^{\frac{p}{2} + 1} B(\frac{p}{2}, \frac{1}{2})}. \quad (39)$$

Ранее введенные фазы $\phi_{p,q}$ (14) могут быть выражены через ϕ_p (37) с помощью формулы

$$\phi_{p,q}^{q-p} = \frac{\phi_p^q}{\phi_q^p}, \quad (40)$$

причем множители, пропорциональные A^{pq} , выпадают.

Информацию о качественном поведении ϕ_p будем извлекать из фактической близости $\phi_{1,2}$ и $\phi_{1,3}$ и инвариантности M_p относительно допустимых деформаций $\widetilde{W}$ [1], сохраняющих ϕ_p и $\phi(\Lambda)$. С учетом (40) имеем

$$\left(\frac{\phi_{1,2}}{\phi_{1,3}} \right)^2 = \frac{\phi_1 \phi_3}{\phi_2^2} = \frac{8}{\pi^2} \frac{M_1 M_3}{M_2^2} \simeq 1 \quad (41)$$

с малой погрешностью, не большей чем $2R$. Универсальность выполнения условия (41) указывает на утрату в M_p при $p \geq 1$ индивидуальных особенностей $\widetilde{W}(r)$, что характерно для асимптотического поведения. Действительно, M_n тождественны интегралам, асимптотика которых получена Лапласом,

$$M_p = \int dx W^{\frac{p}{2}}(x) \sim \sqrt{\frac{4\pi}{|W^{(2)}|_p}} A^{p+1} \left(1 + \frac{a_1}{p} + \frac{a_2}{p^2} + \dots \right). \quad (42)$$

Здесь выполнена замена переменной $x = \ln r$, так что $W(x) = \widetilde{W}(\exp x)$; все производные $W^{(n)}$ берутся в точке максимума. Если подставить в (41) только главные члены разложения, заменяя скобку в (42) единицей, то получим $16/(\pi^2 \sqrt{3})$, что менее чем на 4% отличается от единицы. Это подтверждает предположение об асимптотическом поведении $\phi_p \sim M_p$ при $p \geq 1$.

Заменой $W = \exp S$ интеграл (42) приводится к стандартной форме; в коэффициентах разложения, приведенных в книге [10], необходимо затем вернуться к W . В итоге все коэффициенты a_n выражаются через комбинации производных, инвариантные относительно масштабирования $W \rightarrow FW$, $x \rightarrow sx$. В частности,

$$a_1 = \frac{i_1(W) - 3}{4}, \quad i_1 = A^2 \left(\frac{W^{(4)}}{[W^{(2)}]^2} - \frac{5}{3} \frac{[W^{(3)}]^2}{[W^{(2)}]^3} \right). \quad (43)$$

Выполняя разложение m_p в знаменателе (37), аналогичное (42), получим асимптотическое разложение ϕ_p , которое удобнее записать в экспоненциальной форме (что возможно и в (42))

$$\frac{\phi_p}{\phi_\infty} = \exp \left[\frac{b_1}{p} + \frac{b_2}{p^2} + \dots \right], \quad \phi_\infty = A \sqrt{\frac{2}{|W^{(2)}|}}, \quad b_1 = \frac{i_1}{4} - 1. \quad (44)$$

Выражение для ϕ_∞ совпадает с полученным в [1] иным способом.

Быстрому выходу ϕ_p на асимптотику соответствует $b_1 < 1$, $b_2 \ll b_1$ (особенно при $b_1 b_2 < 0$) и т.д. Такое положение имеет место для Γ -функций, определяющих M_n для степенных и многих других потенциалов: отношение $\Gamma(p)$ к стирлинговской асимптотике $\Gamma_0(p)$ имеет вид экспоненты (44) с $b_1 = 1/12$, $b_2 = -1/360$. Конечная причина малости характерного параметра $p^* < 1$, с которого начинается асимптотика, состоит в следующем: $\Gamma(p)$ может быть представлена в виде [11]

$$\frac{d^2}{dp^2} \ln \Gamma(p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(p+n)^2} = I_1(p) + I_2(p),$$

причем I_1 является заменой суммы интегралом по dn и дает как раз Γ_0 . Поправка к Γ_0 определяется интегралом I_2 метода Абеля–Плана с экспоненциальным знаменателем и характерным для I_2 параметром затухания $p^* \sim (2\pi)^{-1} \simeq 0.2$ (см. примеры в [12]).

Отметим, что через произведение гамма-функций или отношение таких произведений выражаются интегралы от чрезвычайно большого числа функций с качественно различным поведением (их таблицы занимают более 150 страниц монографии [13]). Соответственно обсужденные выше свойства асимптотик можно считать типичными.

Справедливость предположения об асимптотике вида (44) с быстро убывающими b_n подтверждается и следующим образом. Ограничиваясь членами b_1, b_2 , найдем по (16) и (40)

$$R = \frac{\phi_{1,2}}{\phi_{1,3}} - 1 = \exp \left(\frac{1}{6} b_1 + \frac{11}{36} b_2 \right) - 1. \quad (45)$$

Предполагая $|b_2| \ll |b_1|$, получим для потенциалов из таблицы статьи [1] при учете $|R| \sim 1 \div 2\%$ оценку $b_1 \leq 0.1$. Подбирая комбинацию ϕ_p так, чтобы обратить в нуль коэффициент при b_1 , например $\phi_1 \phi_\infty / \phi_2^2$, мы уменьшим отклонение от единицы, как правило, до 10^{-3} . Наконец, обращение в нуль и коэффициента при b_2 , например

$$\frac{\phi_1^{1/3} \phi_3^3}{\phi_2^{8/3} \phi_\infty^{2/3}} \equiv 1 + R', \quad (46)$$

уменьшает ошибку R' до величины порядка 10^{-4} .

Асимптотика (44) правильно описывает замедление изменения ϕ_p при $p \geq 1$. Если ограничиться только членом с b_1 , то из условия $\phi_0 = \phi_\infty \exp(b_1/p')$ можно оценить для потенциалов таблицы из [1] нижнюю границу $p' \sim 0.2 \div 0.3$, до которой ведущую роль играет b_1 .

В общем случае ряд по обратным степеням p функции ϕ_p/p , являющейся преобразованием Меллина для $\phi(\Lambda)$, определяет эту функцию при всех Λ , а поэтому и ϕ_p при всех p вплоть до $p = 0$. В силу конечности $\phi(\Lambda = 0) = \phi_0$ это означает, что ряд в экспоненте (44) должен сворачиваться в регулярную при $p = 0$ функцию p ; это обстоятельство необходимо учитывать в приближенных представлениях ϕ_p .

Наконец, асимптотика (44) объясняет крайнюю близость фазы $\phi_{1,3}$ к среднеквадратичной фазе

$$\bar{\phi} = \frac{3\phi_1 - \phi_3}{2}. \quad (47)$$

Напомним, что в статье [1] было введено понятие расстояния между эффективными потенциалами $W_{1,2}$, определяемое разностью найденных для них $\Delta_{1,2}$ из (35):

$$\rho(W_1, W_2) = \int_0^1 [\Delta_1(\Lambda) - \Delta_2(\Lambda)]^2 d\Lambda.$$

Фаза $\bar{\phi}$ получена как наилучшее приближение заданной функции $\Delta_1(\Lambda)$ линейным значением $\Delta_2 = \bar{\phi}\Lambda$, минимизирующим ρ . В отношении $\bar{\phi}$ и $\phi_{1,3} = (\phi_1^3/\phi_3)^{1/2}$ выпадает линейный по b_1 член, что и приводит к совпадению указанных величин с точностью порядка 10^{-3} . При сравнении $\bar{\phi}$ с $\phi_{1,2}$ линейное по b_1 расхождение сохраняется, однако $\phi_{1,2}$ по той же причине близко к величине $2\phi_1 - \phi_2$, получаемой минимизацией ρ с дополнительным весом $d\Lambda \rightarrow d\Lambda/\Lambda$. Такая минимизация актуальна в задачах с преимущественным значением малых орбитальных моментов.

Вышеприведенные оценки базируются на асимптотике (42), предполагающей наличие требуемых производных $W^{(n)}$. Однако, как упоминалось выше, погрешность метода и, в частности, разность фаз $\bar{\phi} - \phi_{1,3}$ лишь незначительно возрастает для неаналитических потенциалов, что является одним из преимуществ интегрального подхода.

В [1] были изучены допустимые деформации эффективного потенциала W (36) при неизменной A , сохраняющие функции $\phi(\Lambda)$, ϕ_p и M_p . При этом с неизбежностью требуется выразить коэффициенты рядов (42), (44) через инварианты таких деформаций. Простейшим подобным выражением является $i_0 = W^{(2)}$. Следующий коэффициент i_1 (43), как нетрудно получить, одинаков для осциллятора $W = e^{2x}(1 - e^{2x})$ и потенциала Ленца $W = \text{ch}^{-2}(2x)$, при этом в обоих случаях $\phi(\Lambda) = 1/2$. Обратно, исходя из требований инвариантности, сведения ряда (42) к первому члену при $W = e^{-x^2}$ и постоянства ϕ_p для осциллятора, можно было бы восстановить ряд (44). Инварианты i_n последовательно определяются условием сохранения при деформации ширины потенциальной ямы $|x_-(W)| + x_+(W)$ на каждом уровне W для двух склонов $x_- < 0$, $x_+ > 0$. При этом функция W заменяется возрастающими по длине отрезками ряда Тейлора.

7. ПРИМЕНЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО УСЛОВИЯ КВАНТОВАНИЯ

Для состояний с моментом $l \neq 0$ и произвольной функции $\phi(\Lambda)$ из (8) и (35) следует условие, обобщающее (20),

$$\frac{1}{\pi} M_1 = \nu + A \int_0^{\frac{\lambda}{A}} \phi(\Lambda) d\Lambda \quad (48)$$

с амплитудой A из (36).

Физически значимая информация о ϕ_p (37) содержится в основном в фазах $\phi_n \sim N_n$ с $n = 1, 2, 3$, определяющих числа состояний, и в факте конечности ϕ_p при $p \rightarrow 0, \infty$. С практически достаточной точностью поведение ϕ_p хорошо приближается дробно-линейной зависимостью с тремя параметрами. Если принять условие совпадения точных значений $\phi_n \sim M_n$ с вычисленными по приближенной формуле для $n = 1, 2, 3$, то получим [1] следующее универсальное выражение:

$$\Delta(\Lambda) = \int_0^\Lambda \phi(\Lambda) d\Lambda = (\chi + \kappa)\Lambda - \frac{\kappa}{\tau + 1}\Lambda^{\tau+1}, \quad (49)$$

где

$$\begin{aligned} \tau + 1 &= \frac{2(\phi_2 - \phi_3)}{\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2}, \\ \kappa &= 2 \frac{(\phi_2 - \phi_1)(\phi_1 - \phi_3)(\phi_3 - \phi_2)}{(4\phi_2 - 3\phi_3 - \phi_1)(\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2)}, \\ \chi &= \phi_1 + \frac{(\phi_2 - \phi_1)(\phi_1 - \phi_3)}{(\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2)}. \end{aligned}$$

В случае степенных потенциалов (3) величины ϕ_p не будут зависеть от E или b , так что в условии квантования (48) эти параметры появятся лишь через функцию A ,

$$A(E) = \left(\frac{2\mu E}{\mu + 2} \right)^{\frac{\mu+2}{2\mu}} \quad \text{при} \quad b = \frac{1}{\mu}. \quad (50)$$

Для энергий уровней $E^{(n)}(\nu, \lambda)$ в нелинейном приближении

$$E^{(n)}(\nu, \lambda) = b^{\frac{2}{2+\mu}} \left[\left(\nu + (\chi + \kappa)\lambda - \frac{\kappa}{\tau + 1} \left(\frac{\lambda}{A(E)} \right)^\tau \lambda \right) \frac{\mu\pi}{\sqrt{2}B\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{\mu}\right)} \right]^{\frac{2\mu}{2+\mu}} \quad (51)$$

имеем алгебраическое уравнение, поскольку E посредством функции $A(E)$ (50) входит и в правую часть. Уравнение (51) можно решать с помощью итераций. Для этого подставим в выражение (51) амплитуду $A(E^{(l)})$ (50), вычисленную на энергиях $E^{(l)}(\nu, \lambda)$ линейного приближения (22). Таким образом, для энергий уровней всех степенных потенциалов (3) в нелинейном приближении получаем явное, хотя и несколько громоздкое, выражение. Результаты вычислений энергий уровней по этой явной итерационной формуле (при частных значениях μ) в сравнении с результатами численных расчетов [6] приведены в табл. 1 – 3.

Точными решениями для прямоугольной сферической ямы являются, как известно, функции Бесселя полуполого знака $J_\lambda(z)$. Обычные асимптотики для них имеют разный вид в зависимости от соотношения λ и z . В нашем же подходе получаем равномерное приближение корней функций Бесселя при любом отношении λ/z , причем, очевидно, числу λ можно придавать и другие (не полуполовые) значения.

Данный потенциал примечателен и своими плохими аналитическими свойствами, что отражается в значении $\phi_\infty = 0$. Тем не менее значения корней определяются достаточно точно.

Таким образом, развитый подход обеспечивает простое и конструктивное определение спектра центрально-симметричных потенциалов. При решении задач каждого типа используется минимально необходимый объем информации, что полностью соответствует методу сокращенного описания [1].

Предложенный метод имеет много возможностей развития и применения. Среди них назовем, например, учет следующего по $\hbar^2$ приближения [1]. Отдельного изучения заслуживает обратная задача о восстановлении потенциала с учетом допустимых его деформаций [1].

Намеченная выше связь задачи с методом Лапласа позволяет предложить интерполяционные аналоги этого метода для неаналитических функций, определяемые только интегральными характеристиками.

Наконец, изучение асимптотических свойств фаз дает способ получения нелинейных соотношений между специальными функциями, выполняемых с большой точностью. Таково, например, соотношение (46) для степенных потенциалов, выражаемое через бета-функции при использовании явного вида ϕ_p (39).

Список литературы

- [1] А. А. Лобашев, Н. Н. Трунов. ТМФ. 1999. Т. 120. С. 99.
- [2] М. Рид, Б. Саймон. Анализ операторов. Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [3] С. Quigg, J. L. Rosner. Phys. Rep. 1979. V. 56. P. 167.
- [4] П. В. Елютин, В. Д. Кривченко. Квантовая механика с задачами. М.: Наука, 1976.
- [5] А. Б. Мигдал. Качественные методы квантовой теории. М.: Наука, 1974.
- [6] Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. С. Попов. ЖЭТФ. 1995. Т. 107. С. 1768.
- [7] А. А. Локишин, Е. А. Сагомонян. Геометрические методы в теории спектров. М.: Изд-во МГУ, 1996.
- [8] Ю. В. Тарбеев, Н. Н. Трунов, А. А. Лобашев, В. В. Кухарь. ЖЭТФ. 1997. Т. 112. С. 1226.
- [9] З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974.
- [10] М. В. Федорюк. Асимптотика: интегралы и ряды. М.: Наука, 1987.
- [11] Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. Курс современного анализа. Ч. II. М.: Физматгиз, 1963.
- [12] В. М. Мостепаненко, Н. Н. Трунов. Эффект Казимира и его приложения. М.: Энергоатомиздат, 1990.
- [13] О. И. Маричев. Метод вычисления интегралов от специальных функций (теория и таблицы формул). Минск: Наука и техника, 1978.

Поступила в редакцию 17.I.2000 г.,
после доработки 9.III.2000 г.