J. Cohen, S. Yu. Slavyanov, Quasiclassical asymptotics of the spectrum for lower states of an anharmonic oscillator, *Algebra i Analiz*, 1991, Volume 3, Issue 2, 132–138

Алгебра и анализ
Том 3 (1991), вып. 2

КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ АСИМПТОТИКА СПЕКТРА ДЛЯ НИЖНИХ СОСТОЯНИЙ АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Я. Коэн, С. Ю. Славянов

Предложена новая форма правила квазиклассического квантования для нижних состояний ангармонического осциллятора, обобщающего в высших порядках правило Вентцеля. В отличие от традиционного подхода для высших состояний фазовые интегралы, входящие в правило квантования, имеют особенностями под интегралом не точки разветвления, а полюса, что дает возможность вычислить эти интегралы по теореме о вычетах. Приведены пять членов разложения по постоянной Планка.

Цель настоящей статьи — получить правило квантования и асимптотику спектра энергии E_n задачи, порожденной одномерным уравнением Шредингера

$$h^2\psi''(x) + 2(E - V(x))\psi(x) = 0, \tag{1}$$

когда постоянная Планка h мала ($h << 1$), а номер n состояния конечен ($n = 0(1)$), для потенциальной ямы общего положения (потенциал ангармонического осциллятора). Потенциал считается аналитической функцией. Показано, что при выбранном соотношении между n и h правило квантования есть следствие применения теоремы о вычетах к функции, которую естественно ассоциировать с квазиклассическим импульсом. Из правила квантования с помощью итерационной процедуры явно строятся асимптотические ряды по степеням h для энергии E_n, коэффициенты которых являются полиномиальными функциями номера n и производных потенциала $V(x)$ в точке минимума. В стандартно понимаемой квазиклассике, когда $h << 1$, а $n = O(h^{-1})$, особенностями квазиклассического импульса являются не полюса, как в данной статье, а точки разветвления и, как следствие этого, фазовые интегралы, в терминах которых записывается правило квантования, явно не вычисляются. Соответственно нет и явной формулы для энергии.

Задача, поставленная в статье, может быть решена с помощью различных вариантов теории возмущений: шредингеровской теории возмущений [1] либо логарифмической теории возмущений [2] или по схеме метода эталонного уравнения [3], однако передложенный метод алгоритмически значительно более прост. Первоначально идея использования теоремы о вычетах в задаче квазиклассическеого квантования появилась в статье [4]. Впоследствии, однако, произошел отход от первоначальной идеи к стандартной квазиклассике [5].

Ключевые слова: асимптотика спектра, квазиклассическое квантование, теорема о вычетах, системы аналитических вычислений, ангармонический осциллятор.

Хотя основные результаты данной работы справедливы для достаточно широких классов аналитических потенциалов, мы в данной статье ограничимся случаем, когда функция $V(x)$ — полином четного порядка с одним минимумом. Существенно, что в точке минимума вторая производная отлична от нуля (минимум „общего положения"). Для полиномиальных потенциалов достаточно просто доказываются стандартные в теории дифференциальных уравнений асимптотические оценки. Без ограничения общности положим

$$V(0) = V'(0) = 0, \qquad V''(0) = 1.$$

Краевая задача для уравнения (1) задается условием

$$\psi(x) \underset{x\to\pm\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Лемма 1. *В главном порядке по малому параметру h асимптотика спектра поставленной задачи дается формулой*

$$E_n = h(n + 1/2)(1 + O(h)). \tag{2}$$

Доказательство леммы 1 основывается на замене масштаба $x \to \sqrt{h}x$ в уравнении (1) и использовании теории возмущений. Спектр невозмущенной задачи — хорошо известный спектр гармонического осциллятора.

Лемма 1 позволяет установить правильный порядок по h параметра E в уравнении (1) для интересующего нас спектрального интервала ($n = O(1)$). Положим $E = h\mathcal{E}, \mathcal{E} = O(1)$. Уравнение (1) перепишется в виде

$$h^2\psi''(x) + 2h\mathcal{E}\psi(x) - 2V(x)\psi(x) = 0. \tag{3}$$

Представим решение $\psi(x)$ уравнения (3) в форме

$$\psi(x) = (s'(x))^{-1/2}\exp(-s(x)/h). \tag{4}$$

Функция $s'(x)$ удовлетворяет уравнению

$$(s'(x))^2 - 2V(x) + 2h\mathcal{E} - \frac{h^2}{2}\left(\frac{s'''(x)}{s'(x)} - \frac{3}{2}\left(\frac{s''(x)}{s'(x)}\right)^2\right) = 0.$$

Для упрощения дальнейших рекуррентных процедур удобно перейти от функции $s'(x)$ к функции $u = (s')^{-1}$, уравнение для которой имеет вид

$$(1 - 2Vu^2) + 2h\mathcal{E}u^2 + \frac{h^2}{2}(u''u - \frac{1}{2}u'^2) = 0. \tag{5}$$

По размерности (в выбранной системе единиц, когда m — масса равна единице) с точностью до множителя функции $s(x)$,$s'(x)$,$u(x)$ есть соответственно действие, импульс и длина волны. С другой стороны, квазиклассический импульс $p(x)$ естественно ассоциировать с результатом действия оператора импульса на квазиклассическую волновую функцию в форме (4) согласно правилу

$$\hat{p}\psi(x) \equiv -ih\frac{d}{dx}\psi(x) = p(x)\psi(x).$$

Отсюда следует, что

$$p(x) = i(s'(x) + \frac{s''(x)}{s'(x)}).$$

Заметим, что уравнения, начиная с уравнения (3), содержат как линейные, так и квадратичные по h слагаемые. Поэтому разложение функции $u(x)$ по степеням h следует строить в виде

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k(x)h^k, \tag{6}$$

что отличается от стандартного квазиклассического разложения, которое содержит лишь четные степени h. Разложение (6) будет являться формальным (неосциллирующим) решением уравнения (4), если функции $u_k(x)$ вычислять по рекуррентной процедуре, возникающей при подстановке (6) в (5),

$$u_0 = \frac{1}{\sqrt{2V}}, \tag{7}$$

$$u_1 = \frac{\mathcal{E}u_0}{2V}, \tag{8}$$

$$u_k = \frac{1}{4V}u_0(2\mathcal{E}\sum_{g=0}^{k-1} u_g u_{k-g-1}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{g=0}^{k-2}(u_g'' u_{k-g-2} - \frac{1}{2}u_g' u_{k-g-2}')-$$

$$-2V\sum_{g=1}^{k-1} u_g u_{k-g}), \quad k \geqslant 2. \tag{9}$$

Лемма 2. *Функции $u_k(x)$ — голоморфны в некоторой полосе, включающей в себя вещественную полуось, за исключением точки поворота $x = 0$, которая является для этих функций полюсом $2k+1$-го порядка. Функции $u_k(x)$ являются полиномами порядка k по параметру $\mathcal{E}$.*

Доказательство проводится по индукции на основании свойств потенциала $V(x)$ и равенств (7)-(9).

Рассмотрим далее формальные разложения

$$s'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} s_k'(x)h^k, \quad p(x) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k(x)h^k.$$

Из явных формул, связывающих функции s', p, u, следует

Лемма 3. *Функции s_0' и $p_0(x)$ голоморфны в нуле, а функции $s_k'(x), p_k(x), k \geqslant 1$ имеют в нем полюс $2k-1$-го порядка. За исключением этой точки, они голоморфны (включая s_0' и p_0 в некоторой полосе, включающей в себя вещественную ось. Функции s_k', p_k являются полиномами порядка k по параметру $\mathcal{E}$. При $k \geqslant 1$ функции s_k' допускают на бесконечности оценку*

$$s_k'(x) = 0(x^{-2}. \tag{10}$$

Для доказательства оценки (10) используем полиномиальность потенциала и рекуррентные соотношения (7)–(9). В случае более общих классов потенциалов здесь следует потребовать от них выполнения определенных условий поведения на бесконечности.

Положим

$$\tau(x) = \int\limits_0^x s_0'(x)dx, \tag{11}$$

$$\alpha_m^-(x) = \int\limits_{-\infty}^x \sum_{k=1}^m h^{k-1} s_k'(x)dx, \tag{12}$$

$$\alpha_m^+(x) = \int\limits_{\infty}^x \sum_{k=1}^m h^{k-1} s_k'(x)dx, \tag{13}$$

$$v_m(x) = \sum_{k=0}^{m-1} h^k s_k'(x). \tag{14}$$

В (12), (13) и далее в качестве путей интегрирования рассматриваем поступательные пути, т.е. такие, для которых $\mathrm{Re}x$ меняется монотонно. Сходимость интегралов (12), (13) гарантируется оценкой (10).

Согласно лемме 3, точка $x = 0$ является точкой голоморфности для функции $\tau(x)$ и точкой разветвления логарифмического типа для функций $\alpha_m^-(x)$ и $\alpha_m^+(x)$.

Рассмотрим два поступательных пути из $-\infty$ на ∞ — путь γ_1, обходящий точку $x = 0$ сверху, и путь γ_2, обходящий ее снизу. С этими путями свяжем две постоянные $c_m^{(1)}$ и $c_m^{(2)}$

$$c_m^{(1)} = \int\limits_{\gamma_1} \sum_{k=1}^m h^{k-1} s_k'(x)dx, \tag{15}$$

$$c_m^{(2)} = \int\limits_{\gamma_2} \sum_{k=1}^m h^{k-1} s_k'(x)dx. \tag{16}$$

Очевидно, что для путей, лежащих в верхней полуплоскости, выполняется

$$\alpha_m^+(x) = \alpha_m^-(x) + c_m^{(1)},$$

а для лежащих в нижней полуплоскости —

$$\alpha_m^+(x) = \alpha_m^-(x) + c_m^{(2)}.$$

Введем два решения $\psi^+(x)$ и $\psi^-(x)$ уравнения (3), убывающие соответственно при $x \to +\infty$ и при $x \to -\infty$. Нормировку этих решений (множитель) будем выбирать произвольным образом.

Лемма 4. *Решение ψ^+ представимо в виде асимптотического анзаца*

$$\psi^+(x) = (v_m)^{-1/2} \exp(-h^{-1}\tau - \alpha_m^+)(1 + 0(h^m))$$

в некоторой области D_+, включающей в себя положительную полуось, за исключением малой окрестности точки поворота $x = 0$. Решение ψ^- представимо в виде асимптотического анзаца

$$\psi^-(x) = (-v_m)^{-1/2} \exp(-h^{-1}\tau - \alpha_m^-)(1 + O(h^m))$$

в области D_-, включающей в себя отрицательную полуось, за исключением малой окрестности точки поворота $x = 0$. Области D_- и D_+ перекрываются в верхней и *нижней полуплоскости, так что существует область $G_1 : G_1 \subset D_- \cap D_+$ в верхней полуплоскости и область $G_2 : G_2 \subset D_+ \cap D_-$ в нижней полуплоскости, где применимы оба асимптотических анзаца.*

Считаем, что ветви квадратных корней в выражениях для ψ^+ и ψ^- выбраны положительными соответственно на положительной и отрицательной полуосях.

Доказательство леммы 4 проводится стандартными методами, используемыми в теории дифференциальных уравнений с большим параметром [6]. Оценивается невязка, возникающая при подстановке асимптотического анзаца для ψ^+ и ψ^- в уравнение (3), далее от уравнения (3) переходим к интегральным уравнениям вольтерровского типа для ψ^+ и ψ^- и проводим оценку ряда последовательных приближений. Доказательство оценок для полиномиальных потенциалов не вызывает трудностей. Поскольку схема доказательства хорошо известна, мы его здесь не приводим.

Заметим, что асимптотический анзац для ψ^- сохраняется вплоть до малой окрестности положительной полуоси, а для ψ^+ вплоть до малой окрестности отрицательной полуоси.

Вернемся к рассмотрению краевой задачи для уравнения (3). Ее собственные функции допускают аналитическое продолжение в комплексную плоскость x. В области D_+ асимптотика собственных функций, очевидно, должна быть пропорциональна $\psi^+(x)$, а в области D_- пропорциональна $\psi^-(x)$, при спектральном параметре $\mathcal{E}$, выбранном равным $\mathcal{E}_n$.

Для точек x из G_1 в верхней полуплоскости это дает

$$\psi^- = \exp(c_m^{(1)} + i\pi/2)\psi^+(1 + O(h^m)),$$

в нижней полуплоскости для точек из G_2

$$\psi^- = \exp(c_m^{(2)} - i\pi/2)\psi^+(1 + O(h^m)).$$

Отсюда получаем дисперсионное уравнение для отыскания спектра собственных значений $\mathcal{E}_n$ с точностью до $O(h^m)$

$$\exp(c_m^{(2)} - c_m^{(1)} - i\pi) = 1 + O(h^m)$$

или, учитывая определение $c_m^{(1)}$ и $c_m^{(2)}$ согласно (15), (16),

$$-\oint_\gamma \sum_{k=1}^{m} s_k'(x)h^{k-1}dx = i2\pi(n + 1/2)(1 + O(h^m)), \tag{17}$$

где контур γ охватывает точку поворота $x = 0$, являющуюся полюсом подынтегрального выражения, оставляя ее слева. Уравнение (17) является правилом квантования для нижних состояний ангармонического осциллятора. Дадим ему еще одну интерпретацию, что позволит указать возможные значения целочисленных n в правой части (17). Согласно принципу аргумента,

$$\oint_\gamma (\ln \psi_n)' dx = i2\pi n, \quad n = 0, 1, \ldots \tag{18}$$

Здесь n — число нулей собственной функции ψ_n, а контур интегрирования охватывает эти нули. Воспользовавшись асимптотическим представлением функции

$\psi_n(x)$, получим из (1.8) с точностью до $O(h^m)$

$$-\oint_\gamma \sum_{k=0}^{m} s_k'(x)h^{k-1}dx + \frac{1}{2}\ln(\sum_{k=0}^{m} s_k'(x)h^k)|_\gamma =$$
$$= i2\pi n(1 + O(h^m)). \qquad (19)$$

Второе слагаемое в левой части равенства (19) равно

$$\frac{1}{2}\ln(\sum_{k=0}^{m} s_k'(x)h^k)|_\gamma = \frac{1}{2}\ln s_0'(x)|_\gamma = -i\pi.$$

Поскольку по лемме 3

$$\oint s_0'(x)dx = 0,$$

то вновь приходим к правилу квантования (17).

Интегралы в (17) вычисляются по теореме о вычетах, так что (17) можно переписать в виде

$$-\sum_{k=1}^{m} h^{k-1}\operatorname*{Res}_{x=0} s_k'(x) = (n + 1/2)(1 + O(h^m)). \qquad (20)$$

Таким образом, для спектра рассматриваемой задачи справедлива

Теорема. *Асимптотика спектра задачи на оси, связанной с уравнением* (3) *при* $h \to 0$ *и* $n = O(1)$ *определяется решением дисперсионного уравнения* (20), *являющимся квазиклассическим правилом квантования для введенных ранее выше потенциалов. Функции* $s_k'(x)$ *находятся с помощью рекуррентной процедуры* (7)-(9) *и почленного обращения ряда для* $u(x)$.

Известно, что для потенциальной ямы необщего положения, например для потенциала $V(x) = x^4$, явных формул для нижних собственных значений нет. Что нарушается в таких случаях в предложенной схеме. Формальные ряды строятся,но не выполняется ни лемма 3, ни лемма 4.

Вычеты функций $s_k'(x)$ — их локальные характеристики. Поэтому они выражаются через локальные характеристики — коэффициенты ряда Тейлора функции $V(x)$ в точке $x = 0$. Представим $V(x)$ в форме.

$$2V(x) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k x^{k+1}, \quad v_0 = 1.$$

Нетрудно проследить, что вычеты $s_k'(x)$ являются полиномами от коэффициентов $v_k, k \geqslant 1$ и полиномами порядка k от спектрального параметра $\mathcal{E}$.

Заключительная задача — отыскание асимптотики собственных значений $\mathcal{E}_n$ из уравнения (20) — чисто алгебраическая и решается, например, методом последовательных приближений. Для реализаций ее, а также других рекуррентных процедур, возникающих в предложенной методе, эффективны системы аналитических вычислений. Приведем формулу для $\mathcal{E}_n$, полученную с помощью САВ

РЕДЬЮС

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}_n = {} & \frac{\mu_n}{2} + h[\mu_n^2(-\frac{15}{64}v_1^2 + \frac{3}{16}v_2) - \frac{7}{64}v_1^2 + \frac{3}{16}v_2] + \\
& + h^2[\mu_n^3(-\frac{705}{2^{11}}v_1^4 + \frac{225}{2^8}v_1^2v_2 - \frac{35}{64}v_1v_3 - \frac{17}{128}v_2^2 + \\
& + \frac{5}{32}v_4) + \mu_n(-\frac{1155}{2^{11}}v_1^4 + \frac{459}{2^8}v_1^2v_2 - \frac{95}{64}v_1v_3 - \\
& - \frac{67}{128}v_2^2 + \frac{25}{32}v_4)] + n^3[\mu_n^4(-\frac{115755}{2^{17}}v_1^6 + \\
& + \frac{116325}{2^{15}}v_1^4v_2 - \frac{9765}{2^{12}}v_1^3v_3 - \frac{24945}{2^{13}}v_1^2v_2^2 + \\
& + \frac{2715}{2^{11}}v_1^2v_4 + \frac{2415}{2^{10}}v_1v_2v_3 - \frac{315}{2^9}v_1v_5 + \frac{375}{2^{11}}v_2^3 - \\
& - \frac{165}{2^9}v_2v_4 - \frac{315}{2^{10}}v_3^2 + \frac{35}{2^8}v_6) + \mu_n^2(-\frac{209055}{2^{16}}v_1^6 + \\
& + \frac{239985}{2^{14}}v_1^4v_2 - \frac{23685}{2^{11}}v_1^3v_3 - \frac{62013}{2^{12}}v_1^2v_2^2 + \\
& + \frac{8533}{2^{10}}v_1^2v_4 + \frac{7335}{2^9}v_1v_2v_3 - \frac{1365}{2^8}v_1v_5 + \frac{1707}{2^{10}}v_2^3 + \\
& + \frac{885}{2^8}v_2v_4 - \frac{1085}{2^9}v_3^2 + \frac{245}{2^7}v_6) - \frac{101479}{2^{17}}v_1^6 + \\
& + \frac{131817}{2^{15}}v_1^4v_2 - \frac{14777}{2^{12}}v_1^3v_3 - \frac{40261}{2^{13}}v_1^2v_2^2 + \\
& + \frac{6055}{2^{11}}v_1^2v_4 + \frac{5667}{2^{10}}v_1v_2v_3 - \frac{1155}{2^9}v_1v_5 + \frac{1539}{2^{11}}v_2^3 - \\
& - \frac{945}{2^9}v_2v_4 - \frac{1107}{2^{10}}v_3^3 + \frac{315}{2^8}v_0] + O(h^4),
\end{aligned}
$$

где $\mu_n = 2n + 1$; $2V(x) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k x^{k+2}$.

Список литературы

[1] Drummond J. E., *The unharmonic oscillator. Perturbation series for cubic and quartic energy distortion*, J. Phys. A. **14** (1981), 1651–1661.

[2] Долгов А. Д., Попов В. С., *Высшие порядки и структура ряда теории возмущений для ангармонического осциллятора*, ЖЭТФ **79**, вып. 6 (1976), 201—2026.

[3] Славянов С. Ю., *Асимптотика сингулярных задач Штурма – Лиувилля по большому параметру в случае близких точек поворота*, Дифференц. уравнения **5**, вып. 2 (1969), 313–325.

[4] Wentzel G., *Eine Verallgemeinerung der Quanten bedingung für die Zwecke der Wellenmechanic*, Z. Phys. **38** (1926), 518–524.

[5] Fröman N., Fröman P. O., *On Wentzel's proof of the quantization condition for a single-well potential*, Mat. Phys. **18** (1977), 96–99.

[6] Федорюк М. В., *Асимптотические методы для решения линейных дифференциальных уравнений*, Наука, М., 1983, с. 1–295.

Поступило 23 января 1989 г.

Стокгольмский университет

Ленинградский государственный университет
НИИФ
198904, Ст. Петергоф, Ульяновская, 1