Письма в ЖЭТФ, том 45, вып. 7, стр. 323 – 326 *10 апреля 1987 г.*

1/n-РАЗЛОЖЕНИЕ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

В.Д.Мур, В.С.Попов

$1/n$-разложение применяется к вычислению волновых функций. Получены аналитические формулы, справедливые для произвольного гладкого потенциала $V(r)$, в частности, для асимптотических коэффициентов при $r \to 0$ и $r \to \infty$. Сравнение с численными расчетами показывает, что волновая функция в нуле вычисляется с хорошей точностью.

1. $1/n$-разложение используется в различных областях теоретической физики, включая квантовую механику, статистическую физику и теорию поля [1-4]. В [5] показано, что с его помощью можно находить энергии и ширины резонансных состояний. Успешным оказалось также использование $1/n$-разложения в теории эффекта Штарка в сильном поле [6].

В перечисленных работах рассматривалось $1/n$-разложение для энергии уровней:

$$\epsilon \equiv 2n^2 E_{nl} = \epsilon^{(0)} + \frac{\epsilon^{(1)}}{n} + \frac{\epsilon^{(2)}}{n^2} + \ldots , \tag{1}$$

причем первый член ряда $\epsilon^{(0)}$ соответствует энергии классической частицы, покоящейся в точке минимума эффективного потенциала $U(r) = V(r) + l\ (l+1)/2r^2$, а следующие коэффициенты $\epsilon^{(k)}$ вычисляются с помощью рекуррентных соотношений.

Естественно применить $1/n$-разложение к вычислению волновых функций и т.п. величин. Некоторые результаты в этом направлении содержатся в [7,8]; мы, однако, используем иной подход. Не ставя себе целью достижение очень высокой точности расчета, получим аналитические формулы, позволяющие с разумной ($\lesssim 1\%$) точностью вычислять волновые функции $\psi_{nl}(r)$, в том числе в окрестности сингулярных точек ($r \to 0,\ r \to \infty$). Такая задача часто встречается в физике¹⁾. При вычислении $\psi_{nl}(0)$ с помощью численного решения уравнения Шредингера возникают вычислительные трудности в случае состояний с большими l, в то время как $1/n$-разложение сходится тем лучше, чем больше l.

2. Волновые функции и $\psi(0)$. Рассмотрим экранированный кулоновский потенциал

$$V(r) = -r^{-1} f(\mu r), \qquad \hbar = m = e = 1. \tag{2}$$

Полагая $x = \mu r$, $\nu = n^2 \mu$, $\epsilon = 2n^2 E_{nl}$, $\rho = (l + {}^1/2)/n$ и $\Psi_{lm}(\mathbf{r}) = r^{-1} \chi_l(r)\, Y_{lm}(\mathbf{r}/r)$, из уравнения Шредингера

$$\frac{d^2 \chi_l}{dx^2} - n^2 Q^2(x)\ \chi_l = 0, \quad Q(x) = \left[\frac{\rho^2}{x^2} - \frac{2f(x)}{\nu x} - \frac{\epsilon}{\nu^2} \right]^{1/2} \tag{3}$$

при $n \to \infty$ и $k = n - l - 1 << n$ следует, что частица находится вблизи классической точки равновесия $x = x_0 = \mu r_0$, определяемой из уравнения [5] $xf - x^2 f' = \nu$. С учетом этого полагаем в (3): $x = x_0(1 + \xi n^{-1/2})$, причем ξ остается порядка единицы, когда $n \to \infty$. В области $|\xi| << n^{1/2}$ $\chi_l(x)$ совпадает с волновой функцией k-го уровня гармонического осциллятора с частотой ω,

$$\omega = \left[\frac{h(x_0)}{g(x_0)} \right]^{1/2}, \qquad g = f - xf', \quad h = f - xf' - x^2 f'' . \tag{4}$$

С помощью метода ВКБ эта функция может быть продолжена в подбарьерную область. В частности,

$$\chi_{nl}(r) = c_{nl}\, \mu^{l+3/2}\, r^{l+1} + \ldots , \quad r \to 0, \tag{5}$$

где $\int_0^\infty \chi^2_{nl}(r)\, dr = 1$ и c_{nl} — безразмерный коэффициент. Мы ограничимся здесь случаем $k = 0$ ($n = l + 1$, безузельные состояния)

$$c_{n,n-1} = \left(\frac{n\,\omega^3}{\pi x_0^2} \right)^{1/4} \exp\{ -(nJ_0 + J_1) \} , \tag{6}$$

---

¹⁾ Значения $\psi^2(0)$ необходимы при вычислении аннигиляционных ширин квазиядерных систем (типа $\bar{p}p$ [9]), ширин распада чармония [10] и четырехкварковых связанных состояний [11], и т.д. Волновая функция при $r \to \infty$ используется, например, при вычислении эффективного радиуса [12,13].

где

$$J_0 = \ln x_0 + \int_0^{x_0} dx\, [Q_0(x) - x^{-1}],$$

$$J_1 = \frac{1}{2}\int_0^{x_0} dx \left\{ \frac{x_0}{x(x_0 - x)} - [x^{-2} + (\omega - 1) x_0^{-2}]\, Q_0^{-1}(x) \right\} \qquad (6')$$

ω определена в (4), $Q_0^2(x) = x^{-2} - \dfrac{2f(x)}{\nu x} - \dfrac{\epsilon^{(0)}}{\nu^2}$ и $\epsilon^{(0)} = (x^2 f'^2 - f^2)|_{x = x_0}$. Перейдем к примерам.

3. Для степенных потенциалов

$$V(r) = r^N/N, \quad \mu = 1, \qquad (7)$$

формула (6) имеет хорошую точность даже для основного состояния. Обозначая через ρ_l отношение приближенного коэффициента (6) к точному коэффициенту $c_{l+1,l}$, имеем: $\rho_0 = 1{,}0209$ для $N = -1$ (кулоновский потенциал), $\rho_0 = 0{,}9952$ для $N = 1$, $\rho_0 = 0{,}9803$ для $N = 2$ (гармонический осциллятор) и т.д., причем $\rho_l \to 1$ при $l \to \infty$. Например, $\rho_l = 1 + (48l)^{-1} + \ldots$ для $N = -1$.

При описании кваркония и многокварковых систем часто используется потенциал воронки

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r} + \frac{r}{a^2}. \qquad (8)$$

В этом случае $\mu = (\kappa a^2)^{-1/2}$, $f(x) = 1 - x^2$, $\omega = [(1 + 3x_0^2)/(1 + x_0^2)]^{1/2}$, x_0 определяется из уравнения $x^3 + x = n^2\mu$, а интегралы J_0 и J_1 легко вычисляются аналитически. Сравнение (6) с результатами численных расчетов [11] дано в таблице. Помимо l, указаны также значения кулоновского параметра [10] $\lambda = \kappa (2m_q a)^{2/3}$. При этом $c_{l+1,l}$ — безразмерные коэффициенты, вычисленные по (6), а C_l имеют размерность (ГэВ)$^{l+3/2}$ и определяются нормировкой, принятой в [11]. Степень согласия между приближением (6) и точными коэффициентами даже для небольших l является поразительной.

Точность $1/n$-разложения при $r \to 0$ (потенциал воронки)

l	λ	$c_{l+1,l}$	C_l по формуле (6)	C_l численный расчет [11]
1	0,43768	2,197 (−1)	5,940 (−2)	5,955 (−2)
1	2,74036	5,290	1,430	1,43317
3	2,22329	6,943 (−1)	1,940 (−2)	1,943 (−2)
4	2,87926	6,152 (−1)	1,559 (−3)	1,561 (−3)
6	3,56631	1,944 (−1)	1,675 (−4)	1,677 (−4)

Примечание: В скобках указан порядок числа: 2,197 (−1) = 0,2197, и т.д.

С помощью (6) нетрудно проанализировать, как меняется волновая функция в нуле при той или иной модификации $V(r)$. Так, запирающий потенциал в (8) может включаться при $r > r_1$ (это отвечает тому, что струна между кварками образуется, начиная лишь с расстояний $r \geqslant r_1$). Из (6) следует, что $\psi(0)$ при этом увеличивается ($x_0 \approx \nu^{1/3} \gg 1$ при $n \gg 1$, и коэффициент $c_{n,n-1}$ возрастает в $1 + \dfrac{4n}{3}\left(1 + \dfrac{1}{4x_0^2}\right)\dfrac{r_1}{r_0}$ раз).

4. Аналогичные результаты могут быть получены для асимптотического коэффициента $\chi_l(r)$ при $r \to \infty$. Ограничимся состояниями с нулевой энергией (момент возникновения первого l-уровня в потенциале $V(r)$). В этом случае

$$\chi_l(r) \underset{(r\to\infty)}{=} A_l r^{-l} + \ldots, \qquad r_l = -2^{1-2l} [(2l)!/l!A_l]^2, \tag{9}$$

где χ_l – нормированная ($l \neq 0$) волновая функция, а r_l – эффективный радиус, являющийся существенным параметром в теории низкоэнергетического рассеяния (см., например, [14]). $1/n$-разложение дает для A_l формулу типа (6), а для эффективного радиуса

$$r_l = -\frac{4(2l)!}{2l+1}\left(\frac{x_0^2}{\omega}\right)^{3/2} \exp\{-[(2l+1)I_0 + I_1]\}, \tag{10}$$

где $l \geqslant 1$,

$$I_0 = \ln x_0 + \int_{x_0}^{\infty} \frac{dx}{x}\left\{1 - \left[1 - \frac{xf(x)}{x_0 f(x_0)}\right]^{1/2}\right\},$$

а выражение для I_1 более громоздко и за недостатком места здесь не приводится. Для потенциала Юкавы, $f(x) = \exp(-x)$, имеем: $x_0 = 1$, $\omega = 2^{-1/2}$ (при $E = 0$) и $I_0 = 0{,}730$, $I_1 = -0{,}203$. Сравнение (10) с численным расчетом [13] показывает, что для p- и d-волн эта формула недостаточно точна[2)], однако с ростом l ее точность улучшается (так, при $l = 4$ $r_l = -67{,}2\,\mu^7$ согласно [13], а по (10) $r_l = -52\mu^7$). Таким образом, формула (10) может быть полезна в случае $l \gg 1$.

5. Формулы (6), (10) могут быть обобщены на состояния с узлами ($k = 1, 2, \ldots \ll n$). Кроме того, представляется желательным получить с помощью $1/n$-разложения асимптотику $\chi_l(r)$ при $r \to \infty$ для связанных состояний ($E < 0$). Мы надеемся вернуться к этим вопросам в дальнейшем.

Авторы благодарны А.М.Бадалян за стимулирующие обсуждения в ходе работы, Б.М.Карнакову, В.Е.Маркушину и И.С.Шапиро за обсуждение результатов, а также С.Г.Позднякову и А.В.Щеблыкину за помощь в численных расчетах.

Литература

1. *Witten E.* In: Recent Developments in Gauge Theories, ed. by G.t'Hooft, Plenum Press, N.Y., 1980.
2. *Dolgov A.D., Popov V.S.* Phys. Lett., 1979, **86B**, 185; *Долгов А.Д., Елецкий В.Л., Попов В.С.* Препринт ИТЭФ-72, М., 1979.
3. *Bender C., Mlodinov L.D., Papanicolaou N.* Phys. Rev., 1982, **A25**, 1305.
4. *Sukhatme U., Imbo T.* Phys. Rev., 1983, **D28**, 418.
5. *Попов В.С., Вайнберг В.М., Мур В.Д.* Письма в ЖЭТФ, 1985, **41**, 439; ЯФ, 1986, **44**, 1103.
6. *Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В.* Письма в ЖЭТФ, 1986, **44**, 9.
7. *Imbo T., Pagnamenta A., Sukhatme U.* Phys. Lett., 1984, **105A**, 183.
8. *Imbo T., Sukhatme U.* Phys. Rev., 1985, **D31**, 2655.
9. *Shapiro I.S.* Phys. Reps., 1978, **35**, 129.
10. *Eichten E., Gottfried K. et al.* Phys. Rev., 1978, **D17**, 3090.
11. *Badalyan A.M., Ioffe B.L., Smilga A.V.* Nucl. Phys., 1987, **B281**, 85.
12. *Мур В.Д., Попов В.С.* ТМФ, 1976, **27**, 204.
13. *Мур В.Д., Кудрявцев А.Е., Попов В.С.* ЯФ, 1983, **37**, 1417.
14. *Burke P.G.* Potential Scattering in Atomic Physics. Plenum Press, N.Y., 1977.

Институт теоретической
и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
16 февраля 1987 г.

---

2) По-видимому, это связано с тем, что формула (10), в отличие от (6), относится к $E = 0$. Для связанных состояний точность аналогичной формулы должна повышаться с ростом энергии связи.