Письма в ЖЭТФ, том 30, вып. 6, стр. 379 – 383 *20 сентября 1979 г.*

НОВЫЙ ПОДХОД К НАХОЖДЕНИЮ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. СХОДЯЩАЯСЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

А.В.Турбинер

Построена теория возмущений (ТВ), каждый член которой выражается в квадратурах. Сформулирована процедура выбора нулевого приближения, приводящая к быстрой сходимости ряда ТВ. В качестве примера вычислены основное и первое возбужденное состояния в потенциале $V(x) = x^{2n}$ $(n = 2, 3, 4)$.

В настоящее время как и много лет назад в квантовой механике, также как и в квантовой теории поля одной из центральных проблем является проблема сильной связи. До сих пор отсутствуют надежные аналитические методы исследования области больших констант взаимодействия. Причем, если в случае одномерных квантовомеханических систем эта область поддается изучению с помощью численных методов, то при переходе к задачам, не сводящимся к одномерным, и эти методы оказываются почти всегда бессильны. Остановимся более подробно на причинах этой неудовлетворительной ситуации в том случае, когда ищется спектр связанных состояний в какой-либо квантовомеханической системе (сейчас эти задачи особенно актуальны в связи с изучением физики новых частиц). Обычно при решении таких задач используется стандартная теории возмущений Релея – Шредингера [1]. Однако, для того чтобы воспользоваться этим методом необходимо знать весь спектр невозмущенной задачи и его волновые функции, т. е. невозмущенная задача должна быть точно решаемой. Поскольку количество точно решаемых задач довольно ограниченное, то обычно *потенциалы взаимодействия являются более сингулярными, чем потенциалы невозмущенных задач*. А это, в свою очередь, приводит к расходимости ряда ТВ. Поэтому информация, извлекаемая из ряда ТВ, довольно скудна и касается, в основном, только области слабой связи.

В данной работе будет сделано следующее: 1) будет построена для одномерного случая ТВ, в которой каждый член выражается в квадратурах и которая не требует знания всего спектра невозмущенной задачи, и 2) будет сформулирован рецепт выбора невозмущенной задачи, позволяющий получить быстросходящийся ряд ТВ.

Перейдем к построению ТВ. Пусть невозмущенная задача описывается гамильтонианом $H_0 = p^2 + V_0(x)$, а потенциал взаимодействия равен $\lambda V_1(x)$. Идея метода состоит в переходе от *линейного* уравнения Шредингера с помощью замены $y = -\psi'/\psi$ (ψ – волновая функция) к *нелинейному* уравнению Риккати

$$y^1 - y^2 = E - V_0(x) - \lambda V_1(x) \tag{1}$$

и последующем построении ТВ по параметру λ (уже в уравнении Риккати) для y и E $\left(y = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \lambda^n y_n(x),\quad E = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_n\right)$. Тогда для того чтобы вычислить n-й член ряда ТВ необходимо будет решить *линейное* уравнение первого порядка, при условии что известны предыдущие $(n-1)$ членов

$$y_1^1 - 2y_0 y_1 = E_1 - V_1(x), \tag{2}$$

$$y_n^1 - 2y_0 y_n = E_n + \sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i}, \qquad n \geqslant 2,$$

где y_0 и E_0 отвечают какому-нибудь уровню энергии невозмущенной задачи. Накладывая очевидные граничные условия $y_i(\pm\infty) = 0$, получаем решения (2)

$$y_1 = \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^{x} (E_1 - V_1(x)\psi_0^2\,dx, \qquad E_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} V_1(x)\psi_0^2\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2\,dx}, \tag{3а}$$

$$y_n = \psi_0^{-2} \int_{-\infty}^{x} (E_n + \sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-i})\psi_0^2\,dx, \qquad E_n = -\frac{\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^{n-1} y_i y_{n-1} \psi_0^2\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2\,dx}, \tag{3б}$$

где ψ_0 – волновая функция, по которой строятся y_0 и E_0. Подчеркнем, что E_1 совпадает с поправкой, получаемой с помощью стандартной ТВ Релея – Шредингера. Выражая очевидным образом поправки ψ_n к волновой функции через поправки y_n, определяя при этом надлежащим образом константы интегрирования, можно получить правила сумм для рядов, встречающихся в обычной ТВ [1] через квадратуры [3]. Таким образом, для определения положения какого-либо уровня совсем не обязательно знать весь спектр невозмущенной задачи[1]. Стоит отметить, что Долгов и Попов [2], изучая обычную расходящуюся ТВ по для ангармонического осциллятора ($V_0 = x^2$, $V_1 = x^{2n}$), заметили, что уравнение Риккати очень удобно для вычисления членов ряда ТВ, поскольку в этом случае $y_n(x)$ являются полиномами по x. Это наблюдение позволило им легко перекрыть результаты Бендера и Ву [3], детально исследовав структуру ряда ТВ.

---

[1] При построении ТВ для возбужденных уровней имеются трудности, связанные с проблемой ортогональности волновых функций разных состояний. Обсуждение этих вопросов и пути их преодоления будут рассмотрены в подробной статье.

Величина ΔE дает значение соответствующего члена ТВ.
Цифры в скобках указывают относительное отклонение от точного ответа

Потенциал / № приближения		$V(x) = x^4$		$V(x) = x^6$		$V(x) = x^8$	
		нулевой уровень	первый уровень	нулевой уровень	первый уровень	нулевой уровень	первый уровень
0	E	1	3	1	3	1	3
	ΔE	1	3	1	3	1	3
1	E	1,13359(6,9%)	3,94939 (4%)	1,15841(1,2%)	4,35903(0,5%)	1,23476(0,73%)	4,87684(2,5%)
	ΔE	0,13359	0,94939	0,15841	1,35903	0,23476	1,87684
2	E	1,09519(2,3%)	3,84482(1,2%)	1,14747(0,2%)	4,33976(0,03%)	1,225595(0,02%)	4,75414(0,036%)
	ΔE	0,04841	0,10458	0,01094	0,01927	0,009165	0,122696
3	E	1,06976(0,9%)	–	–	–	–	–
	ΔE	0,01542	–	–	–	–	–
$E_{\text{точное}}$		1,06036211	3,79967315	1,14480246	4,33859882	1,22582010	4,75587451

Теперь перейдем к вопросу о выборе нулевого приближения в уравнении [1]. Рецепт выбора волновой функции нулевого приближения при нахождении какого-либо уровня в потенциале $V(x)$ состоит в том, что потенциал $V_0(x)$, отвечающий $\psi_0(x)$ (т. е. $V_0(x) - E_0 = \psi_0''/\psi_0$), содержал бы *все* сингулярности потенциала $V(x)$. В этом случае потенциал возмущения $\lambda V_1(x)$ равен разности $V(x)$ и $V_0(x)$ и мал по сравнению с $V(x)$. Очевидно, что ряд ТВ в этом случае будет сходящимся.

В качестве примера вычислим положения нулевого и первого уровней в потенциале $V(x) = x^{2n}$, $n = 2, 3, 4$. Волновые функции нулевого приближения возьмем в виде

$$ {}_n\psi_0^{(0)} = \exp\left\{-\frac{x^2}{2} - \frac{x^{n+1}}{n+1}\right\}, \qquad {}_n\psi_0^{(1)} = x\exp\left\{-\frac{x^2}{2} - \frac{x^{n+1}}{n+1}\right\} \tag{4} $$

соответственно. Этим волновым функциям отвечают потенциалы и уровни

$$ {}_nV_0^{(0)}(x) = -\{nx^{n-1} - 2x^{n+1} - x^2\} + x^{2n}, \quad {}_nE_0^{(0)} = 1, \tag{5а} $$

$$ {}_nV_0^{(1)}(x) = -\{(n+2)x^{n-1} - 2x^{n+1} - x^2\} + x^{2n}, \quad {}_nE_0^{(1)} = 3. \tag{5б} $$

Выражения, стоящие в (5а, б) в фигурных скобках, представляют собой $V_1(x)$[1]. Развивая теперь ТВ, описанную ранее, и подставляя (4) и (5а, б) в (3а, б), вычисляем положения уровней. Результаты вычислений приведены в таблице, где они также сравниваются с результатами, полученными при численном решении уравнения Шредингера. Видно, что уже второе приближение дает довольно высокую точность. Стоит особо отметить, что можно доказать сходимость ряда ТВ в этом случае, построив для этого мажорирующую последовательность[2].

Резюмируя подчеркнем, что вышеописанным образом можно довольно просто проводить исследования спектров различных потенциалов и, в частности, вычислять волновые функции, отвечающие этим спектрам, в квантовомеханических одномерных задачах. Очевидно, что этим методом можно изучать область сильной связи. Этому вопросу будет посвящена следующая работа, в которой будет рассмотрена проблема ангармонического осциллятора и потенциала с двумя минимумами. Обобщение метода на многомерные задачи со сферической симметрией совершенно тривиально, хотя обобщение на задачи без сферической симметрии является довольно сложным, поскольку многомерный аналог уравнения [1] представляет собой довольно сложную конструкцию. Но тем не менее в двумерном случае всю программу удается реализовать. Все эти результаты будут опубликованы в ближайшее время.

---

[1] В данном случае $\lambda = 1$.

[2] Доказательство будет опубликовано в подробной статье. Здесь отметим только наводящее соображение, что не видно физических причин для возникновения сингулярностей в конечных точках λ-плоскости.

В заключение, я считаю своим приятным долгом поблагодарить К.А.Тер-Мартиросяна, Б.Л.Иоффе и Ю.А.Симонова за полезные обсуждения и интерес к работе, а также М.С.Маринова и В.Е.Шестопала за проведение численных расчетов по решению уравнения Шредингера с потенциалом $V(x) = x^{2n}$.

Институт теоретической
и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
20 июля 1979 г.

Литература

[1] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, § 38, М., 1974.

[2] А.Д.Долгов, В.С.Попов. ЖЭТФ, 75, 2010, 1978.

[3] C.M.Bender, T.T.Wu. Phys. Rev., 184, 1231, 1969; D7, 1620, 1973.