Письма в ЖЭТФ, том 33, вып. 3, стр. 181 – 185 *5 февраля 1981 г.*

ОБ АЛГЕБРАИЗАЦИИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

А.В.Турбинер

Показано, что если невозмущенная задача является многомерным гармоническим осциллятором или водородоподобной системой, а возмущение – полиномиально, то построение теории возмущений становится чисто алгебраической задачей. В качестве примера рассмотрена задача о водородоподобной системе в параллельных электрическом и магнитном полях $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$. Вычислена поправка к энергии основного состояния порядка $\mathcal{E}^2\mathcal{H}^2$. Некоторые структуры произвольной "поправки к волновой функции" найдены в явном виде.

1. Теория возмущений (ТВ) Релея – Шредингера является одним из наиболее широко используемых методов решения задач о спектре связанных состояний. Однако этот подход имеет такой существенный недостаток как необходимость знания всего спектра невозмущенной задачи и сопряжен с такими, часто трудно преодолимыми технически сложностями как вычисление матричных элементов и суммированием многократных рядов. В этой статье будет показано, что в случае таких часто встречающихся задач, как полиномиальное возмущение гармонического осциллятора или кулоновской системы, задача построения ТВ – *чисто алгебраическая*, сводящаяся к решению рекуррентных соотношений. Они допускают простую формализацию применительно к ЭВМ.

2. В работе [1] был сформулирован подход к проблеме спектра в квантовой механике, основанный на "процедуре нелинеаризации" (см. также [2, 3]). Основным его достоинством была необязательность знания всего спектра невозмущенной задачи. Кратко напомним основные моменты подхода. Вместо волновой функции ψ перейдем к ее логарифмической производной $\mathbf{y} \equiv -\nabla\phi = -\nabla \ln\psi$. Тогда уравнение Шредингера будет иметь вид [1, 2]

$$\operatorname{div}\mathbf{y} - \mathbf{y}^2 = E - V. \qquad (1)$$

Пусть теперь $V = V_o + \lambda V_1$. Разовьем ТВ по параметру λ для (1)

$$y = \Sigma \lambda^n y_n, \quad E = \Sigma \lambda^n E_n. \tag{2}$$

Тогда поправка определяется из уравнения [1, 2]

$$\Delta \phi_n - 2 y_o \nabla \phi_n = E_n - Q_n, \quad n \geqslant 1, \tag{3}$$

где $y_o = -\nabla \ln \psi_o$, а E_n и Q_n находятся из предыдущих итераций

$$Q_1 = V_1, \quad Q_n = -\sum_{i=1}^{n-1} y_i\, y_{n-i}, \quad E_n = \int Q_n \psi_o^2\, dx / \int \psi_o^2\, dx. \tag{4}$$

Отметим, что Q_n можно придать смысл потенциала возмущения. В случае возбужденных состояний формула для E_n в (4) несколько модифицируется [3]. Далее она нам не понадобится и мы не будем на ней останавливаться.

3. Целью данной работы является изучение вопроса о построении ТВ в случаях, когда невозмущенный потенциал отвечает гармоническому осциллятору

$$V_o = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i^2, \quad a_i > 0 \tag{5}$$

и водородоподобной системе

$$V_o = -\frac{2a}{r}, \quad a > 0, \tag{6}$$

а возмущение полиномиально

$$V_1 = \sum_{i_1 i_2 \ldots i_n}^{i_{1max} \ldots i_{n\,max}} a_{i_1 i_2 \ldots i_n} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \ldots x_n^{i_n} \tag{7}$$

или (применительно к потенциалу (6))

$$V_1 = \sum_{l,m}^{l_{max}} R_{lm}(r)\, Y_l^m(\mu, \phi), \quad R_{lm} = \sum_{k=1}^{k_{max}} a_k r^k \tag{8}$$

причем $r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{1/2}$, $\mu = \cos\Theta$, Y_l^m — сферические гармоники. Сформулируем теперь основные утверждения нашей работы.

Утверждение 1. При построении ТВ для основного состояния потенциала (5) в случае полиномиальности возмущения, поправки ϕ_n являются полиномами. Причем, если максимальная степень по переменной x_k равна l_k, то максимальная степень x_k в поправке ϕ_n лежит в интервале от $nl_k - 2n + 2$ до nl_k.

Утверждение 2. При построении ТВ для основного состояния потенциала (6) в случае, когда возмущение содержит конечное число гармоник с полиномиальными по r коэффициентами, поправка ϕ_n содержит конечное число гармоник с полиномиальными коэффициентами.

Оба эти утверждения кажутся довольно очевидными и могут быть легко доказаны по индукции. Поскольку, если предположить, что ϕ_l при $l < n$ – полиномы, то тогда ϕ_n (см. (4)) – полином. Поэтому задача сводится к доказательству существования полиномиального решения уравнения (3) с полиномиальной правой частью. Мы не будем проводить доказательства. Отметим только, что в случае потенциала (5), когда $\mathrm{y}_o = (\alpha_1 x_1, \alpha_2 x_2, \ldots, \alpha_n x_n)$, поправка ϕ_1 содержит те же комбинации степеней$(i_1 i_2 \ldots i_n)$, что и потенциал V_1, и подобные им комбинации $(i_1 - 2k_1, i_2 - 2k_2, \ldots i_n - 2k_n)$, где $k_1, k_2 \ldots k_n$ – целые, положительные числа[1]. Можно показать, что подобные утверждения – (с некоторыми модификациями) справедливы в случае возбужденных состояний.

Итак задача нахождения поправок ϕ_n и E_n [2] сводится к решению рекуррентных соотношений, т. е. является алгебраической. Более того, без особого труда можно написать явное решение этих рекуррентных соотношений для коэффициентов при старших степенях этих полиномов. Их решение с помощью ЭВМ также не слишком сложно.

4. Обсудим вкратце полученные результаты. Утверждение 1 кажется довольно естественным, если вспомнить о наличии довольно ограниченного числа ненулевых матричных элементов переходов в случае возмущений типа (7) (см., например, [4]). Тогда суммы по промежуточным состояниям становятся конечными и поправки к волновой функции имеют вид полинома, умноженного на экспоненту. Впервые этот факт был систематически исследован Бендером и Ву [5] в случае одномерного, а в компании с Банксом [6] для случая двумерного ангармонических осцилляторов. Ими были выписаны рекуррентные соотношения, исследованы свойства возникающих полиномов, найдены 75 членов ряда ТВ для энергии основного состояния. Полиномиальность ϕ_n в одномерном случае также использовалась и в других работах, например в [7], в двумерном случае – в [3].

Утверждение 2 выглядит значительно более нетривиальным. Однако полиномиальность ТВ в этом случае становится почти очевидной, если учесть, что кулоновская система эквивалентна четырехмерному гармоническому осциллятору [8]. Факт полиномиальности ТВ отмечался в [2] в случае мультипольного статического возмущения, а в [9, 10] – для штарк-эффекта и эффекта Зеемана на водороде.

5. Для того чтобы продемонстрировать возможности описанного в работе метода, рассмотрим классическую задачу о водородоподобной системе (водородоподобный атом, экситон) в параллельных электрическом $\mathcal{E}$ и магнитном $\mathcal{H}$ полях. До сих пор эта задача практически не исследована количественно, имеется только качественное рассмотрение [11]. Она имеет важные приложения в астрофизике, физике полупроводников, спектроскопии.

В этой статье мы ограничимся изучением основного состояния, вычислим член $\sim \mathcal{E}^2 \mathcal{H}^2$, существенный в случае слабых полей и опишем общую структуру поправок ϕ_{kn}. Итак, $\mathcal{E} \parallel \mathcal{H}$ потенциал в случае ос-

---

[1] Естественно, в этих комбинациях $i_l - 2k_l \geqslant 0$.

[2] Поправка E_n выражается через коэффициенты ϕ_n при членах $\sim x_i^2$.

новного состояния имеет вид

$$V_1 = \mathcal{E}z + \mathcal{H}^2(x^2+y^2) = -\mathcal{E}rP_1(\mu) + \mathcal{H}^2 r^2 P_2(\mu)\,. \tag{9}$$

Будем строить ТВ по полям $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$

$$E = \sum_{k,\,n} E_{kn}\mathcal{E}^k\mathcal{H}^{2n}, \quad \phi = \sum_{k,\,n}\phi_{kn}\mathcal{E}^k\mathcal{H}^{2n} \tag{10}$$

причем $\phi_o = ar$, $E_o = -a^2$; формулы (4) будут в этом случае иметь несколько модифицированный вид. Анализ уравнения (3) показывает, что произвольная поправка ϕ_{kn} имеет структуру

$$\phi_{kn} = \sum_{l=o}^{n+[k/2]} R_{k,n,2n+k-2l}\, P_{2n+k-2l}(\mu);$$

$$R_{k,n,2n+k-2l} = \sum_{\substack{m=2n+k-2l\\ m\neq 0}}^{2n+k+1} a_m r^m. \tag{11}$$

Подчеркнем обстоятельство, что полином при старшей гармонике P_{2n+k} – двучленный, при предыдущей P_{2n+k-2} – четырехчленный и т. д. Аналогичная структура была отмечена ранее при изучении эффекта Зеемана ($\mathcal{E}=0$) в [10]. Некоторые коэффициенты этих полиномов могут быть легко найдены в явном виде. Например, полином при старшей гармонике

$$-R_{k,n,2n+k} = \frac{(2n+k)!^2(2n+2k)!\,2^{-2k}}{(4n+2k)!\,(n+k)!\,k!\,n!\,(2n+2k-1)!}\;\frac{r^{2n+k+1}}{3^n a^{2n+2k-1}} +$$

$$+\frac{(2n+k)!^2(n+k-1)!}{2(2k+4n)!\,k!\,n!}\left\{1+\frac{(2n+2k)!\,(n+k)2^{-2n-2k+1}}{(n+k)!^2(2n+k)}\right\}\times$$

$$\times\left(\frac{4}{3}\right)^n\frac{r^{2n+k}}{a^{2n+2k}}\,. \tag{12}$$

При $k=0$ ($\mathcal{E}\equiv 0$) (12) переходит в формулу, полученную ранее в [10]. Поправки E_{kn} просто связаны с ϕ_{kn}. Приведем первые члены разложения E в явном виде

$$E = -a^2 - \frac{9}{8a^4}\mathcal{E}^2 + \frac{2}{a^2}\mathcal{H}^2 - \frac{53}{6a^6}\mathcal{H}^4 - \frac{3555}{512a^{10}}\mathcal{E}^4 + \frac{317}{48a^8}\mathcal{E}^2\mathcal{H}^2 + \dots \tag{13}$$

Отметим, что коэффициенты при членах четвертого порядка практически одинаковой величины. В принципе, без особого труда могут быть найдены следующие поправки. Однако, в связи с асимптотической природой ряда (13), не ясно нужно ли это делать. Аналогичным образом, как в [10] для случая $\mathcal{E} \equiv 0$, могут быть рассмотрены возбужденные состояния. Это будет описано в другой работе.

Итак, мы показали, что в двух важных частных случаях построение ТВ представляет собой алгебраическую задачу. Видимо, аналогичное явление будет иметь место и в других случаях, где нулевое приближение – точно решаемая задача.

Институт теоретической и экспериментальной физики

Поступила в редакцию 2 декабря 1980 г.

Литература

[1] А.В.Турбинер. Препринт ИТЭФ-117, 1979.

[2] C.K.Au.Y.Aharonov. Phys. Rev., A20, 2245, 1979.

[3] А.В.Турбинер. Препринт ИТЭФ-139, 1979; ЖЭТФ, 79, 1719, 1980.

[4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, М., изд. Наука, 1974.

[5] C.Bender, T.T.Wu. Phys. Rev., 184, 1231, 1969.

[6] T.Banks, C.M.Bender, T.T.Wu. Phys. Rev., D8, 3346, 1973.

[7] А.Д.Долгов, В.С.Попов. ЖЭТФ, 75, 2010, 1978; S.Hikami, E.Brézin. J. of Phys. A, 12, 759, 1979.

[8] A.C.Chen. Phys. Rev., A22, 333, 1980.

[9] С.П.Аллилуев, В.Е.Елецкий, В.С.Попов. Phys. Lett., 73A, 103, 1979.

[10] А.В.Турбинер. Препринт ИТЭФ-99, 1980.

[11] Л.А.Буркова, И.Е.Дзялошинский, Г.Ф.Друкарев, Б.С.Монозон. ЖЭТФ, 71, 526, 1976.