

РАСХОДЯЩИЕСЯ РЯДЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ И КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

В.С.Попов, В.М.Вайнберг, В.Д.Мур¹⁾

Суммирование расходящихся рядов теории возмущений (ТВ) позволяет определить энергии уровней (реальных, виртуальных и квазистационарных) по коэффициентам ТВ E_k . С помощью предельного перехода к классической механике найдена асимптотика высоковозбужденных уровней с $l = n - 1 \gg 1$, подтверждающая результаты суммирования рядов ТВ.

1. В последние годы достигнуты значительные успехи в вычислениях высших порядков теории возмущений (ТВ), особенно в квантовой механике ^{1–4}. Для ангармонического осциллятора, эффектов Штарка и Зеемана в атоме водорода, экранированного кулоновского потенциала

$$V(r) = -r^{-1}f(\mu r), \quad \hbar = m = e = 1 \quad (1)$$

новые методы ТВ позволяют легко вычислять очень высокие порядки ТВ E_k для энергии уровней (вплоть до $k = 100 \div 200$ в случае основного состояния ^{1–3}). Однако, ряды ТВ в квантовой механике и теории поля, как правило, расходятся из-за факториального роста $|E_k|$ при $k \rightarrow \infty$ ⁵. Поэтому, при восстановлении энергии по коэффициентам ТВ нельзя обойтись без методов суммирования расходящихся рядов. Для этой цели применяют аппроксиманты Паде (АП), преобразование Бореля и т. д. Все эти методы используют то обстоятельство, что высшие порядки ТВ содержат больше информации, чем это можно получить простым вычислением полиномов ТВ.

Мы обсудим результаты суммирования расходящихся рядов ТВ на примере потенциалов²⁾ типа (1).

2. Энергии уровней при $\mu \rightarrow 0$ могут быть представлены формальными рядами Рэлея – Шредингера:

$$E^{(nl)}(\mu) = \sum_{k=0}^{\infty} E_k^{(nl)} \mu^k, \quad \mu \rightarrow 0, \quad (2)$$

(n – главное квантовое число, l – орбитальный момент, $0 \leq l \leq n - 1$). Вычисление коэффициентов E_k при произвольной экранировке $f(\mu r)$ можно свести к рекуррентным соотношениям, удобным для счета на ЭВМ. Для $l = n - 1$ (наинизший уровень с данным l) такие соотношения получены в ³, где приведены также таблицы E_k . С ростом параметра экранирования достигается такое значение $\mu = \mu_c(n, l)$, при котором энергия связи об-

¹⁾ Московский инженерно-физический институт.

²⁾ В частности, $f(x) = \exp(-x)$ отвечает потенциальну Юкавы, $f(x) = x / (e^x - 1)$ – потенциальну Хюльтена, и т. д.

ращается в нуль, и связанный nl -уровень превращается в виртуальный ($l = 0$) или квазистационарный ($l \geq 1$). Было показано^{6, 7}, что в области дискретного спектра ($0 < \mu < \mu_{cr}$) ряды ТВ для многих потенциалов успешно суммируются с помощью АП. Например, для потенциала Юкавы $\mu_{cr}(l+1, l) = 1, 190\ 612; 0, 2201; 0, 09134; 0, 04983; 6, 250 \times 10^{-3}$ и $7, 730 \cdot 10^{-4}$ для $l = 0, 1, 2, 3, 10$ и 30 , соответственно³⁾.

Мы продолжили эти вычисления в область $\mu > \mu_{cr}$. При $l = 0$ суммирование рядов ТВ с помощью АП определяет энергию виртуальных n -уровней по крайней мере до $\mu \sim 10\mu_{cr}$ ⁷. Эти результаты подтверждаются численным решением интегральных уравнений Липпмана – Шингера, аналитически продолженных на второй лист энергии⁹. Для вычисления положения и ширины брейт-вигнеровских резонансов $E^{(nl)} = E_0 - i\Gamma/2$ при $\mu > \mu_{cr}$; $l \neq 0$ необходимо сочетать метод АП с конформным преобразованием $\mu \rightarrow z(\mu)$; подробности см. в^{7, 8}. Часть полученных результатов показана на рис. 1 и рис. 2. Отметим, что вычисленные значения ширин согласуются с пороговым поведением: $\Gamma_{nl}(\mu) \approx C_{nl}(\mu - \mu_{cr})^{1+1/2}$ при $\mu \rightarrow \mu_{cr}(n, l)$. При этом константы C_{nl} нетрудно найти численно.

Перечисленные результаты демонстрируют эффективность суммирования рядов ТВ. Хотя сходимость последовательностей АП $[L/L+j]$ с $j = 0, \pm 1$ и $L \rightarrow \infty$ является хорошей, мы считали необходимым подтверждение результатов суммирования независимым методом.

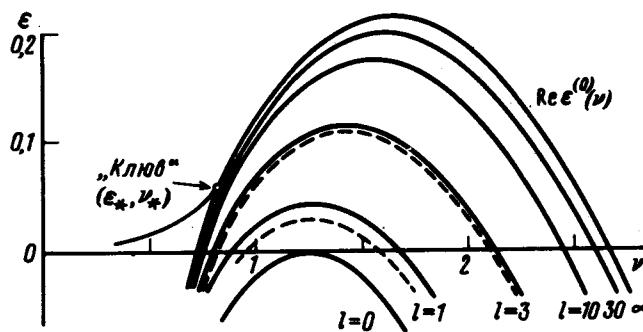


Рис. 1. Потенциал Юкавы. Энергии состояний с $l = n - 1$, полученные суммированием рядов ТВ, в переменных $\epsilon = 2n^2 E^{(nl)}$ и $\nu = n^2 \mu$. Пунктирные кривые соответствуют двум членам $1/n$ – разложения (4). Для $l = 10$ и 30 они совпадают в (в пределах точности рисунка) со сплошными кривыми

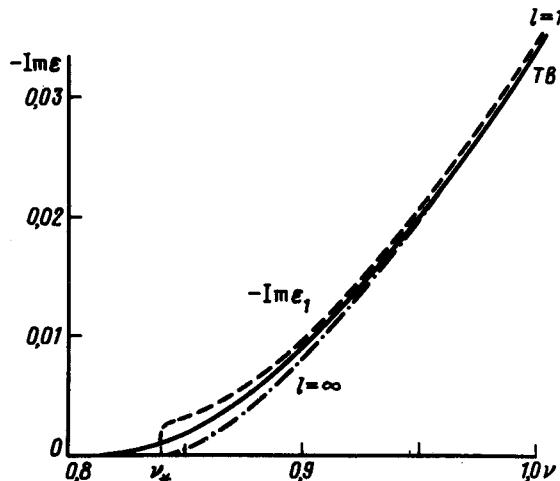


Рис. 2. Значения $-Im \epsilon = n^2 \Gamma_{nl}$ для состояний с $l = n - 1$ в потенциале Юкавы. Сплошная кривая (ТВ) отвечает суммированию ряда (2), пунктирующая – первым двум членам $1/n$ – разложения ($l = 10$)

3. При $n \sim l \gg 1$ эффективный потенциал в уравнении Шредингера $U(r) = -r^{-1}f(\mu r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}$ содержит узкий и глубокий минимум, в который скатывается классическая частица. Если $l = n - 1$ ($n_r = 0$), то при $n \rightarrow \infty$ можно пренебречь квантовыми флюктуациями вокруг классического минимума (их амплитуда $\propto 1/n$). Полагая $E^{(nl)} = \epsilon/2n^2$, $\nu =$

3) Подробнее см. в^{7, 8}, где приведены таблицы μ_{cr} для потенциалов Юкавы и Хильтена и энергии связанных состояний в зависимости от μ/μ_{cr} , вычисленные суммированием рядов ТВ

$= n^2 \mu$ и $x = \mu r$, приходим к уравнениям:

$$\epsilon = x^2 f'^2 - f^2, \quad \nu = x f - x^2 f', \quad (3)$$

которые задают зависимость ϵ от ν параметрически и определяют точку минимума $x_0(\nu)$. Учет квантовых флюктуаций вокруг x_0 позволяет вычислить несколько членов $1/n$ разложения:

$$\epsilon(\nu, l=n-1) = \epsilon^{(0)} + \frac{\epsilon^{(1)}}{n} + \frac{\epsilon^{(2)}}{n^2} + \dots, \quad (4)$$

где $\epsilon^{(0)}(\nu)$ определяется уравнением (3), а первая квантовая поправка равна

$$\epsilon^{(1)} = -[g^2 - g^{3/2} h^{1/2}]_{x=x_0}, \quad g = f - x f', \quad h = f - x f' - x^2 f'' \quad (5)$$

(имеется регулярный способ вычисления следующих поправок $\epsilon^{(k)}$). Как правило, $\epsilon^{(0)}$ – монотонно возрастающая функция ν вплоть до точки $\nu = \nu_*$, в которой $h(\nu_*) = 0$ и происходит столкновение двух классических решений (см. "ключ" на рис. 1). При $\nu \rightarrow \nu_*$ $\epsilon^{(0)}$ и $\epsilon^{(1)}$ имеют особенности вида $(\nu_* - \nu)^{3/2}$ и $(\nu_* - \nu)^{1/2}$. Если $\nu > \nu_*$, то $x_0(\nu)$, $\epsilon^{(0)}$ и $\epsilon^{(1)}$ становятся комплексными. Такое решение не имеет смысла в классической механике, но при переходе к квантовой механике именно оно определяет асимптотику E_0 и Γ при $n \rightarrow \infty$.

Результаты расчета для $f(x) = e^{-x}$ (потенциал Юкавы) приведены на рис. 1 и рис. 2.

Классическая асимптотика $\epsilon^{(0)}(\nu)$ в области $\nu < \nu_{cr}$ весьма близка к точным решениям уравнения Шредингера, начиная с $n \sim 10$. Первая квантовая поправка улучшает точность и при $\nu > \nu_{cr}$ (см. пунктирные кривые на рис. 1 и рис. 2). Приведем характерные числа: при $\nu = \nu_{cr} = 0,735\,759$ имеем: $\epsilon^{(0)} = 0$ и для $l=10$: $\epsilon_1 = -0,014\,414$, $\epsilon_2 = -0,014\,038$ (здесь $\epsilon_i = \epsilon^{(0)} + \epsilon^{(1)} n^{-1} + \dots + \epsilon^{(i)} n^{-i}$), а согласно ⁷ $\epsilon_{TB} = -0,014040$. Таким образом, $1/n$ – разложение полностью подтверждает результаты, полученные суммированием расходящихся рядов ТВ.

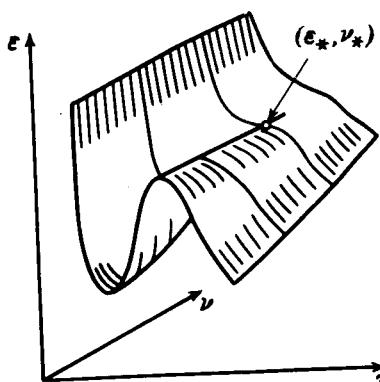


Рис. 3

При рассмотрении экранировки общего вида (1) полезно использовать теорию катастроф ¹⁰. На рис. 3 показан рельеф поверхности эффективной потенциальной энергии $\epsilon = -2\nu \frac{f(x)}{x} + \frac{\nu^2}{x^2}$. Проекция ее на плоскость (ϵ, ν) дает особенность типа "ключа" (рис. 1). В окрестности точки (ϵ_*, ν_*) уравнение поверхности приводится к стандартному виду: ⁴⁾

$$z^3 + az + b = 0, \quad (6)$$

где $a = 6kx_*^{-3}(\nu - \nu_*)$, $b = \epsilon - \epsilon_* + 2f'(\nu - \nu_*)$,

⁴⁾ Ситуация, соответствующая рис. 3, в теории катастроф называется "сборкой Уитни".

$$k = x f''' + 3f'', \quad z = \frac{x}{x_*} - 1 + 3\left(\frac{\nu}{\nu_*} - 1\right)\left(1 + \frac{x^3 f'''}{3g}\right)^{-1}$$

и все производные берутся в точке $x = x_* = x_0(\nu_*)$. Для двух классических решений, сталкивающихся в вершине клюва, имеем:

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_* + c_1(\nu - \nu_*) \pm c_2(\nu_* - \nu)^{3/2} + \dots, \quad (7)$$

$$c_1 = -2f'(x_*), \quad c_2 = 2^{5/2} [(3f'' + xf''')/x^3]_{x=x_*}^{3/2},$$

что согласуется с рис. 1.

Отметим, что $\epsilon^{(0)}, \epsilon^{(1)}, \dots$ имеют мнимую часть только после столкновения решений ($\nu > \nu_*$). В то же время при конечных n, l ширина Γ_{nl} появляется уже при $\nu = \nu_{cr}(n, l)$, но при $\nu_{cr} < \nu < \nu_*$ она весьма мала и быстро падает с ростом l (рис. 2). С другой стороны, Γ_{nl} — вялая функция l в область $\nu > \nu_*$.

Итак, классические решения, аналитически продолженные в область комплексных значений координат, определяют ширину брейт-вигнеровских резонансов (за исключением вблизи пороговой области $\mu \approx \mu_{cr}$).

Литература

1. Bender C.M., Wu T.T. Phys. Rev., 1969, **184**, 1231; 1973, **D7**, 1620.
2. Alliluev S.P., Eletsky V.L., Popov V.S. Phys. Lett., 1979, **73A**, 103; 1980, **78A**, 43.
3. Eletsky V.L., Popov C.S., Weinberg V.M. Phys. Lett., 1981, **84A**, 235, ЖЭТФ, 1981, **81**, 1567.
4. Турбинер А.В. УФН, 1984, **144**, 35.
5. Dyson F.J. Phys. Rev., 1952, **85**, 631.
6. Lai C.S. Phys. Rev., 1981, **A23**, 455.
7. Popov V.S., Weinberg V.M. Preprint ITEP-101, 1982. ДАН СССР, 1983, **75**, 2010.
8. Eletsky V.L., Popov V.S., Weinberg V.M. Preprint ITEP-119, 1983.
9. Вайнберг В.М., Орлов Ю.В., Попов В.С., Туровцев В.В. Препринт ИТЭФ-35, 1984.
10. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980.