Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1964

Д. В. ГАЛЬЦОВ, В. Ч. ЖУКОВСКИЙ

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВКБ ДЛЯ РАСЧЕТОВ С ТОЧНОСТЬЮ ДО ВЫСОКИХ СТЕПЕНЕЙ $\hbar$

В работе исследуется применение квазиклассического приближения с точностью до величин порядка $\hbar^2$ и $\hbar^3$. Новый метод используется для нахождения спектра собственных значений ангармонического осциллятора с добавками αx^3, βx^4, γx^6. Получающиеся этим способом выражения для энергетических уровней осциллятора совпадают с результатами теории возмущений.

Обычно квазиклассическое приближение используется для расчетов с точностью до величин порядка $\hbar$. Попытка применить обычную технику для получения более высокой точности наталкивается на значительные трудности при сшивании волновых функций на классических границах. Однако квазиклассическое приближение может быть все же использовано с точностью до величин высоких порядков по $\hbar$ с помощью метода, развитого Титчмаршем [1]. Идея метода состоит в подсчете числа нулей волновой функции, которая берется в квазиклассическом приближении, интегрированием в комплексной плоскости. Таким путем устанавливается связь собственного значения H с его номером, т. е. находится энергетический спектр. С точностью до $\hbar^2$ получается следующее уравнение для определения уровней:

$$n = \frac{\sqrt{2\mu}}{2\pi\hbar} \int\limits_C \sqrt{E_n - V(z)}\, dz + \frac{1}{8\pi i} \int\limits_C \frac{V'(z)}{E_n - V(z)} dz - \frac{\hbar}{64\,\pi\sqrt{2\mu}} \int\limits_C \frac{V'^2(z)\, dz}{[E_n - V(z)]^{5/2}}, \tag{1}$$

где $V(z)$ — потенциальная энергия, экстраполированная на всю комплексную плоскость.

Контур C должен охватывать все действительные нули волновой функции и не содержать внутри себя ее невещественных нулей. При этом регулярность $V(z)$ обеспечивает регулярность волновой функции в той же области.

Применим формулу (1) к ангармоническому осциллятору:

$$V(x) = \mu \frac{\omega^2}{2} x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4.$$

Теория возмущений дает для E_n следующее [2]:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) + \\ + \frac{3}{2}\frac{\beta\hbar^2}{(\mu\omega)^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$$

(с точностью до $\hbar^2$).

Как известно, волновые функции при $\alpha=\beta=0$ (полиномы Эрмита) вовсе не содержат невещественных нулей. Предположим, что решение уравнений Шредингера устойчиво относительно возмущения $\alpha x^3+\beta x^4$ и, считая α и β малыми, произведем разложение по α и β всех подынтегральных выражений. Окончательный результат показывает, что таким путем удается избежать появления невещественных нулей. Теория возмущений подсказывает, что достаточно оставлять члены с точностью до α^2 и β (это следует также из методики данного расчета)

$$V'^2 = \mu^2\omega^4x^2 + 6\mu\omega^2\alpha x^3 + 9\alpha^2x^4 + 8\mu\omega^2\beta x^4,$$

$$V_0 = \frac{\mu\omega^2}{2}x^2,$$

$$\sqrt{E-V} = \sqrt{E-V_0} - \frac{1}{2}\frac{\alpha x^3+\beta x^4}{\sqrt{E-V_0}} - \frac{\alpha^2x^6}{8(E-V_0)^{3/2}},$$

$$\frac{1}{E-V} = \frac{1}{E-V_0} + \frac{\alpha x^3+\beta x^4}{(E-V_0)^2} + \frac{2x^6\alpha^2}{(E-V_0)^3},$$

$$\frac{1}{(\sqrt{E-V})^5} = \frac{1}{(\sqrt{E-V_0})^5} + \frac{5}{2}\frac{\alpha x^3+\beta x^4}{(\sqrt{E-V_0})^7} + \frac{35}{8}\frac{\alpha^2x^6}{(\sqrt{E-V_0})^9}.$$

В качестве контура C выберем окружность достаточно большого радиуса и вычислять интегралы будем с помощью вычетов относительно бесконечно удаленной точки

$$\int_C \ldots = 2\pi i c_1,$$

где c — коэффициент при члене $\frac{1}{x}$ в разложении подынтегральных выражений в ряд Лорана.

Правильный выбор ветвей в выражениях, содержащих радикалы, легко осуществить, полагая $\alpha=\beta=0$ и учитывая члены порядка $\hbar$. Нужно брать $\sqrt{E - \frac{\mu\omega^2}{2}z^2} = i\sqrt{\frac{\mu\omega^2z^2}{2} - E}$ $(z\to\infty)$. Для упрощения вычислений предварительно установим простое правило:

$$\int_C \frac{z^{2n+1}}{(\sqrt{E-V_0})^{2k+1}}dz = 0$$

(n и k—любые натуральные числа).

Пусть $E=\alpha^2$, $V_0=b^2z^2$,

$$z^{2n+1}(a^2-b^2z^2)^{-\frac{2k+1}{2}} = (i)^{-(2k+1)}(b^2z^2-a^2)^{-\frac{2k+1}{2}}z^{(2n+1)} =$$

$$= (i)^{-(2k+1)} z^{-(2k+1)} z^{2n+1} \left(b - \frac{a}{z}\right)^{-\frac{2k+1}{2}} \left(b + \frac{a}{z}\right)^{-\frac{2k+1}{2}} =$$

$$= i^{-(2k+1)} z^{2(n-k)} \left\{A_0 - A_1\left(\frac{a}{z}\right) + A_2\left(\frac{a}{z}\right)^2 - \ldots\right\} \times$$

$$\times \left\{A_0 + A_1 \frac{a}{z} + A_2\left(\frac{a}{z}\right)^2 + \ldots\right\} = i^{-(2k+1)} z^{2(n-k)} \times$$

$$\times \left\{c_0 + c_2\left(\frac{a}{z}\right)^2 + c^4\left(\frac{a}{z}\right)^4 + \ldots\right\},$$

откуда $c_1 = 0$ и $\therefore \int = 0$.

Аналогично $\int\limits_C \frac{z^{2n}}{(E - V_0)^k} = 0$.

Как видим, возмущение αx^3 не дает поправки порядка α, δx^5 не дает поправки порядка δ и т. д.

В качестве примера приведем вычисление интеграла $\int \frac{V'(z)\,dz}{E - V(z)}$.

$$\int\limits_C \frac{V'\,dz}{E - V} = \int\limits_C \frac{2b^2 z + 4bz^3}{a^2 - b^2z^2}\,dz + \int\limits_C \frac{z^5(3\alpha^2 + 2\beta b^2)\,dz}{(a^2 - b^2z^2)^2} +$$

$$+ \int \frac{4\alpha^2 z^7 b^2 dz}{(a^2 - b^2z^2)^3} = I_1 + I_2 + I_3$$

(остальные интегралы равны нулю в силу установленных правил)

$$(a^2 - b^2z^2)^{-1} = -\frac{1}{z^2}\left[\left(6 - \frac{a}{z}\right)^{-1}\left(b + \frac{a}{z}\right)^{-1}\right] =$$

$$= -\frac{1}{z^2}\left\{b^{-2} + \frac{a^2b^{-4}}{z^2} + \ldots\right\},$$

$$I_1 = 2\pi i\left[2b^2\left(-\frac{1}{b^2}\right) + 4\beta\left(-\frac{a^2}{b^4}\right)\right] = -8\pi i\left\{\frac{1}{2} + \frac{\beta E}{b^4}\right\}.$$

Аналогично

$$I_2 = 2\pi i\left(\frac{6\alpha^2 E}{b^6} + 4\beta\frac{E}{b^4}\right),$$

$$I_3 = -2\pi i\left(\frac{6\alpha^2 E}{b^6}\right).$$

Итак,

$$\frac{1}{8\pi i}\int\limits_C \frac{V'\,dz}{E - V} = -\frac{1}{2}.$$

Точно так же вычисляются остальные интегралы:

$$\int\limits_C \sqrt{E - V}\,dz = \frac{\pi E}{\omega}\sqrt{\frac{2}{\mu}} + \alpha^2\frac{15}{4}\pi\frac{E^2}{\mu^3\omega^7}\sqrt{\frac{2}{\mu}} - \frac{3}{2}\frac{\pi\beta E^2}{\mu^2\omega^5}\sqrt{\frac{2}{\mu}},$$

$$\int\limits_C \frac{V'^2\,dz}{(\sqrt{E - V})^5} = -\frac{28\pi\alpha^2}{\mu^2\omega^5}\sqrt{\frac{2}{\mu}} + \frac{24\pi\beta}{\mu\omega^3}\sqrt{\frac{2}{\mu}}.$$

Для определения E_n получим уравнение

$$n + \frac{1}{2} = \frac{E}{\hbar\omega} + E^2\left(\frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\mu^3\omega^7} - \frac{3}{2}\frac{\beta}{\hbar\mu^2\omega^5}\right) + \frac{7}{16}\hbar\frac{\alpha^2}{\mu^3\omega^5} - \frac{3\hbar\beta}{8\mu^2\omega^3}.$$

Решаем его, сохраняя члены до $\hbar^2$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right) + \frac{3}{2}\frac{\beta\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right),$$

что совпадает с результатом теории возмущений.

Вычисляя следующий член разложения по $\hbar$ в формуле (1), можно убедиться интегрированием по частям, что он тождественно равен нулю. Следовательно, формула (1) справедлива с точностью до $\hbar^3$. Это позволяет применить ее к возмущению γx^6 (член δx^5 дает поправку порядка $\hbar^4$). Следует иметь в виду, что отсутствие кубичных поправок в предыдущих вычислениях объясняется неучетом более высоких степеней α и β в разложениях.

Для нахождения кубичной поправки от возмущений γx^6 следует использовать разложения

$$V'^2 = 4b^4x^2 + 24b^2\gamma x^6,$$

$$\sqrt{E-V} = \sqrt{E-V_0} - \frac{1}{2}\frac{\gamma x^6}{\sqrt{E-V_0}}, \quad \frac{1}{E-V} = \frac{1}{E-V_0} + \frac{\gamma x^6}{(E-V_0)^2},$$

$$\frac{1}{(\sqrt{E-V})^5} = \frac{1}{(\sqrt{E-V_0})^5} + \frac{5}{2}\frac{\gamma x^6}{(\sqrt{E-V_0})^7}.$$

Интегралы вычисляются тем же способом и для определения E_n; получается уравнение

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = E_n - \frac{5}{2}\gamma\frac{E_n^3}{\omega^3}\frac{1}{(\mu\omega)^3} - \frac{25}{8}\gamma\frac{E}{\omega}\frac{\hbar^2}{(\mu\omega)^3}.$$

Решая его по известной формуле, получаем с точностью до членов $\hbar^3$:

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) + \gamma\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3\left(\frac{5}{2}n^3 + \frac{15}{4}n^2 + 5n + \frac{15}{8}\right),$$

что также совпадает с результатом теории возмущений. В заключение выпишем уравнение для определения E_n с точностью до $\hbar^4$

$$n = \frac{\sqrt{2\mu}}{2\pi\hbar}\int_C \sqrt{E_n - V}\,dz + \frac{1}{8\pi i}\int_C \frac{V'\,dz}{E_n - V} - \frac{\hbar}{64\pi\sqrt{2\mu}}\int_C \frac{V'^2\,dz}{(E_n-V)^{5/2}} + \frac{\hbar^3}{(2\mu)^{3/2}2\pi}\int_C\left[\frac{49}{1024}\frac{V'^4}{(\sqrt{E-V})^{11}} - \frac{3}{32}\frac{V'V'''}{(\sqrt{E-V})^7}\right]dz.$$

Прямое использование его затруднительно из-за необходимости решать алгебраическое уравнение 4-го порядка, однако эту формулу можно использовать для проверки имеющегося результата.

ЛИТЕРАТУРА

1. Титчмарш. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка, ч. I. ИЛ, М., 1960.
2. Соколов А. А., Лоскутов В. А., Тернов И. М. Квантовая механика.
3. Соколов А. А., Мурадян Р. М., Арутюнян В. М. «Вестн. Моск. ун-та», сер. мех., мат., астрон., физ., химии, № 4 и 6, 1959.

Поступила в редакцию
24. 9 1963 г.

Кафедра
теоретической физики