УДК 530.145:530.12

ПОСТРОЕНИЕ КОРОТКОВОЛНОВЫХ АСИМПТОТИК МЕТОДОМ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ДИАГОНАЛИЗАЦИЙ

Ю. Г. Павленко, Ю. А. Афиногенов, С. И. Зеленский

(кафедра теоретической физики)

В рамках гамильтоновой теории специальных функций получен алгоритм, позволяющий строить высшие ВКБ-приближения. Предложенный подход основан на последовательных диагонализациях гамильтониана, порождающего волновое уравнение, причем каждый этап — точное преобразование исходных уравнений.

Волновые уравнения занимают значительное место в теоретической и математической физике. Разделение переменных приводит к уравнениям с переменными коэффициентами, решения которых удается получить лишь для модельных систем. Среди приближенных методов большой интерес для приложений представляют квазиклассические асимптотики волновых уравнений [1—6]. Приближение ВКБ активно используется для решения обратных задач рассеяния частиц и дифракции [7]. Однако до настоящего времени не известен алгоритм, позволяющий строить высшие приближения.

В статье эта задача решена в рамках гамильтоновой теории специальных функций [8, 9]. Гамильтонов подход позволяет в принципе получить решение общих систем уравнений как каноническое преобразование (КП) начальных данных, не обращаясь непосредственно к уравнениям. Предлагаемый метод последовательных диагонализаций гамильтониана, порождающего волновое уравнение, является иллюстрацией этого аспекта теории. Более того, в статье показано, что КП позволяет связать решения двух различных уравнений, т. е. генерировать нетривиальные решения одного уравнения из частных решений другого.

Рассмотрим уравнение

$$\frac{d}{dx}\left(m(x)\frac{du}{dx}\right)+k(x)u=0, \tag{1}$$

порождаемое гамильтонианом

$$H_0(u,\ v,\ x)=\frac{1}{2m(x)}v^2-\frac{1}{2}k(x)u^2 \tag{2}$$

в фазовом пространстве $\mathbf{R}^2(u,\ v)$. Фундаментальные скобки Пуассона (СП): $[u,\ v]=1$, $[u,\ u]=[v,\ v]=0$.

1. **Преобразование функции.** Произведем КП $u,\ v\to q,\ p$:

$$v=\frac{\partial F_2}{\partial u},\quad q=\frac{\partial F_2}{\partial p}, \tag{3}$$

порождаемое производящей функцией

$$F_2\ (u,\ p,\ x)=\sqrt{m}\,up-\frac{1}{4}\dot{m}u^2,\quad \dot{m}\equiv\frac{dm}{dx}.$$

Учитывая (3), получим

$$u=m^{-1/2}q,\quad v=m^{1/2}p-\frac{1}{2}m^{-1/2}\dot{m}q. \tag{4}$$

Новый гамильтониан

$$H(q,\ p,\ x)=H_0+\frac{\partial F_2}{\partial x}=\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}w(x)q^2, \tag{5}$$

$$w(x)=\frac{k}{m}+\frac{1}{2}\{m^{-1},\ x\}, \tag{6}$$

где $\{G,\ x\}$ — производная в смысле Шварца:

$$\{G,\ x\}=\frac{\ddot{G}}{G}-\frac{3}{2}\left(\frac{\dot{G}}{G}\right)^2=-G^{1/2}\ \frac{d}{dx}\left(G^{1/2}\frac{d}{dx}G^{-1}\right).$$

Канонические уравнения эквивалентны уравнению

$$\ddot{q}=[[qH]H]\to\ddot{q}+w(x)q=0. \tag{7}$$

Пример 1. Преобразование Уиттекера. Рассмотрим уравнение

$$A(x)\ddot{u}+B(x)\dot{u}+C(x)u=0.$$

Используя интегрирующий множитель, приведем его к лагранжевой форме (1), где

$$m=\lambda A,\quad k=\lambda C,\quad \lambda=A^{-1}\exp\left[\int\frac{B}{A}dx\right].$$

Из (4), (6) находим

$$u=\exp\left[-\frac{1}{2}\int\frac{B}{A}dx\right]q,\quad w(x)=\frac{C}{A}-\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{B}{A}\right)-\frac{1}{4}\left(\frac{B}{A}\right)^2.$$

Пусть $u=F(a,\ c,\ x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция: $A=x$, $B=c-x$, $C=-a$. Преобразование Уиттекера имеет вид

$$u=e^{x/2}x^{-c/2}q(x),\quad w(x)=-\frac{1}{4}+\left(\frac{1}{2}c-a\right)\frac{1}{x}-\frac{c(c-2)}{4x^2}.$$

2. Линейные канонические преобразования. Производящая функция

$$F_1(q,\ q',\ x)=\frac{1}{2}[a(x)q^2-2b(x)qq'+c(x)q'^2] \tag{8}$$

порождает замену переменных $q,\ p\to q',\ p'$:

$$p=\frac{\partial F_1}{\partial q},\quad p'=-\frac{\partial F_1}{\partial q'}.$$

Учитывая (8), получим линейное КП ($\Delta=b^2-ac$)

$$q=b^{-1}(cq'+p'),\quad p=b^{-1}(-\Delta q'+ap'), \tag{9}$$

$$q'=b^{-1}(aq-p),\quad p'=b^{-1}(\Delta q+cp), \tag{10}$$

сохраняющее СП независимо от выбора функций a, b, c. Новый гамильтониан

$$H'(q',\ p',\ x)=\frac{p'^2}{2b^2}(a^2+w+\dot{a})+\frac{1}{b^2}q'p'[-a\Delta+c(w+\dot{a})-b\dot{b}]+$$

$$+\frac{q'^2}{2b^2}[\Delta^2+c^2(w+\dot{a})-2cb\dot{b}+\dot{c}b^2]. \tag{11}$$

А. Пусть $a=\dot{q}_2/q_2^2$, $b=q_2^{-1}$, $c=q_1/q_2$, где q_1, q_2 — два линейно неза-

висимых решения уравнения (7), $q_1\dot{q}_2-\dot{q}_1q_2=1$. Тогда $H'(q', p', x)=0$, $q', p'=\text{const}$. Преобразование (9) определяет точное решение уравнения (7).

B. Преобразование подобия. Подчиним функции a, b, c условиям

$$a^2+w+\dot{a}=b^2,\ \dot{b}=b(c-a). \tag{12}$$

Тогда из (11) получим

$$H'(q', p', x)=\frac{p'^2}{2}+w'(x)\frac{q'^2}{2},\quad w'(x)=w(x)+a^2-c^2+\dot{a}+\dot{c}. \tag{13}$$

C. Преобразование Дарбу [10]. Положим

$$w(x)=2[E-U(x)],\quad a=c=\dot{q}_0/q_0,\quad b=\sqrt{2(E-E_0)}, \tag{14}$$

где q_0 — частное решение уравнения

$$\ddot{q}_0+2[E_0-U(x)]q_0=0. \tag{15}$$

Из (11)—(14) находим

$$w'(x)=2[E-U'(x)],\quad U'(x)=U(x)-\frac{d}{dx}\frac{\dot{q}_0}{q_0}. \tag{16}$$

Таким образом, КП (10)

$$q'=[2(E-E_0)]^{-1/2}\left(\frac{\dot{q}_0}{q_0}q-\dot{q}\right) \tag{17}$$

является преобразованием Дарбу, связывающим решения двух уравнений

$$\ddot{q}+2[E-U(x)]q=0,\quad \ddot{q}'+2[E-U'(x)]q'=0. \tag{18}$$

Пример 2. В суперсимметричной квантовой механике компоненты волновой функции удовлетворяют двум уравнениям с потенциалами

$$U(x)=\frac{1}{2}(\dot{\varphi}^2-\ddot{\varphi}),\quad U'(x)=\frac{1}{2}(\dot{\varphi}^2+\ddot{\varphi}), \tag{*}$$

выражающимися через одну функцию — суперпотенциал $\varphi(x)$. Полагая в (15) $E_0=0$, $q_0=e^{-\varphi}$, получим из (16) соотношения (*). Следовательно, решения уравнений (18) связаны КП (17).

Пример 3. Гармонический осциллятор. Положим $E_0=-1/2$, $U(x)=x^2/2$. Тогда $q_0=\exp(x^2/2)$. Собственная функция основного состояния с $E=1/2$ равна $q=\exp(-x^2/2)$. Из (17) следует, что собственная функция q', удовлетворяющая уравнению (18) с $U'(x)=x^2/2-1$, соответствует собственному значению $E'=E+1=3/2$. Из (17) находим, что КП

$$q'=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{d}{dx}\right)q$$

эквивалентно действию оператора рождения на вакуумное состояние [11]. В результате n-кратного преобразования (17) получим волновую функцию состояния с энергией $E_n=n+1/2$.

3. **Построение высших приближений ВКБ методом последовательных диагонализаций.** Предлагаемый подход позволяет получить приближение в результате n-кратной диагонализации гамильтониана линейным КП. После первого шага все последующие преобразования по существу идентичны.

Рассмотрим уравнение (7) на интервале, где $w(x) \geqslant 0$. Проведем вначале гамильтониан (5) к диагональной форме КП (9): $q, p \to q_1, p_1$. Если функции a, b, c подчинить условиям $a^2 + w = 0$, $\Delta^2 + c^2 w = 0$, то старый гамильтониан в новых переменных имеет диагональную форму $q_1 p_1 (cw - a\Delta)/b^2$. С другой стороны, условие $c\dot{a} - b\dot{b} = 0$ приводит к отсутствию диагонального слагаемого в производной производящей функции. Полагая

$$a = iw^{1/2}, \quad b = i\sqrt{2}w^{1/4}, \quad c = i,$$

мы удовлетворим указанным выше условиям и получим КП

$$q = \frac{w^{-1/4}}{\sqrt{2}}(q_1 - ip_1), \quad p = \frac{-iw^{1/4}}{\sqrt{2}}(q_1 + ip_1), \tag{19}$$

которое диагонализует гамильтониан $H(q, p, x)$. Однако вклад производящей функции приводит к появлению в новом гамильтониане недиагональной составляющей:

$$H_1(q_1, p_1, x) = -iw^{1/2} q_1 p_1 - \frac{i}{8}\frac{\dot{w}}{w}(p_1^2 + q_1^2). \tag{20}$$

Решение уравнений, порождаемых первым членом в (20),

$$q_1 = \sqrt{J} e^{-i\Phi}, \quad p_1 = i\sqrt{J} e^{i\Phi}, \quad \Phi = \int \sqrt{w}\, dx + \psi \tag{21}$$

является КП к переменным действие J, угол ψ. После подстановки (21) в (19) найдем первое приближение ВКБ:

$$q = \frac{\sqrt{2J}}{w^{1/4}} \cos\left(\int^x \sqrt{w}\, dx + \psi\right). \tag{22}$$

Заметим, что это решение можно получить методом Крылова—Боголюбова [12] для систем с медленно меняющимися параметрами: $\dot{w}^2 \ll |w^3|$. Для построения высших приближений обычно исходят из уравнений, которые в каноническом формализме порождаются гамильтонианом

$$h(J, \psi, x) = -\frac{1}{4}\frac{\dot{w}}{w} J \sin 2\Phi.$$

В работах по методу ВКБ решение (22) неизбежно возникает как первое приближение. Однако в гамильтоновом формализме существует уникальная возможность получить n-е приближение, не используя предыдущие приближения. С этой целью произведем КП $q_1, p_1 \to q_2, p_2$ гамильтониана (20), порождаемое производящей функцией (8):

$$F_2(q_1, q_2, x) = \frac{1}{2}[a_2(x) q_1^2 - 2b_2(x) q_1 q_2 + c_2(x) q_2^2].$$

Сущность метода состоит в том, что необходимо, как и на первом этапе, обратить в нуль коэффициенты при p_2^2 и q_2^2 в гамильтониане и коэффициент при $q_2 p_2$ в производной $\partial F_2/\partial x$. В результате получим уравнения

$$a_2 = c_2, \quad a_2^2 - b_2^2 = 1, \quad w^{1/2} a_2 + \frac{1}{8}\frac{\dot{w}}{w}(1 + a^2) = 0. \tag{23}$$

Новый гамильтониан приобретает вид

$$H_2(q_2,\ q_2,\ x) = -ib_2^{-2}q_2p_2\left[w^{1/2}(a_2^2+1)+\frac{1}{2}\frac{\dot{w}}{w}a_2\right]+\frac{\dot{a}_2}{2b_2^2}(p_2^2-q_2^2).$$

Для определения функций a_2, b_2, c_2 произведем параметризацию, положив $a_2/b_2=u$, $b_2^{-1}=v$, $u=\operatorname{ch}\varphi_2$, $v=\operatorname{sh}\varphi_2$. Тогда из (23) следует, что $\operatorname{th}2\varphi_2=-\omega_1 w^{-1/2}$, где $\omega_1={}^1/_4\dot{w}/w$. Используя соотношения

$$u^2,\ v^2=\frac{1}{2}(\operatorname{ch}2\varphi_2\pm 1)=\frac{1}{2}\left(\frac{w^{1/2}}{\lambda_2}\pm 1\right),\quad \lambda_2=\sqrt{w-w_1^2}, \tag{24}$$

получим явный вид КП:

$$q_1=uq_2+vp_2,\quad p_1=vq_2+up_2 \tag{25}$$

и новый гамильтониан

$$H_2(q_2,\ p_2,\ x)=-i\lambda_2q_2p_2-\frac{\omega_2}{2}(p_2^2-q_2^2),\quad \omega_2=\dot{\varphi}_2=-\frac{1}{2}\frac{w}{\lambda_2^2}\frac{d}{dx}\left(\frac{w_1}{\sqrt{w}}\right). \tag{26}$$

Подставляя в (25) решение уравнений, порождаемых первым членом в (26), получим из (19) решение (7) во втором приближении:

$$q=\frac{\sqrt{2J}}{w^{1/4}}[u\cos\Phi_2-v\sin\Phi_2],\quad \Phi_2=\int^x\lambda_2\,dx+\psi.$$

Если уравнение $w(x)=2[E-U(x)]=0$ имеет простые нули, то энергетический спектр определяется из условия

$$n+\frac{1}{2}=\frac{1}{2\pi\hbar}\oint\sqrt{w-\left(\frac{\dot{w}}{4w}\right)^2}\,dx. \tag{27}$$

Разлагая радикал по параметру адиабатичности $\dot{w}^2/w^3$, получим из (27) условие квантования, найденное в работе [13].

Продолжим диагонализацию гамильтониана (26) линейным КП q_2, $p_2\to q_3$, p_3, порождаемым производящей функцией типа (8). Если подчинить a_3, b_3, c_3 условиям

$$a_3=c_3,\quad b_3^2-a_3^2=1,\quad i\lambda_2a_3+\frac{\dot{\varphi}_2}{2}(a_3^2-1)=0,$$

то функция $H_2(q_2,\ p_2,\ x)$ в новых переменных станет диагональной. Вводя параметризацию $a_3=-i\operatorname{cth}\varphi_3$, $b_3=-i\operatorname{sh}^{-1}\varphi_3$, получим $\operatorname{th}2\varphi_3=\omega_2/\lambda_2$. Новый гамильтониан

$$H_3(q_3,\ p_3,\ x)=-i\lambda_3q_3p_3-\frac{i\omega_3}{2}(p_3^2+q_3^2),$$

$$\lambda_3=\sqrt{w-\omega_1^2-\omega_2^2},\quad \omega_3=\frac{1}{2}\frac{\lambda_2^2}{\lambda_3^2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\omega_2}{\lambda_2}\right)$$

имеет структуру (20).

4. **Диагонализация гамильтониана в методе удвоения переменных** [8, 9]. Этот метод позволяет построить приближение ВКБ для произвольных линейных систем уравнений. Рассмотрим систему

$$Q_m=H_{mn}(x)Q_n,\quad m,\ n=1,\ 2, \tag{28}$$

с гамильтонианом

$$H(Q, P, x) = H_{mn}(x) P_m Q_n. \tag{29}$$

Произведем линейное КП $Q, P \to Q', P'$, порождаемое функцией $F_2(Q, P', x) = \Lambda_{\mu n}(x) P_\mu' Q_n$:

$$Q_n = \Lambda_{n\nu}^{-1} Q_\nu', \quad P_m = \Lambda_{\mu m} P_\mu'.$$

Новый гамильтониан

$$H'(Q', P', x) = H_{mn} \Lambda_{\mu m} \Lambda_{n\nu}^{-1} P_\mu' Q_\nu' + \omega'_{\mu\nu} P_\mu' Q_\nu', \tag{30}$$

где $\omega'_{\mu\nu} = \dot{\Lambda}_{\mu n} \Lambda_{n\nu}^{-1}$. Матрицу Λ выбираем таким образом, чтобы первое слагаемое в (30) имело диагональный вид, а матрица $\omega'_{\mu\nu}$ содержала только недиагональные элементы. Для диагонализации матрицы $\Lambda H \Lambda^{-1}$ найдем собственные значения λ_n и собственные векторы $\mathbf{v}^{(n)}$ матрицы H:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left[H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 H_{12} H_{21}} \right],$$

$$\mathbf{v}^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mu_n \end{pmatrix} N_n, \quad \mu_n = \frac{\lambda_n - H_{11}}{H_{12}},$$

где $N_n(x)$ — неизвестные пока функции. Полагая $\Lambda_{n\nu}^{-1} = v_n^{(\nu)}$, получим двупараметрическое преобразование, диагонализующее первое слагаемое в (30). Условие невырожденности преобразования возьмем в виде $\det \Lambda^{-1} = 1$:

$$\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{H_{12}} N_1 N_2 = 1. \tag{31}$$

Для определения функций N_n потребуем обращения диагональных компонент $\omega'_{\mu\nu}$ в нуль. Это приводит к уравнениям

$$\dot{\mu}_2 N_2 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{H_{12}} \dot{N}_2 = 0, \quad -\dot{\mu}_1 N_1 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{H_{12}} \dot{N}_1 = 0, \tag{32}$$

совместимым с условием (31). Недиагональные элементы имеют вид

$$\omega'_{12} = \dot{\mu}_2 N_2^2, \quad \omega'_{21} = -\dot{\mu}_1 N_1^2.$$

В новых переменных гамильтониан (29) $H' = H_0' + \Delta H'$, где

$$H_0'(Q', P', x) = \lambda_n P'_n Q'_n, \quad \Delta H' = \omega'_{12} P_1' Q_2' + \omega'_{21} P_2' Q_1'. \tag{33}$$

Первое приближение следует из уравнений, порождаемых гамильтонианом H_0'. Для построения следующего приближения повторяем процедуру диагонализации гамильтониана H' линейным КП $Q', P' \to Q'', P''$. Таким образом, приведенный алгоритм позволяет найти n-е ВКБ-приближение. Отметим, что в предложенном подходе каждый шаг — точное преобразование исходных уравнений (28).

Пример 4. Пусть $H_{11} = H_{22} = 0$, $H_{12} = 1$, $H_{21} = R(x)$, где $R(x) > 0$ на конечном отрезке. Тогда система (28) эквивалентна уравнению (7) с $w(x) = -R(x) < 0$.

Первое приближение: $\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{R}$,

$$\mathbf{v}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} R^{-1/4} \\ R^{1/4} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -R^{-1/4} \\ R^{1/4} \end{pmatrix},$$

$$\omega'_{12} = \omega'_{21} = -\omega = -\frac{1}{4} \frac{\dot{R}}{R}.$$

Второе приближение: $\lambda_{1,2}=\pm\lambda$, $\lambda=\sqrt{R+\omega^2}$,

$$\mathbf{v}^{(1)}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\gamma}{2}\\ \sin\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},\quad \mathbf{v}^{(2)}=\begin{pmatrix}-\sin\frac{\gamma}{2}\\ \cos\frac{\gamma}{2}\end{pmatrix},\quad \operatorname{tg}\gamma=\frac{\omega}{\sqrt{R}},$$

$\omega_{12}''=-\omega''_{21}=\dot{\gamma}/2$. В этом приближении решение уравнения $\ddot{Q}_1-R(x)Q_1=0$ имеет вид

$$Q_1=R^{-1/4}\left[Q_1''\cos\left(\frac{\gamma}{2}+\frac{\pi}{4}\right)\exp\left(\int\lambda\,dx\right)-\right.$$
$$\left.-Q_2''\sin\left(\frac{\gamma}{2}+\frac{\pi}{4}\right)\exp\left(-\int\lambda\,dx\right)\right].$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Фреман Н., Фреман П. У. ВКБ-приближение. М., 1967. [2] Бабич В. М., Булдырев В. С. Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн. М., 1972. [3] Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М., 1976. [4] Найфэ А. Методы возмущений. М., 1976. [5] Олвер Ф. Введение в асимптотические методы и специальные функции. М., 1978. [6] Федорюк М. В. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М., 1985. С. 381. [7] Шадан К., Сабатье П. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. М., 1980. С. 332. [8] Павленко Ю. Г. Гамильтоновы методы в электродинамике и в квантовой механике. М., 1985. [9] Павленко Ю. Г., Зеленский С. И.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1987. 28, № 1. С. 8. [10] Лем Дж. Л. Введение в теорию солитонов. М., 1983. С. 48. [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1974. С. 94. [12] Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., 1958. [13] Титчмарш Э. Ч. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. М., 1960. Ч. 1. С. 170.

Поступила в редакцию
20.04.87

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 5

УДК 541.11

К ТЕРМОДИНАМИКЕ КРИТИЧЕСКОГО $\gamma\rightleftarrows\alpha$ ПЕРЕХОДА В ЦЕРИИ

И. П. Базаров, Е. Д. Солдатова, М. В. Мажаров

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

Рассматриваются свойства церия в окрестности критической точки в терминах термодинамики однокомпонентной системы. Получено термическое уравнение состояния в переменных P, V, T. Линия равновесия кончается критической точкой. Вычислены критические показатели: $\alpha=0$, $\gamma=1$, $\beta=1/2$, $\delta=3$.

Известно, что фазовая диаграмма изоморфного $\gamma\rightleftarrows\alpha$ перехода в Се имеет критическую точку, аналогичную критической точке системы жидкость—газ. Это было впервые предсказано в работе [1], а в работе [2] были определены координаты критической точки. Дальнейшее изучение свойств Се (см., напр., [3—5]) показало, что в окрестности критической точки он действительно имеет свойства, аналогичные системе жидкость—газ. Поэтому представляет интерес рассмотреть свойства Се в окрестности критической точки, подобно системе жидкость—газ, в терминах термодинамики однокомпонентной системы. В предлагаемой статье мы рассматриваем простую модель Се,