УДК 530.145.6

ПРАВИЛА ПЕРЕХОДА ЧЕРЕЗ ОСОБУЮ ТОЧКУ ПОТЕНЦИАЛА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ

В. Б. Гостев, И. В. Гостев, А. Р. Френкин
(кафедра теоретической физики)

Исходя из физически очевидного требования непрерывности наблюдаемых величин — уровней энергии и коэффициента прохождения — указаны правила продолжения волновой функции через особенность одномерного потенциала $W=\lambda|x|^{-\nu}$, применимые не только в физически важных случаях $\nu=1$, 2, но и во всем интервале значений параметра $0<\nu<2$. Найденные правила приводят к однозначным результатам при решении конкретных квантовомеханических задач.

Одномерное движение в потенциальном поле с особенностью

$$W=\lambda\,|x|^{-\nu},\ \nu>0,\ -\infty<\lambda,\ x<\infty, \tag{1}$$

представляет значительный интерес как для физических приложений (значению $\nu=1$ соответствует одномерное кулоновское движение [1, с. 527], $\nu=2$ — центробежная особенность [1—3]), так и для теоретических исследований [4].

Мы в настоящей статье ограничимся сингулярностью (1) со значениями параметра

$$0<\nu<2 \tag{2}$$

(пограничный случай $\nu=2$ подробно рассмотрен в [5]).

При ограничении (2) стационарное уравнение Шрёдингера (УШ)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-(U(x)+W(x)-E)\,\psi(x)=0, \tag{3}$$

$$\hbar=2m=1, \tag{4}$$

в котором $U(x)$ — «гладкий» вблизи $x=0$ потенциал, имеет при $x\gtrless 0$ два независимых решения, в качестве каковых при $x>0$ удобно взять для значений параметра

$$\nu\neq\nu_n=2-\frac{1}{n},\ n=1,\ 2,\ \ldots, \tag{5}$$

функции

$$\psi_+(x)=\sum_{m,n=0}^{\infty} a_{mn}x^{(2-\nu)m}\,x^{2n} \tag{6}$$

и

$$\psi_-(x)=x\sum_{m,n=0}^{\infty} b_m x^{(2-\nu)m}\,x^{2n} \tag{7}$$

с «начальными» коэффициентами

$$a_{00}=1, \tag{8}$$

$$b_{00}=1. \tag{9}$$

Поведение этих решений вблизи особой точки $x=0$ не зависит от вида гладкого потенциала $U(x)$ и энергии E $(\psi_+(x)\simeq 1+\alpha x^{2-\nu},\ \psi_-(x)\simeq x)$.

В особых точках $\nu=\nu_n$ ряд (6) изменяется следующим образом:

$$\psi_+(x)=\sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{(2-\nu)k}+x\ln x\sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{(2-\nu)k} \qquad (10)$$

и условие (аналог условия (8))

$$a_0=1 \qquad (11)$$

не фиксирует решения (10) однозначно, так как остается неопределенным коэффициент a_n при x^1. Выберем в разложении (10)

$$a_n=-c_0, \qquad (12)$$

где c_0 однозначно определяется из условия (11).

Аналог разложения (7) с условием (9) имеет вид ($\nu=\nu_n$)

$$\psi_-(x)=x\sum_{k=0}^{\infty} b_k x^{(2-\nu)k}, \ b_0=1. \qquad (13)$$

Особенность поведения решений (10), (11) и (13) при $x\to+0$, как и решений (6), (7), не зависит от $U(x)$ и E.

Решения (6), (7) (а также (10), (13)) линейно независимы и образуют базис. Функции (6), (8) при $\nu\neq\nu_n$ удовлетворяют граничным условиям

$$\psi_+(0)=1 \text{ («нормировка»)}, \qquad (14)$$

$$\lim_{x\to+0}(\psi'_+(x)-\mathcal{P}_\nu(\lambda,\ x))=0, \qquad (15)$$

$$\mathcal{P}_\nu(\lambda,\ x)=\sum_{k=1}^{\mathcal{E}(m)} \lambda^k f_k(\nu)\, x^{(2-\nu)k-1}, \qquad (16)$$

где

$$m=\frac{1}{2-\nu}, \qquad (17)$$

$\mathcal{E}(m)$ — целая часть m,

$$f_1(\nu)=-\frac{1}{\nu-1}. \qquad (18)$$

Все коэффициенты $f_k(\nu)$ не зависят от $U(x)$ и E. Производная $\psi'_+(x)$ расходится (эффект подбарьерной концентрации [6]). Функции (7) и (13) удовлетворяют стандартным для нечетных решений условиям

$$\psi'_-(0)=1 \text{ («нормировка»)}, \qquad (19)$$

$$\psi_-(0)=0. \qquad (20)$$

Любое решение УШ (3) при $x>0$ можно представить в виде линейной комбинации решений (6) ((10)) и (7) ((13)), при ненулевом вкладе $\psi_+(x)$ это решение будет иметь в точке $x=0$ бесконечный разрыв производной (15). Переход через особенность требуется при решении физических задач (нахождение уровней энергии и коэффициента прохождения), имеющих практические приложения (для одномерного кулоновского потенциала [1, 3]).

В литературе рассматриваются различные пути преодоления этой трудности главным образом для частных случаев $\nu=1$ (обзор [7]) и $\nu=2$ [8]. Ниже мы кратко проанализируем эти пути, указав наиболее приемлемый, на наш взгляд.

Предварительно ограничимся случаем четного потенциала в УШ (3):

$$U(x)=U(-x). \qquad (21)$$

Основной в этом случае будет задача построения четного решения уравнения (3). Нечетными естественно считать нечетно продолженные на полуось $x<0$ решения (7), (13). Четные решения, «нормированные» условием (14), можно представить в виде

$$\psi_e(x)=\psi_+(x)+h(\lambda, \nu, E)\psi_-(x), \qquad (22)$$

где

$$h(0, \nu, E)=0, \qquad (23)$$

так как при выключении сингулярности потенциала (1) ($\lambda=0$) функция $\psi_+(x)$ удовлетворяет условию (14) и обычному для четных функций условию

$$\psi'_+(0)=0. \qquad (24)$$

Естественным для физики путем выбора решения $\psi_e(x)$ является регуляризация сингулярной части потенциала (1) [9, 10], например, заменой

$$W(x)\to W_r(x)=W(x+a) \qquad (25)$$

с последующим переходом $a\to+0$ с фиксированными для четных решений граничными условиями (14), (24) $\psi_+(x)\to\psi_e(x)$. Однако такая и другие регуляризации не дают (в отличие от нечетного случая [1, с. 143] в четном случае физически и математически приемлемого решения и даже какого-либо самосопряженного расширения гамильтониана, т. е. подходящего граничного условия, так как в случае притяжения ($\lambda<0$) четные уровни вырождаются: $E_{(n+1)+}\to E_{n-}+0$, где $n=0, 1, 2, \ldots$; E_{n-} — нечетные уровни, а основной уровень «падает на дно»:

$$E_{0+}\to-\infty. \qquad (26)$$

Остается рассмотреть в качестве четных всевозможные решения (22). Они удовлетворяют граничному условию («нормировка» (14), $\nu\neq\nu_n$)

$$\lim_{x\to+0}(\psi_e'(x)-\mathscr{P}_\nu(\lambda, x))=h(\lambda, \nu, E). \qquad (27)$$

Самосопряженность гамильтониана (3) устраняет зависимость функции $h(\lambda,\nu,E)$ от энергии E. Дальнейший выбор граничных условий требует физических аргументов [11].

Кроме использования условия (27) возможен еще математически приемлемый выбор четного решения УШ путем четного продолжения на $x<0$ нечетных решений (7) с граничным условием (20). Это сделано неявно для $\nu=1$ [1, с. 527] и $\nu=2$ [12], и хотя в этом случае нет падения на дно, но по-прежнему имеет место вырождение уровней по четности ($E_{n+}=E_{n-}$, $n=0,1,2,\ldots$) и полное запирание барьера (ямы) (1) ($T\equiv0$). Этот выбор четных состояний мы отбрасываем, как и предыдущий.

Относительно функции $h(\lambda,\nu)$ при условии (23) можно привести следующие физические соображения. Конечный скачок логарифмической производной волновой функции вызывается сосредоточенным в точке разрыва δ-образным потенциалом [13]

$$V_\delta=\frac{\psi'(+0)-\psi'(-0)}{\psi(0)}\delta(x). \qquad (28)$$

По аналогии с формулой (28) можно ввести соответствующий бесконечному скачку производной (27) потенциал

$$V_\delta = 2\left(\mathscr{P}_\nu(\lambda,\ |x|) + h(\lambda,\ \nu)\right)\delta(x). \tag{29}$$

Первое слагаемое было указано в [14], второе — в [15]. Второе слагаемое можно и нужно выбирать. Первое автоматически присуще четной особенности (1), кроме случая четного излома нечетной функции, который приводит к наиболее сингулярному потенциалу

$$V_\delta = 2\,\frac{\delta(x)}{|x|}. \tag{30}$$

Выбор коэффициента a_n (12) позволяет сохранить связь аналога граничного условия (27) и вида потенциала V_δ (29) и для случая $\nu=\nu_n$ (5).

Одной из попыток [15] построения граничного условия (27) был кажущийся физически приемлемым выбор минимального числа слагаемых у потенциала V_δ (29)

$$h(\lambda, \nu) \equiv 0. \tag{31}$$

Однако такой выбор приводит к разрыву непрерывности по переменной ν у физических величин — четных уровней энергии $E_{n+}(\lambda,\nu)$ и коэффициента прохождения $T(\lambda,\nu,E)$ в точках $\nu=\nu_n$, в которых скачком меняется число сингулярных слагаемых у потенциала (29) (оно равно $\mathscr{E}(m)$, см. (17)), причем, как показывают численные расчеты, $E_{0+}(m)\to-\infty$ при $m\to n-0$ $(n=1,2,3)$, а остальные скачки конечны.

Компенсировать эти скачки можно только сингулярностями функции $h(\lambda,\nu)$ в точках $\nu=\nu_n$. Перед выводом вида этой компенсации заметим, что потенциал (29) не влияет на нечетные уровни, поэтому он остается незамеченным при рассмотрении s-волновых функций в поле сингулярных центральных потенциалов [16].

Для поиска хотя бы одной функции $h(\lambda,\nu)$, сглаживающей скачки $E_{n+}(\nu)$, воспользуемся физически естественным предположением о независимости граничного условия для четной функции от вида гладкой части потенциала $U(x)$ (3) и выберем $U(x)=0$, тогда УШ принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \lambda\,|x|^{-\nu}\psi + E\psi = 0 \tag{32}$$

и зависит от трех параметров: λ, ν, E.

Путем перехода к безразмерной длине ($[x]=1$, см. (17))

$$z = |\lambda|^m x \tag{33}$$

число параметров УШ уменьшается до двух (ν, ε):

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} \mp |z|^{-\nu}\psi + \varepsilon\psi = 0, \tag{34}$$

$$\varepsilon = E\,|\lambda|^{-2m},\quad [\varepsilon]=0, \tag{35}$$

знак «минус» в УШ (34) относится к отталкиванию $(\lambda>0)$. Потребуем, чтобы и граничное условие зависело только от этих параметров.

Требование самосопряженности гамильтониана устраняет зависимость от энергии E, т. е. от ε, и условие (27) примет вид

$$\lim_{z\to+0}\left(\frac{\psi'(z)}{\psi(z)} \pm \frac{z^{1-\nu}}{\nu-1} + \ldots\right) = D_\pm(\nu), \tag{36}$$

знак «плюс» в условии (36) относится к отталкиванию $(\lambda>0)$.

Условие (36) приводит к скейлинговой зависимости уровней энергии и коэффициента прохождения $T(t)$:

$$E_n = |\lambda|^{2m} \varepsilon_n(\nu), \tag{37}$$

$$t = |\lambda| E^{-1/2m}, \ [t] = 0. \tag{38}$$

Формулы (37) имеют место для нечетных уровней и δ-потенциала [13].

Возвращаясь к размерной длине x, из условия (36) находим

$$h(\lambda, \nu) = D_\pm(\nu) |\lambda|^m, \tag{39}$$

т. е. задача поиска функции $h(\lambda, \nu)$ сводится к выбору функции одной переменной $D_\pm(\nu)$.

Для отыскания подходящей функции $D_+(\nu)$ воспользуемся еще более частным видом УШ (3), т. е. (34), — рассмотрим четные состояния с $E=\varepsilon=0$ функции $\tilde{\psi}_e(x)$ в случае потенциала отталкивания ($\lambda = +1$, $x=z$), удовлетворяющие УШ ($x>0$):

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{dx^2} - x^{-\nu}\tilde{\psi} = 0. \tag{40}$$

Четные решения УШ (40) однозначно определяются для $\nu=2$ [6] ($-1/4<\lambda<3/4$):

$$\tilde{\psi}_e = x^{-s}, \quad s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda} \tag{41}$$

и свободной частицы ($U=W=E=0$):

$$\tilde{\psi}_e = 1. \tag{42}$$

Решения (41), (42) монотонно не возрастают для $3/4>\lambda>0$ и при $x\to\infty$ (условие (14) для решения (41) не выполняется, но $\tilde{\psi}_e(x)>0$ при $x>0$) не имеют нулей. При $E=0$ имеется единственный виртуальный уровень энергии, что физически приемлемо, так как работает потенциал притяжения [5, 6]

$$V_\delta = -2s\delta(x)|x|^{-1}. \tag{43}$$

Зафиксируем этот единственный для притяжения виртуальный (реальный) уровень с нулевой энергией, обусловленный потенциалом притяжения (29) с $\lambda>0$. Убывающее на бесконечности решение УШ (40) единственно (с точностью до нормировки):

$$\tilde{\psi}_e(x) = x^{1/2} K_m(2mx^{1/2m}), \quad x>0, \tag{44}$$

$K_\alpha(z)$ — модифицированная цилиндрическая функция, при $x\to\infty$

$$\tilde{\psi}(x) \sim \exp\{-2mx^{1/2m}\}. \tag{45}$$

Функция (44) конечна при $x=0$, не имеет нулей (нет связанных состояний с отрицательной энергией) и монотонно убывает при $x\to\infty$.

Из логарифмической производной решения (44) находим граничное условие (36) (для функции $D_+(\nu)$) с функцией

$$D_+(m) = -\frac{\pi m^{2m+1}}{\Gamma^2(1+m)\sin \pi m}, \tag{46}$$

где m определено формулой (17).

Эта функция имеет полюсы при $\nu=\nu_n$ ($m=1, 2, ...$), которые компенсируют скачок потенциала V_δ, определяемый формулами (29), (39) и (46) в этих точках. Численные расчеты показывают, что условие (46) обеспечивает непрерывность коэффициента прохождения через барьер (1) ($\lambda=1$).

Остаются две проблемы: найти граничные условия в особых точках (5) и перейти к случаю притяжения. Рассмотрим вторую. Нечетное продолжение функции (39) ($|\lambda|\to\lambda$) не обязательно, так как потенциал (29) определенной четностью по λ не обладает, и численный расчет показывает, что такое продолжение не обеспечивает непрерывности четных уровней по ν.

Поступим следующим образом. В выражении (39) заменим $|\lambda|$ для $\lambda>0$ на λ и продолжим множитель λ^m на отрицательную λ-полуось. Так как функция λ^m ($m\neq 1, 2, ...$) имеет на этой полуоси разрез в комплексной λ-плоскости, а функция (39) должна в силу самосопряженности гамильтониана быть вещественной, надо в качестве продолжения множителя λ^m взять его главное значение $|\lambda|^m \cos \pi m$, т. е., согласно (39), (46),

$$D_-(m) = -\frac{\pi m^{2m+1} \operatorname{ctg} \pi m}{\Gamma^2(1+m)}, \quad \lambda<0, \quad m\neq 1, \ 2, \ \ldots . \tag{47}$$

Численный расчет показывает, что четные уровни и коэффициент прохождения непрерывны для потенциала притяжения (1) при $\lambda=-1$.

В случае $\nu=\nu_m$, $m=m_n=1, 2, ...$, видоизменяется вид функции $\mathscr{P}_\nu(\lambda, x)$ (27), (29):

$$\mathscr{P}_{\nu_n}(\lambda, x) = \sum_{k=1}^{m_n-1} \lambda^k f_k(\nu_n)\, x^{(2-\nu_n)k-1} + f_{m_n}\lambda^{m_n} \ln(|\lambda|^{m_n}\ |x|), \tag{48}$$

константы $f_k(\nu_n)$, f_{m_n} определяются по-прежнему из логарифмической производной функции (44) при $m=m_n$. В кулоновском случае $\nu=1$, $m_1=1$ в формуле (48) остается только последнее слагаемое. Логарифмическая производная бесселевой функции (44) дает и значение константы D_{m+}, а правило перехода к притяжению просто:

$$h(\lambda, m) = D_{m\pm}\,|\lambda|^m, \quad m=1, \ 2, \ \ldots, \tag{49}$$

$$D_{m-} = (-1)^m D_{m+}. \tag{50}$$

Численные расчеты показывают, что при таком выборе граничных условий, несмотря на разрыв граничных условий (27), (39), (46), (47) в точках $\nu=\nu_n$, имеет место непрерывность физических параметров (E_{n+}, $\nu(E)$).

Конечно, выбор функций (46), (47) и констант (50) не однозначен. Непрерывность физических параметров не будет нарушена, если сделать замену

$$D_\pm(m) \to D_\pm(m) + L_\pm(m), \tag{51}$$

где $L_\pm(m)$ — непрерывные при $1/2\leqslant m<0$ ($0\leqslant\nu<2$) функции. Однако поводы для такого видоизменения нам пока неизвестны.

После того как осуществлен выбор четных состояний для решений УШ с особенностью (1), легко сформулировать правило перехода любого решения УШ (3) с гладким потенциалом $U(x)$ без определенной четности через особую точку $x=0$. При $x>0$ любое решение УШ (3) можно представить в виде комбинации локально-четного и локально-нечетного решений:

$$_+\psi(x) = c_+\psi_e(x) + c_-\psi_0(x), \tag{52}$$

где $_+\psi_e(x)$ удовлетворяет граничным условиям (27) и (14) ($\psi_+ \to \psi_e$) $\psi_0(x)$ — условиям (20) и (19). Продолжением решения (52) на полуось $x<0$ будет функция

$$_-\psi(x) = c_+ \, _-\psi_e(x) + c_- \psi_0(x), \tag{53}$$

где $\psi_0(x)$ по-прежнему удовлетворяет условиям (20), (19), а локально-четная функция $_-\psi_e(x)$ — условию (14) и условию

$$\lim_{x \to -0} (-\psi_e'(x) + \mathscr{P}_\nu(\lambda, |x|)) = -h(\lambda, \nu). \tag{54}$$

Правило (52)—(54) легко обобщается на случай несимметричного сингулярного потенциала

$$W(x) = \begin{cases} \lambda_+ x^{-\nu_+}, & x > 0, \\ \lambda_- |x|^{-\nu_-}, & x < 0, \end{cases} \tag{55}$$

заменой в условии (54) $\lambda \to \lambda_-$, $\nu \to \nu_-$. Правило действует и в обратную сторону.

Сформулированные правила обеспечивают самосопряженность гамильтониана (2) на функциях с особенностями логарифмической производной при $x \to 0$ (27), (54), так как в дополнение к сингулярности (55) подключается точечный потенциал

$$V_\delta = (\mathscr{P}_{\nu+}(\lambda_+, |x|) + \mathscr{P}_\nu(\lambda_-, |x|) + h(\lambda_+, \nu_+) + h(\lambda_-, \nu_-))\,\delta(x). \tag{56}$$

Эти же правила позволяют непротиворечиво решить любую задачу одномерной квантовой механики с особенностью потенциала (1) (уровни энергии, прохождение через барьер), в том числе обратную задачу [5]. Примеры будут рассмотрены в отдельной публикации.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1989. [2] Переломов А. М. Обобщенные когерентные состояния и их приложения. М., 1987. [3] Dittrich J., Exner P.//J. Math. Phys. 1985. 28. P. 2000. [4] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. М., 1982. [5] Гостев В. Б., Френкин А. Р.//ТМФ. 1991. 88. С. 37. [6] Гостев В. Б., Минеев В. С., Френкин А. Р.//ТМФ. 1986. 68. С. 45. [7] Moss R. E.//Amer. J. Phys. 1987. 55. P. 397. [8] Малкин А., Манько В. Н. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М., 1979. [9] Loudon P.//Amer. J. Phys. 1959. 27. P. 649. [10] Calodgero F.//J. Math. Phys. 1969. 10. P. 2191. [11] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 2. М., 1980. [12] Klauder J.//Acta Phys. Austriaca Suppl. 1973. 11. P. 341. [13] Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Т. 2. М., 1960. [14] Ezawa H., Klauder J., Shepp L.//J. Math. Phys. 1975. 16. P. 783. [15] Гостев В. Б., Френкин А. Р.//ТМФ. 1988. 74. С. 247. [16] Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М., 1969.

Поступила в редакцию
24.06.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

УДК 539.19+539.2

ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРЕМА ХОЭНБЕРГА—КОНА В МЕТОДЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ

О. С. Еркович, В. В. Комаров, А. М. Попова, В. А. Борзилов
(НИИЯФ)

Сформулирована и доказана обобщенная теорема Хоэнберга—Кона, лежащая в основе метода многочастичных функционалов плотности. Предлагаемый метод является обобщением метода функционалов плотности и основан на представлении энер-