Краткие сообщения по физике № 11,12 — 1991 г.

УДК 530.145

О ПОВЫШЕНИИ ТОЧНОСТИ ВКБ КВАНТОВАНИЯ ДЛЯ ДВИЖЕНИЯ В ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

А. С. Бруев

Рассмотрена модификация ВКБ приближения, позволяющая повысить точность квазиклассического квантования для движения в центрально-симметричном поле.

Метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ) является одним из наиболее распространенных приближенных методов решения уравнения Шредингера (УШ). В данной работе на примере s-состояний для некоторых сферически-симметричных потенциалов, не имеющих особенностей при $r = 0$, показано, что стандартное ВКБ приближение /1/ может быть модифицировано за счет учета искажений фаз ВКБ функций, возникающих при наложении краевого условия в начале координат.

Похожая задача о модификации ВКБ приближения возникает при рассмотрении ВКБ квантования для сферически-симметричных потенциалов, имеющих особенность в начале координат. В частности, для сферически-симметричного кулоновского потенциала Лангером было показано, что для получения правильного результата при нахождении энергий связанных состояний к потенциалу следует добавлять поправочный член $\Delta U = \mathrm{const}\cdot r^{-2}$ /2/. При этом использовалось преобразование $z = \ln r$, отображающее интервал $(0, \infty)$ на интервал $(-\infty, +\infty)$. В последующих работах /3/ — /5/ была рассмотрена проблема однозначного выбора отображающего преобразования для произвольного потенциала, имеющего особенность в начале координат.

При рассмотрении методом Лангера квантования для любых центральных полей, в том числе и для тех, которые не имеют особенностей в начале координат, всегда возникает дополнительный член $\Delta U = \mathrm{const}\cdot r^{-2}$, приводящий к искажению фаз ВКБ функций. Эти искажения, очевидно, обусловлены наложением краевого условия в начале координат. Однако описанный способ учета искажений фаз ВКБ функций приводит к определенным неудобствам, поскольку возникающие фазовые интегралы, как правило, можно вычислить только численными методами.

Наряду с методом квантования Лангера в случае потенциалов, имеющих особенность при $r = 0$, известен другой метод учета фазовых искажений ВКБ функций /6/. Таким методом в работе /7/ была исследована зависимость s-волнового решения радиального уравнения Шредингера от приведенной массы системы. В данной работе показано, что учет искажений фаз ВКБ функций, обусловленных наложением краевого условия при $r = 0$, приводит к повышению точности приближения и в случае потенциалов, не имеющих особенностей в начале координат. Соответственно улучшение точности приближения достигается при замене приближенного граничного условия $\chi^{(WKB)}(r) = 0$, где $\chi^{(WKB)}(r)$ — решение УШ в приближении ВКБ, условием $\chi(r) = 0$, требующим сшивания точного решения $\chi(r)$ с ВКБ решением вдали от точки $r = 0$.

1. Степенной потенциал $U(r) = U_0(r + r_0)^2/a_0^2$, где U_0, r_0, a_0 — положительные параметры.

Для данного потенциала, в соответствии с известным условием применимости ВКБ приближения /1/, при значениях энергии E близких к нулю должно выполняться неравенство $r + r_0 \gg a_0/v_0^{1/4}$, где $v_0 = 2ma_0^2U_0/\hbar^2$. Поэтому при $v_0^{1/4}r_0/a_0 \sim 1$ ВКБ приближение нарушается вблизи начала координат, так что необходима отмеченная выше модификация ВКБ функций. Покажем это с помощью непосредственного расчета.

Для s-состояний частные решения радиального УШ в данном случае выражаются через функции Вебера. Решение, ограниченное при $r \to \infty$, имеет вид $\chi(r) = U(-\epsilon/2v_0^{1/2}, 2^{1/2}v_0^{1/4} \times (r + r_0)/a_0)$, где $\epsilon = 2ma_0^2E/\hbar^2$, $U(a, z)$ — функция Вебера. Используя краевое условие при $r = 0$, получаем уравнение, определяющее энергии уровней $U(-\epsilon/2v_0^{1/2}, 2^{1/2}v_0^{1/4}r_0/a_0) = 0$. В общем случае точное решение этого трансцендентного уравнения найти не удается. Однако можно рассмотреть такие значения параметров потенциала, когда выполняется соотношение

$$\epsilon = \epsilon_n = 2v_0^{1/2}(n + 1/2), \tag{1}$$

где $n = 0, 1, 2...$. При таком условии функция Вебера $U(-n - 1/2, z)$ выражается через полиномы Эрмита $H_n(z/\sqrt{2})$ /8/. Поэтому уравнение $v_0^{1/4}r_0/a_0 = x_{n,s}$, где $x_{n,s}$ — корни полиномов Эрмита $H_n(v_0^{1/4}r_0/a_0)$, определяет возможные значения параметров потенциала, для которых выполняется соотношение (1). В частности, при $n = 1, 2, 3$ имеем:

$$\epsilon = \epsilon_1 = 3v_0^{1/2};\ v_0^{1/4}r_0/a_0 = 0;$$

$$\epsilon = \epsilon_2 = 5v_0^{1/2};\ v_0^{1/4}r_0/a_0 = 1/\sqrt{2}; \tag{2}$$

$$\epsilon = \epsilon_3 = 7v_0^{1/2};\ v_0^{1/4}r_0/a_0 = \sqrt{3/2};\ 0.$$

Использование для расчета энергий уровней традиционного ВКБ приближения в рассматриваемом случае приводит к следующему уравнению:

$$\epsilon = 4v_0^{1/2}\left(N + \frac{3}{4}\right) + \frac{2}{\pi} v_0^{1/2} \frac{r_0}{a_0} \left[\epsilon - v_0 \left(\frac{r_0}{a_0}\right)^2\right]^{1/2} + \frac{2}{\pi} \epsilon \arcsin \left(\frac{v_0}{\epsilon}\right)^{1/2} \frac{r_0}{a_0}, \tag{3}$$

где N = 0, 1, 2... . Сравнивая (2) и (3), отметим, что при $r_0/a_0 \neq 0$ значения энергий, найденные с помощью ВКБ приближения, отличаются от точных значений. Данные расчета точных (ϵ) и приближенных (ϵ_{WKB}) энергий уровней для значений параметров потенциала $v_0^{1/4} r_0/a_0 = 2^{-1/2}$; $(3/2)^{1/2}$, приведены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Точные и приближенные значения энергий уровней для потенциала $U(r) = U_0(r + r_0)^2/a_0^2$

$v_0^{1/4} r_0/a_0$	$v_0^{-1/2}\epsilon_{WKB}$	$v_0^{-1/2}\tilde{\epsilon}_{WKB}$	$v_0^{-1/2}\epsilon$
$2^{-1/2}$	4,9737	4,9979	5
$(3/2)^{1/2}$	6,9614	6,9966	7

Рассмотрим расчет энергий уровней с помощью модифицированного ВКБ приближения. Вблизи начала координат линейно-независимые решения УШ для рассматриваемого потенциала выражаются через функции Эйри Ai(z) и Bi(z), где

$$z = \frac{a_0}{2r_0}\left(2v_0 \frac{r_0}{a_0}\right)^{1/3} \frac{v_0(r_0/a_0)^2 - \epsilon}{v_0} + \left(2v_0 \frac{r_0}{a_0}\right)^{1/3} \frac{r}{a_0}.$$

Граничное условие при r = 0 требует использования определенной комбинации частных решений

$$\chi(r) = Bi(z)Ai(z_0) - Ai(z)Bi(z_0), \tag{4}$$

где $z_0 = (a_0/2r_0)(2v_0 r_0/a_0)^{1/3}[v_0(r_0/a_0)^2 - \epsilon]/v_0$. При $E \to \infty$, используя асимптотики функций Эйри /8/, для функции $\chi(r)$ в (4) имеем:

$$\chi(r) = A\left[\epsilon - v_0\left(\frac{r_0}{a_0}\right)^2 - 2v_0\frac{r_0 r}{a_0^2}\right]^{-1/4} \sin\left\{\int_0^r \left[\epsilon - v_0\left(\frac{r_0}{a_0}\right)^2 - 2v_0\frac{r_0 r}{a_0^2}\right]^{1/2}\frac{dr}{a_0} + \gamma\right\}, \qquad (5)$$

где A — константа, а фаза γ определяет искажение фазы ВКБ решения из-за краевого условия при $r = 0$ и имеет вид

$$\gamma = \mathrm{Arc\,cos}\ \frac{Bi(z_0)}{\sqrt{Ai^2(z_0) + Bi^2(z_0)}} - \frac{\pi}{4} - \frac{1}{3v_0}\frac{a_0}{r_0}\left(\epsilon - v_0\frac{r_0^2}{a_0^2}\right)^{3/2}$$

Аналитически продолжая выражение (5) в ту часть классически разрешенной области, где потенциал $U(r)$ имеет произвольные значения, находим выражение для волновой функции частицы, соответствующее модифицированному ВКБ приближению

$$\chi(r) = Ap^{-1/2}\sin\left(\int_0^r pa_0^{-1}dr + \gamma\right), \qquad (6)$$

где $p = [\epsilon - v_0((r + r_0)/a_0)^2]^{1/2}$. В классически запрещенной области справа от точки поворота для волновой функции частицы имеем $\chi(r) = B|p|^{-1/2}\exp(-\int_{r_*}^{r} |p|a_0^{-1}dr)$, где B — константа, а r_* — координата точки поворота. Используя известные формулы связи для ВКБ функций /1/, находим выражение для волновой функции слева от точки поворота

$$\chi(r) = Bp^{-1/2}\sin[\pi/2 - \int_r^{r_*} pa_0^{-1}dr]. \qquad (7)$$

Сшивая выражения (6) и (7) в некоторой произвольной точке r_1, такой, что $r_0 < r_1 < r_*$, находим условие квантования для модифицированного ВКБ приближения

$$\int_0^r pa_0^{-1}dr = \pi(N + 3/4) - \gamma, \qquad (8)$$

где N = 0, 1, 2... С помощью условия квантования (8) для расчета энергий уровней получаем уравнение, отличающееся от уравнения (3) наличием поправочного члена — $(4/\pi)v_0^{1/2}\gamma$ в правой части. Улучшение точности ВКБ приближения подтверждается данными ($\tilde{\epsilon}_{WKB}$), приведенными в табл. 1.

2. Экспоненциальный потенциал $U(r) = - U_0 \exp(- r/r_0)$, где U_0, r_0 — положительные параметры.

Для данного потенциала при значениях энергии, близких к нулю, условие применимости ВКБ приближения для движения частицы в потенциальной яме, когда $r < r_0$, будет выполнено, если $v_0 = 2mU_0 r_0^2/\hbar^2 \gg 1$. Соответственно при $v_0 \lesssim 1$ описанная выше модификация ВКБ приближения должна привести к улучшению точности расчета уровней энергии. Убедимся в этом, проведя непосредственные вычисления уровней энергии.

Для s-состояний частные решения радиального УШ в данном случае выражаются через функции Бесселя. Решение, ограниченное при $r \to \infty$, имеет вид

$$\chi(r) = J_\nu \left[2v_0^{1/2} \exp(-\frac{r}{2r_0}) \right],$$

где $\nu = 2\sqrt{-\epsilon}$, $\epsilon = 2mr_0^2 E/\hbar^2$, $J_\nu(z)$ — функция Бесселя. Используя краевое условие при $r = 0$, получаем уравнение, определяющее энергии уровней

$$J_\nu (2v_0^{1/2}) = 0. \tag{9}$$

Расчет энергий уровней с помощью стандартного ВКБ метода приводит к уравнению, отличающемуся от уравнения (9)

$$2\sqrt{v_0 + \epsilon} - 2\sqrt{-\epsilon} \arccos \sqrt{-\epsilon/v_0} = \pi(N + 3/4), \tag{10}$$

где N = 0, 1, 2... Используя уравнения (9) и (10), мы нашли точные и приближенные (μ, μ_{WKB}) значения параметра $\mu = 2v_0^{1/2}$, отвечающие появлению в яме уровня с энергией, равной нулю. Значения μ и μ_{WKB} приведены в табл. 2.

Таблица 2

Точные и приближенные значения параметра μ, отвечающие появлению в яме уровня с энергией, равной нулю

μ_{WKB}	$\tilde{\mu}_{WKB}$	μ
2,3562	2,4206	2,4048
5,4978	5,5319	5,5201
8,6394	8,6623	8,6537

При расчете энергий уровней с использованием модифицированного ВКБ приближения мы получили уравнение, отличающееся от уравнения (10) наличием поправочного члена — $(4/\pi)v_0^{1/2}\gamma$ в правой части. Выражение для γ имеет вид:

$$\gamma = \mathrm{Arc}\cos \frac{\mathrm{Bi}(z_0)}{\sqrt{\mathrm{Ai}^2(z_0) + \mathrm{Bi}^2(z_0)}} - \frac{\pi}{4} - \frac{2}{3}\,\frac{(\epsilon + v_0)^{3/2}}{v_0},$$

где $z_0 = -(\epsilon + v_0)/v_0^{2/3}$. Улучшение точности обычного ВКБ приближения подтверждается данными табл. 2, где содержатся значения параметра $\tilde{\mu}_{\mathrm{WKB}}$, найденные с использованием модифицированного ВКБ приближения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
2. Langer R. E. Phys. Rev., **51**, 669 (1937).
3. Пономарев Л. И. ДАН СССР, **162**, 1023 (1965).
4. Adams J. E.; Miller W. H. J. Chem. Phys., **67**, 5775 (1977).
5. Vicharelly P. A., Collins C. B. Phys. Lett., **A89**, 215 (1982).
6. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. М., Наука, 1975.
7. Moxhay P., Rosner J. L. J. Math. Phys., **21**, 1688 (1980).
8. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стиган И. М., Наука, 1979.

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 4 ноября 1991 г.