

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ КВАНТОВАНИЕ С ИСКЛЮЧЕНИЕМ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Б. М. Карнаков*, В. Д. Мур

*Московский государственный инженерно-физический институт
115409, Москва, Россия*

В. С. Попов

*Институт теоретической и экспериментальной физики
117259, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 марта 1999 г.

Развита модификация метода ВКБ (модифицированный метод квантования, или ММК) для нахождения радиальных волновых функций, основанная на исключении центробежного потенциала из квазиклассического импульса и соответствующем изменении фазы в условии квантования Бора—Зоммерфельда. ММК применяется при вычислении асимптотических коэффициентов в нуле и на бесконечности. На примерах степенных потенциалов и потенциала воронки показано, что ММК не только значительно расширяет возможности аналитического исследования спектра энергий и волновых функций, но и обеспечивает процентную точность вычислений даже для состояний с радиальным квантовым числом $n_r \sim 1$, если орбитальный момент l не слишком велик. Кратко обсуждается возможность обобщения ММК на релятивистский случай (уравнение Солпитера для бесспиновых частиц).

PACS: 03.65.-w; 03.65.Sq

1. Квазиклассическое приближение, или метод ВКБ, является одним из наиболее эффективных методов квантовой механики и математической физики (см., например, [1–8]). В работах [9, 10] предложена модификация метода ВКБ, состоящая в исключении центробежного потенциала из квазиклассического импульса, $p(r) \rightarrow \tilde{p}(r)$, и в учете его с помощью изменения фазы γ_l в правиле квантования Бора—Зоммерфельда:

$$\int_0^{r_0} \tilde{p}(r) dr \equiv \int_0^{r_0} \sqrt{2[E_{n_r, l} - V(r)]} dr = \pi(n_r + \gamma_l). \quad (1)$$

Здесь и далее $\hbar = m = 1$, $n_r = 0, 1, 2, \dots$ — радиальное квантовое число, r_0 — точка поворота¹⁾, а значение γ_l зависит от орбитального момента l и от поведения потенциала на малых расстояниях. Если $V(r) \propto r^\alpha$ ($\alpha > -2$, что исключает «падение на центр» [2]), то, согласно [9, 10], для потенциалов притяжения имеем

$$\gamma_l = \begin{cases} (2l + 3)/4, & \alpha > 0, \\ (2l + 3 + \alpha)/2(2 + \alpha), & -2 < \alpha < 0. \end{cases} \quad (2a)$$

$$(26)$$

*E-mail: karnak@theor.mephi.msk.su

¹⁾ Т.е. $\tilde{p}(r_0) = 0$. Заметим, что для потенциалов притяжения, монотонно возрастающих с увеличением r , левой точкой поворота в (1) всегда является $r = 0$.

В частности, для короткодействующих потенциалов с кулоновской особенностью в нуле ($\alpha = -1$, потенциалы Юкавы, Хюльтена и т.д.) в правой части (1) стоит $n_r + l + 1 \equiv n$ — главное квантовое число уровня, а зависимость энергии $E_{n_r, l}$ от l входит только в поправках к условию квантования (1). Отметим, что для потенциалов, конечных в нуле ($\alpha \geq 0$), условие квантования (1) с $\gamma_l = (2l + 3)/4$ приведено в [5].

Подход (1), (2) (далее — модифицированный метод квантования, или ММК) существенно расширяет возможности аналитического исследования энергетического спектра. В данной работе ММК обобщен на случай «запирающих» потенциалов, имеющих только дискретный спектр уровней энергии, а также применен для вычисления радиальной волновой функции в подбарьерной области, в том числе асимптотического коэффициента в нуле (п. 2). Сравнение с точными и численными решениями уравнения Шредингера для степенных потенциалов показывает, что формулы ММК не только являются асимптотически точными в пределе $n_r \rightarrow \infty$, но и сохраняют высокую точность даже для состояний с $n_r \sim 1$, если орбитальный момент l не слишком велик. В п. 3 ММК применяется к потенциалу воронки, часто встречающемуся в квантовой хромодинамике [11, 12], что позволяет получить уравнения для энергетического спектра и коэффициента в нуле в аналитическом виде. Квазиклассические формулы для асимптотических коэффициентов на бесконечности получены в п. 4. Возможность обобщения ММК на релятивистский случай рассмотрена в п. 5. Краткое обсуждение полученных результатов содержится в п. 6. Некоторые детали вычислений (исследование модифицированного правила квантования (1) для потенциала воронки, а также общих свойств интеграла квантования в (1)) вынесены в Приложения.

2. Идея исключения центробежного потенциала из квазиклассического импульса основана на том, что для высоковозбужденных ($n_r \gg 1$) состояний, когда волновая функция имеет много узлов, этот потенциал при $l \sim 1$ существен лишь в области малых расстояний, а в основной области локализации частицы он выступает как возмущение $\propto \hbar^2$ и в квазиклассическом приближении может быть опущен. При этом квазиклассическая радиальная функция может быть записана в виде

$$\chi_{El}^{\text{WKB}}(r) = \frac{C}{\sqrt{\tilde{p}(r)}} \sin \left\{ \int_0^r \tilde{p}(r) dr - \pi \delta_l \right\}, \quad (3)$$

причем для нормированной функции связанного состояния [2, 3]

$$C = \frac{2}{\sqrt{T_r}}, \quad T_r = \frac{2\pi}{\omega_r} = 2 \int_0^{r_0} \frac{dr}{\tilde{p}(r)}. \quad (4)$$

Значение δ_l определяется из сшивания квазиклассической функции с точным решением уравнения Шредингера, удовлетворяющим граничному условию

$$\chi_{El}(r) = c_{El} r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0, \quad (5)$$

где c_{El} — асимптотический коэффициент в нуле. Решение проблемы сшивания зависит от вида потенциала $V(r)$ на малых расстояниях (т.е. в области неквазиклассичности), энергии E и орбитального момента l .

Начнем со случая больших значений энергии $E = k^2/2$, когда потенциал, регулярный на малых расстояниях, можно рассматривать как возмущение. Ограничиваясь

первым порядком теории возмущений по потенциалу $V(r)$, удобно записать (3) в виде

$$\chi_{El}^{\text{WKB}}(r) = \frac{C}{\sqrt{k}} [\sin \phi_0(r) + \phi_1(r) \cos \phi_0(r)], \quad (6)$$

где $\delta_l = \delta_l^{(0)} + \delta_l^{(1)}$,

$$\phi_0(r) = kr - \pi\delta_l^{(0)}, \quad \phi_1(r) = \int_0^r (\sqrt{k^2 - 2V(r)} - k) dr - \pi\delta_l^{(1)} \quad (7)$$

(выделение слагаемого kr в фазе $\phi_0(r)$ соответствует пренебрежению потенциалом V). С другой стороны, в отсутствие потенциала

$$\chi_{El}^{(0)}(r) = A\sqrt{kr} J_\nu(kr) \approx A\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right), \quad kr \gg \nu^2, \quad \nu = l + \frac{1}{2}. \quad (8)$$

Расстояния $r \gg \nu^2/k$ являются областью сшивания точной и квазиклассической волновых функций. Сравнивая (6) и (7) с (8), получаем

$$\delta_l^{(0)} = \frac{l}{2}, \quad A = \sqrt{\frac{\pi}{2k}} C. \quad (9)$$

Воспользовавшись асимптотикой функции Бесселя $J_\nu(z)$ при $z \rightarrow 0$ и соотношениями (4), находим

$$c_{El}^{(0)} = \frac{\sqrt{\omega_r}}{\Gamma(l + 3/2)} \left(\frac{E}{2}\right)^{(2l+1)/4} \quad (10)$$

(нулевое приближение). В этом приближении энергетический спектр частицы определяется правилом квантования (1), (2а), в котором

$$\gamma_l = \delta_l^{(0)} + 3/4 = (2l + 3)/4.$$

Как видно, оно справедливо для всех $\alpha > -2$.

Формула (10) получена в пренебрежении потенциалом $V(r)$ на малых расстояниях. Учтем его по теории возмущений, для чего воспользуемся функцией Грина радиального уравнения Шредингера для свободной частицы:

$$G_{E\nu}(r, r') = (-1)^l \pi \sqrt{r < r'} J_\nu(kr <) J_{-\nu}(kr >),$$

где $r < (r >)$ — меньшее (большее) из чисел r и r' . Поправка первого порядка по потенциалу к невозмущенному решению (8) имеет вид

$$\begin{aligned} \chi_{El}^{(1)}(r) &= - \int_0^\infty G_{E\nu}(r, r') V(r') \chi_{El}^{(0)}(r') dr' = \\ &= (-1)^{l+1} A \pi \sqrt{kr} \left\{ J_\nu(kr) \int_r^\infty r V(r) J_\nu(kr) J_{-\nu}(kr) dr + J_{-\nu}(kr) \int_0^r r V(r) J_\nu^2(kr) dr \right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

причем $\chi_{El} = \chi_{El}^{(0)} + \chi_{El}^{(1)}$.

При $r \rightarrow 0$ существенно лишь первое слагаемое в фигурных скобках, которое $\propto r^{l+1}$, как и (5), и потому приводит к перенормировке асимптотического коэффициента в нуле:

$$c_{El}^{WKB} = c_{El}^{(0)} \{1 + d_l(E)\},$$

$$d_l(E) = (-1)^{l+1} \pi \int_0^\infty r V(r) J_\nu(kr) J_{-\nu}(kr) dr. \quad (12)$$

Ввиду быстрых осцилляций произведения функций Бесселя асимптотика $d_l(E)$ при больших энергиях определяется поведением потенциала при $r \rightarrow 0$. Для потенциалов, имеющих степенную асимптотику $V(r) = gr^\alpha/\alpha$, получаем²⁾

$$d_l(E) = (-1)^{l+1} g \frac{\pi \Gamma(-\alpha - 1) \Gamma(1 + \alpha/2)}{2\alpha \Gamma(-\alpha/2) \Gamma(-\nu - \alpha/2) \Gamma(\nu - \alpha/2)} \left(\frac{2}{k}\right)^{\alpha+2} \quad (13)$$

(см. 6.574.2 из справочника [13]). В частности,

$$d_l(E) = g \frac{\pi}{2(2E)^{1/2}}, \quad -g \frac{\pi(\nu^2 - 1/4)}{4(2E)^{3/2}}, \quad -g \frac{\nu^3 - \nu}{12E^2} \quad (14)$$

соответственно для $\alpha = -1, 1$ и 2 . Для логарифмического потенциала $V(r) = g \ln r$ коэффициент $d_l(E) \propto (\ln E + b_l)/E$ может быть получен в аналитическом виде с помощью предельного перехода $\alpha \rightarrow 0$ в (13). Заметим, что чем больше показатель α , тем менее существен потенциал $V(r)$ на малых расстояниях и тем быстрее убывает поправка (14) при увеличении энергии: $d_l(E) \propto 1/E^{1+\alpha/2}$.

Аналогичным образом можно рассмотреть случай степенных потенциалов притяжения $V(r) = -\zeta/r^\beta$ ($0 < r < \infty$) с $0 < \beta \equiv -\alpha < 2$, когда возникает ступение уровней при $E \rightarrow -0$. При решении уравнения Шредингера на малых расстояниях (в области неквазиклассичности) можно опустить слагаемое с энергией

$$\chi_{El}^{(0)}(r) = A\sqrt{r} J_\mu \left(\frac{\sqrt{8\zeta}}{2-\beta} r^{1-\beta/2} \right), \quad \mu = \frac{2l+1}{2-\beta}. \quad (15)$$

Отсюда

$$c_{n,l}^{(0)} = \frac{2^{(\mu+1)/2} \zeta^{\mu/2} \omega_r^{1/2}}{\Gamma(\mu+1)(2-\beta)^{\mu+1/2}}, \quad (16)$$

причем частота ω_r дается прежним выражением (4).

Учитывая слагаемое с энергией по теории возмущений, приходим к формуле (12), где теперь

$$d_l(E) = \frac{4\pi E}{\sin \pi \mu} \frac{(2-\beta)^{\beta/(2-\beta)}}{(8\zeta)^{2/(2-\beta)}} \int_0^\infty z^{(2+\beta)/(2-\beta)} J_\mu(z) J_{-\mu}(z) dz.$$

²⁾ Интеграл в (12), как правило, требует регуляризации, в качестве которой удобно выбрать аналитическое продолжение по параметру α .

В частности, для кулоновского потенциала $V(r) = -Z/r$ имеем

$$c_{nl}^{\text{WKB}} = Z^{l+3/2} \frac{2^{l+1}}{(2l+1)!n^{3/2}} \left\{ 1 - \frac{l(l+1)(2l+1)}{12n^2} \right\}, \quad (17)$$

что совпадает с разложением точного [2] коэффициента в нуле c_{nl} .

Проиллюстрируем точность квазиклассических результатов на примере степенных потенциалов притяжения, $V(r) = r^\alpha/\alpha$. В случае $\alpha > 0$ по формулам (1), (2а) и (10) находим квазиклассические выражения для энергетических уровней и асимптотических коэффициентов в нуле:

$$E_{n_r, l}^{\text{WKB}} = \left[\epsilon_\alpha \left(n_r + \frac{1}{4}(2l+3) \right) \right]^{2\alpha/(2+\alpha)}, \quad \epsilon_\alpha = \sqrt{2\pi} \alpha^{1-1/\alpha} \frac{\Gamma((2+3\alpha)/2\alpha)}{\Gamma(1/\alpha)}, \quad (18)$$

$$c_{n_r, l}^{(0)} = \sqrt{\frac{\alpha \epsilon_\alpha}{2+\alpha}} \frac{(E_{n_r, l}^{\text{WKB}})^{\beta_l}}{2^{(2l-1)/4} \Gamma(l+3/2)}, \quad \beta_l = \frac{l+1-\alpha^{-1}}{2} \quad (19)$$

(здесь учтено, что $\omega_r = \partial E_{n_r, l} / \partial n_r$; поправки к $c_{n_r, l}^{(0)}$ даются формулами (13), (14)).

Сравнение результатов вычислений $c_{n_r, l}^{\text{WKB}}$ с точными значениями для случаев $\alpha = -1, 1, 2$ проведено в табл. 1. В ней представлены значения точных асимптотических коэффициентов $c_{n_r, l}$ и отношения

$$\eta_{n_r, l} = \frac{c_{n_r, l}^{(0)}}{c_{n_r, l}} \{ 1 + d_l(E_{n_r, l}^{\text{WKB}}) \} - 1. \quad (20)$$

Для s -состояний в случае кулоновского и линейного потенциалов асимптотические коэффициенты (12) совпадают с точными:

$$c_{n_r, 0} = \frac{2}{(n_r+1)^{3/2}} \quad (\alpha = -1), \quad c_{n_r, 0} = \sqrt{2} \quad (\alpha = 1),$$

и потому в табл. 1 опущены.

Как видно из таблицы, даже для состояний с $n_r \sim 1$ погрешность формул ММК, как правило, не превышает нескольких процентов и быстро уменьшается с увеличением n_r . Необходимо отметить существенную роль поправки $d_l(E)$. Формулы нулевого приближения (10), (15) являются асимптотически точными в пределе $n_r \rightarrow \infty$, однако при $n_r \sim 1$ и $l \neq 0$ имеют большую погрешность и часто носят лишь оценочный характер (см., например, вклад d_l в (17)).

В заключение этого пункта сделаем несколько замечаний относительно условия квантования (1), (2а). Из него следует своеобразное вырождение уровней³⁾ с одинаковым значением $N = 2n_r + l$, аналогичное известному «случайному» вырождению энергетического спектра сферического осциллятора [2, 3, 5]. Для иллюстрации приведем рисунок, на котором представлен энергетический спектр $E_{n_r, l}$ нижних состояний в случае степенных потенциалов с показателями $\alpha = 1$ и 4. Как видно из рисунка, для данного N близость уровней с различными значениями l нарушается только при увеличении момента (но s - и d -уровни, как и энергии p - и f -состояний, всегда близки друг к другу; с увеличением N к ним начинают приближаться уровни с большими значениями l).

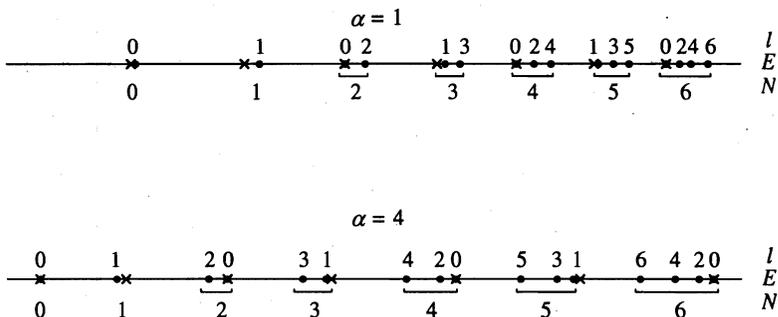
³⁾ Конечно, этот результат является приближенным, и вырождение снимается в более высоких порядках квазиклассического приближения.

Таблица 1

Точность ММК для асимптотических коэффициентов в нуле в случае степенных потенциалов $V(r) = r^\alpha / \alpha$

l	α	$n_r=0$	1	2	3	10
0	2	1.50225 2.8(-3)	1.83987 1.1(-4)	2.05704 2.0(-5)	2.22186 5.8(-6)	2.88969 9(-8)
1	-1	2.04124(-1) 1.0(-2)	1.20962(-1) 1.3(-3)	8.06872(-2) 5.2(-4)	5.84237(-2) 2.1(-4)	1.59817(-2) 6.1(-6)
	1	9.23722(-1) 6.4(-3)	1.20480 2.8(-3)	1.39708 1.6(-3)	1.54805 1.1(-3)	2.19768 2.0(-4)
	2	1.22658 -3.0(-4)	1.93940 -3.5(-5)	2.56558 -8.5(-6)	3.14218 -3.0(-6)	6.53295 -6(-8)
2	-1	9.01601(-3) 2.8(-2)	6.98771(-3) 6.3(-3)	5.35462(-3) 2.2(-3)	4.21685(-3) 1.0(-3)	1.40121(-3) 4.1(-5)
	1	4.36675(-1) -7.9(-4)	6.77368(-1) -2.6(-3)	8.81660(-1) -1.9(-3)	1.06500 -1.3(-3)	2.08230 -3.0(-4)
	2	7.75759(-1) 5.5(-3)	1.45131 8.1(-4)	2.17697 2.3(-4)	2.94763 8.6(-5)	9.23898 2.3(-6)
3	-1	2.20092(-4) 1.4(-2)	2.03986(-4) 2.2(-3)	1.73900(-4) 6.0(-4)	1.46814(-4) 2.1(-4)	5.84389(-5) 2.6(-6)
	1	1.66280(-1) -4.6(-2)	2.93371(-1) -2.6(-2)	4.19592(-1) -1.7(-2)	5.45822(-1) -1.2(-2)	1.43173 -2.5(-3)
	2	4.14661(-1) 1.6(-2)	8.79628(-1) 2.9(-3)	1.45870 9.2(-4)	2.14715 3.8(-4)	9.69891 1.2(-5)

Примечание. Для данных n_r и l в первой строке приведено точное значение коэффициента $c_{n_r, l}$, во второй — погрешность $\eta_{n_r, l}$ (20). Обозначение: $a(b) \equiv a \cdot 10^b$.



Энергетический спектр $E_{n_r, l}$ нижних состояний в потенциале $V(r) = r^\alpha / \alpha$ с $\alpha = 1$ и 4. Точками обозначены точные значения энергии. Около них указаны значения орбитального момента l и квантового числа $N = 2n_r + l$; крестиками обозначены квазиклассические значения (18)

Далее, рассмотрим вопрос о поправках к условию квантования (1), (2а), связанных с учетом потенциала $V(r)$ на малых расстояниях. Для этого заметим, что в области квазиклассичности $r \gg \nu^2/k$ (но где еще $V(r) \ll k^2$) в формуле (11) существенно лишь второе слагаемое в фигурных скобках. Оно соответствует поправке к фазе $\phi_0(r)$, связанной с учетом потенциала $V(r)$ в (6), (7). Из равенства выражений (6) и (11) получаем

$$\delta_l^{(1)} = \frac{1}{\pi} \int_0^r \left\{ \pi r V(r) J_\nu^2(kr) + \sqrt{k^2 - 2V(r)} - k \right\} dr, \quad r \gg \nu^2/k. \quad (21)$$

В случае степенных потенциалов с показателем $\alpha < 1$ этот интеграл принимает постоянное значение, не зависящее от r и уточняющее условие квантования (1), (2а):

$$\int_0^{r_0} \sqrt{2[E_{n_r l}^{\text{WKB}} - V(r)]} dr = \pi \left[n_r + \frac{l}{2} + \frac{3}{4} + \delta_l^{(1)}(E_{n_r l}^{\text{WKB}}) \right]. \quad (22)$$

Так, для потенциалов с кулоновской особенностью, $V(r) = -Z/r$ при $r \rightarrow 0$, интегрирование в (21) можно распространить до $r = \infty$ и получить

$$\delta_l^{(1)}(E) = \frac{1}{\pi k a_B} [\ln(k a_B) + 1 + \psi(l+1)], \quad k a_B \gg 1 \quad (23)$$

(здесь $a_B = 1/Z$ — радиус Бора, а $\psi(z)$ — логарифмическая производная гамма-функции).

3. Для потенциала воронки

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + gr, \quad 0 < r < \infty, \quad (24)$$

интеграл квантования (1) вычисляется аналитически, что позволяет легко исследовать спектр энергий $E_{n_r l}$ (см. Приложение А).

Для состояний с $E_{n_r l} > 0$ асимптотические коэффициенты в нуле могут быть вычислены по формуле

$$c_{n_r l}^{\text{WKB}} = c_{n_r l}^{(0)} (1 + d_l^{(C)} + d_l^{(L)}), \quad (25)$$

где коэффициенты $c_{n_r l}^{(0)}$ определены в (10), поправки $d_l^{(C)}$ и $d_l^{(L)}$ относятся к кулоновской и линейной по r частям потенциала (24) и даются формулами (14), а энергия $E_{n_r l}^{\text{WKB}}$ определяется из условия квантования (22) с фазой (23).

Однако для потенциала с кулоновской особенностью в нуле возможно дальнейшее уточнение как формул (12), так и (25), связанное с точным учетом его влияния при любых значениях энергии $E = k^2/2 > 0$. При этом решение радиального уравнения Шредингера дается регулярной кулоновской функцией $F_l(-Z/k, kr)$, см. [14]. Используя ее асимптотику при $r \rightarrow 0$, можно показать, что при точном учете кулоновского потенциала на малых расстояниях соотношения (12), принимают вид ($q = 1/k a_B$)

$$c_{El} = c_{El}^{(0)} \left\{ \frac{2\pi q}{1 - \exp(-2\pi q)} / \prod_{s=1}^l \left(1 + \frac{q^2}{s^2} \right) \right\}^{1/2} \quad (26)$$

Таблица 2

ММК для потенциала воронки (24), $Z = 0.68812$, $g = 1/2$

$l = 0$					
n_r	0	1	2	3	4
$E_{n_r,l}$	0.49018	1.61443	2.42105	3.10454	3.71656
$\epsilon_{n_r,l}$	-0.132	-5.0(-3)	-1.6(-3)	-7.9(-4)	-4.7(-4)
$c_{n_r,l}$	2.08332	1.66335	1.53617	1.46909	1.42580
$\eta_{n_r,l}$	4.0(-2)	5.1(-3)	2.3(-3)	1.4(-3)	9.8(-4)

l	1			2			
	n_r	0	1	2	0	1	2
$E_{n_r,l}$		1.30557	2.14835	2.85424	1.84780	-	-
$\epsilon_{n_r,l}$		-3.8(-2)	-1.4(-2)	-7.2(-3)	-4.6(-2)	-	-
$c_{n_r,l}$		0.89695	1.07009	1.18071	0.31027	0.45700	0.57479
$\eta_{n_r,l}$		1.1(-2)	9.0(-3)	6.2(-3)	6.8(-2)	3.4(-2)	2.2(-2)

(в случае $l = 0$ произведение следует считать равным единице). Заменяя в (25) слагаемое $c_{n_r,l}^{(0)}(1 + d_l^{(C)})$ выражением (26), получаем требуемое уточнение для асимптотического коэффициента $c_{n_r,l}^{WKB}$.

Сравнение результатов вычисления уровней энергии и асимптотических коэффициентов для потенциала воронки на основе ММК с точными значениями, полученными численным решением уравнения Шредингера, проведено в табл. 2 для $l = 0, 1, 2$. При этом были выбраны значения $Z = 0.68812$ и $g = 1/2$, которые используются в КХД при описании состояний чармония $c\bar{c}$ [12]. Точность расчетов характеризуется величинами

$$\epsilon_{n_r,l} = \frac{E_{n_r,l}^{WKB}}{E_{n_r,l}} - 1, \quad \eta_{n_r,l} = \frac{c_{n_r,l}^{WKB}}{c_{n_r,l}} - 1. \tag{27}$$

Как видно из табл. 2, квазиклассические значения E^{WKB} и c^{WKB} имеют процентную точность (за исключением энергии основного состояния; для него $ka_B \doteq 1.44$, а условие квантования (22), (23) применимо, строго говоря, при $ka_B \gg 1$). Таким образом, для потенциала воронки, так же как и в случае степенных потенциалов, ММК обеспечивает вполне приемлемую точность вычисления энергетических уровней и коэффициентов в нуле.

4. Рассмотрим связанные состояния частицы в случае потенциалов, исчезающих на бесконечности: $V(r) = -Z/r + o(1/r^2)$ при $r \rightarrow \infty$, $Z \geq 0$. При этом асимптотика нормированной волновой функции имеет вид

$$\psi_{\kappa lm}(\mathbf{r}) \approx 2C_{\kappa l} \kappa^{3/2} (\kappa r)^{\nu-1} e^{-\kappa r} Y_{lm}(\mathbf{r}/r), \tag{28}$$

где $\kappa = \sqrt{-2E}$, E — энергия уровня, параметр $\nu = Z/\kappa$ — эффективное главное квантовое число (часто обозначаемое также n^*). Асимптотические коэффициенты $C_{\kappa l}$, наряду

с коэффициентами в нуле (5), встречаются в квантовой механике и ее приложениях. В [15] рассмотрено квазиклассическое приближение для этих коэффициентов. Удобно представить квазиклассические формулы для $C_{\kappa l}$, так же как и само условие квантования, в более общем виде.

Пусть

$$V(r) = -\frac{g}{2R^2}v(x), \quad x = \frac{r}{R}, \quad (29)$$

где R — характерный радиус, g — безразмерная константа связи, а функция $v(x)$ определяет форму потенциала взаимодействия. Тогда условие квантования и выражение для асимптотического коэффициента принимают вид⁴⁾

$$\sqrt{g}Q(z) = N, \quad N = n_r + \gamma_l, \quad (30)$$

$$C_{\kappa l}^{\text{WKB}} = \left[-\frac{8\pi N z Q'(z)}{Q(z)} \right]^{-1/2} \left[N \frac{z x_0}{Q(z)} \right]^{-\sigma N} \times \\ \times \exp \left\{ N \frac{J(z)}{Q(z)} - \frac{(l+1/2)^2}{N} J_1(z) Q(z) \right\}, \quad \sigma = \frac{v_\infty}{2z Q(z)}. \quad (31)$$

Здесь $z = \kappa R / \sqrt{g}$, $E_N^{\text{WKB}} = -gz^2/2R^2$, $v_\infty = \lim_{x \rightarrow \infty} xv(x) = 2ZR/g$ и введены функции

$$Q(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{x_0(z)} \sqrt{v(x) - z^2} dx, \quad v(x_0) = z^2, \quad (32)$$

$$J(z) = z x_0(z) - \int_{x_0(z)}^\infty \left[\sqrt{z^2 - v(x)} - z + \frac{v_\infty}{2zx} \right] dx, \quad (33)$$

$$J_1(z) = \frac{1}{2} \int_{x_0(z)}^\infty \frac{dx}{x^2 \sqrt{z^2 - v(x)}}, \quad (34)$$

которые определяются формой потенциала $v(x)$, см. Приложение Б.

Полученные формулы позволяют весьма просто вычислять энергетические спектры и асимптотические коэффициенты. Рассмотрим несколько примеров, когда вычисления проводятся аналитически.

1) Для кулоновского потенциала притяжения $v(x) = 1/x$, $\gamma_l = l + 1$, $N \equiv n = n_r + l + 1$ — главное квантовое число, $Z = g/2R$. Простое вычисление по приведенным выше формулам дает

$$Q(z) = \frac{1}{2z}, \quad x_0(z) = \frac{1}{z^2}, \quad \sigma = 1, \quad J(z) = \frac{1+2\ln 2}{2z}, \quad J_1(z) = z.$$

⁴⁾ Первое из этих уравнений содержится в [9].

Таблица 3

Точность ММК для асимптотического коэффициента на бесконечности

l	$n_r = 0$	1	2	3	10
0	-4.30(-2)	-2.09(-2)	-1.39(-2)	-1.04(-2)	-3.8(-3)
1	2.85(-2)	-7.5(-4)	-5.0(-3)	-5.6(-3)	-3.3(-3)
2	0.147	4.53(-2)	1.82(-2)	7.9(-3)	-1.8(-3)
3	0.306	0.118	5.88(-2)	3.33(-2)	1.5(-3)

Примечание. В таблице приведены значения $\tilde{\eta}_{n,l}$ в случае кулоновского потенциала.

Отсюда следуют точный спектр кулоновских уровней $E_n = -Z^2/2n^2$ и формула ММК для асимптотического коэффициента

$$C_{nl}^{WKB} = \frac{1}{\sqrt{8\pi n}} \left(\frac{2e}{n}\right)^n \exp\left\{-\frac{(l+1/2)^2}{2n}\right\}. \tag{35}$$

Сравнение с точными значениями [2] C_{nl} проведено в табл. 3, где представлены $\tilde{\eta}_{n,l} = C_{nl}^{WKB}/C_{nl} - 1$. Заметим, что

$$\frac{C_{nl}^{WKB}}{C_{nl}} = 1 - \frac{n}{24[n^2 - (l+1/2)^2]} + \dots, \quad n \rightarrow \infty. \tag{36}$$

Перейдем к короткодействующим потенциалам, для которых $Z = v_\infty = 0$.

2) Для потенциала Хюльгена $v(x) = (e^x - 1)^{-1}$, $\gamma_l = l+1$, $N \equiv n = n_r + l + 1 = 1, 2, \dots$ (как и для кулоновского потенциала), $x_0(z) = \ln(1 + z^{-2})$ и

$$Q(z) = \sqrt{1 + z^2} - z, \quad J(z) = 2(y^{-1} \text{Arth } y - \ln 2z), \tag{37}$$

где $y = z/\sqrt{1 + z^2}$, $0 < z < \infty$. Условие квантования (30) дает

$$z = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{g}{g_n}} - \sqrt{\frac{g_n}{g}} \right), \quad E_n^{WKB} = -\frac{(g - n^2)^2}{8R^2n^2}, \quad n < \sqrt{g} \tag{38}$$

(значения g , равные $g_n = n^2$, отвечают появлению связанного состояния). Для s -уровней квазиклассический спектр ММК совпадает с точным [9].

Аналитическое вычисление функций Q и J возможно также для потенциалов $v(x) = 1/\text{ch}^2 x$ и $\exp(-x)$. За подробностями мы отсылаем к Приложению Б.

5. Кратко обсудим применение ММК к релятивистскому случаю. Ограничимся здесь уравнением Солпитера для двух релятивистских кварков в состоянии с орбитальным моментом l в системе центра масс⁵⁾

$$\{\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_1^2} + \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_2^2} + V(r)\}\psi_n = M_n\psi_n. \tag{39}$$

⁵⁾ Влиянием спина пренебрегается (относительно вывода уравнения (39) см. работы [16, 17]). Метод ВКБ для фермионов, подчиняющихся уравнению Дирака (в том числе для состояний, лежащих вблизи границы нижнего континуума), был развит в [18, 19].

Квазиклассический спектр масс M_n определяется из условия квантования (1), в котором с учетом релятивистской кинематики

$$\tilde{p}^2(r) = \frac{1}{4M^2} [M^2 - (m_1 + m_2)^2] [M^2 - (m_1 - m_2)^2], \quad (40)$$

где $M = M_n - V(r)$ и $V(r_0) = M_n - m_1 - m_2$, r_0 — точка поворота. Для потенциала конфайнмента $V(r) = \sigma r$ интеграл квантования (1) принимает вид

$$J = \int_0^{r_0} \tilde{p}(r) dr = \frac{(m_1 + m_2)^2}{4\sigma} \int_1^{\epsilon^2} \frac{dx}{x} \sqrt{(x-1)(x-\mu^2)},$$

$$x = [(M_n - \sigma r)/(m_1 + m_2)]^2$$

и вычисляется аналитически:

$$J = \frac{(m_1 + m_2)^2}{4\sigma} \left\{ (\epsilon^2 - 1)\xi - (1 + \mu^2) \ln(1 + \xi) - \frac{1}{2}(1 + \mu^2) \ln \frac{\epsilon^2 - 1}{1 - \mu^2} + 2\mu \ln \frac{\epsilon}{\xi - \mu} \right\}, \quad (41)$$

$$\epsilon = \frac{M_n}{m_1 + m_2}, \quad \mu^2 = \left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \right)^2, \quad \xi = \sqrt{\frac{\epsilon^2 - \mu^2}{\epsilon^2 - 1}},$$

причем $\epsilon > 1 \geq \mu \geq 0$ и $\xi > 1$. Уравнение $J = \pi(n_r + l/2 + 3/4)$ для M_n нетрудно решить численно.

Если $m_1 + m_2 \ll M_n$, то из (41) получаем

$$M_n^2 - 2(m_1^2 + m_2^2) \left(\ln \frac{2M_n}{m_1 + m_2} + \frac{1}{2} \right) + 2 \left[\left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \ln \frac{2m_1}{m_1 + m_2} + \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \ln \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \right] + O \left(\frac{(m_1^2 + m_2^2)^2}{M_n^2} \right) = 4\pi\sigma \left(n_r + \frac{l}{2} + \frac{3}{4} \right), \quad (42)$$

где n_r — радиальное квантовое число. Отметим, что константа γ_l в (42) соответствует значению, принятому в ММК для конечных в нуле потенциалов (см. (2а)).

Предыдущие формулы значительно упрощаются в случае кварков с равными массами, а также в пределе $m_1/m_2 \rightarrow 0$. Так, например, при $m_1 = m_2 = m$ имеем $\tilde{p} = \sqrt{M^2 - 4m^2}/2$,

$$M_n \sqrt{M_n^2 - 4m^2} - 4m^2 \operatorname{Arch} \frac{M_n}{2m} = (4n_r + 2l + 3)\pi\sigma \quad (43)$$

(см. [20, 21]). В частности, при $m = 0$ (безмассовые кварки) квазиклассический спектр находится в явном виде:

$$M_n = M_n^{(0)} = \sqrt{(4n_r + 2l + 3)\pi\sigma}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (44)$$

Сравнение (44) с результатами численных расчетов [20, 21] показывает, что точность квазиклассического приближения является впечатляющей: даже для низшего состояния $n_r = l = 0$ ошибка δ не превышает 3% и быстро уменьшается с ростом n , а с увеличением l точность хотя и убывает, но при $l \leq 3$ и $n_r > 0$ остается удовлетворительной ($\delta \leq 5\%$). Таким образом, ММК может принести пользу также и при исследовании релятивистских волновых уравнений.

6. Сделаем несколько заключительных замечаний.

1) Квазиклассический импульс в ММК записывается так же, как и в одномерном случае, зато константа γ в условии квантования меняется. Исключение центробежного потенциала из квазиклассического импульса позволяет получить аналитические формулы для спектра энергий и волновых функций (в частности, для асимптотических коэффициентов в нуле и на бесконечности) для состояний с отличным от нуля орбитальным моментом.

2) Формулы ММК являются асимптотически точными при $n_r \gg 1, l$. Для «затягивания» их в область небольших значений радиального квантового числа, $n_r \sim 1$, необходимо учитывать поправки, зависящие от поведения потенциала на малых расстояниях.

3) Такие поправки особенно существенны при вычислении коэффициента в нуле. Для гладких потенциалов их учет обеспечивает, как правило, процентную точность расчета для безузельных p -, d - и f -состояний.

Авторы благодарны Ю. А. Симонову за обсуждение полученных результатов. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-17007).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В случае потенциала воронки (24) интеграл квантования (1) вычисляется аналитически⁶⁾, что дает для спектра энергий уравнение

$$\frac{Z}{\kappa} {}_2F_1\left(1/4, 3/4; 2; -\frac{16gZ}{\kappa^4}\right) = N \quad (\text{A.1})$$

($N = n_r + \gamma_l$, $\kappa = \sqrt{-2E}$). Рассмотрим два крайних случая.

а) Для глубоких уровней, в основном определяемых кулоновским потенциалом ($E < 0$, $N \equiv n$ — главное квантовое число), из (A.1) получаем

$$\kappa_n = \frac{Z}{n} \left(1 - \frac{3}{2}\lambda - \frac{1}{4}\lambda^2 - \frac{39}{16}\lambda^3 - \dots\right), \quad \lambda \rightarrow 0, \quad (\text{A.2})$$

где $\lambda = n^4 g / Z^3$ — эффективная константа связи (безразмерная). Ряд теории возмущений для экранированных кулоновских потенциалов общего вида,

$$V(r) = \frac{Z}{r} \sum_{k=0}^{\infty} v_k r^k,$$

⁶⁾ При этом используется формула 15.3.1 из справочника [14], а также квадратичное преобразование Куммера 15.3.19. Аналогичные преобразования оказались полезными в теории эффекта Штарка в сильном поле [22, 23].

построен в работах [24, 25], из которых вытекает, что

$$\kappa_{nl} = \frac{Z}{n} \left[1 - \frac{1}{2}(3 - \rho^2)\lambda - \frac{1}{4} \left(1 - 3\rho^2 + 2\rho^4 - \frac{5}{2n^2} \right) \lambda^2 - \frac{1}{16} \left(39 - 20\rho^2 + 11\rho^4 - 14\rho^6 + \frac{60 + 5\rho^2}{n^2} \right) \lambda^3 - \dots \right], \quad (\text{A.3})$$

$\rho = \sqrt{l(l+1)}/n$. Для безузельных ($\rho^2 = 1 - n^{-1}$) состояний это разложение согласуется с [26]. Сравнение (A.2) и (A.3) показывает, что квазиклассическое уравнение (A.1) является хорошим приближением при $n \gg 1, l$ и особенно для s -состояний.

б) Другой предельный случай: $Z \rightarrow 0, E > 0, N = n - (2l+1)/4$ требует аналитического продолжения уравнения (A.1) на положительные значения энергии $E \equiv \epsilon/2 > 0$, что достигается с помощью формулы 15.3.21 в [14]:

$$Z(\epsilon^2 + 16gZ)^{-1/4} {}_2F_1 \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}; 2; \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon}{(\epsilon^2 + 16gZ)^{1/2}} \right] \right) = N. \quad (\text{A.4})$$

Отсюда

$$\epsilon = \epsilon_0 \{ 1 + 2\zeta [\ln \zeta - (2 \ln 2 + 1)] + O(\zeta^2 \ln \zeta) \}, \quad (\text{A.5})$$

$$\epsilon_0 = (3\pi gN)^{2/3}, \quad \zeta = \frac{Z}{(2\pi N)^{4/3} g^{1/3}} = [(3\pi)^4 \lambda]^{-1/3}, \quad (\text{A.6})$$

причем ϵ_0 совпадает (при $l = 0$) с квазиклассическим спектром в линейном потенциале. Разложение (A.5) содержит неаналитическое по ζ слагаемое $\zeta \ln \zeta$. Однако учет поправки (23), которая в данном случае эквивалентна замене

$$N \rightarrow N \left\{ 1 - \frac{Z}{\pi N \epsilon_0^{1/2}} \left[\ln \left(\frac{Z}{\epsilon_0^{1/2}} \right) - 1 - \psi(l+1) \right] \right\},$$

компенсирует это слагаемое, и окончательно получаем

$$\epsilon = \epsilon_0 \{ 1 - 2\zeta [\ln(3\pi N) + 2 \ln 2 - \psi(l+1)] + O(\zeta^2) \}. \quad (\text{A.7})$$

Таким образом, поправка (23) к правилу квантования приводит не только к количественному согласию квазиклассического и точного спектров, но и обеспечивает правильную аналитическую зависимость уровней энергии от параметров, определяющих вид потенциала на малых расстояниях.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Рассмотрим общие свойства интеграла квантования $Q(z)$. Пусть в (29) $v(x) \approx ax^{-\rho} \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow 0, 0 < \rho < 2$ (мы считаем, что $v(x) > 0$ и $v'(x) < 0$ при $0 < x < \infty$). Тогда $x_0(z) \propto z^{-2/\rho}, z \rightarrow \infty$ и

$$Q(z) \approx a_1 z^{-(2-\rho)/\rho}, \quad a_1 = a^{1/\rho} \Gamma \left(\frac{2-\rho}{2\rho} \right) / 2\sqrt{\pi} \Gamma(\rho^{-1}). \quad (\text{B.1})$$

Если же потенциал ограничен в нуле, $v(0) = v_0$, то в уравнениях (30)–(34) фигурируют лишь значения z из интервала $0 < z < \sqrt{v_0}$.

Другой предельный случай: $v(x) \approx \exp(-bx^\sigma)$, $x \rightarrow \infty$. Здесь $z \rightarrow 0$ и $x_0(z) \propto (-\ln z)^{1/\sigma}$,

$$Q(z) = Q(0) - b_1 z (-\ln z)^{2(1-\sigma)/\sigma} + \dots, \quad Q(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sqrt{v(x)} dx, \quad (Б.2)$$

$$J(z) = c_1 z (-\ln z)^{1/\sigma} + \dots, \quad b_1 = (\sigma b^{1/\sigma})^{-1}, \quad c_1 = (b/2)^{-1/\sigma}. \quad (Б.3)$$

Проиллюстрируем эти формулы на примере потенциалов Хюльтена и Юкавы. В первом случае $v(x) = (e^x - 1)^{-1}$, $\rho = \sigma = a = b = 1$, $a_1 = 1/2$,

$$Q(z) = \begin{cases} 1 - z + \frac{1}{2}z^2 + \dots, & z \rightarrow 0, \\ \frac{1}{2z} - \frac{1}{8z^3} + \dots, & z \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (Б.4)$$

а для $v(x) = e^{-x}/x$

$$Q(z) = \begin{cases} \sqrt{2/\pi} - z + \dots, & z \rightarrow 0, \\ \frac{1}{2z} - \frac{1}{4z^3} + \dots, & z \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (Б.5)$$

Заметим, что аналитическое представление для $Q(z)$ в случае потенциала Юкавы довольно сложно [9].

Уравнение (30) определяет z и энергии уровней $E = -gz^2/2R^2$ в зависимости от константы связи g . В частности, в момент возникновения nl -уровня

$$g_{nl}^{\text{WKB}} = Q^{-2}(0)N^2. \quad (Б.6)$$

Наконец, заметим, что для потенциалов притяжения со степенным убыванием на бесконечности, $v(x) = ax^{-\rho}$, $x \rightarrow \infty$, $0 < \rho < 2$, легко получить закон сгущения уровней к границе континуума ($n \rightarrow \infty$):

$$E_{nl} \approx -\frac{A}{2R^2} g^{2/(2-\rho)} N^{-2\rho/(2-\rho)}, \quad A = a_1^{2\rho/(2-\rho)} \quad (Б.7)$$

(обозначения те же, что и в (Б.1)). Спектр энергий становится все более редким по мере того, как показатель ρ приближается к 2.

Литература

1. L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1955).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
3. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
4. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975).
5. *Функциональный анализ* (Справочная математическая библиотека), гл. 7, § 3, Наука, Москва (1964).

6. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer, Berlin (1971); перевод: З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, Москва (1974).
7. M. V. Berry and K. E. Mount, *Rep. Prog. Phys.* **35**, 315 (1972).
8. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, Наука, Москва (1992).
9. М. С. Маринов, В. С. Попов, ЖЭТФ **67**, 1250 (1974).
10. M. S. Marinov and V. S. Popov, *J. Phys. A* **8**, 1575 (1975).
11. E. Eichten, K. Gottfried, T. Kinoshita, K. D. Lane, and T.-M. Yan, *Phys. Rev. D* **17**, 3090 (1978).
12. А. М. Бадалян, Д. И. Киторова, Д. С. Парийский, ЯФ **46**, 226 (1978).
13. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1962).
14. *Справочник по специальным функциям*, под редакцией М. Абрамовица и И. Стиган, Наука, Москва (1979).
15. Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, В. С. Попов, ЯФ **61**, 481' (1998).
16. J. Finger, D. Horn, and J. E. Mandula, *Phys. Rev. D* **20**, 3253 (1979).
17. А. Ю. Дубин, А. В. Кайдалов, and Yu. A. Simonov, *Phys. Lett. B* **323**, 41 (1994); А. Ю. Дубин, А. Б. Кайдалов, Ю. А. Симонов, ЯФ **56**(12), 213 (1993).
18. V. S. Popov, V. L. Eletsky, V. D. Mur, and D. V. Voskresensky, *Phys. Lett. B* **80**, 68 (1978); В. С. Попов, Д. В. Воскресенский, В. Л. Елецкий, В. Д. Мур, ЖЭТФ **76**, 431 (1979).
19. В. Д. Мур, В. С. Попов, ЯФ **28**, 837 (1978).
20. P. Cea, P. Colangelo, G. Nardulli, G. Paiano, and G. Preparata, *Phys. Rev. D* **26**, 1157 (1982); P. Cea, G. Nardulli, and G. Paiano, *Phys. Rev. D* **28**, 2291 (1983).
21. J. L. Basdevant and S. Boukraa, *Z. Phys. C* **28**, 413 (1985).
22. В. М. Вайнберг, В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сепреев, ЖЭТФ **93**, 450 (1987).
23. V. S. Popov, V. D. Mur, A. V. Sergeev, and V. M. Weinberg, *Phys. Lett. A* **149**, 418 (1990).
24. J. McEnnan, L. Kissel, and R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **13**, 532 (1976).
25. M. Grant and C. S. Lai, *Phys. Rev. A* **20**, 718 (1979).
26. V. L. Eletsky, V. S. Popov, and V. M. Weinberg, *Phys. Lett. A* **84**, 235 (1981).

Примечание при корректуре (20 мая 1999 г.). Квазиклассические условия квантования для уравнения Солпитера в случае двух безмассовых кварков, а также для системы легкий кварк—тяжелый антикварк обсуждаются (V. L. Morgunov, A. V. Nefediev, and Yu. A. Simonov, submitted to *Phys. Lett. B*) в связи с исследованием вращающейся струны и спектра мезонов в квантовой хромодинамике.