1815

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р - 1815

Л.И. Пономарев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВКБ ПРИ АСИМПТОТИЧЕСКОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1964

Применение метода ВКБ при асимптотическом решении уравнений

В работе показано, что обычный способ (5) приведения уравнения (1) к квазиклассическому виду (2) приводит к ряду трудностей, которые не возникают, если использовать преобразование (9). На основе (9) найдена квазиклассическая асимптотика присоединенных полиномов Лежандра, сфероидальных функций и волновых функций задачи двух центров. Преобразование (9) представляет также методический интерес.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна. 1964.

P - 1815

Ponomarev L. I.

The Application of WKB Method to the Asymptotic Solution of Equations

It is shown that the conventional method (5) of reducing Eq. (1) to the quasiclassical form (2) leads to some difficulties which do not appear if transformation (9) is used. On the basis of (9) there were found a quasiclassical asymptotics of the associated Legendre polynomials, spheroidal functions and the wave functions of the two-centre problems. Transformation (9) is also of interest from a methodical point of view.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna. 1964.

P - 1815

Л.И. Пономарев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВКБ ПРИ АСИМПТОТИЧЕСКОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЙ

Введение

Известно, что метод ВКБ[1] позволяет находить асимптотику решений и собственные значения λ уравнения Штурма-Лиувилля

$$\frac{d}{dx}\, p(x)\frac{dy}{dx} + r(x,\lambda)y = 0 \tag{1}$$

при $\lambda \gg 1$. (В частности, такие задачи часто возникают в квантовой механике). Для этого уравнение (1) необходимо привести к виду:

$$\frac{d^2u}{dt^2} + Q(t)u = 0, \tag{2}$$

что достигается заменой:

$$t = \chi(c)\ , \qquad y = \frac{u}{\sqrt{p(x)\chi'(x)}}\ . \tag{3}$$

Так как $\chi(x)$ – произвольная функция, то переход от (1) к (2) неоднозначен[2], и асимптотическое решение зависит от вида $\chi(x)$.

В общем случае в прежних переменных и для прежней функции асимптотическое решение, соответствующее методу ВКБ, имеет вид:

$$y = \frac{C}{\sqrt[4]{r(x)p(x) - \sigma(x)}} \exp\left\{\pm i \int \frac{dx}{p(x)} \sqrt{r(x)p(x) - \sigma(x)}\right\}, \tag{4}$$

где

$$\sigma(x) = [p(x)\chi'(x)]^2 \cdot (\tfrac{1}{4}q^2 + \tfrac{1}{2}q') ,$$

$$q = -p(x)\frac{d}{dx}\cdot\frac{1}{p(x)\chi'(x)}\ , \quad q' = \frac{1}{\chi'(x)}\cdot\frac{d}{dx}\, q(x). \tag{4'}$$

В квазиклассике принято преобразование:

$$t = x\ , \quad y = \frac{u}{\sqrt{p(x)}}\ . \tag{5}$$

При этом в различных задачах возникают следующие трудности: а) необходимость "руками" производить замену $\ell(\ell+1) \to (\ell + \tfrac{1}{2})^2$ в радиальном уравнении Шредингера в центрально-симметричном поле[3]; б) с той же степенью строгости заменять

$m^2-1 \to m^2$ в уравнениях для штарк-эффекта в атоме водорода и в задаче о молекулярном ионе водорода [4]; в) расходимость фазовых интегралов для σ -термов в случаях а)-б) [5]; г) неправильная фаза волновых функций при больших аргументах ; д) неправильное поведение асимптотических решений в особых точках уравнения (1). Подчеркнем еще раз, что перечисленные трудности возникают лишь вследствие использования преобразования (5) и никоим образом не связаны с обычными приближениями, принятыми в методе ВКБ.

1. Выбор преобразования (3)

Существует пример Лангера для уравнения Шредингера в центрально-симметричном поле [7], который показывает, что удовлетворение д) автоматически ликвидирует трудность г).

Устраним произвол в выборе (3), потребовав, чтобы асимптотические решения всегда имели правильное поведение в особых точках. Найдем вид $\chi(x)$, исходя из этого условия.

Поведение решения уравнения (1) в регулярных особых точках определяется характеристическим уравнением [8]. Пусть $p(x)=x^n$ (поместим для простоты начало координат в особую точку). Тогда (условие регулярности особой точки): $r(x)=\frac{r_0}{x^{2-n}}+\frac{r_1}{x^{1-n}}+\ldots$ Регулярное решение уравнения в окрестности $x=0$:

$$y = x^{\rho}(1+c_1x+\ldots), \tag{6}$$

$$\rho = -\frac{n-1}{2} \pm \sqrt{-r_0+\left(\frac{n-1}{2}\right)^2}\ .$$

Используя (4'), можно показать, что решение (4) обладает этим свойством, если в (3) положить:

$$\chi(x)=\ln x\ , \quad y=\frac{u}{x^{\frac{n-1}{2}}}\ . \tag{7}$$

При $n=2$ получим преобразование Лангера [7]:

$$t=\ln r\ , \quad R(r)=\frac{u(r)}{\sqrt{r}}\ . \tag{8}$$

Преобразование (7) устанавливает локальное соответствие точных и приближенных решений в особых точках. При $n=1$ (простые нули в $p(x)$) аналогом (7) во всей области изменения переменных будет преобразование

$$t=\chi(x)=\int\frac{dx}{p(x)}\ ; \quad y(x)=y(x(t))=u(t)\ . \tag{9}$$

Можно убедиться, что при таком выборе $\chi(x)$ ни одна из трудностей а)–д) не возникает, так как, обеспечив правильное поведение в особой точке, мы тем самым выбираем из линейной комбинации решений уравнения (1) только одно – регулярное, без примеси другого, что и обеспечивает правильную фазу вдали от особых точек[x/].

Если же использовать (5), то для ρ получим:

$$\rho = -\frac{n}{2} + \sqrt{-r_0 + \left(\frac{n-1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}}\,, \tag{10}$$

что, очевидно, не совпадает с (6).

2. Общий вид решений

Для преобразования (9) всегда $\sigma(x) = 0$, поэтому можно сразу написать общий вид асимптотических решений трехмерного уравнения Шредингера (или Гельмгольца – при $V(\xi) = 0$, $\epsilon_1 = k^2$):

$$\Delta\psi + [\epsilon_1 - V(\xi)]\psi = 0 \tag{11}$$

во всех координатных системах, где оно разделяется. Это возможно, если произведение коэффициентов Ламе представимо в виде[/9/]:

$$h_1 h_2 h_3 = f_1(\xi_1) f_2(\xi_2) f_3(\xi_3) |\phi_{ij}(\xi_i)|, \quad i = 1,2,3 \tag{12}$$

($|\phi_{ij}(\xi_i)|$ – определитель Штеккеля), а потенциал $V(\xi)$ – в виде

$$V(\xi) = \sum_i \frac{v_i(\xi_i)}{h_i^2}\,. \tag{13}$$

В этом случае задача сводится к решению системы уравнений:

$$\frac{1}{f_i}\frac{d}{d\xi_i}\left(f_i\frac{dX_i}{d\xi_i}\right) + \left(\sum_j \phi_{ij}\epsilon_j - v_i\right)X_i = 0 \tag{14}$$

(ϵ_2 и ϵ_3 – константы разделения; $\psi = CX_1(\xi_1)X_2(\xi_2)X_3(\xi_3)$). Обозначим

$$\sum_j \phi_{ij}(\xi_i)\epsilon_j - v_i(\xi_i) = r_i(\xi_i)\,. \tag{15}$$

Используя (9), (4) и (4'), получим асимптотические решения, например, в области, где $r_i(\xi_i) > 0$:

[x/] Можно предложить следующую аналогию: строгую зависимость фазы колебаний струны от характера граничных условий.

$$X_1 = \frac{C_1}{\sqrt{f_1(\xi_1)}\ \sqrt[4]{r_1(\xi_1)}} \cdot \cos\left(\int_{\xi_1^0}^{\xi_1} d\xi \cdot \sqrt{r_1(\xi)} - \frac{\pi}{4}\right) \qquad (16)$$

(ξ_1^0 – соответствуюший корень ("точка остановки") уравнения $r_1(\xi_1) = 0$). Собственное значение ϵ_1 (для уравнения Шредингера) и константы разделения ϵ_2 и ϵ_3 находятся из квазиклассических условий квантования, которые различны в зависимости от знака ϵ_1 и вида эффективных потенциалов $r_1(\xi_1)$.

3. Некоторые частные случаи

1. Угловая функция уравнения Шредингера в центрально-симметричном поле удовлетворяет уравнению[4]

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \left(-A - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)Y = 0 . \qquad (17)$$

Константа разделения A должна определяться из условия:

$$\oint d\theta\sqrt{-A - \frac{m^2}{\sin^2\theta}} = 2\pi(n_\theta + ½) \qquad (18)$$

(интеграл по обоим берегам разреза вокруг точек ветвления корня под интегралом). Отсюда ($\ell = n_\theta + |m|$) получаем

$$A = -(\ell + ½)^2 \qquad (19)$$

и асимптотику присоединенных полиномов Лежандра, нормированных на единицу[x]

$$Y = \sqrt{\frac{2\ell+1}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sin\theta}\ \sqrt[4]{(\ell+½)^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}}} \cdot \cos\left(\int_{\theta_1}^{\theta} d\theta\sqrt{(\ell+½)^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}} - \frac{\pi}{4}\right). \qquad (20)$$

2. Уравнение Шредингера электрона в поле двух фиксированных зарядов Z_1 и Z_2 (задача 2-х центров, см., например,[10]) разделяется в вытянутых эллиптических координатах. Если соотношения между параметрами удовлетворяют условиям квазиклас-

[x] Использование (3) приводит к фазовому интегралу

$$\oint d\theta\sqrt{-A + ¼ - \frac{m^2 - ¼}{\sin^2\theta}} = 2\pi(n_\theta + ½) ,$$

который расходится при $m = 0$. Поэтому обычно константу $A = -\ell(\ell+1)$ берут из точного решения уравнения (17). Но тогда для получения правильных квазиклассических решений радиального уравнения нужно использовать не (5), а (8), которое и приводит к замене $\ell(\ell+1) \to (\ell+½)^2$. Если же с самого начала применять к обоим уравнениям преобразование (9), то, используя (19), сразу получим правильный результат, приведенный, например, в[4] .

сики [11], то для волновых функций дискретного спектра имеем:

а) при $p^2 \gg 1$, $\frac{p^2 - A}{p} \gg 1$, $p^2 \gg A$ (приближение далеких центров)

$$\psi(\xi,\eta,\phi) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \cdot \frac{\epsilon^{3/4}}{\sqrt{n}} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi)\,d\xi - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\xi^2-1}\,\sqrt{R(\xi)}} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta)\,d\eta - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{1-\eta^2}\,\sqrt{Q(\eta)}}\, e^{im\phi}; \tag{21}$$

б) при $p^2 \ll 1$, $\frac{A}{p^2} \gg 1$ (приближение близких центров)

$$\psi(\xi,\eta,\phi) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \cdot \frac{\epsilon^{3/4}(-A)^{1/4}}{\sqrt{R(Z_1+Z_2)}} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi)\,d\xi - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\xi^2-1}\,\sqrt{R(\xi)}} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta)\,d\eta - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{1-\eta^2}\,\sqrt{Q(\eta)}}\, e^{im\phi} \tag{22}$$

Здесь

$$R(\xi) = \left[\frac{-p^2\xi^2 + b'\xi + A}{\xi^2-1} - \frac{m^2}{(\xi^2-1)^2}\right]^{1/2},$$

$$Q(\eta) = \left[\frac{p^2\eta^2 + b\eta - A}{1-\eta^2} - \frac{m^2}{(1-\eta^2)^2}\right]^{1/2},$$

$$p^2 = \frac{R^2}{4}\epsilon = -\frac{R^2}{2}E, \quad b' = R(Z_2+Z_1), \quad b = R(Z_2-Z_1), \tag{23}$$

R – расстояние между зарядами, E –энергия электрона, A –константа разделения, n –главное квантовое число.

Ряды для A по степеням p^2 в этих предельных случаях даны, например, в [12].

Если электрон находится в непрерывном спектре, то $-p^2 \to s^2 = \frac{R^2}{4}k^2$, где k –импульс электрона. Для радиальной волновой функции (нормированной на δ – функцию от k) имеем:

$$x(\xi) = \sqrt{\frac{2s}{\pi}} \cdot \frac{2}{R} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi)\,d\xi - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\xi^2-1}\,\sqrt{R(\xi)}}, \tag{24}$$

для угловой функции:

$$Y(\eta) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,(-A)^{1/4} \cdot \frac{\cos\left(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta) - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{1-\eta^2}\,\sqrt{Q(\eta)}} \tag{25}$$

(связь A и k^2 см. [12]). При $R \to 0$, $\xi \to \frac{2r}{R}$, $\eta \to \cos\theta$ (24) и (25) переходят в нормированные волновые функции непрерывного спектра электрона в кулоновском поле. (Впервые фазы волновых функций (24) и (25) вычислялись в работе Пилия [6] без учета указанной замены $m^2 - 1 \to m^2$).

3. При $Z_1 = Z_2 = 0$ формулы (24) и (25) дают асимптотику сфероидальных функций, т.е. решений уравнения Гельмгольца в эллипсоидальных координатах[x/]. При этом все интегралы в (21)-(25) выражаются через эллиптические.

В заключение выражаю глубокую благодарность и признательность С.С. Герштейну за постоянное внимание и большую помощь в работе.

Литература

1. G.Wentzel. Zeits. f. Phys., 38, 518 (1926); H.A.Kramers, Zeits. f. Phys., 39, 828 (1926); M.L. Brillouin. C.R. 183, 24, (1926).

2. R.E.Langer. Trans Amer. Math Soc., 36, 637 (1934); 37, 397 (1935); Bull. Amer. Math. Soc., 40, 545 (1934).

3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
4. Г. Бете. Квантовая механика простейших систем. М., ОНТИ, 1935.
5. E.M. Engers, H.A.Kramers. Zs. f. Phys., 82, 328 (1933).
6. А.Д. Пилия. ЖЭТФ, 36, 1185 (1959).
7. R.E.Langer. Phys. Rev., 51, 669 (1937).
8. В.И. Смирнов. Курс высшей математики. т. III, ч. 2. М., Физматгиз, 1958.
9. Ф.М. Морс и Г. Фешбах. Методы теоретической физики. т. 1. М., ИИЛ, 1958.
10. С.С. Герштейн, В.Д. Кривченков. ЖЭТФ, 40, 1491 (1961).

11. С.С. Герштейн, Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина. Препринт ОИЯИ, Р-1779, Дубна, 1964.
12. J. Meixner, F.W. Schafke. Mathiesche Fenktionen und Spharoidfunktionen. Springerverlag, Berlin, 1954.
13. J.A.Statton, P.M.Mors. L.J.Chu., J.D.C.Little, F.J.Corbato. Spheroidal wave funktions. London, 1956.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 августа 1964 г.

[x/] Асимптотика функций, соответствующих нормировке, принятой в таблицах Стрэттона и др. /13/, получается из (24) при $b' = b = 0$ делением на $\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k$.