объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-94-115

И.М.Матора

ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЯХ С ОДНОРОДНОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ЕЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ОТ КООРДИНАТ

Направлено в журнал «Оптика и спектроскопия»

1994

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени наиболее точно исследованы квантово-механические состояния частицы в полях с оператором ее потенциальной энергии $U(\vec{r}) = -\dfrac{Ze^2}{r}$ (кулоновское взаимодействие электрона с тяжелым положительным зарядом Ze) и $U(\vec{r}) = \dfrac{m}{2}\omega^2 x^2$ (гармонический осциллятор). Оба вида взаимодействия имеют т.н. однородную, степени ρ зависимость $U(\vec{r})$ от координат ($\rho = -1$ в кулоновском поле и $\rho = +2$ в гармоническом осцилляторе), при которой всегда $U(\lambda\,\vec{r}) = \lambda^{\rho} U(\vec{r})$ ($\lambda = \text{const.}$).

В действительности реализуются не только вышеупомянутые степени однородности $\rho = -1$ и $+2$, но также и другие значения ρ. В частности, $\rho = -3$ характеризует взаимодействие магнитных моментов двух элементарных частиц, а $\rho = -2$ хотя и не имеет физического смысла, но проблема существования суперсвязанного состояния частицы в гипотетическом поле с $U(\vec{r}) = \dfrac{\gamma}{r^2}$ ($\gamma > 0$) (падения ее на центр) давно привлекает внимание физиков (см., например, §§ 18 и 35 в [1]).

В связи с этим представляется актуальным исследовать возможность (или ее отсутствие) существования связанных квантово-механических состояний микрочастицы, взаимодействующей с массивным (неподвижным) центром через однородный оператор ее потенциальной энергии в поле центра $U(\vec{r}) = \gamma\, r^{\rho}$ ($\gamma = \text{const}$) при всевозможных значениях степени $\rho \in (-\infty, +\infty)$.

2. ТЕОРИЯ

Очевидный способ точного расчета спектров собственных значений оператора полной энергии частицы, двигающейся в поле неподвижного центра, при каждой конкретной степени $\rho \in (-\infty, +\infty)$ с помощью решения соответствующих уравнений Шредингера в данном случае реализовать нельзя.

Однако решение проблемы возможно, если воспользоваться данным в 1930 г. В.А.Фоком квантово-механическим обобщением известной теоремы вириала [2,3] для совершающей финитное движение вокруг центра частицы с оператором ее потенциальной энергии $U(\overline{r})$

$$2\overline{T} = \overline{V}. \tag{1}$$

Среднее значение $\overline{T}$ оператора кинетической энергии частицы в (1) точно выражено через среднее значение $\overline{V}$ ее вириала $V(\overline{r}) = x\frac{\partial U}{\partial x} + y\frac{\partial U}{\partial y} + z\frac{\partial U}{\partial z}$, причем в случае однородной степени ρ зависимости $U(\overline{r})$ из (1) следует:

$$2\overline{T} = \rho\overline{U}. \tag{2}$$

Из теоремы (2) и определения среднего значения оператора полной энергии частицы $\overline{E} = \overline{T} + \overline{U}$ при финитном ее движении (т.е., дискретном спектре ее полной энергии $\overline{E}_n$) находим связь $\overline{T}_n$ и $\overline{U}_n$ с $\overline{E}_n$ (n — квантовое число уровня) в виде

$$\overline{E}_n = \left(1 + \frac{2}{\rho}\right)\overline{T}_n = \left(1 + \frac{\rho}{2}\right)\overline{U}_n. \tag{3}$$

Последнее точное соотношение между средними значениями полной, кинетической и потенциальной энергии (в предположении финитности движения частицы) хотя и не содержит прямой зависимости каждого из $\overline{E}_n$, $\overline{T}_n$ и $\overline{U}_n$ от ρ, но, тем не менее, позволяет не только классифицировать интервалы ρ по возможности существования в них связанных состояний, но и выяснить ряд новых интересных особенностей этих состояний.

Рассмотрим, прежде всего, связь значений $\overline{E}_n$ с $\overline{T}_n$, найдя из выражения (3) частную производную

$$\frac{\partial\overline{T}_n}{\partial\overline{E}_n} = \frac{\rho}{2 + \rho}, \tag{4}$$

зависимость которой от ρ представлена рисунком 1.

Обращает на себя внимание то, что значения производной положительные, обусловливающие возрастание наблюдаемой кинетической энергии частицы после ее возбуждения из любого связанного состояния в более высокое (по полной энергии) связанное состояние, существует лишь в двух областях ρ: $-\infty < \rho < -2$ и $0 < \rho < +\infty$, а в области $-2 < \rho < 0$, в которой находится и одно из наиболее распространенных — кулоновское поле притяже-

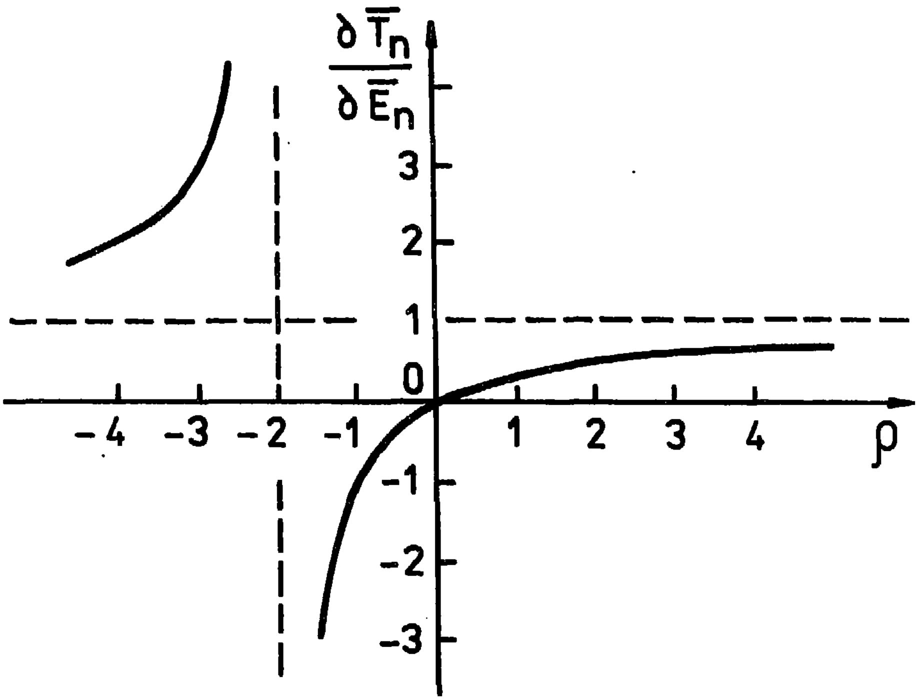

Рис. 1

ния $U(\overline{r}) = -\frac{\gamma}{r}$ $(\gamma > 0)$ со степенью однородности $\rho = -1$, переход частицы на более высокий уровень $\overline{E}_n$ всегда сопровождается убыванием $\overline{T}_n$.

Теперь проанализируем отношения $\frac{\overline{T}_n}{\overline{U}_n}$ и $\frac{\overline{E}_n}{\overline{U}_n}$.

$$\frac{\overline{T}_n}{\overline{U}_n} = \frac{\rho}{2}, \tag{5}$$

$$\frac{\overline{E}_n}{\overline{U}_n} = \frac{\rho}{2} + 1. \tag{6}$$

Ход обоих отношений по ρ изображен на рис.2.

Из отношения (5) следует:

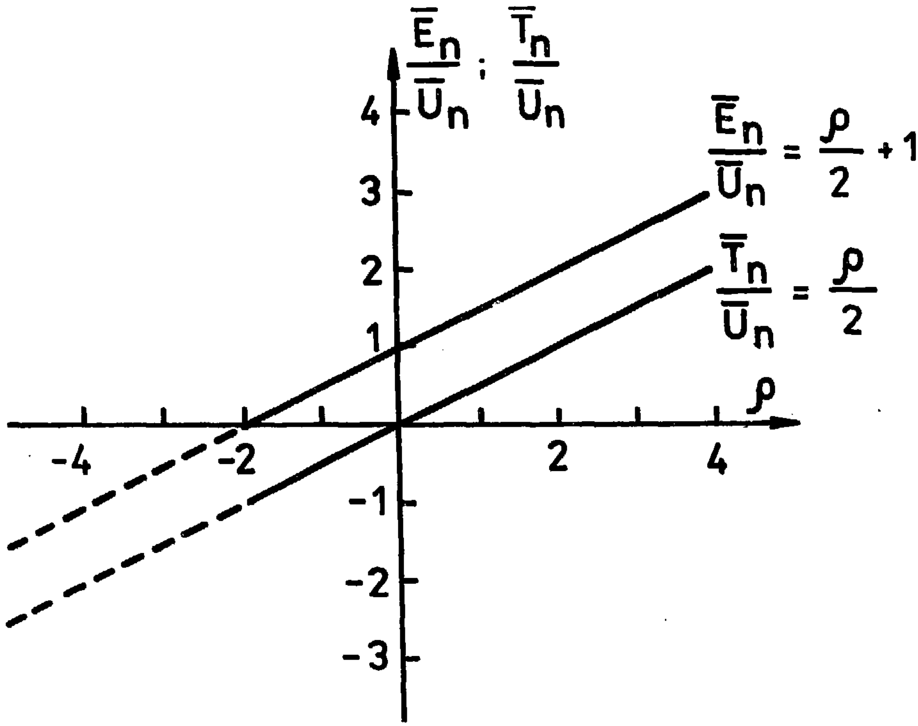

Рис.2

из-за того, что всегда $\bar{T}_n > 0$, при финитности движения частицы для всех $\rho < 0$ $\bar{U}_n$ всегда должно быть отрицательным, а для всех $\rho > 0$ пригодны только положительные средние значения потенциального энергии $\bar{U}_n$.

Но тогда из соотношения (6) и $\bar{U}_n < 0$ при $\rho < 0$ и $\bar{U}_n > 0$ для $\rho > 0$ (см. рис.2) отрицательные средние значения $\bar{E}_n$ допустимы только в узком интервале $\rho \in (-2{,}0)$, а при всех ρ вне этого интервала, т.е. при $\rho < -2$ и $\rho \in (0, +\infty)$ $\bar{E}_n$ связанных состояний могут быть только положительными.

Оба вида совместимых с возможностью существования связанных состояний операторов потенциальной энергии $U(\bar{r}) = \gamma\, r^{\rho}$, первый из которых имеет константы $\gamma < 0$ и $\rho < 0$, а второй — $\gamma > 0$ и $\rho > 0$, представлены на рис.3. Масштаб осей на нем таков, что выражаемая в эВ потенциальная энергия на задаваемых в а.е. расстояниях близка к $U(r)$ электрона в атоме водорода и $U(x)$ (под x подразумевается абсолютная величина отклонения частицы от положения равновесия) одного из атомов в молекуле водорода H_2. Полезно отметить, что в зависимостях обоих видов знак оператора

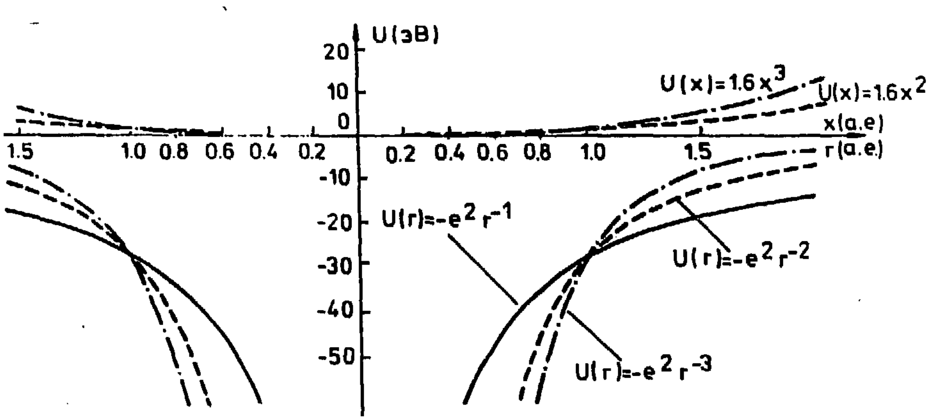

Рис.3

$\gamma\, r^{\rho}$остается неизменным во всем пространстве, и, разумеется, он всегда совпадает со знаком ρ.

В соответствии с соотношением (5) (см. также рис.2) для всех $|\rho| > 2$ модули $|\overline{T}_n|$ частиц в состояниях с финитным движением должны превосходить $|\overline{U}_n|$.

Рассмотрим более подробно сваязанные состояния частицы в гипотетическом поле $U(r) = -\dfrac{\gamma}{r^2}$ $(\rho = -2)$.

3. ПАРАДОКСАЛЬНЫЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ С $U(r) = -\dfrac{\gamma}{r^2}$

Вещественное общее решение нерелятивистского радиального уравнения Шредингера для волновой функции частицы в поле с $U(r) = -\dfrac{\gamma}{r^2}$ $(\gamma > 0)$

$$r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + [2\overline{E}r^2 + 2\gamma - l(l+1)]R(r) = 0 \text{ (записано в а.с.)} \qquad (7)$$

легко находится [4] для всех возможных сочстаний входящих в него параметров $\overline{E} \leq 0$ — среднего значения полной энергии; γ — постоянной взаимодействия частицы с центром и момента импульса $\sqrt{l(l+1)}$ $(l = 0,1,2,...)$. Вид решения следующий:

$$R(r) = \frac{CI_\nu(\beta r) + DK_\nu(\beta r)}{\sqrt{r}} \quad \text{для} \quad \overline{E} < 0;$$

$$\nu = \sqrt{\frac{1}{4} - 2\gamma + l(l+1)}; \; \beta = \sqrt{-2\overline{E}}; \tag{8}$$

$$R(r) = \frac{C\cos(\alpha \ln r) + D\sin(\alpha \ln r)}{\sqrt{r}} \quad \text{для} \quad \overline{E} = 0;$$

$$\alpha = \sqrt{2\gamma - \frac{1}{4} - l(l+1)}; \; 2\gamma > \frac{1}{4} + l(l+1); \tag{9}$$

$$R(r) = \frac{C\ln r + D}{\sqrt{r}} \quad \text{для} \quad \overline{E} = 0; \; 2\gamma = \frac{1}{4} + l(l+1); \tag{10}$$

$$R(r) = \frac{Cr^{\delta} + Dr^{-\delta}}{\sqrt{r}} \quad \text{для} \quad \overline{E} = 0;$$

$$\delta = \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - 2\gamma}; \; 2\gamma < \frac{1}{4} + l(l+1); \tag{11}$$

($I_\nu(z)$ и $K_\nu(z)$ — цилиндрические функции мнимого аргумента, первая из которых при $z \to \infty$ неограниченно возрастает, а вторая — экспоненциально убывает).

Для превращения найденных общих решений уравнения (7) в волновые функции стационарных состояний необходимо найти для каждого из них такие значения постоянных C и D и параметров $\overline{E}$, γ и l, при которых будут выполнены стандартные требования к волновым функциям таких состояний [1,3, 5—7]: нормируемости на 1, однозначности и непрерывности вместе с производной во всем пространстве, а также конечности (точнее — выполнения соотношения $\lim\limits_{r \to 0} r \cdot R(r) = 0$ [5]).

Начнем со среднего значения полной энергии $\overline{E} \equiv 0$, которое, на первый взгляд, наиболее точно соответствует теореме вириала для рассматриваемого поля со степенью однородности $\rho = -2$ (см. соотношение (5)). Легко видеть, что решениям (9) и (10) придать вид волновых функций стационарных состояний невозможно по причине расходимости нормировочного интеграла на ∞ при любых C и D. Решение (11) также неприемлемо — в нем для обеспечения сходимости на ∞ нормировочного интеграла $\int\limits_0^\infty R^2(r)\, r^2 dr$ нужно приравнять $C = 0$, но и после этого для его сходимости в нуле нужно ограничить величину $\delta < \frac{1}{2}$, а это даже при $C = 0$ делает его расходящимся на ∞. Тем самым доказана невозможность финитности движения частицы в этом поле при $\bar{E} \equiv 0$.

Исследуем теперь оставшееся общее решение (8) для $\bar{E} < 0$. Оно при $C = 0$ и, в частности — $\nu = 0$, хотя и возрастает неограниченно при $r \to 0$, но $\lim\limits_{r \to 0} r \cdot R_0(r) = 0$, а сама $R_0(r)$ нормируема на 1 и, кроме того, непрерывна вместе с производной и однозначна в интервале $0 < r < \infty$. Может ли $R_0(r)$ оказаться волновой функцией стационарного состояния, проверим, прежде всего, на поле с постоянной взаимодействия $\gamma = \frac{1}{8} + \frac{l(l+1)}{2}$, при которой и само уравнение (7), и его решения неизменны для всех l. В частном случае с $l = 0$ это поле в [1] названо критическим.

Здесь $\nu = 0$, и предполагаемая волновая функция $R_0(r)$ в соответствии с (8) имеет вид

$$R_0(r) = \frac{D}{\sqrt{r}} K_0(\beta r), \quad \text{где [8]} \tag{12}$$

$$K_0(z) = -\ln\frac{z}{2} I_0(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Psi(k+1)\cdot z^{2k}}{2^{2k}\cdot(k!)^2}; \quad I_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{2^{2k}(k!)^2};$$

$$\Psi(k+1) = -0{,}5772... + \sum_{m=1}^{k} \frac{1}{m}. \tag{13}$$

Нормировочный интеграл от (12) равен (см. [8]):

$D^2 \int\limits_0^\infty K_0^2(\beta r) r dr = \frac{D^2}{2\beta^2} = I$, т.е., $D = \beta\sqrt{2}$, и нормированная на I

$$R_0(r) = \beta\sqrt{2}\,\frac{K_0(\beta r)}{r^{1/2}}. \tag{14}$$

Вычисление среднего значения расстояния $\bar{r}$ частицы от центра дает:

$$\bar{r} = 2\beta^2 \int\limits_0^\infty r^2 dr K_0^2(\beta r) = \frac{2}{\beta}\int\limits_0^\infty K_0^2(z)\, z^2 dz = \frac{A}{\beta} \tag{15}$$

($A = 2\int\limits_0^\infty K_0^2(z)\, z^2 dz \doteq 0{,}62$ — результат численного интегрирования).

Тот факт, что $\bar{r} = \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\sqrt{-2\bar{E}}}$, является аргументом в пользу основанного на приближенном исследовании проблемы в [1] утверждения о возможности падения частицы на центр в рассматриваемом поле при $\bar{E} \to -\infty$.

Вычислим, далее, средние значения $\bar{T}$, $\bar{U}$ и $\bar{E}$ и сопоставим их с вытекающими из теоремы вириала соотношениями между ними. При вычислениях полезно воспользоваться вытекающим из рекуррентных соотношений между K_ν выражением $K_0'' = K_0 - \frac{K_0'}{z}$, разложением (13) $K_0(z)$ в ряд, а также экспоненциальным убыванием $K_0(z)$ на ∞. В результате

$$\bar{T} = \int_0^\infty R_0(\beta r)\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2R_0}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{dR_0}{dr} + \frac{l(l+1)}{2r^2}R_0\right)r^2dr =$$

$$= 2\gamma\beta^2 \int_0^\infty K_0^2(z)\frac{dz}{z} - \frac{\beta^2}{2} = 2\gamma\beta^2\left(\frac{L^3}{3} + aL^2 + a^2L\right) - \frac{\beta^2}{2};$$

$$(a = \ln 2 - 0{,}5772...;\quad L = \lim_{z\to 0} |\ln z|); \tag{16}$$

$$\bar{U} = -\gamma\int_0^\infty R_0^2(\beta r)dr = -2\gamma\beta^2\left(\frac{L^2}{3} + aL^2 + a^2L\right); \tag{17}$$

$$\bar{E} = \bar{T} + \bar{U} = -\frac{\beta^2}{2} \text{ для любого значения } l. \tag{18}$$

Как видим, волновая функция $R_0(\beta r)$ состояний частицы в поле со степенью однородности $\rho = -2$ и постоянной взаимодействия $\gamma = \frac{1}{8} + \frac{l(l+1)}{2}$ в нерелятивистском приближении найдена. Средние значения всех необходимых характеристик состояния с фиксированным $\bar{E}$ легко с ее помощью вычисляются, причем полученные величины $\bar{T}$, $\bar{U}$ и $\bar{E}$ находятся в соответствии с теоремой вириала, справедливой только для состояний с финитным движением частицы. Так, соотношения (5) и (6) между средними значениями (16), (17) и (18) выполняются с точностью до бесконечно малых 3-го порядка:

Для (5) $\dfrac{\overline{T}}{\overline{U}} = -1 + 0\left(\dfrac{1}{L^3}\right) \doteq -1$; а для (6) $\dfrac{\overline{E}}{\overline{U}} = 0\left(\dfrac{1}{L^3}\right) \doteq 0$, как и должно быть при $\rho = -2$.

Но вместе с тем необходимо отметить следующие парадоксальные свойства описываемых ею состояний:

а) Спектр средних значений полной энергии частицы $\overline{E} < 0$ в поле с $U(r) = -\dfrac{1}{8r^2} - \dfrac{l(l+1)}{2r^2}$ является сплошным, равномерно заполняющим всю область $-\infty < \overline{E} < 0$, а не дискретным, несмотря на ярко выраженную финитность ее движения.

б) Собственные функции каждого значения $\overline{E}$ имеют универсальную для всей области $-\infty < \overline{E} < 0$ зависимость $R_0(r) = \beta\sqrt{2}\,\dfrac{K_0(\beta r)}{\sqrt{r}}$ от r, причем любые две из них $R_0(\beta_1 r)$ и $R_0(\beta_2 r)$ с $\overline{E}_1 = \dfrac{\beta_1^2}{2} \neq \overline{E}_2 = -\dfrac{\beta_2^2}{2}$ не ортогональны друг другу.

Уместно заметить, что последнее свойство $R_0(\beta r)$ для $\overline{E} < 0$ не является признаком неполноты набора волновых функций всей области $-\infty < \overline{E} < +\infty$, ибо волновые функции для положительных $\overline{E}$, которые, как легко проверить для $\gamma = \dfrac{1}{8} + \dfrac{l(l+1)}{2}$ имеют вид

$$R_{0+} = \frac{1}{\sqrt{r}}\,(M\cos\kappa r + N\sin\kappa r),\quad (M \text{ и } N \text{ — константы}, \kappa = \sqrt{2\overline{E}})$$

в совокупности со всеми R_0 являются, очевидно, набором полным.

в) Состояние с $\overline{E} \equiv 0$, которое наиболее точно соответствовало бы теореме вириала в рассмотренном поле, не реализуется.

Итак, в нерелятивистском приближении исследованы связанные состояния частицы в поле со степенью однородности $\rho = -2$ лишь при значениях $\gamma = \dfrac{1}{8} + \dfrac{l(l+1)}{2}$ с универсальной волновой функцией $R_0(\beta r) = \beta\sqrt{2}\,\dfrac{K_0(\beta r)}{\sqrt{r}}$. Однако то, что расходимость в 0 входящей в R_0 цилиндрической функции мнимого аргумента $K_0(z)$ является логарифмической, т.е., минимальной для многообразия $K_\nu(z)$ со всевозможными ν и, вместе с тем, даже при $\nu = 0$ средние значения $\overline{T}$ и $\overline{U}$ логарифмически расходились, дает основание предполагать, что состояния в этом поле с $R_\nu(\beta r) = D\,\dfrac{K_\nu(\beta r)}{\sqrt{r}}$ $(\nu \neq 0)$ окажутся не финитными. Поэтому исследование решений уравнения Шредингера (7) типа (8) с $\nu \neq 0$ не представляется необходимым.

Найти волновые функции частицы для имеющего физический смысл поля $U(r) = -\frac{\gamma}{r^3}$ пока, к сожалению, не удалось, и вопрос о существовании в нем связанных состояний с положительными (в соответствии с теоремой вириала) $\bar{E}$, тогда как верхний предел величины оператора потенциальной энергии ее $U(r)_{max.} = 0$, остается открытым. Правда, решение его с помощью нерелятивистского уравнения Шредингера, по-видимому, не будет убедительным, т.к. даже для $\rho = -2$ полученные средние значения $\bar{T}$ являются ультрарелятивистскими, а для $\rho = -3$ логично ожидать их возрастания.

В заключение искренне благодарю Б.Н.Захарьева, В.И.Лущикова, С.А.Ракитянского и В.М.Чабанова за плодотворные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Наука, 1989.
2. Фок В.А. — ЖРФХО, 1930, т.42, 379.
3. Фок В.А. — Начала квантовой механики. М., Наука, 1976.
4. Камке Э. — Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М., Наука, 1965.
5. Дирак П.А.М. — Принципы квантовой механики. М., Наука, 1979.
6. Блохинцев Д.И. — Основы квантовой механики. М.—Л., ГИТТЛ, 1949.
7. Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М. — Квантовая механика. М., Просвещение, 1965.
8. Рыжик И.М., Градштейн И.С. — Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.—Л., ГИТТЛ, 1951.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 апреля 1994 года.