

ПАДЕНИЕ ЧАСТИЦ НА ЦЕНТР. ГИПОТЕЗА ЛАНДАУ-ЛИФШИЦА И ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

В. П. Незнамов*, И. И. Сафронов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Впервые решением уравнения Шредингера с потенциалом, обратно пропорциональным квадрату расстояния до центра, с помощью преобразования Прюфера определены дискретные энергетические спектры в зависимости от минимального радиуса в численных расчетах. Показано, что энергия частицы в состоянии n обратно пропорциональна квадрату минимального радиуса. При стремлении минимального радиуса к нулю дискретные спектры не ограничены снизу. При уменьшении минимального радиуса значимые вероятности обнаружения частиц смещаются к центру.

Ключевые слова: квантовая механика, уравнение Шредингера, преобразование Прюфера, энергетические спектры, плотности вероятности.

1. Введение

Известно, что в квантовой механике с достаточно сильными сингулярными потенциалами притяжения возникают проблемы, связанные с так называемым «падением на центр» (см., например, [1–3]). Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц [2] лаконично установили, что в этом случае дискретный спектр не ограничен снизу, а квантово-механическая частица локализуется в окрестности центра $r = 0$. При этом задание гамильтониана H еще не определяет однозначно физические величины: уровни энергии, S – матрицу и т. д. С точки зрения математики это означает, что гамильтониан H , заданный формально как эрмитов оператор, обладает ненулевыми индексами дефекта. Для однозначности необходим выбор граничного условия вблизи области, где потенциал сингулярен. Этот выбор определяет самосопряженное расширение гамильтониана H [4, 5]. При математической ясности в задачах квантовой механики с сингулярными потенциалами притяжения представляет методический интерес процесс эволюции не ограниченных снизу дис-

кретных энергетических спектров квантово-механических частиц при $r \rightarrow 0$. Важно также показать в расчетах через вероятности обнаружения квантово-механических частиц справедливость выражения «падение частиц на центр». В данной работе мы осуществляем это с помощью преобразования Прюфера [6, 7], применяемого к нерелятивистскому уравнению Шредингера для радиальной волновой функции. Для примера уравнение Шредингера рассматривается с потенциалом притяжения $U(r) = -\beta/r^2$.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 к радиальному уравнению Шредингера применяется преобразование Прюфера и обсуждаются свойства преобразованного уравнения и волновой функции. В разделах 3, 4 излагаются результаты расчетов, демонстрирующие эволюции не ограниченных снизу энергетических спектров в условиях существования проблемы «падения на центр» и локализацию частиц в окрестности центра. В разделе 5 проводится заключительное обсуждение.

* E-mail: neznamov@vniief.ru

2. Преобразование Прюфера

Мы применяем преобразование Прюфера [6, 7] к уравнению Шредингера для радиальной волновой функции с потенциалом притяжения $U(r) = -\beta/r^2$. Ниже будем использовать безразмерные переменные $\rho = r/l_c$; $\varepsilon = E/mc^2$, где $l_c = \hbar/mc$ – комптоновская длина волны частицы, E – энергия частицы.

2.1. Уравнение Шредингера

Уравнение для функции $\chi(\rho) = \rho R(\rho)$, где $R(\rho)$ – радиальная волновая функция, можно записать в виде

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left(2\varepsilon + \frac{\gamma}{\rho^2}\right)\chi = 0. \quad (1)$$

В (1) $\gamma = \frac{2m}{\hbar^2}\beta - l(l+1)$, l – квантовое число орбитального момента частицы.

Пусть

$$\begin{aligned} \chi(\rho) &= A(\rho) \sin \Phi(\rho), \\ \frac{d\chi}{d\rho} &= A(\rho) \cos \Phi(\rho). \end{aligned} \quad (2)$$

Тогда

$$\chi(\rho) \Big/ \frac{d\chi}{d\rho} = \text{tg} \Phi(\rho), \quad (3)$$

и уравнение (1) можно записать в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка [7]

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = \cos^2 \Phi + \left(2\varepsilon + \frac{\gamma}{\rho^2}\right) \sin^2 \Phi, \quad (4)$$

$$\frac{d \ln A}{d\rho} = \left(1 - 2\varepsilon - \frac{\gamma}{\rho^2}\right) \sin \Phi \cos \Phi. \quad (5)$$

Отметим, что уравнение (5) должно решаться после определения собственных значений ε_n и собственных функций $\Phi_n(\rho)$ из уравнения (4). Для связанных состояний частицы $\varepsilon < 0$ и при $\rho \rightarrow \infty$ $\chi \rightarrow Ce^{-\sqrt{-2\varepsilon}\rho}$.

В этом случае из (3) следует

$$\text{tg} \Phi \Big|_{\rho \rightarrow \infty} = -\frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}}. \quad (6)$$

Для определения собственных состояний уравнений (4), (5) необходимо кроме условия (6) знание поведения $\Phi(\rho)$ при $\rho \rightarrow 0$.

В уравнении (4) введем новую переменную

$$t = \sigma \ln \rho. \quad (7)$$

Здесь $\sigma = \sqrt{\gamma - 1/4}$.

Если $\rho \rightarrow 0$, то $t \rightarrow -\infty$ и уравнение (4) сводится к

$$\frac{d\Phi}{\sin^2 \Phi} = \gamma e^{-\frac{t}{\sigma}} dt. \quad (8)$$

После интегрирования

$$\text{tg} \Phi = \frac{1}{\gamma} e^{\frac{t}{\sigma}}. \quad (9)$$

Видно, что при $\rho \rightarrow 0$ ($t \rightarrow -\infty$)

$$\Phi \rightarrow k\pi; \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10)$$

Из-за особенности в уравнениях при $\rho \rightarrow 0$ степень приближения $\Phi(\rho)$ к $k\pi$ в численных расчетах будет определяться величиной выбранного значения ρ_{\min} . В задачах с хорошо определенными граничными условиями, начиная с некоторого малого значения ρ_{\min} , энергетический спектр практически не зависит от дальнейшего уменьшения ρ_{\min} . В этом случае ρ_{\min} определяется требованиями необходимой точности определения дискретных спектров и собственных функций рассматриваемых систем. В задачах, где присутствует проблема «падения на центр», энергетический спектр всегда зависит от величины ρ_{\min} и для его однозначного определения должны привлекаться дополнительные физические соображения.

2.2. Общие свойства фазовых функций

В данной работе применен следующий численный способ решения уравнений (4) и (5). Для набора значений ε численно решается задача Коши с начальным контролируемым условием (6) при $\rho \rightarrow \infty$.

Для решения задачи Коши используется неявный метод Рунге–Кутты пятого порядка с контролем размера шага (схема Ила трехстадийного метода Радо II A [8]).

Ниже для анализа кроме функций $\Phi(\rho)$, $A(\rho)$ для заданного интервала ε мы будем использовать также функцию $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min}) = \Phi(\varepsilon) \Big|_{\rho=\rho_{\min}}$. Отметим три важных свойства этой функции [9]:

1. Функция $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ уменьшается при возрастании ε .

2. В случае существования связанных состояний с $\varepsilon < 1$ поведение функции $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ носит скачкообразный характер. В задачах с хорошо определенными граничными условиями при достижении собственного значения ε_n функция $\Phi(\varepsilon_n, \rho_{\min})$ изменяется скачком на π .

$$\Phi(\varepsilon_n, \rho_{\min}) - \Phi(\varepsilon_0, \rho_{\min}) = n\pi, \quad (11)$$

3. В случае отсутствия связанных состояний изменение функции $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ во всем интервале $\varepsilon < 1$ меньше величины π .

На рис. 1 для иллюстрации приведены зависимости фазовых функций $\Phi(\lambda, \theta_{\min})$, полученные нами при решении угловых уравнений Чандрасекара–Пейджа [10]. Здесь λ – константа разделения, θ – полярный угол. Видно, что всюду $\Phi(\lambda, \theta_{\min})$ равна $k\pi$, где $k = 0, -1, -2, \dots$. В нашем случае в соответствии с (10) функция $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ по мере уменьшения ρ_{\min} всюду должна приближаться к $k\pi$.

Известно, что асимптотика решения (1) при $\rho \rightarrow 0$ имеет вид [3]

$$\chi(\rho)\Big|_{\rho \rightarrow 0} = \begin{cases} C_1 \rho^{1/2 \pm \sqrt{1/4 - \gamma}}, & \gamma \leq 1/4, \\ C_2 \rho^{1/2} \sin(\sqrt{\gamma - 1/4} \ln \rho + \varphi), & \gamma > 1/4. \end{cases} \quad (12)$$

В (12) C_1, C_2 – постоянные интегрирования, φ – произвольная вещественная фаза ($0 \leq \varphi < 2\pi$). В этом случае собственные значения гамильтониана уравнения (1) вещественны, а собственные функции образуют ортогональную и полную систему [1, 11]. Появление фазы φ в (12) свидетельствует о присутствии в этом случае проблемы «падения на центр». Для однозначности дискретного спектра необходимо дополнительное граничное условие.

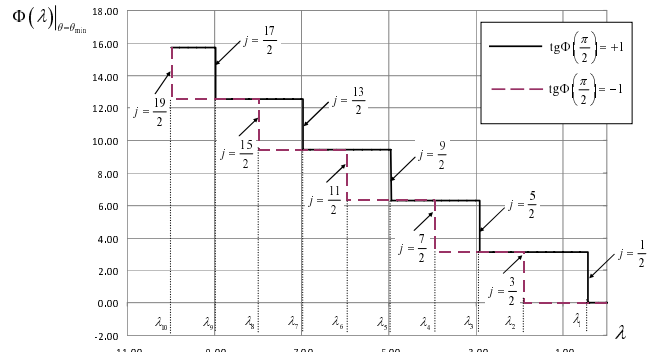


Рис. 1. Зависимости фазовой функции от параметра разделения λ . Собственные значения λ для различных j при $a\omega = 1, \mu = 0, P = -1, m = \pm 1/2$

3. Определение дискретных спектров в численных расчетах решения уравнения для фазовой функции $\Phi(\rho)$

В проведенных численных расчетах решения уравнения (4) с граничными условиями (6), (10) получены следующие основные результаты.

3.1. Уровни энергии $\varepsilon_n (n = 0, 1, 2, \dots)$ * для фиксированных значений γ обратно пропорциональны ρ_{\min}^2

$$\varepsilon_n = -\frac{K_n(\gamma)}{\rho_{\min}^2}. \quad (13)$$

Здесь K – постоянная величина для рассматриваемых значений γ и n . Видно, что при $\rho_{\min} \rightarrow 0$ дискретный спектр (13) не ограничен снизу.

В расчетах для фиксированных значений γ и ρ_{\min} подтверждена определенная ранее (см., например, [3, 4]) зависимость

$$|\varepsilon_n| \sim e^{-\frac{2\pi n}{\sigma}}. \quad (14)$$

Исключением является основное состояние с $n = 0$, для которого соотношение с другими состояниями с $n \neq 0$ несколько отличается от зависимости (14).

3.2. Для обеспечения резкого (не размытого) скачка функции $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ при $\varepsilon = \varepsilon_n$ и выполнении для остальных значений ε условия (10) достаточно использовать в расчетах $\rho_{\min} \leq 10^{-3}$. Ис-

* Выбранная для удобства нумерация $\varepsilon_n (n = 0, 1, 2, \dots)$ отличается от нумерации ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) в работах [1–5].

пользование для определения ε_n значения $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ в середине скачка

$$\Phi(\varepsilon_n, \rho_{\min}) = \frac{\pi}{2} - \pi l \quad (15)$$

обеспечивает достаточную точность в расчетах и при больших значениях $10^{-3} < \rho_{\min} < 1$.

3.3. Скачок фазовой функции $\Phi(\varepsilon, \rho_{\min})$ для состояний ε_n соответствуют переходу от значений $\Phi(\varepsilon^- \rightarrow \varepsilon_n, \rho_{\min}) = -\pi l$ к значениям $\Phi(\varepsilon^+ \rightarrow \varepsilon_n, \rho_{\min}) = -\pi(n+1)$. Здесь $\varepsilon^-, \varepsilon^+$ – значения ε слева и справа от ε_n . Например, для основного состояния ε_0 скачок происходит от значения $\Phi(\varepsilon^- \rightarrow \varepsilon_0, \rho_{\min}) = 0$ к значению $\Phi(\varepsilon^+ \rightarrow \varepsilon_0, \rho_{\min}) = -\pi$.

Из проведенного рассмотрения следует, что если для конкретного значения γ и какого-либо значения $\rho_{\min} \leq 10^{-3}$ определить уровни энергии ε_0 и ε_1 , то соотношения (13), (14) вместе с пунктами 3.2, 3.3 позволяют определить значения ε_n для любых значений n и $\rho_{\min} < 1$.

Ниже для иллюстрации приведены некоторые результаты численных расчетов.

Результаты приведены с точностью до трех значащих цифр. При этом из-за округления могут возникать некоторые отклонения от зависимостей (13), (14).

3.4. $\gamma = 2$. В этом случае $\sigma = \sqrt{2-1/4} = 1,3229$; величину ρ_{\min} представляем в виде

$$\rho_{\min} = \exp\left(-\frac{2\pi + \varphi}{\sigma}\right). \quad (16)$$

В (16) $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ – фаза решения (12); $\exp\left(+\frac{2\pi}{\sigma}\right) = 115,538$.

В табл. 1 приведены значения ε_n ($n = 0, 1, 2, 3$) для $\varphi = 0$ и 2π ($\rho_{\min} = 8,655 \cdot 10^{-3}$ и $7,491 \cdot 10^{-5}$).

Т а б л и ц а 1

Расчетные значения ε_n

n	$\varphi = 0$ ($\rho_{\min} = 8,655 \cdot 10^{-3}$)	$\varphi = 2\pi$ ($\rho_{\min} = 7,491 \cdot 10^{-5}$)
0	$-4,02 \cdot 10^3$	$-5,37 \cdot 10^7$
1	$-26,2$	$-3,5 \cdot 10^5$
2	$-0,226$	$-3,02 \cdot 10^3$
3	$-1,96 \cdot 10^{-3}$	$-26,2$

В табл. 2 приведены значения энергии основного состояния ε_0 для $\varphi = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$.

Т а б л и ц а 2

Расчетные значения ε_0

φ	0	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{3\pi}{2}$	2π
ε_0	$-4,02 \cdot 10^3$	$-4,32 \cdot 10^4$	$-4,65 \cdot 10^5$	$-4,99 \cdot 10^6$	$-5,37 \cdot 10^7$

3.5. $\gamma = 1$. В этом случае $\sigma = \sqrt{1-1/4} = 0,866$; $e^{+\frac{2\pi}{\sigma}} = 1,416 \cdot 10^3$.

В табл. 3 приведены значения ε_n для $\rho_{\min} = 7,062 \cdot 10^{-4}$, $\varphi = 0$ и $n = 0, 1, 2, 3$.

Т а б л и ц а 3

Расчетные значения ε_n

n	0	1	2	3
ε_n	$-2,28 \cdot 10^5$	-124	$-8,77 \cdot 10^{-2}$	$-6,15 \cdot 10^{-5}$

3.6. $\gamma = 0,3; 0,5; 1; 2; 3$. В табл. 4 приведены значения $\varepsilon_0, \varepsilon_1$ для $R_{\min} = 10^{-4}$ и для интервала значений $\gamma = 0,3 \div 3$.

Т а б л и ц а 4

Расчетные значения $\varepsilon_0, \varepsilon_1$

γ	0,3	0,5	1	2	3
ε_0	$-1,84 \cdot 10^6$	$-4,07 \cdot 10^6$	$-1,14 \cdot 10^7$	$-2,63 \cdot 10^7$	$-5,2 \cdot 10^7$
ε_1	$-9,54 \cdot 10^{-7}$	$-11,4$	$-6,2 \cdot 10^3$	$-1,71 \cdot 10^5$	$-8,79 \cdot 10^5$

4. Радиальные собственные функции и вероятности

Последовательно решая уравнения (4) и (5), можно вычислить собственные функции $\chi_n(\rho) = A_n(\rho) \sin \Phi_n(\rho)$. Плотность вероятности обнаружения частицы в сферическом слое $d\rho$ с радиусом слоя ρ равна

$$w(\rho) = \chi_n^2(\rho) = A_n^2(\rho) \sin^2 \Phi_n. \quad (17)$$

На рис. 2 и в табл. 5 для $\gamma = 2$, $n = 0$ и некоторых значений ρ_{\min} приведены вероятности обнаружения частиц в интервале $[\rho_{\min}, \rho]$.

$$W(\rho) = \int_{\rho_{\min}}^{\rho} A_n^2(\rho) \sin^2 \Phi_n d\rho. \quad (18)$$

Из рис. 2 и табл. 5 видно, что для основного состояния ($n = 0$) при уменьшении ρ_{\min} значимые вероятности смещаются в сторону центра, т. е. действительно при неограниченном уменьшении энергии основного состояния частица локализуется вблизи центра ($\rho = 0$). Расчеты полностью подтверждают качественные соображения в [2] и правомерность термина «падение на центр».

Таблица 5

Интервалы $[\rho_{\min}, \rho_{95}]$ для вероятностей обнаружения частиц $W(\rho) = 95\%$ в расчетах с $\gamma = 2$ и $n = 0$

ρ_{\min} (ε)	$8,655 \cdot 10^{-3}$ $(-4,02 \cdot 10^3)$	$7,49 \cdot 10^{-5}$ $(-5,37 \cdot 10^7)$	$6,48 \cdot 10^{-7}$ $(-7,17 \cdot 10^{11})$
$W = 0,95$	$[8,655 \cdot 10^{-3}, 4 \cdot 10^{-2}]$	$[7,49 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-4}]$	$[6,48 \cdot 10^{-7}, 3 \cdot 10^{-6}]$

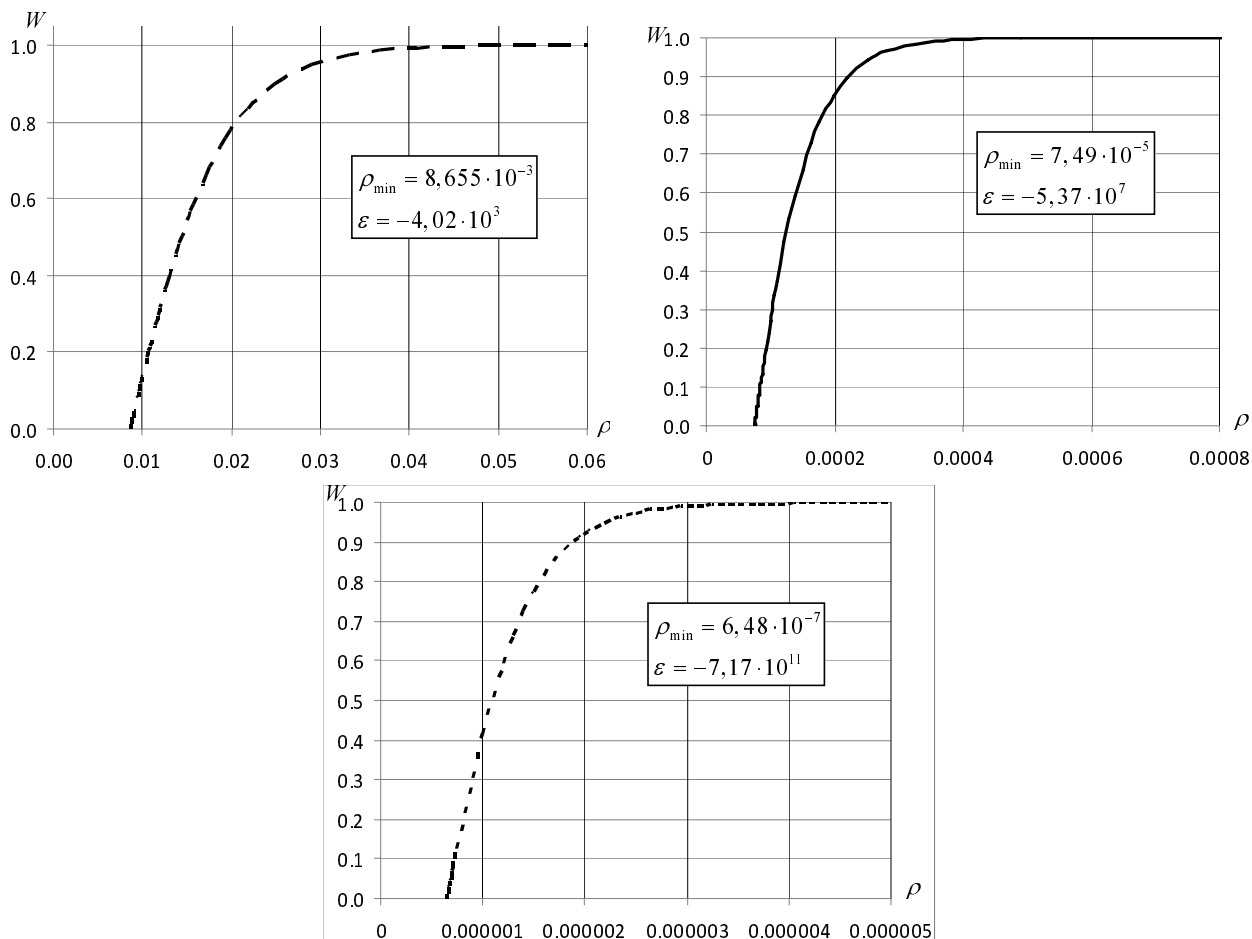


Рис. 2. Нормированные вероятности $W(\rho)$ для $\gamma = 2$, $n = 0$

5. Заключение

В результате решения нерелятивистского уравнения Шредингера с потенциалом $U = -\beta/r^2$ с помощью преобразования Прюфера получены следующие результаты:

1. Для значений $\gamma > 1/4^*$ вычислены дискретные энергетические спектры в зависимости от ρ_{\min} . Для данного состояния n энергия частицы

$$\varepsilon_n \sim -(\rho_{\min})^{-2}. \quad (19)$$

В (19) $\rho_{\min} = r_{\min}/l_c$ – безразмерный минимальный радиус, достигнутый при решении уравнений (4), (5) ($\rho_{\min} < 1$), $l_c = \hbar/mc$ – комптоновская длина волны частицы. При $\rho_{\min} \rightarrow 0$ спектр (19) не ограничен снизу.

2. В расчетах для состояний с $n > 0$ подтверждена зависимость

$$|\varepsilon_n| \sim e^{-\frac{2\pi n}{\sigma}}, \quad (20)$$

где $\sigma = \sqrt{\gamma - 1/4}$.

Соотношение между энергией основного состояния ($n = 0$) и другими состояниями несколько отличается от зависимости (20) (см. табл. 4).

3. В расчетах для $n > 0$ при $\rho \rightarrow 0$ при уменьшении $\rho_{\min}^{(1)}$ до $\rho_{\min}^{(2)} = \rho_{\min}^{(1)} e^{-\frac{\pi}{\sigma}}$ состояния $\varepsilon_n^{(1)}$ становятся равными $\varepsilon_{n+1}^{(2)}$.

4. Значимые вероятности обнаружения частиц в интервале $[\rho_{\min}, \rho]$ смещаются к центру при уменьшении ρ_{\min} . Это полностью согласуется с термином «падение квантово-механических частиц на центр».

Данная работа показывает наглядность и простоту решения уравнения Шредингера методом фазовой функции [6–8] с очевидным выбором для нее граничных условий.

Работа имеет также методическое значение. Впервые приведены количественные результаты, полностью подтверждающие полученные ранее аргументы и доказательства (см., например, [1–5]).

Авторы благодарят А. Л. Новоселову за существенную техническую помощь в подготовке статьи.

Список литературы

1. Case K. M. // Phys. Rev. 1950. Vol. 80. P. 797.
2. Landau L. D., Lifshitz E. M. Quantum mechanics. Nonrelativistic theory. M.: Fizmatlit, M.: 1963, (in Russian); [L.D.Landau and E.M.Lifshitz. Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory, Pergamon Press, Oxford (1965)].
3. Переломов А. М., Попов В. С. // ТМФ. 1970. Т. 4, № 1. С. 48–65.
4. Gitman D. M., Tyutin I. V., Voronov B. L. Self-adjoint extensions in quantum mechanics // Progress in Mathematical Physics 62, DOI 10.1007/978-0-8176-4662-2-1, Springer Science + Business media New York 2012.
5. Sobajima M. and Watanabe S., arxiv: 1312.2774v1 [math.AP].
6. Prüfer H. // Math. Ann. 1926. Vol. 95. P. 499.
7. Уваров В. П., Алдонясов В. И. // Журнал вычисл. и матем. физ. 1967. Т. 7: 2. С. 436–440.
8. Hairer E., Wanner G. Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems, second revised edition, springer-verlag 1991, 1996 (Russian translation – M.: Mir, 1999).
9. Ulehla I., Horejsi J. // Phys. Lett. 1986. Vol. 113A, № 7. P. 355.
10. Neznamov V. P., Safronov I. I. // Int. J. of Modern Phys. D. 2016. Vol. 25, No 10. DOI: 10.1142/S0218271816500917, arxiv: 1605/07450.
11. Meetz K. Nuovo Cim. 1964. Vol. 34. P. 690.

Статья поступила в редакцию 29.11.2016

* $\gamma = \frac{2m}{\hbar^2} \beta - l(l+1)$, l – квантовое число орбитального момента частицы.