

Основное состояние квантовой частицы в потенциальном поле

А. М. Дюгаев⁺, П. Д. Григорьев^{+*×1)}

⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия

^{*}Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, 119049 Москва, Россия

[×]Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2020 г.

После переработки 1 июня 2020 г.

Принята к публикации 1 июня 2020 г.

Исследуется решение уравнения Шредингера для основного состояния частицы в потенциальном поле. Так как волновые функции основного состояния не имеют узлов, оказывается возможным однозначно определить потенциалы разных типов. Выяснилось, что для широкого круга модельных потенциалов энергия основного состояния равна нулю. Более того, нулевой уровень может быть единственным уровнем на границе сплошного спектра. Рассмотрены потенциалы типа “воронки”, имеющие монотонную зависимость от координат, для случая одного, двух и трех измерений. В одномерном случае интересны потенциалы “инстантонного” типа с двумя точками равновесия частицы. Для кулоновского потенциала энергия основного состояния устойчива к его экранировке, как на больших, так и на малых расстояниях. Найдены двухсолитонные решения нелинейного уравнения Шредингера. Аргументирована эффективность предлагаемого “метода обратной задачи” для исследования решений дифференциальных уравнений.

DOI: 10.31857/S1234567820140074

1. Для квантовой частицы вид рассеивающего потенциала может быть в некоторых случаях восстановлен по найденным из опыта фазам рассеяния [1, 2]. В данной работе мы покажем, что если частица имеет хотя бы одно связанное состояние в потенциальном поле, возможно однозначно определить потенциал, задав модельную волновую функцию основного состояния Ψ_0 . Это утверждение основано на осцилляторной теореме [3, 4], согласно которой функция Ψ_0 не имеет узлов, что дает возможность записать уравнение Шредингера для Ψ_0 в виде

$$V(\mathbf{r}) - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi_0}{\Psi_0}. \quad (1)$$

Согласно (1) модельная функция Ψ_0 определяет модельный потенциал $V(\mathbf{r})$ и энергию основного состояния E_0 . Для сферически симметричного потенциала $V = V(r)$ можно так определить характерный масштаб a_0 , что после обезразмеривания уравнение (1) принимает вид [5]

$$v(r) - \varepsilon_0 = \left(\frac{\Psi'_0}{\Psi_0}\right)^2 + \left(\frac{\Psi'_0}{\Psi_0}\right)' + 2\frac{\Psi'_0}{\Psi_0} \frac{1}{r}. \quad (2)$$

Здесь $v(r)$ и ε_0 – безразмерные потенциал и энергия основного состояния:

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} v(r); \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \varepsilon_0. \quad (3)$$

Штрихи в (2) означают дифференцирование по безразмерной переменной $r_* = r/a_0$. Везде ниже значок “*” у r мы опускаем. Запись уравнения для Ψ_0 в виде (2) показывает, что для определения $v(r)$ и ε_0 достаточно задать не саму функцию основного состояния, а ее логарифмическую производную φ :

$$v(r) - \varepsilon_0 = \varphi^2 + \varphi' + \frac{2\varphi}{r}; \quad \varphi = \frac{\Psi'_0}{\Psi_0}. \quad (4)$$

Среди “физических” функций Ψ_0 известны две, которым отвечают два физических потенциала $v(r)$:

$$\Psi_0(r) = e^{-r} \rightarrow v(r) = -\frac{2}{r}; \quad \varepsilon_0 = -1,$$

$$\Psi_0(r) = e^{-r^2/2} \rightarrow v(r) = r^2; \quad \varepsilon_0 = 3. \quad (5)$$

Первый потенциал – кулоновский, а второй – осцилляторный. Естественно обобщить (5) и задать пробную функцию Ψ_0 в виде:

$$\Psi_0(r) = e^{-r^\nu/\nu}, \quad (6)$$

¹⁾e-mail: grigorev@itp.ac.ru

где ν – непрерывный параметр, $\nu > 0$. Из (2), (4) находим потенциал $v(r)$

$$v(r) = r^{2\nu-2} - (\nu+1)r^{\nu-2}; \quad \nu \neq 1, \nu \neq 2, \varepsilon_0 = 0. \quad (7)$$

Два значения $\nu = 1$ и $\nu = 2$ оказались выделены, и для всех $\nu \neq 1, \nu \neq 2$ энергия основного состояния равна нулю. Потенциал (7) притягивает частицу на малых расстояниях и отталкивает ее на больших r . При $r^\nu = (\nu+1)$ потенциал $v(r)$ обращается в нуль. На интервале $0 < \nu < 1$ основной уровень является единственным связанным состоянием. Он лежит точно на границе сплошного спектра. Это потенциалы “барьерного” типа. Характерен случай $\nu = 1/2$:

$$v(r) = \frac{1}{r} - \frac{3}{2} \frac{1}{r^{3/2}}; \quad \Psi_0(r) = e^{-2\sqrt{r}}. \quad (8)$$

Потенциал притяжения на малых r переходит в кулоновский потенциал отталкивания на больших r .

На интервале $1 < \nu < 2$ потенциал $v(r)$ монотонно зависит от r . Это потенциалы типа “воронки”. Связанных состояний в этом случае бесконечно много. Однако энергия ε_0 точно равна нулю на всем этом интервале $1 < \nu < 2$. Здесь выделено значение $\nu = 3/2$, когда Ψ_0 можно назвать обобщенной функцией Эйри [4]

$$v(r) = r - \frac{5}{2} \frac{1}{r^{1/2}}; \quad \Psi_0(r) = e^{-\frac{2}{3}r^{3/2}}. \quad (9)$$

В области $\nu > 2$ потенциал $v(r)$ имеет минимум, однако нижний уровень запиннигован в нуле. Например, для $\nu = 3$

$$v(r) = r^4 - 4r; \quad \Psi_0(r) = e^{-r^{3/3}}. \quad (10)$$

Понижение размерности пространства с $d = 3$ к $d = 2$, т.е. переход от координаты r к координате ρ , мало что меняет. Аналогии (4), (5), (7) имеют вид

$$v(\rho) - \varepsilon_0 = \varphi^2 + \varphi' + \frac{\varphi}{\rho},$$

$$\Psi_0(\rho) = e^{-\rho} \rightarrow v(\rho) = -\frac{1}{\rho}, \quad \varepsilon_0 = -1; \quad (11)$$

$$\Psi_0(\rho) = e^{-\rho^2/2} \rightarrow v(\rho) = \rho^2, \quad \varepsilon_0 = 2;$$

$$\Psi_0(\rho) = e^{-\rho^\nu/\nu} \rightarrow v(\rho) = \rho^{2\nu-2} - \nu\rho^{\nu-2},$$

$$\nu \neq 1, \quad \nu \neq 2, \quad \varepsilon_0 = 0.$$

Так же, как и для $d = 3$, значения $\nu = 1$ и $\nu = 2$ выделены, а для $\nu \neq 1, \nu \neq 2$ энергия основного состояния равна нулю.

Для одномерного случая $d = 1$ представление пробной функции в виде (6), (11) возможно только при $\nu > 1$

$$\Psi_0(x) = e^{-|x|^\nu/\nu}; \quad v(r) - \varepsilon_0 = \varphi^2 + \varphi'. \quad (12)$$

Здесь выделено значение $\nu = 2$:

$$\Psi_0(x) = e^{-x^2/2} \rightarrow v(x) = x^2; \quad \varepsilon_0 = 1.$$

При $\nu \neq 2$

$$v(x) = |x|^{2\nu-2} - (\nu-1)|x|^{\nu-2}; \quad \varepsilon_0 \equiv 0. \quad (13)$$

Для одномерной “воронки” $\nu = 3/2$ из (13) имеем

$$\begin{aligned} \Psi_0(x) &= \exp\left(-\frac{2}{3}|x|^{3/2}\right) \rightarrow \\ &\rightarrow v(x) = |x| - \frac{1}{2} \frac{1}{|x|^{1/2}}; \quad \varepsilon_0 = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

В области $\nu > 2$ потенциал $v(x)$ имеет два минимума, и его можно отнести к “инстантонному” типу. Например ($\nu = 4$),

$$\Psi_0(x) = e^{-x^4/4} \rightarrow v(x) = x^6 - 3x^2; \quad \varepsilon_0 = 0. \quad (15)$$

Чтобы рассмотреть для одномерного случая область $\nu < 1$, достаточно несколько усложнить пробную функцию (12)

$$\Psi_0(x) = \exp\left(-\frac{(x^2 + x_0^2)^{\nu/2}}{\nu}\right). \quad (16)$$

Это полезно сделать и для $d = 3$ и $d = 2$, что отвечает замене в (16) x на r и ρ . Независимо от значений параметра x_0 в (16) при $\nu \neq 1$ и далее при всех ν , не равных четным числам, энергия основного состояния ε_0 равна нулю, а потенциал $v(x)$ имеет вид

$$\begin{aligned} v(x) &= x^2(x^2 + x_0^2)^{\nu-2} - (\nu-2)x^2(x^2 + x_0^2)^{\nu/2-2} - \\ &- d(x^2 + x_0^2)^{\nu/2-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для осцилляторного потенциала ($\nu = 2$) $x_0 \neq 0$ эквивалентно умножению Ψ_0 на постоянный множитель, что компенсируется ее нормировкой и не влияет на ответ. Поэтому энергия ε_0 зависит только от размерности d :

$$v(x) = x^2, \quad v(\rho) = \rho^2, \quad v(r) = r^2, \quad \varepsilon_0 = d.$$

Кулоновский случай ($\nu = 1$) дает энергию нулевого уровня $\varepsilon_0 = -1$ независимо от размерности d и параметра x_0 в (16):

$$v(x) = -\frac{x_0^2}{x^2 + x_0^2} - \frac{x_0^2}{(x^2 + x_0^2)^{3/2}} - (d-1) \frac{1}{(x^2 + x_0^2)^{1/2}}. \quad (18)$$

Указанная независимость ε_0 от d и x_0 является неожиданным результатом. Из (18) можно увидеть, что для $d = 3$ и $d = 2$ “кулоновский” потенциал (18) экранирован на малых r и ρ , но это не сдвигает энергию основного состояния и сохраняет область сгущения кулоновских уровней при $\varepsilon = 0$. В одномерном случае $d = 1$ переход к пределу $x_0 \rightarrow 0$ осуществляется заменой $v(x) \rightarrow -2\delta(x)$; $\Psi_0(x) = e^{-|x|}$, когда второй член в (18) переходит в дельта-функцию. Кулоновский потенциал обладает еще одним замечательным свойством. Энергия основного состояния $\varepsilon_0 = -1$ не сдвигается также и при экранировке на больших расстояниях. Чтобы это показать, достаточно рассмотреть пробную функцию Ψ_0 вида

$$\Psi_0(r) = \frac{e^{-r}(1 - e^{-\kappa r})}{r}, \quad (19)$$

где параметр κ ограничен условием $\kappa > 0$. Из (2), (4) определяется потенциал $v(r)$, который выражается через функцию Бозе–Эйнштейна с эффективным зарядом q :

$$v(r) = -q \frac{1}{e^{\kappa r} - 1}, \quad q = \kappa(2 + \kappa), \quad \varepsilon_0 = -1. \quad (20)$$

При $\kappa \rightarrow 0$ $v(r)$ переходит в незэкранированный кулоновский потенциал, а при $\kappa \rightarrow \infty$ $v(r)$ отвечает узкой и глубокой потенциальной яме:

$$\kappa \rightarrow 0: v(r) = -\frac{2}{r}; \quad \kappa \rightarrow \infty: v(r) = -\kappa^2 e^{-\kappa r}. \quad (21)$$

2. Число дискретных уровней N для потенциала (20) можно оценить из квазиклассической связи N с “площадью” $v(r)$ [4] (в силу вырождения уровней энергии оно меньше соответствующего числа квантовых состояний):

$$N \approx \int_0^\infty |v(r)| r dr. \quad (22)$$

При $\kappa \rightarrow 0$ имеется кулоновское сгущение уровней: $N \approx 1/\kappa$. С ростом κ верхние уровни один за другим уходят в сплошной спектр, а при $\kappa \rightarrow \infty$ остается один уровень основного состояния с $\varepsilon_0 = -1$. Это значение ε_0 не зависит от κ . Указанное явление отвечает стационарному решению задачи Штурма–Лиувилля [2]. Потенциал $v(r)$ в (20) зависит от параметра, а энергия стационарна: $\varepsilon_0 = -1$.

Чтобы сдвинуть энергию ε_0 из точки $\varepsilon_0 = -1$, следует допустить конкуренцию двух экспонент и рассмотреть волновую функцию вида

$$\Psi_0(r) = \frac{e^{-r} \sinh(\kappa r)}{r}. \quad (23)$$

Из (2) находим потенциал $v(r)$ и энергию ε_0 :

$$v(r) = -\frac{4\kappa}{e^{2\kappa r} - 1}, \quad \varepsilon_0 = -(1 - \kappa)^2. \quad (24)$$

Здесь параметр κ ограничен интервалом $0 < \kappa < 1$, а при $\kappa = 1$ энергия $\varepsilon_0 = 0$. Потенциал (24) зависит от одного параметра κ и допускает рассмотрение случая малой энергии связи $1 - \kappa \ll 1$. Другие модельные $v(r)$ типа потенциальной ямы [4] характеризуются двумя параметрами: глубиной и шириной. Следует отметить, что потенциалы типа (20), (24) были популярны в ядерной физике. Обзор работ по этой теме содержится в [5]. Было обосновано ограничение на $v(r)$, при котором существует хотя бы один уровень

$$\int_0^\infty |v(r)| r dr > 1. \quad (25)$$

На этом общем утверждении все и ограничилось. Точные решения для $\Psi_0(r)$ типа (19), (23) не были найдены. Здесь явно видна эффективность предлагаемого “метода обратной задачи”. Проще задать функцию $\Psi_0(r)$ и найти потенциал $v(r)$ из (2). Значительно труднее задать тот же потенциал $v(r)$ и найти хотя бы одну волновую функцию основного состояния $\Psi_0(r)$.

3. Потенциал типа “воронки” (9), (14) популярен в теории струн. Обзор первых работ по этой теме содержится в [6]. На больших расстояниях r потенциал взаимодействия кварков растет линейно по r , а на малых r он может иметь кулоновский вид. Чтобы учесть такую возможность предложенным выше “методом обратной задачи”, рассмотрим волновую функцию основного состояния $\Psi_0(r)$ вида

$$\Psi_0(r) = e^{-zr - r^\nu/\nu}. \quad (26)$$

Для любого заряда z и $\nu \neq 2$ энергия основного состояния $\varepsilon_0 = -z^2$ и не зависит от знака z , а потенциал $v(r)$ определяется на основе (2), (4):

$$v(r) = 2zr^{\nu-1} + r^{2\nu-2} - (\nu + 1)r^{\nu-2} - \frac{2z}{r}. \quad (27)$$

Для кварковых струн в (27) нужно положить $\nu = 3/2$. Из (27) видно, что потенциал $v(r)$ кулоновский на малых r и линейно зависит от r на больших r . Два знака заряда z отвечают двум известным в теории струн явлениям. Можно устремить в (27) $z \rightarrow \infty$, это соответствует конфайнменту частиц при $r = 0$. Случай $z \rightarrow -\infty$ соответствует деконфайнменту на сфере радиуса $r = z^2$. Примечательно, что энергия основного состояния $\varepsilon_0 = -z^2$ не зависит от знака z .

4. Перейдем к рассмотрению состояний более сложных, чем локализованные вблизи одной потенциальной ямы. Простейшая система из двух осцилляторов имеет волновую функцию вида

$$\Psi_+(x) = e^{-(x-x_0)^2/2} + e^{-(x+x_0)^2/2}, \quad (28)$$

или с точностью до нормировки

$$\Psi_+(x) = e^{-x^2/2} \cosh(xx_0). \quad (29)$$

Потенциал и энергия для $\Psi_+(x)$ находится из (2):

$$v(x) = x^2 - 2xx_0 \tanh(xx_0); \quad \varepsilon_0 = 1 - x_0^2. \quad (30)$$

Потенциал (30) относится к инстантонному типу и при $x_0 > 1/\sqrt{2}$ имеет два симметричных минимума, которые при $x_0 \gg 1$ расположены в точках $x \approx \pm x_0$. Уравнения (28)–(30) удобны для описания эволюции основного состояния и его энергии при плавном переходе (с ростом параметра x_0) от одно- к двухямному потенциалу.

В качестве другого примера возьмем хорошо известное решение нелинейного уравнения Шредингера [2] в виде стационарного солитона

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\cosh(x)}; \quad v(x) = -2\Psi_0^2(x); \quad \varepsilon_0 = -1, \quad (31)$$

и рассмотрим двухсолитонную функцию вида

$$\Psi_+(x) = \Psi_0(x - x_1) + \Psi_0(x - x_2). \quad (32)$$

При произвольных параметрах x_1 и x_2 можно из (2) определить потенциал $v_+(x)$ и энергию ε_+

$$v_+(x) = -2\Psi_0^2(x - x_1) - 2\Psi_0^2(x - x_2) + 2\Psi_0(x - x_1)\Psi_0(x - x_2); \quad \varepsilon_+ = \varepsilon_0 = -1. \quad (33)$$

При $x_1 = x_2$ двухсолитонное решение совпадает с односолитонным. В обратном предельном случае $|x_1 - x_2| \gg 1$ последним членом в потенциале (33) можно пренебречь, и потенциал (33) отвечает двум невзаимодействующим солитонам. Энергия двух солитонов не зависит от x_1 и x_2 и совпадает с энергией одного солитона $\varepsilon_0 = -1$. Это замечательное свойство характерно и для многосолитонных решений уравнения Шредингера:

$$\Psi_N(x) = \sum_{i=1}^N \Psi_0(x - x_i), \quad (34)$$

для которых потенциал $v(x)$ и энергию также можно найти в явном виде из уравнения (2). Получающийся потенциал взаимодействия солитонов так устроен,

что независимо от числа солитонов, их энергия равна энергии одного солитона: $\varepsilon_N = \varepsilon_0 = -1$. Этот новый результат еще раз демонстрирует эффективность “метода обратной задачи”.

Тем же методом можно рассмотреть одночастичную функцию вида

$$\Psi_0(x) = e^{-|x|}; \quad v(x) = -2\delta(x); \quad \varepsilon_0 = -1, \quad (35)$$

и построить двухсолитонную функцию Ψ_+ и потенциал v_+ вида

$$\Psi_+(x) = e^{-|x-x_1|} + e^{-|x-x_2|}; \quad \varepsilon_+ = -1, \quad (36)$$

$$v_+(x) = -2 \frac{\delta(x-x_1) + \delta(x-x_2)}{1 + e^{-|x_1-x_2|}}. \quad (37)$$

Так же, как и для функции (32), энергия ε_+ в потенциале (37) не зависит от числа и от расстояния между солитонами (или минимумами потенциала) и совпадает с энергией одного солитона.

5. Нами установлен факт выделенности экспоненциальной и гауссовой волновых функций, являющихся решением уравнения Шредингера с кулоновским и осцилляторным потенциалами соответственно. Для широкого класса других функций и соответствующих им потенциалов энергия основного состояния запиннигована в нуле. Этот пиннинг является устойчивым к возмущениям и проявляется в различных физических системах. Приведем характерный пример. Спектр двумерного Паулевского электрона в поперечном магнитном поле имеет вид [7, 8]

$$E_{n,\sigma} = \hbar\omega_c(n + 1/2 + \sigma), \quad \sigma = \pm 1/2. \quad (38)$$

Для основного состояния $n = 0$, а спин электрона направлен против поля: $\sigma = -1/2$, поэтому $E_{0,-1/2} = 0$. Происходит точное сокращение диамагнитного и парамагнитного вкладов в $E_{0,-1/2}$. Зануление энергии основного состояния имеет место и для неоднородного магнитного поля [8] $H = H(x, y)$. Это тот случай, который мы рассматривали: пиннинг $E_{0,-1/2} = 0$ устойчив и не зависит от магнитного поля $H(x, y)$. Попытки найти простое физическое объяснение этому результату обречены на неудачу. Математически он элегантно следует [8] из уравнения Паули или Дирака, для которых имеется точная связь между циклотронной энергией $\hbar\omega_c$ и магнитным моментом электрона: $\hbar\omega_c = 2\mu_e H$. Указанное свойство позволило точно найти волновые функции основного состояния электрона для широкого класса неоднородных полей $H(x, y)$ [9].

В заключение отметим, что предложенный нами метод определения потенциала через волновую

функцию основного состояния оказался полезным и удобным при решении дифференциальных уравнений. Так, например, одномерная функция $\Psi_0(x) = \frac{1}{1+x^2}$ есть решение нелинейного уравнения Шредингера с потенциалом $v(x) = 6\Psi_0 - 8\Psi_0^2$ и энергией $\varepsilon_0 = 0$. Единственное связанное состояние записано на границе сплошного спектра. Последнее не случайно и является общим свойством очень широкого класса волновых функций.

Работа поддержана госзаданием 0033-2019-0001 “Развитие теории конденсированного состояния вещества”, грантами Российского фонда фундаментальных исследований 19-02-01000 и 18-02-00280, и фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. И. М. Гельфанд, Б. М. Левитан, Известия АН СССР, Сер. матем. **15**(4), 309 (1951).
2. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов. Метод обратной задачи*, Наука, М. (1980).
3. М. А. Лаврентьев, Л. А. Люстерник, *Курс вариационного исчисления*, Гостехиздат, М. (1950).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, М. (1989).
5. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, М. (1971).
6. И. В. Андреев, *Хромодинамика и жесткие процессы при высоких энергиях*, Наука, М. (1981).
7. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1989).
8. Y. Aharonov and A. Casher, Phys. Rev. A **19**, 2461 (1979).
9. А. М. Дюгаев, П. Д. Григорьев, ЖЭТФ **129**, 79 (2006) [JETP **102**, 69 (2006)].