

О КВАНТОВЫХ ФУНКЦИЯХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННОЙ МОДЕЛИ ЛИНЕЙНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Ш.М. НАГИЕВ, А.М. ДЖАФАРОВА, Ш.А. АМИРОВА

Институт Физики НАНА, Баку, Азербайджан

shakir.m.nagiyev@physics.ab.az

1. В недавней работе [1] была представлена новая модель точно решаемого линейного нерелятивистского квантового гармонического осциллятора [1]. Данная модель обладает свойством полуконфайнмента. Это свойство заключается в том, что волновые функции стационарных состояний обращаются в нуль в двух крайних точках: 1) $x = a$ и 2) $x = \infty$. Свойство полуконфайнмента в этой модели достигается заменой постоянной массы $m = \text{const}$ эффективной массой $M = M(x)$, зависящей от координаты. Из-за бесконечной глубины потенциальной ямы стационарные состояния системы имеют только дискретный спектр энергии. Соответствующие волновые функции стационарных состояний выражаются через полиномы Лагерра $L_n^\lambda(x)$, однако ее энергетический спектр полностью совпадает с энергетическим спектром нерелятивистского квантового гармонического осциллятора.

Цель настоящей работы — построить квантовые функции распределения, а именно стандартно-упорядоченную квантовую функцию распределения и функцию Хусими для рассматриваемой полуграниченной модели линейного гармонического осциллятора. (В связи с этим отметим, что квантовая функция распределения Вигнера для данной модели не существует — соответствующий интеграл расходится.)

2. Полуграниченная модель линейного гармонического осциллятора описывается следующим уравнением Шредингера с зависящей от координаты массой $M(x)$ (см, например, [2]):

$$\left\{ \partial_x^2 - \frac{M'}{M} \partial_x + \frac{2M}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \psi(x) = 0, \quad (1)$$

где

$$M(x) = \frac{am}{a+x}, \quad V(x) = \frac{M(x)\omega^2 x^2}{2}, \quad -a < x < \infty. \quad (2)$$

Уравнение (1) имеет следующие собственные функции [1]

$$\psi_n(x) = c_n \left(1 + \frac{x}{a}\right)^{\lambda_0^2 a^2} e^{-\lambda_0^2 a(x+a)} L_n^{2\lambda_0^2 a^2} (2\lambda_0^2 a^2 (x+a)), \quad (3)$$

где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ и $\lambda_0 = \sqrt{m\omega/\hbar}$. Приведем вид полиномов Лагерра. Они имеют вид [3, 4]

$$L_n^\alpha(x) = (\alpha+1)_n / n! \Phi(-n, \alpha+1; x), \quad (\alpha)_n = \Gamma(\alpha+n) / \Gamma(\alpha). \quad (4)$$

Волновые функции (3) соответствуют уровням энергии

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (5)$$

и удовлетворяют следующему условию ортонормированности

$$\int_{-a}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm}. \quad (6)$$

Из этого условия для нормировочной постоянной получаем выражение

$$c_n = (-1)^n (2\lambda_0^2 a^2)^{\lambda_0^2 a^2 + \frac{1}{2}} \sqrt{\frac{n!}{a\Gamma(n+2\lambda_0^2 a^2 + 1)}}. \quad (7)$$

При выводе равенство (6) мы воспользовались условием ортогональности для полиномов Лагерра [4]

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \delta_{nm}, \quad \alpha > -1. \quad (8)$$

3. Для чистых состояний стандартно-упорядоченная квантовая функция распределения определяется следующим образом [5]

$$F^S(x, p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x, t) \phi^*(p, t) e^{ipx/\hbar}, \quad (9)$$

где $\phi(p, t)$ есть волновая функция в импульсном -представление:

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a}^{\infty} \psi(x, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx. \quad (10)$$

Для нахождения стандартно-упорядоченной квантовой функции распределения по формуле (9) нам сначала следует найти явно волновые функции в импульсном p - представлении (10):

$$\begin{aligned} \phi_n(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a}^{\infty} \psi_n(x, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx, \\ \psi_n(x, t) &= \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}, \quad \phi_n(x, t) = \phi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Поскольку волновые функции $\psi_n(x, t)$ (3) ортонормированы, то и волновые функции $\phi_n(p, t)$ (11) также будут ортонормированными, т.е. $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(p, t) \phi_m(p, t) dp = \delta_{nm}$. Вводя обозначения $\zeta = 2\lambda_0^2 a(x + a)$, $0 < \zeta < \infty$ и $b = \lambda_0 a$, получим

$$\phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{c_n}{2\lambda_0 b} \int_0^{\infty} \zeta^{b^2} e^{-\frac{\zeta}{2} L_n^{2b^2}(\zeta)} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} d\zeta \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{c_n}{2\lambda_0 b} e^{\frac{ipa}{\hbar}} I_n \quad (12)$$

где

$$I_n = \int_0^{\infty} \zeta^{b^2} e^{-s\zeta} L_n^{2b^2}(\zeta) d\zeta, \quad s = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{p}{\lambda_0 b}\right). \quad (13)$$

Для вычисления интеграла (13) воспользуемся формулой [6]

$$\int_0^{\infty} x^{\alpha-1} e^{-px} L_n^{\lambda}(cx) dx = \frac{\Gamma(\alpha)}{p^{\alpha}} P_n^{(\lambda, \alpha-\lambda-n-1)} \left(1 - \frac{2c}{p}\right), \quad \text{Re } p > 0, \quad \text{Re } \alpha > 0. \quad (14)$$

В формуле (14) функции $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ являются полиномами Якоби [3, 4]

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = (\alpha + 1)_n / n! F(-n, n + \alpha + \beta + 1; \alpha + 1; \frac{1-x}{2}).$$

В результате для волновой функции в p - представлении приходим к выражению

$$\begin{aligned} \phi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{c_n}{2\lambda_0^2 a} e^{\frac{ipa}{\hbar}} \Gamma(\lambda_0^2 a^2 + 1) \left[\frac{2\hbar\lambda_0^2 a(\hbar\lambda_0^2 a - ip)}{p^2 + \hbar^2 \lambda_0^4 a^2} \right]^{\lambda_0^2 a^2 + 1} \\ &\quad \cdot P_n^{(2\lambda_0^2 a^2, -\lambda_0^2 a^2 - n)} \left(1 - \frac{4\hbar\lambda_0^2 a(\hbar\lambda_0^2 a - ip)}{p^2 + \hbar^2 \lambda_0^4 a^2}\right). \end{aligned} \quad (15)$$

С учетом $F_n^S(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi_n(x, t) \phi_n^*(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, (3) и (15) находим окончательное выражение для стандартно-упорядоченной квантовой функции распределения

$$\begin{aligned} F_n^S(x, p) &= \frac{1}{4\pi\hbar} \frac{c_n^2}{\lambda_0^2 a} \Gamma(\lambda_0^2 a^2 + 1) \left[\frac{2\hbar\lambda_0^2 a(\hbar\lambda_0^2 a - ip)}{p^2 + \hbar^2 \lambda_0^4 a^2} \right]^{\lambda_0^2 a^2 + 1} \left(1 + \frac{x}{a}\right)^{\lambda_0^2 a^2} \times \\ &\quad \times e^{-(x+a)(\lambda_0^2 a - \frac{ip}{\hbar})} L_n^{2\lambda_0^2 a^2} (2\lambda_0^2 a^2(x + a)) P_n^{(2\lambda_0^2 a^2, -\lambda_0^2 a^2 - n)} \left(1 - \frac{4\hbar\lambda_0^2 a(\hbar\lambda_0^2 a - ip)}{p^2 + \hbar^2 \lambda_0^4 a^2}\right), \end{aligned} \quad (16)$$

где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Отметим, что, как хорошо известно, в стационарном состоянии физические величины, характеризующие системы, от времени не зависят.

4. Вычислим теперь квантовую функцию распределения Хусими. Она с нормировочным множителем $(\pi\hbar)^{-1}$ в координатном представлении определяется выражением [5, 6]

$$F^H(x, p, t) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar D} \left| \int \psi(x', t) e^{-i\frac{px'}{\hbar} - \frac{(x-x')^2}{4D^2}} dx' \right|^2. \quad (17)$$

Она ограничена как $0 \leq F^H(x, p, t) \leq (\pi\hbar)^{-1}$. Здесь значение квадрата параметра D равно $D^2 = 1/2 \lambda_0^2$. Перейдем теперь к вычислению явного вида функции распределения Хусими (17) для рассматриваемой квантовой системы в -ом стационарном состоянии, используя аналитическое выражение волновой функции этого состояния (3). Имеем

$$F_n^H(x, p) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar D} \left| \int \psi_n(x') e^{-i \frac{px'}{\hbar} - \frac{(x-x')^2}{4D^2}} dx' \right|^2. \quad (18)$$

Представим (18) в виде

$$F_n^H(x, p) = \frac{\lambda_0}{2\pi \hbar \sqrt{\pi}} |A_n|^2, \quad A_n = \int_{-a}^{\infty} \psi_n(x') e^{-i \frac{px'}{\hbar} - \frac{\lambda_0^2}{2}(x-x')^2} dx'. \quad (19)$$

Подставив аналитическое выражение волновой функции n -го стационарного состояния (3) в (19), находим:

$$A_n = c_n \int_{-a}^{\infty} \left(1 + \frac{x'}{a}\right)^{b^2} e^{-\frac{\lambda_0^2}{2}(x-x')^2 - b^2 \left(1 + \frac{x'}{a}\right) - i \frac{px'}{\hbar}} L_n^{2b^2} \left(2b^2 \left(1 + \frac{x'}{a}\right)\right) dx'. \quad (20)$$

Для вычисления (20) воспользуемся операторным методом, т.е. учтем, что

$$L_n^{2b^2} \left(2b^2 \left(1 + \frac{x'}{a}\right)\right) \cdot e^{-i \frac{px'}{\hbar}} = L_n^{2b^2} \left(2i\lambda_0 b \hbar \frac{d}{dp} + 2b^2\right) \cdot e^{-i \frac{px'}{\hbar}}. \quad (21)$$

Подстановка (21) в (20) дает

$$A_n = \frac{c_n}{c_0} L_n^{2b^2} \left(2i\lambda_0 b \hbar \frac{d}{dp} + 2b^2\right) \cdot A_0, \quad (22)$$

$$A_0 = a c_0 \int_0^{\infty} y^{b^2} e^{-i \frac{pa}{\hbar}(y-1) - \frac{\lambda_0^2}{2}[x-a(y-1)]^2 - b^2 y} dy,$$

где введена новая безразмерная переменная $y = 1 + \frac{x'}{a}$. Этот табличный интеграл выражается через функции параболического цилиндра $D_\nu(z)$ [8]

$$\int_0^{\infty} y^{\alpha-1} e^{-py^2 - qy} dy = \Gamma(\alpha) (2p)^{-\alpha/2} e^{\frac{q^2}{8p}} D_{-\alpha} \left(\frac{q}{\sqrt{2p}}\right), \quad \text{Re } \alpha, \text{Re } p > 0. \quad (23)$$

Поэтому для A_0 получаем выражение

$$A_0 = \frac{(2b)^{b^2 + \frac{1}{2}}}{\sqrt{\lambda_0} \Gamma(2b^2 + 1)} \Gamma(b^2 + 1) e^{\frac{z^2}{4} + \beta} D_{-b^2 - 1}(z), \quad (24)$$

где $z = -(\lambda_0 x + i p / \sqrt{m\omega \hbar})$, $\beta = -\frac{1}{2}(b + \lambda_0 x)^2 + i b p / \sqrt{m\omega \hbar}$. С учетом теперь формул (19), (22) и (24) получаем следующая операторная формула для функции Хусими для n -го стационарного состояния в виде

$$F_n^H(x, p) = \frac{\lambda_0}{2\pi \hbar \sqrt{\pi}} \frac{n!}{(2b^2 + 1)_n} \left| L_n^{(2b^2)} \left(2b^2 + 2i\lambda_0 b \hbar \frac{d}{dp}\right) \cdot A_0 \right|^2. \quad (25)$$

Отметим, что используя степенного представления для полиномов Лагерра мы можем вычислить действие дифференциального оператора в (25) и тем самым получить аналитическую формулу для функции Хусими. Непосредственное вычисление функции Хусими по формуле (19) дает следующее выражение

$$F_{Nn}^H(x, p) = \frac{1}{\pi \hbar} e^{-\frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2} (x^2 + 4ax + 2a^2)\right)} b^{2b^2 + 1} \frac{\Gamma(b^2 + 1) (2b^2 + 1)_n}{\Gamma(b^2 + \frac{1}{2})} \frac{1}{n!} \times$$

$$\times \sum_{k,s=0}^n \frac{(-n)_k (-n)_s (b^2 + 1)_k (b^2 + 1)_s (2b)^{k+s}}{(2b^2 + 1)_k (2b^2 + 1)_s k! s!} \times$$

$$\times D_{-(b^2+k+1)} \left(-\lambda_0 \left(x - i \frac{p}{m_0 \omega}\right)\right) D_{-(b^2+s+1)} \left(-\lambda_0 \left(x + i \frac{p}{m_0 \omega}\right)\right). \quad (26)$$

Представление (25) удобно для вычисления предела $F_n^H(x, p)$ при $a \rightarrow \infty$. Таким образом воспользовавшись предельной формулой

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \left(\frac{2}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}n} L_n^{(\alpha)} \left((2\alpha)^{\frac{1}{2}} x + \alpha\right) = \frac{(-1)^n}{n!} H_n(x) \quad (27)$$

легко можем найти предел функции Хусими. Можно показать, что этот предел, как и должно быть, совпадает со соответствующим известным выражением для нерелятивистского линейного гармонического осциллятора, т.е. $\lim_{a \rightarrow \infty} F_n^H(x, p) = F_{Nn}^H(x, p)$, где (см., например, [9])

$$F_{Nn}^H(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right]^n e^{-\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)}. \quad (28)$$

- [1] *E.I. Jafarov and J. Van der Jeugt.* Exact solution of the semiconfined harmonic oscillator model with a position-dependent effective mass, *Eur. Phys. J. Plus*, 136 758 (2021).
- [2] *E. I. Jafarov and S. M. Nagiyev.* *Mod. Phys. Lett. A* **36**, No.29, 2150206 (2021).
- [3] *Г. Бейтмен, А. Эрдейи.* Высшие трансцендентные функции, т. 2: Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены, Наука, М., 1974.
- [4] *R. Koekoek, P. A. Lesky, and R. F. Swarttouw.* *Hypergeometric Orthogonal Polynomials and their q-Analogues*, (Springer, Berlin 2010).
- [5] *H.-W. Lee.* Theory and application of the quantum phase-space distribution functions, *Phys. Rep.* 259 (1995) 147-211.
- [6] *А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев.* Интегралы и ряды, т. 2: Специальные функции, Наука, М., 1983.
- [7] *К. Husimi.* Some formal properties of the density matrix, *Proc. Phys.-Math. Soc. Japan*, 22 264 (1940).
- [8] *А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев.* Интегралы и ряды, т. 1: Элементарные специальные функции, Наука, М., 1983.