УДК 530.145.6

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ ОСЦИЛЛЯТОРА. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА

А. С. Вшивцев, В. А. Вшивцев, А. В. Татаринцев, А. Р. Френкин

(*кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

С помощью предложенной процедуры, связанной с исследованием аналитических свойств лапласовских образов волновых функций, найден спектр одномерного уравнения Шрёдингера для линейного осциллятора и осциллятора со сдвигом.

В работе [1] была разработана процедура нахождения спектра уравнения Шрёдингера (УШ), которая сводила задачу к решению бесконечной системы линейных алгебраических уравнений.

Представляет несомненный интерес сравнение приближенных решений, полученных этим методом, с точными решениями УШ, известными для некоторых потенциалов. В этой связи мы исследуем одномерный линейный осциллятор, для которого алгебраическая процедура просто приводит к известному точному решению УШ [2], а также осциллятор со сдвигом, для которого алгебраический метод дает лишь приближенное решение задачи.

Следуя работе [1], рассмотрим сначала УШ для осциллятора:

$$\Psi''(\lambda, x) - x^2\Psi(\lambda, x) + \lambda\Psi(\lambda, x) = 0. \qquad (1)$$

Решением уравнения (1) являются четные $\Psi(\lambda, x)$ и нечетные $\tilde{\Psi}(\lambda, x)$ (по x) волновые функции (ВФ), которые будем искать в виде разложений

$$\Psi(\lambda, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(\lambda)x^{2n}}{(2n-1)!!}, \quad \tilde{\Psi}(\lambda, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{a_n}(\lambda)x^{2n+1}}{(2n+1)!!}, \qquad (2)$$

причем для простоты выбираем $a_0 = \tilde{a}_0 = 1$.

Для нахождения спектра УШ (1) используем обобщенное преобразование Лапласа, специально подобранное для функций с асимптотическим поведением $\exp\left\{\pm x^2/2\right\}$ при $|x| \to \infty$:

$$\Phi(\lambda, \omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi\omega}} \int_0^{\infty} \Psi(\lambda, x)\, \mathrm{e}^{-x^2/2\omega}\, dx,$$
$$\tilde{\Phi}(\lambda, \omega) = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2}{\pi\omega}} \int_0^{\infty} x\tilde{\Psi}(\lambda, x)\, \mathrm{e}^{-x^2/2\omega}\, dx. \qquad (3)$$

ВФ (2) удовлетворяют условию $\Psi, \tilde{\Psi} \in L_2(-\infty, \infty)$ лишь для таких значений энергии λ (спектр УШ), для которых лапласовские образы ВФ $\Phi(\lambda, \omega)$ и $\tilde{\Phi}(\lambda, \omega)$ регулярны в точке $\omega = 1$.

Подстановка разложений (2) в формулы (3) дает

$$\Phi(\lambda, \omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\lambda)\omega^n, \quad \tilde{\Phi}(\lambda, \omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n(\lambda)\omega^n. \qquad (4)$$

Применяя преобразования (3) к УШ для Ψ и $\tilde{\Psi}$, можно получить два уравнения первого порядка для функций $\Phi(\lambda, \omega)$ и $\tilde{\Phi}(\lambda, \omega)$, которые удобно объединить и записать в виде уравнения для функции $\Phi_\alpha(\lambda, \omega)$, совпадающей с $\Phi(\lambda, \omega)$ и $\tilde{\Phi}(\lambda, \omega)$ при $\alpha = 1/4$ и $\alpha = 3/4$ соответственно:

$$\left(1 - \omega^2\right) \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial \omega} + \frac{1}{2}\left(\lambda - 4\alpha\omega\right)\Phi_\alpha = 0. \qquad (5)$$

Это уравнение имеет решение

$$\Phi_\alpha(\lambda, \omega) = (1+\omega)^{-\frac{\lambda}{4}-\alpha}(1-\omega)^{\frac{\lambda}{4}-\alpha}. \qquad (6)$$

Функция $\Phi_\alpha(\lambda, \omega)$ регулярна в точке $\omega = 1$ при $\lambda = \lambda_N^{(\alpha)} = 4N + 4\alpha$, $N = 0, 1, \ldots$. Эти значения λ и определяют спектр УШ (1), причем индексу $\alpha = 1/4$ соответствуют четные ВФ, а $\alpha = 3/4$ — нечетные.

Функция $\Phi_\alpha(\lambda, \omega)$ может быть представлена в виде (см. (4)): $\Phi_\alpha(\lambda, \omega) = \sum\limits_{n=0}^{\infty} P_n^{(\alpha)}(\lambda)\omega^n$, где использованы обозначения $P_n^{(1/4)}(\lambda) = a_n(\lambda)$, $P_n^{(3/4)}(\lambda) = \tilde{a}_n(\lambda)$. Из УШ (1) или уравнения (5) следует, что величины $P_n^{(\alpha)}(\lambda)$ являются полиномами по переменной λ, удовлетворяющими рекуррентным соотношениям

$$(n+1)P_{n+1}^{(\alpha)}(\lambda) - (n+2\alpha-1)P_{n-1}^{(\alpha)}(\lambda) = -\frac{\lambda}{2}P_n^{(\alpha)}(\lambda). \qquad (7)$$

Тогда $\Phi_\alpha(\lambda, \omega)$ (6) — производящая функция этих полиномов, имеющих вид

$$P_n^{(\alpha)}(\lambda) = \left\{\Gamma\left(\alpha - \frac{\lambda}{4}\right)\Gamma\left(\alpha + \frac{\lambda}{4}\right)\right\}^{-1} \times \qquad (8)$$
$$\times \sum_{k=0}^{n} (-1)^{n-k} \frac{\Gamma(k+\alpha-\lambda/4)\Gamma(n-k+\alpha+\lambda/4)}{\Gamma(k+1)\Gamma(n-k+1)}.$$

Эти полиномы $P_n^{(\alpha)}(\lambda)$ (фактически являющиеся одним из видов полиномов Полачека [3] мнимого аргумента) ортогональны на мнимой оси энергий λ отдельно для четных ($\alpha = 1/4$) и нечетных ($\alpha = 3/4$) решений УШ (1):

$$\int_{-i\infty}^{i\infty} P_n^{(\alpha)}(\lambda)P_k^{(\alpha)}(\lambda)g_\alpha(\lambda)d\lambda = \frac{(-1)^n\Gamma(2\alpha+n)}{n!\Gamma(2\alpha)}\delta_{kn},$$

причем весовая функция $g_\alpha(\lambda)$ имеет вид

$$g_\alpha(\lambda) = -\frac{i \cdot 2^{2\alpha-3}}{\pi\Gamma(2\alpha)}\left|\Gamma(\alpha - \lambda/4)\right|^2.$$

Особые точки (полюсы) весовой функции $g_\alpha(\lambda)$ на положительной действительной полуоси λ и определяют спектр задачи $\lambda = \lambda_N^{(\alpha)}$, $N = 0, 1, \ldots$. Заметим также, что подстановка разложений (8) в (2) при $\lambda = \lambda_N^{(\alpha)}$ приводит к обычным выражениям для ВФ линейного осциллятора [2], записанным через полиномы Эрмита.

Рассмотрим далее УШ для осциллятора со сдвигом:

$$\Psi''(\lambda, x) - (x^2 + 2\varepsilon x)\Psi(\lambda, x) + \lambda\Psi(\lambda, x) = 0, \quad (9)$$

для которого также имеется точное решение, и покажем, как предложенный в работе [1] метод может быть применен в этом случае.

Решение УШ (9) можно представить в виде суммы четного $\Psi(\lambda, x)$ и нечетного $\tilde{\Psi}(\lambda, x)$ решений, лапласовские образы которых $\Phi(\lambda, x)$ и $\tilde{\Phi}(\lambda, x)$, как следует из УШ (9), удовлетворяют системе уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned}
&(1-\omega^2)\frac{\partial\Phi}{\partial\omega} + \frac{1}{2}(\lambda - \omega)\Phi - \varepsilon\omega\tilde{\Phi} = 0,\\
&(1-\omega^2)\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial\omega} + \frac{1}{2}(\lambda - 3\omega)\tilde{\Phi} - \varepsilon\left(\Phi + 2\omega\frac{\partial\Phi}{\partial\omega}\right) = 0.
\end{aligned} \quad (10)$$

Вместо используемой ранее переменной ω при определении спектра УШ (9) удобно ввести новую переменную $y = (1-\omega)/(1+\omega)$ и исследовать поведение лапласовских образов ВФ $\Phi(\lambda, x)$ и $\tilde{\Phi}(\lambda, x)$ в точке $y = 0$.

Решение системы (10) будем искать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\Phi(\lambda, \omega) &= \left(\frac{1+y}{2}\right)^{1/2} B(\lambda, y),\\
\tilde{\Phi}(\lambda, \omega) &= \left(\frac{1+y}{2}\right)^{3/2} \tilde{B}(\lambda, y),
\end{aligned} \quad (11)$$

где функции $B(\lambda, y)$ и $\tilde{B}(\lambda, y)$ регулярны в точке $y = 0$, т.е. представимы в виде $B(\lambda, y) = \sum\limits_{n=0}^{\infty} b_n y^n$, $\tilde{B}(\lambda, y) = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \tilde{b}_n y^n$. Подставляя разложения $B(\lambda, y)$ и $\tilde{B}(\lambda, y)$ в уравнения (10), можно получить рекуррентные соотношения для величин b_n и $\tilde{b}_n$, $n = 0, 1, \ldots$:

$$\begin{aligned}
&\varepsilon\tilde{b}_{n-1} + (\lambda - 1 - 4n)b_n - \varepsilon\tilde{b}_n = 0,\\
&-2\varepsilon(2n+1)b_n + (\lambda - 3 - 4n)\tilde{b}_n + 4\varepsilon(n+1)b_{n+1} = 0.
\end{aligned} \quad (12)$$

Эти соотношения представляют собой бесконечную систему линейных алгебраических уравнений относительно величин b_n, $\tilde{b}_n$, с помощью которой можно определить спектр УШ (9). Рассматривая вместо бесконечной системы уравнений (12) конечные системы из $2N$ уравнений ($N = 1, \ldots$) и приравнивая определители таких систем к нулю, получаем (с помощью вычислений на ЭВМ) приближенный спектр УШ (9). Этот спектр при росте N с возрастающей точностью совпадает с точным спектром УШ (9), равным $\lambda_n = 2n + 1 - \varepsilon^2$, $n = 0, 1, \ldots$.

Тем самым подтверждаются возможности метода для решения различных задач по нахождению спектра УШ.

Авторы (В. А. Вшивцев, А. В. Татаринцев, А. Р. Френкин) глубоко благодарны А. В. Борисову, В. Ч. Жуковскому и О. С. Павловой за многочисленные полезные обсуждения.

Литература

1. *Вшивцев А.С., Норин Н.В., Сорокин В.Н.* // ТМФ. 1996. **109**, № 1. С. 107.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М., 1963.
3. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. М., 1966. Т. 2.

Поступила в редакцию
07.04.99