

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 530.145

СПЕКТР РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА
С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПРИТЯГИВАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

О. С. Павлова, А. Р. Фркин

(кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

E-mail: th180@phys.msu.su

Методом, основанным на исследовании аналитических свойств лапласовских образов волновых функций, определяется дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с произвольным притягивающим потенциалом. С помощью нового подхода задача сведена к приближенному нахождению корней характеристического уравнения, соответствующего бесконечной системе линейных алгебраических уравнений.

В работах [1–3] развит метод определения дискретного спектра радиального уравнения Шрёдингера (УШ) с удерживающим и притягивающим потенциалами. Этот метод, который был назван методом интегральных преобразований, основан на исследовании поведения лапласовских образов волновых функций (ВФ). В настоящей работе предлагается новый и чрезвычайно простой вариант метода интегральных преобразований, основанный на использовании операторного подхода. Такой подход позволяет решить задачу определения спектра УШ с произвольным гладким притягивающим потенциалом, убывающим на бесконечности и имеющим кулоновскую особенность z/r и особенность типа A/r^2 .

Рассмотрим радиальное уравнение Шрёдингера (использована система единиц $\hbar = 2m = 1$)

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Psi - U(r)\Psi + E\Psi = 0 \quad (1)$$

($l = 0, 1, 2, \dots$ — орбитальное квантовое число) с потенциалом

$$U(r) = V(r) - \frac{z}{r} + \frac{A}{r^2}.$$

При этом будем считать, что потенциал $V(r)$ может быть разложен в ряд по степеням $(r/a)^N$ начиная с $N = -2$:

$$V(r) = V(r/a) = \sum_{N=-2}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N \quad (a > 0).$$

Если ввести обозначения $Z = z - b_{-1}a$, $\mathcal{A} = A + b_{-2}a^2$ и $B = \mathcal{A} + l(l+1)$, то (1) можно записать в виде

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{B}{r^2}\Psi + \frac{Z}{r}\Psi - \sum_{N=0}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N \Psi + E\Psi = 0.$$

Это уравнение может иметь дискретный спектр энергий $E = -|E| < 0$ при $\mathcal{A} > -(2l+1)^2/4$.

Введем новую переменную $x = |E|^{1/2}r$, тогда УШ принимает следующую форму:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{\gamma}{x}\Psi - \frac{B}{x^2}\Psi - \sum_{N=0}^{\infty} B_N x^N \Psi - \Psi = 0, \quad (2)$$

где $\gamma = Z|E|^{-1/2}$, $B_N = b_N a^{-N}|E|^{-N/2-1}$.

Следуя работам [1–3], применим к УШ преобразование Лапласа вида

$$\langle\varphi\rangle \equiv \varphi(\omega) = \frac{\omega^{-2\delta}}{\Gamma(2\delta)} \int_0^{\infty} e^{-x/\omega} \varphi(x) x^{\delta-1} dx, \quad (3)$$

где величина $\delta = (1 + \sqrt{1 + 4B})/2$ определяет поведение волновой функции в нуле: $\Psi \sim x^{\delta}$ при $x \rightarrow 0$. Заметим, что для квадратично интегрируемого решения УШ лапласовский образ ВФ $\Phi(\omega) \equiv \langle\Psi\rangle$ должен быть регулярным в точке $\omega = 1$ [1–3].

В лапласовском представлении после интегрирования по частям УШ (2) принимает вид

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi + \gamma\Phi = \sum_{N=0}^{\infty} B_N \langle x^{N+1}\Psi \rangle. \quad (4)$$

Из преобразования Лапласа (3) следует равенство

$$\langle x^{N+1}\Psi \rangle = \frac{1}{\omega^{2\delta}} L^{N+1} \{\omega^{2\delta}\Phi(\omega)\},$$

где оператор $L = \omega^2 \frac{d}{d\omega}$. С помощью оператора L запишем УШ (4) так:

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi + \gamma\Phi = \frac{1}{\omega^{2\delta}} \sum_{N=0}^{\infty} B_N L^{N+1} \{\omega^{2\delta}\Phi(\omega)\}. \quad (5)$$

Переходя в (5) к переменной $y = (1 - \omega)/(1 + \omega)$ и используя представление

$$\Phi(\omega) = (1 + y)^{2\delta} D(y), \quad D(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k,$$

получаем уравнение

$$\begin{aligned} y \frac{dD}{dy} + \left(\delta - \frac{\gamma}{2} \right) D = \\ = -\frac{1}{2} (1 - y)^{-2\delta} \sum_{N=0}^{\infty} B_N \sum_{k=0}^{\infty} a_k L^{N+1} \{ (1 - y)^{2\delta} y^k \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Введем переменную $\xi = (1 - y)^{-1}$, через которую оператор L выражается крайне просто:

$$L = -\frac{1}{2} \mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \frac{d}{d\xi}.$$

Теперь уравнение (6) примет более простой вид:

$$\begin{aligned} y \frac{dD}{dy} + \left(\delta - \frac{\gamma}{2} \right) D = \\ = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N B_N}{2^{N+2}} \xi^{2\delta} \mathcal{L}^{N+1} \left\{ \xi^{-2\delta} \left(1 - \frac{1}{\xi} \right)^k \right\}. \end{aligned}$$

Теперь разложим $(1 - 1/\xi)^k$ по степеням $1/\xi$:

$$\left(1 - \frac{1}{\xi} \right)^k = \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m k!}{m! \Gamma(k - m + 1)} \xi^{-m}.$$

Легко видеть, что

$$\begin{aligned} \xi^{2\delta} \mathcal{L}^{N+1} \xi^{-(2\delta+m)} = \\ = (-1)^{N+1} \frac{\Gamma(m + N + 2\delta + 1)}{\Gamma(m + 2\delta)} \xi^{-(m+N+1)}. \end{aligned}$$

Это соотношение позволяет, возвращаясь к переменной y , УШ (6) записать в виде

$$\begin{aligned} y \frac{dD}{dy} + \left(\delta - \frac{\gamma}{2} \right) D = - \sum_{k=0}^{\infty} k! a_k \sum_{N=0}^{\infty} \frac{B_N}{2^{N+2}} \times \\ \times \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m \Gamma(m + N + 2\delta + 1)}{m! (k - m)! \Gamma(m + 2\delta)} (1 - y)^{m+N+1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Далее будем пользоваться разработанной схемой [1] и разложим выражение $(1 - y)^{m+N+1}$ по степеням y , затем приравняем в (7) коэффициенты при одинаковых степенях y^n ($n \leq m + N + 1$). В результате получим систему алгебраических уравнений относительно величин a_n , которую удобно записать в виде

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ B_{nk} - \left(n + \delta - \frac{\gamma}{2} \right) \delta_{nk} \right\} a_k = 0, \\ B_{nk} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{B_N}{2^{N+2}} \beta_{nk}(N), \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_{nk}(N) = \frac{(-1)^{n+1} k!}{n!} \times \\ \times \sum_{\substack{m=nk \\ n=N-1}}^k \frac{(-1)^m \Gamma(m + N + 2\delta + 1) \Gamma(m + N + 2)}{m! (k - m)! \Gamma(m + 2\delta) \Gamma(m + N - n + 2)}. \end{aligned}$$

Спектр УШ находится из уравнения

$$\det \left\| B_{nk} - \left(n + \delta - \frac{\gamma}{2} \right) \delta_{nk} \right\| = 0. \quad (9)$$

Величину B_{nk} удобно выразить через начальные коэффициенты разложения потенциала, т.е. b_N :

$$B_{nk} = \frac{1}{4} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{b_N}{|E| (2a|E|^{1/2})^N} \beta_{nk}(N). \quad (10)$$

Заметим, что для всех исследуемых потенциалов $V(r)$ множители $\beta_{nk}(N)/[4|E|(2a|E|^{1/2})^N]$ одинаковы, отличие заключается только в коэффициентах разложения потенциала b_N . Следует отметить, что поскольку разложение (10) — это разложение по обратным степеням энергии, то уравнение (9) должно давать лучшее приближение при больших $|E|$, т.е. для нижних уровней спектра УШ.

По формулам (8), (9) был рассчитан энергетический спектр для потенциала $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ при $l = 0$. Полученные приближенные результаты уже при $N = 15$ хорошо совпадают с известным точным решением УШ для этого потенциала [4], например для значения параметра $2a\sqrt{V_0}$, равного 5.1356223, приближенное значение энергии основного состояния отличается от точного всего на 0.005%.

Авторы глубоко благодарны А.В. Борисову за плодотворное обсуждение результатов работы.

Литература

1. Павлова О.С., Френкин А.Р. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 1. С. 58 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 1. P. 69).
2. Павлова О.С., Баскаран Д., Френкин А.Р. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 5. С. 14 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 5. P. 18).
3. Павлова О.С., Френкин А.Р. // ТМФ. 2000. 125. № 2. С. 242.
4. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М: Мир, 1969.

Поступила в редакцию
10.11.00