УДК 530.145

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПРИТЯГИВАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

О. С. Павлова, А. Р. Френкин

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

E-mail: th180@phys.msu.su

Методом интегральных преобразований, связанным с исследованием лапласовских образов волновых функций, найден дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с короткодействующим и дальнодействующим притягивающими потенциалами общего вида. В матричных элементах характеристического уравнения, представленных в виде формального разложения по обратным степеням энергии, произведено суммирование рядов. На примере S-состояния уравнения Шрёдингера с потенциалом Хюльтена продемонстрированы возможности метода. Предложенный метод с успехом может быть использован и для других потенциалов.

Ранее в работах [1–4] был разработан метод интегральных преобразований для определения спектра энергий радиального уравнения Шрёдингера (УШ), в основе которого лежит исследование лапласовских образов волновых функций. При этом задача сводится к приближенному решению характеристического уравнения бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. Были рассмотрены некоторые потенциалы: удерживающий потенциал степенного роста на бесконечности [1, 3, 4] и ядерно-кулоновский [2]. В работе [5] разработан операторный вариант метода интегральных преобразований для притягивающих потенциалов. Настоящая работа является продолжением исследования в этой области и касается целого класса потенциалов общего вида.

Рассмотрим радиальное уравнение Шрёдингера с произвольным гладким притягивающим потенциалом $V(r)$, убывающим на бесконечности:

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

(здесь использована система единиц $\hbar = 2m = 1$, а $l = 0, 1, 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число). Будем считать, что потенциал $V(r) = V(r/a)$ может быть разложен в ряд по степеням $(r/a)^N$, а также может иметь особенности типа $1/r$ и $1/r^2$ при $r = 0$:

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

Как показано в работе [5], дискретный спектр энергий УШ $E = -|E| < 0$ при $A > -(2l+1)^2/4$ определяется из характеристического уравнения

$$\det ||\tilde{\mathcal{B}}_{nk}|| = 0, \quad n, k = 0, 1, \ldots, \qquad (3)$$

где

$$\tilde{\mathcal{B}}_{nk} = \mathcal{B}_{nk} - (n + \delta - \frac{\gamma}{2})\delta_{nk},$$

$$\delta = \frac{1}{2}\left[1 + \sqrt{(2l+1)^2 + 4A}\right], \quad \gamma = \frac{Z}{|E|^{1/2}},$$

$$\mathcal{B}_{nk} = a^2 x^2 \sum_{N=0}^{\infty} b_N \beta_{nk}(N) x^N, \quad x = \frac{1}{2a|E|^{1/2}}, \qquad (4)$$

$$\beta_{nk}(N) = \frac{(-1)^{n+1}k!}{n!} \times \\ \times \sum_{\substack{m=\\ =\max\{0, n-N-1\}}}^{k} \frac{(-1)^m \Gamma(m+N+2\delta+1)\Gamma(m+N+2)}{m!(k-m)!\Gamma(m+2\delta)\Gamma(m+N-n+2)}. \qquad (5)$$

Таким образом, величина $\mathcal{B}_{nk} = \mathcal{B}_{nk}(x)$ в характеристическом уравнении (3) представлена в виде формального разложения по обратным степеням $|E|^{1/2}$. Однако этот ряд может быть сравнительно просто просуммирован только лишь для обобщенного потенциала Юкавы

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/a}}{r}\left[1 + \sum_{i=1}^{I} \alpha_i \left(\frac{r}{a}\right)^i\right]. \qquad (6)$$

Для всех остальных притягивающих потенциалов величины $\mathcal{B}_{nk}(x)$ представляются некоторыми интегральными функциями. Заметим, что в предложенном методе определения дискретного спектра УШ все элементы матрицы $\mathcal{B}_{nk}$ должны быть записаны в замкнутой форме, как результат суммирования ряда (4).

Однако для потенциалов вида (6) можно обойтись и без формального суммирования рядов (4), так как в этом случае задача может быть сведена к исследованию некоторого дифференциального уравнения, из которого может быть непосредственно определена матрица $\mathcal{B}_{nk}(x)$ в замкнутой форме, причем элементы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ выражаются через довольно простые функции переменной x. Например, при $\delta=l+1$ каждый элемент матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ является отношением двух полиномов по x. Таким путем для УШ с потенциалом Юкавы $V=-V_0\,\mathrm{e}^{-r/a}/r$, $V_0>0$, в работе [2] были получены величины $\mathcal{B}_{nk}(x)$, где $n,k=0,\ldots$, и при $l=0$ определен спектр энергий УШ (1) $E_p=-1/(2ax_p)^2$, $p=0,1,\ldots$.

Здесь следует заметить, что матрица $\mathcal{B}_{nk}(x)$ (4) определяется двумя величинами: матрицей $\beta_{nk}(N)$, одинаковой для любых потенциалов $V(r)$, и величиной b_N, характеризующей данный конкретный потенциал. В связи с этим процедура суммирования рядов (4) может быть проведена по сходной схеме для самых разных типов потенциалов.

В настоящей работе мы подробно исследуем способы суммирования рядов (4) и найдем спектр УШ с тремя типичными потенциалами квантовой теории: короткодействующим притягивающим потенциалом юкавского типа $V=-V_0\,\mathrm{e}^{-r/a}$, дальнодействующим потенциалом $V=-V_0/(1+r/a)^2$ и короткодействующим потенциалом Хюльтена $V=V_0/(1-\mathrm{e}^{r/a})$ с кулоновской особенностью при $r=0$. Первый и третий потенциалы интересны тем, что УШ для них при $l=0$ имеет точное решение. Тем самым мы получаем возможность сравнить найденный из уравнения (3) приближенный спектр энергий с точным.

Начнем с рассмотрения УШ с потенциалом $V(r)=-V_0\,\mathrm{e}^{-r/a}$, при этом $b_N=-V_0(-1)^N/\Gamma(N+1)$. Тогда формула (4) принимает вид

$$\mathcal{B}_{nk}=-qx^2\sum_{N=0}^{\infty}(-1)^N x^N\frac{\beta_{nk}(N)}{\Gamma(N+1)},\quad q=V_0a^2. \quad (7)$$

Для решения уравнения (3), в котором следует положить $\gamma=0$ и $\delta=l+1$, нужно сначала просуммировать ряд (7). Исходя из вида матрицы $\beta_{nk}(N)$, это можно сделать с помощью соотношения типа

$$\sum_{N=0}^{\infty}\frac{(-1)^N\Gamma(s+N)}{N!\Gamma(s)}x^N=\frac{1}{(1+x)^s}, \quad (8)$$
$$s=2l+3,\ldots,n+k+2l+3,$$

что приводит к выражениям вида

$$\mathcal{B}_{nk}=qx^2\frac{\mathcal{P}_{n+k}(x)}{(1+x)^{n+k+2l+3}}, \quad (9)$$

где $\mathcal{P}_{n+k}(x)$ — некоторый полином, максимальная степень которого по переменной x равна $n+k$.

Заметим, что суммирование ряда (7) значительно удобнее проводить с помощью вычислений на ЭВМ, а не с помощью формул (8). С этой целью определяются точные значения величины $\beta_{nk}(N)/\Gamma(N+1)$ для $N=0,\ldots,(n+k+2l+3)$. Затем, путем сравнения (при фиксированных значениях чисел n,k) левой и правой частей соотношения

$$-\mathcal{P}_{n+k}(x)=(1+x)^g\sum_{N=0}^{g}(-1)^{N+1}x^N\frac{\beta_{nk}(N)}{\Gamma(N+1)}$$
$$(g=n+k+2l+3),$$

находятся коэффициенты при степенях x в полиноме $\mathcal{P}_{n+k}(x)$, что однозначно определяет значение матриц $\mathcal{B}_{nk}(x)$.

Элементы матрицы $b_{nk}(x)=\mathcal{B}_{nk}(x)/qx^2=\mathcal{P}_{n+k}(x)/(1+x)^{n+k+2l+3}$ для значений $n,k=0,1,2,3$ и $l=0$ приведены ниже:

$$b_{00}(x)=\frac{2}{(1+x)^3},\quad b_{01}(x)=\frac{1}{2}b_{10}=\frac{-1+2x}{(1+x)^4},$$
$$b_{02}(x)=\frac{1}{3}b_{20}=\frac{-2x+2x^2}{(1+x)^5},$$
$$b_{03}(x)=\frac{1}{4}b_{30}=\frac{-3x^2+2x^3}{(1+x)^6},$$
$$b_{11}(x)=\frac{4}{(1+x)^5}(1-x+x^2),$$
$$b_{12}(x)=\frac{2}{3}b_{21}=\frac{2}{(1+x)^6}(-1+4x-3x^2+2x^3),$$
$$b_{13}(x)=\frac{2}{3}b_{31}=\frac{2}{(1+x)^7}(-3x+6x^2-4x^3+2x^4),$$
$$b_{22}(x)=\frac{6}{(1+x)^7}(1-2x+4x^2-2x^3+x^4),$$
$$b_{23}(x)=\frac{3}{4}b_{32}=\frac{4}{(1+x)^8}(-1+6x-9x^2-12x^3-5x^4+2x^5),$$
$$b_{33}=\frac{8}{(1+x)^9}(1-3x+9x^2-9x^3+9x^4-3x^5+x^6). \quad (10)$$

Спектр задачи с произвольной точностью, увеличивающейся с ростом ранга матрицы $\mathcal{B}_{nk}$, определяется из характеристического уравнения (3). Например, при $q=5.13562$ и ранге матрицы $K=7$ отличие от точного значения $x=0.5$ составляет $2\cdot10^{-5}$ [5].

Рассмотренный пример показывает, что ряд по степеням x в матрице $\mathcal{B}_{nk}(x)$ может быть просуммирован и сведен к отношению двух полиномов по x при $\delta=l+1$ лишь при наличии в знаменателе величины b_N множителя, полностью компенсирующего Γ-функцию в матрице $\beta_{nk}(N)$.

В противном случае, при отсутствии такой компенсации, расходящуюся при больших значениях N величину $b_N\beta_{nk}(N)$ следует записать в виде

$$b_N\beta_{nk}(N)=B(N)P_m(N),$$

где $B(N)$ — возрастающая с ростом N (сильнее, чем степенная функция от N) величина, одинаковая для всех значений $n, k = 0, 1, \ldots$, а P_m — полином по N некоторой степени $m = m(n, k)$, разный для различных значений чисел n, k. Если для величин $B(N)$ удается найти интегральное представление вида

$$B(N) = \int_0^\infty K(y) y^N dy, \tag{11}$$

где $K(y)$ — некоторое ядро, ряд (4) для матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ может быть просуммирован, и тогда задача нахождения спектра решена полностью. Подобные интегральные представления существуют для ряда величин $B(N)$, соответствующих типичным квантовомеханическим и ядерным потенциалам [6].

Суммирование рядов (4) при отсутствии полной компенсации Γ-функции в матрице $\beta_{nk}(N)$ продемонстрируем на примере типичного дальнодействующего притягивающего потенциала

$$V(r) = -\frac{V_0}{(1 + r/a)^2},$$

для которого $b_N = V_0(-1)^{N+1}(N+1)$. Тогда формула (4) для матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ принимает вид

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = -qx^2 \sum_{N=0}^\infty (-1)^N \Gamma(N+2) x^N \frac{\beta_{nk}(N)}{\Gamma(N+1)}.$$

Воспользовавшись интегральным представлением $\Gamma(N+2)$-функции, получаем

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = -qx^2 \sum_{N=0}^\infty (-1)^N \frac{\beta_{nk}(N)}{\Gamma(N+1)} x^N \int_0^\infty \mathrm{e}^{-y}\, y^{N+1} dy. \tag{12}$$

Изменив в (12) порядок суммирования и интегрирования [7], имеем:

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = -q \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t/x}\, t dt \sum_{N=0}^\infty (-1)^N t^N \frac{\beta_{nk}(N)}{\Gamma(N+1)}. \tag{13}$$

Входящая в формулу (13) сумма по N была получена ранее (см. (9)), только в ней следует заменить переменную x на t. Тогда для матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$ окончательно получаем

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = q \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t/x}\, t dt \frac{P_{n+k}(t)}{(1+t)^{n+k+2l+3}},$$

где величины $b_{nk} = P_{n+k+2}(t)/(1+t)^{n+k+2l+3}$ приведены в (10) (с заменой x на t). Спектр энергий S-состояния УШ $|E_p| = 1/(2ax_p)^2$ определяется из характеристического уравнения (3), где следует положить $\gamma = 0$, $\delta = 1$. Процедура вычисления величин x_p быстро сходится с увеличением ранга матрицы $\mathcal{B}_{nk}(x)$, что было показано в наших предыдущих работах [2–4].

Продемонстрируем теперь возможности операторного варианта метода интегральных преобразований на примере УШ с короткодействующим потенциалом Хюльтена

$$V(r) = -\frac{V_0}{e^{r/a} - 1}, \quad V_0 > 0. \tag{14}$$

Уравнение Шрёдингера (1) с таким потенциалом при $l = 0$ имеет точное решение, и уровням энергии соответствуют значения параметра [8]:

$$x_p = \frac{p+1}{q - (p+1)^2} > 0, \quad p = 0, 1, \ldots, \tag{15}$$

с которыми можно сравнить приближенные решения характеристического уравнения (3). Воспользуемся разложением [9]

$$\frac{y}{\mathrm{e}^y - 1} = \sum_{m=0}^\infty \frac{B_m}{m!} y^m \quad (B_m \text{— числа Бернулли})$$

и запишем потенциал (14) в виде

$$V(r) = -\frac{aV_0}{r} - V_0 \sum_{m=0}^\infty \frac{B_{m+1}}{\Gamma(m+1)} \left(\frac{r}{a}\right)^m,$$

откуда следует, что $Z = aV_0$, $\gamma = 2qx$. Учитывая, что $B_0 = 1$, $B_1 = -1/2$, а в следующих членах разложения отличны от нуля только числа Бернулли с четным индексом, величину $\mathcal{B}_{nk}(x)$ можно записать в виде

$$\mathcal{B}_{nk}(x) = \frac{1}{2} qx^2 \beta_{nk}(0) - qx^3 \sum_{N=0}^\infty B_{2N+2} x^{2N} \frac{\beta_{nk}(2N+1)}{\Gamma(2N+3)}. \tag{16}$$

Если воспользоваться интегральным представлением для чисел Бернулли [9]

$$B_{2N} = \pi(-1)^{N+1} \int_0^\infty \frac{y^{2N}}{\mathrm{sh}^2(\pi y)} dy,$$

величины $\tilde{\mathcal{B}}_{nk}$ в уравнении (3) могут быть записаны следующим образом:

$$\tilde{\mathcal{B}}_{nk}(x) = -(n + \delta - qx)\delta_{nk} + \frac{1}{2} qx^2 \beta_{nk}(0) -$$

$$-q\pi \int_0^\infty \frac{t^2 dt}{\mathrm{sh}^2(\pi t/x)} \sum_{N=0}^\infty (-1)^N t^{2N} \frac{\beta_{nk}(2N+1)}{\Gamma(2N+3)}.$$

Входящую сюда сумму по N можно записать подобно формуле (9):

$$\sum_{N=0}^{\infty}(-1)^N t^{2N}\frac{\beta_{nk}(2N+1)}{\Gamma(2N+3)}=\frac{\tilde{P}_{n+k+1}(t^2)}{(1+t^2)^{n+k+2\delta}},$$

где $\tilde{P}_{n+k+1}(t^2)$ — некоторый полином по t^2 степени $n+k+1$ (или ниже).

Приведем несколько первых функций $\tilde{\mathcal{B}}_{nk}(x)$ при $\delta=1$ $(l=0)$:

$$\tilde{\mathcal{B}}_{00}(x)=-1+qx-qx^2+q\pi\int\limits_0^{\infty}\frac{t^2\,dt}{\mathrm{sh}^2(\pi t/x)}\frac{3+t^2}{(1+t^2)^2},$$

$$\tilde{\mathcal{B}}_{01}(x)=\frac{1}{2}qx^2-q\pi\int\limits_0^{\infty}\frac{t^2\,dt}{\mathrm{sh}^2(\pi t/x)}\frac{3-t^2}{(1+t^2)^3},$$

$$\tilde{\mathcal{B}}_{10}(x)=2\tilde{\mathcal{B}}_{01}(x),$$

$$\tilde{\mathcal{B}}_{11}(x)=-2+qx-2qx^2+ +q\pi\int\limits_0^{\infty}\frac{t^2\,dt}{\mathrm{sh}^2(\pi t/x)}\frac{12-7t^2+6t^4+t^6}{(1+t^2)^4}.$$

По предложенной схеме был проведен расчет величин x_p (см. (15)) для нахождения первых трех уровней энергии УШ (1) с потенциалом Хюльтена при двух значениях параметра: $q=21$ и $q=101$. При $q=21$ точное решение (15) дает значения $x_0=0.05$, $x_1=0.1176$, $x_2=0.25$. В нулевом приближении уравнение (3), приобретающее вид $\tilde{\mathcal{B}}_{00}=0$, имеет решение $x_0=0.05006$. В первом приближении спектральное уравнение, имеющее вид $\tilde{\mathcal{B}}_{00}\tilde{\mathcal{B}}_{11}-2\tilde{\mathcal{B}}_{01}^2=0$, дает для основного состояния значение $x_0=0.05$ и для первого возбужденного состояния значение $x_1=0.1235$. Во втором приближении $x_0=0.05$, $x_1=0.1181$. При параметре $q=101$ (кулоноподобная задача) формула (15) приводит к следующим значениям: $x_0=0.01$, $x_1=0.02062$, $x_2=0.03261$. Характеристическое уравнение (3) уже в нулевом приближении имеет решение $x_0=0.0100005$. В первом приближении его решения: $x_0=0.01$, $x_1=0.02064$; во втором приближении: $x_0=0.01$, $x_1=0.2062$, $x_2=0.03294$.

Приведенный пример демонстрирует быструю сходимость процедуры нахождения корней уравнения (3) при увеличении ранга матрицы характеристического уравнения (подобную сходимости результатов в случае УШ с потенциалом Юкавы [2]).

Таким же образом может быть решено характеристическое уравнение (3) и для других притягивающих потенциалов, например, гауссовского потенциала $V=-V_0\,\mathrm{e}^{-(r/a)^2}$, потенциала $V=-V_0/\mathrm{ch}(r/a)$ и ряда других.

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. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. №6. С. 20 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 6. P. 27).
5. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. №2. С. 57 (Moscow University Phys. Bull. 2001. No. 2. P. 66).
6. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. М: Наука, 1969.
7. *Харди Г.* Расходящиеся ряды. М: ИЛ, 1951.
8. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. М: Мир, 1969.
9. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М: Наука, 1973.

Поступила в редакцию
24.05.01