

ПРИБЛИЖЕННЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ГАУССОВЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Ю.А. Гришечкин, А.В. Павленко

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

APPROXIMATE ANALYTICAL METHOD FOR SOLVING THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH THE GAUSSIAN POTENTIAL IN THE MOMENTUM REPRESENTATION

Yu.A. Grishechkin, A.V. Paulenko

F. Scorina Gomel State University

Предложен приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера с гауссовым потенциалом в импульсном представлении. Идея метода заключается в представлении искомой волновой функции в виде суперпозиции волновых функций трехмерного гармонического осциллятора в импульсном представлении. Решения найдены в случае связанных состояний.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, волновая функция, потенциал Гаусса, гармонический осциллятор, связанные состояния.

The approximate analytical method is proposed for solving the Schrödinger equation with the Gaussian potential in the momentum representation. The idea of the method is to represent the desired wave function in the form of a superposition of wave functions of the three-dimensional harmonic oscillator in the momentum representation. Solutions are found in the case of coupled states.

Keywords: Schrödinger equation, wave function, Gaussian potential, harmonic oscillator, coupled states.

Введение

Одной из основных проблем квантовой механики является нахождение энергий связанных состояний частиц для потенциалов взаимодействия различной конфигурации. Основным инструментом для решения этой задачи в нерелятивистском случае является уравнение Шредингера. В трехмерном пространстве это уравнение обычно приводят к парциальным уравнениям путем разложения всех входящих в него величин по сферическим гармоникам, зависящим от угловых переменных. Решение парциальных уравнений, как правило, является более простой задачей, чем решение трехмерного уравнения.

В импульсном представлении парциальное уравнение Шредингера для фиксированного значения орбитального квантового числа $l = 0, 1, 2, \dots$ в случае связанных состояний имеет вид [1]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \psi_l(k) = \\ = - \frac{4\pi k}{2l+1} \int_0^\infty k' a_l(k, k') \psi_l(k') dk'. \end{aligned} \quad (0.1)$$

В уравнении (0.1) m – масса частицы, \hbar – введенная постоянная Планка, k – модуль импульса частицы, $\psi_l(k)$ – парциальная волновая функция, $a_l(k, k')$ – парциальный потенциал в

импульсном представлении, $E < 0$ – энергия частицы.

Для моделирования короткодействующих взаимодействий в квантовой теории широко используется потенциал Гаусса

$$V(r) = -V_0 \exp(-ar^2), \quad (0.2)$$

где $V_0 > 0$ – глубина потенциала, $a > 0$ – параметр, характеризующий его ширину.

Решение спектральной задачи с потенциалом (0.2) в координатном представлении было выполнено различными приближенными аналитическими и численными методами [2]–[9]. В импульсном представлении эта задача была решена в работе [10].

Известно, что релятивистские двухчастичные уравнения квантовой теории поля, такие как уравнение Логанова – Тавхелидзе [11] или уравнение Кадышевского [12], в импульсном представлении являются интегральными. Поэтому в данной работе мы обсуждаем метод приближенного аналитического решения уравнения Шредингера в импульсном представлении с целью его возможного обобщения на релятивистский случай.

1 Метод решения

Парциальный потенциал $a_l(k, k')$ в интегральном уравнении (0.1) определяется по формуле [1]

$$a_l(k, k') = \frac{2l+1}{(2\pi)^2} \int_{-1}^1 dx P_l(x) \times \left[\int_0^\infty r V(r) \frac{\sin(\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk'xr})}{\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk'x}} dr \right], \quad (1.1)$$

где $P_l(x)$ – полином Лежандра [13]. Подстановка (0.2) в формулу (1.1) и вычисление интегралов приводит к выражению

$$a_l(k, k') = -V_0 \frac{2l+1}{8\pi a} \frac{1}{\sqrt{kk'}} \exp\left(-\frac{k^2 + k'^2}{4a}\right) I_{l+1/2}\left(\frac{kk'}{2a}\right), \quad (1.2)$$

в котором $I_{l+1/2}(z)$ – модифицированная функция Бесселя [13].

Приведем уравнение (0.1) с потенциалом (1.2) к безразмерному виду. Для этого выполним замену переменных и энергии по формулам

$$k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \rho, \quad k' = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \rho', \quad E = -V_0 \lambda, \quad (1.3)$$

где ρ и ρ' – безразмерные переменные, $\lambda > 0$ – безразмерный спектральный параметр. С учетом (1.3) представим интегральное уравнение (0.1) с потенциалом (1.2) в безразмерных переменных в виде

$$(\rho^2 + \lambda)\psi_l(\rho) = \frac{1}{2q} \int_0^\infty \sqrt{\rho\rho'} \times \exp\left(-\frac{\rho^2 + \rho'^2}{4q}\right) I_{l+1/2}\left(\frac{\rho\rho'}{2q}\right) \psi_l(\rho') d\rho', \quad (1.4)$$

При формулировке уравнения (1.4) введено обозначение $q = a \hbar^2 / (2mV_0)$ и выполнено переобозначение волновой функции $\psi_l(k) \Rightarrow \psi_l(\rho)$.

Решение уравнения (1.4) будем искать в форме

$$\psi_l(\rho) = \sum_{\alpha=0}^M C_\alpha \phi'_\alpha(\rho), \quad \phi'_\alpha(\rho) = N'_\alpha \rho^{l+1} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2}\right) L_{\alpha}^{l+1/2}(\rho^2), \quad (1.5)$$

где $\phi'_\alpha(\rho)$ – парциальные волновые функции трехмерного гармонического осциллятора в импульсном представлении,

$$N'_\alpha = \sqrt{\alpha! / \Gamma(l+3/2 + \alpha)}$$

– нормирующий множитель, $\Gamma(z)$ – гамма-функция, $L_{\alpha}^{l+1/2}(z)$ – обобщенный полином Лагерра [13], C_α – неизвестные постоянные коэффициенты. Подставив сумму (1.5) в интегральное уравнение (1.4), умножив полученное равенство на $\phi'_\beta(\rho)$ и проинтегрировав его на полупрямой

$\rho \in [0, \infty)$, мы получим систему линейных однородных алгебраических уравнений для коэффициентов

$$\sum_{\alpha=0}^M C_\alpha (T_{\alpha\beta}^l - I_{\alpha\beta}^l) = C_\beta \lambda. \quad (1.6)$$

В системе уравнений (1.6) использованы следующие обозначения для интегралов:

– при $\alpha, \beta > 1$

$$I_{\alpha\beta}^l = \int_0^\infty \rho^2 \phi'_\beta(\rho) \phi'_\alpha(\rho) d\rho = N'_\alpha N'_\beta \left[g(\alpha) \delta_{\alpha,\beta} - g(\alpha) \delta_{\alpha,\beta-1} - g(\beta) \delta_{\alpha-1,\beta} + g(\alpha-1) \delta_{\alpha-1,\beta-1} \right]; \quad (1.7)$$

– при $\alpha = 0$ или $\beta = 0$

$$I_{\alpha\beta}^l = \int_0^\infty \rho^2 \phi'_\beta(\rho) \phi'_\alpha(\rho) d\rho = N'_\alpha N'_\beta \frac{\Gamma(l+5/2) \Gamma(l+\alpha+\beta+3/2)}{\beta! \alpha! \Gamma(l+3/2)} \times {}_2F_1\left(-\alpha-\beta, l+\frac{5}{2}, l+\frac{3}{2}; 1\right);$$

а также

$$T_{\alpha\beta}^l = \int_0^\infty \phi'_\beta(\rho) \left[\int_0^\infty \rho' a_l(\rho, \rho') \phi'_\alpha(\rho') d\rho' \right] d\rho = N'_\alpha N'_\beta \frac{(-1)^{\alpha-\beta} \Gamma(\alpha+\beta+l+3/2) q^{\alpha+\beta}}{\alpha! \beta! (q+1)^{\alpha+\beta+l+3/2}} \times {}_2F_1\left(-\alpha, -\beta, -\alpha-\beta-l-\frac{1}{2}; 1-\frac{1}{q^2}\right),$$

где

$$g(\alpha) = \Gamma(5/2 + \alpha + l) / \alpha!,$$

${}_2F_1(a, b, c; z)$ – гипергеометрический ряд, $\delta_{i,j}$ – дельта-символ Кронекера [13]. Значения интегралов (1.7) мы взяли из справочника [14].

2 Анализ полученных результатов

Таким образом, задача о решении интегрального уравнения (0.1) с ядром (1.2) была сведена к задаче о нахождении собственных значений λ линейной алгебраической системы однородных уравнений (1.6). Результаты нахождения λ при разных значениях орбитального квантового числа l приведены в таблице 2.1 для $q = 0,005$.

Графики волновых функций, построенные с использованием суммы (1.5), для $l = 0$ и $l = 7$ показаны на рисунке 2.1.

Отметим, что с ростом значения l для сохранения точности необходимо увеличивать количество слагаемых в сумме (1.5). Мы полагали при построении каждого графика на рисунке 2.1, а), что в сумме (1.5) $M = 201$, а при построении графика на рисунке 2.1, б) – $M = 351$.

Отметим, что в работе [10] был предложен приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера с использованием суммы, аналогичной (1.5) в координатном представлении. Кроме того, в этой работе уравнение (0.1) было решено методом квадратур (1.1). Для сравнения полученных результатов представим их в таблице 2.2 при $q = 0,005$.

В третьем и четвертом столбце таблицы 2.2 записан результат приближенного аналитического решения уравнения Шредингера в импульсном и координатном представлении соответственно, а в пятом столбце – результат численного решения интегрального уравнения (1.4), при этом N – количество шагов в квадратурной формуле. Проведя анализ результатов, полученных разными способами, можно сделать вывод об эффективности рассматриваемого здесь метода.

Таблица 2.1 – Собственные значения λ

l	n	M		
		150	300	600
0	1	0,797388006687952	0,797388006692116	0,797388006692110
	2	0,553887443391449	0,553887457151782	0,553887457151758
	3	0,345007609415862	0,345015684742383	0,345015684819089
	4	0,174233548021766	0,175228714966842	0,175229048241785
1	1	0,668962195973668	0,668962196177256	0,668962196177252
	2	0,442295536034096	0,442295685076295	0,442295685076914
	3	0,252137477936358	0,252234946770784	0,252234952063515
	4	0,099207509451286	0,104599176941280	0,104611683610667
5	1	0,214926842418461	0,214944363991372	0,214944365068270
	2	0,064772560696915	0,067320876652746	0,067328054279795
6	1	0,118619410013109	0,118768189153254	0,118768251153496
7	1	0,0303391164334095	0,031312330222877	0,031315796088782

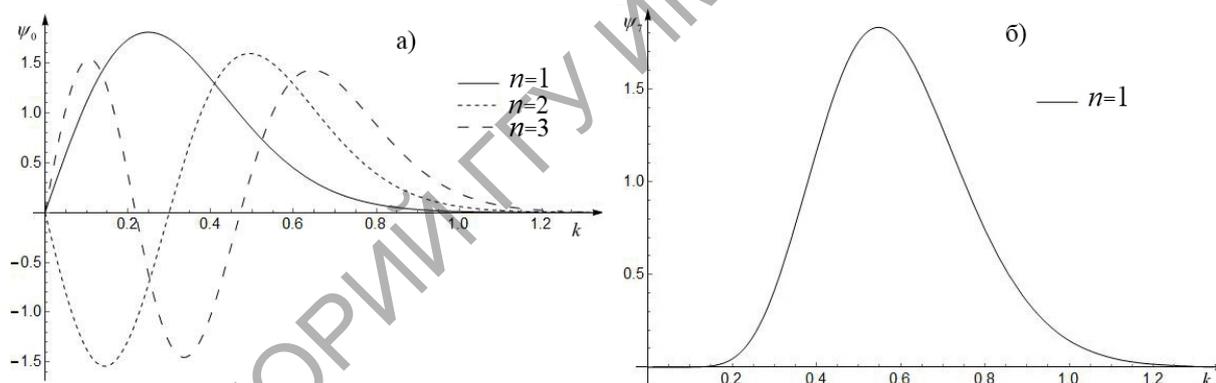


Рисунок 2.1 – Волновые функции: а) для $l = 0$; б) для $l = 7$

Таблица 2.2 – Собственные значения λ , найденные различными методами

l	n	$M = 150$	$M = 300$ [10]	$N = 90$ [10]
0	1	0,797388006687952	0,797388006692130	0,797388006692111
	2	0,553887443391449	0,553887457151760	0,553887457151759
	3	0,345007609415862	0,345015684742373	0,345015684819085
	4	0,174233548021766	0,175228714966775	0,175229048243894
1	1	0,668962195973668	0,668962196177320	0,668962196177261
	2	0,442295536034096	0,442295685076343	0,442295685076918
	3	0,252137477936358	0,252234946770758	0,252234952063518
	4	0,099207509451286	0,104599176941210	0,104611684774313
5	1	0,214926842418461	0,214944363991333	0,214944365068266
	2	0,064772560696915	0,067320876652722	0,067328056076143
6	1	0,118619410013109	0,118768189153335	0,118768251154786
7	1	0,0303391164334095	0,031312330222893	0,031315798725289

Заключение

В данной работе был предложен приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера в импульсном представлении для связанных состояний с гауссовым потенциалом. Суть метода состоит в представлении неизвестной волновой функции в виде суммы, содержащей волновые функции трехмерного гармонического осциллятора в импульсном представлении. Таким образом, задача о решении интегрального уравнения была сведена к системе линейных алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов. В процессе решения был найден энергетический спектр и волновые функции связанных состояний в некоторых частных случаях. Сравнение полученных результатов с решениями данной задачи, найденными другими способами в координатном и импульсном представлении, продемонстрировало эффективность предложенного метода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – 3-изд. – Москва: ЛКИ, 2010. – Т. 1. – 344 с.
2. Stephenson, G. Eigenvalues of the Schrodinger equation with a Gaussian potential / G. Stephenson // J. Phys. A: Math Gen. – 1977. – Vol. 10. – L229–L232.
3. Lai, C.S. On the Schrodinger equation for the Gaussian potential – $A\exp(-\lambda r^2)$ / C.S. Lai // J. Phys. A: Math Gen. – 1983. – Vol. 16. – L181–L185.
4. Crandale, R.E. Fast eigenvalue algorithm for central potentials / R.E. Crandale // J. Phys. A: Math Gen. – 1983. – Vol. 16. – L395–L399.
5. Chatterjee, A. $1/N$ expansion for Gaussian potential / A. Chatterjee // J. Phys. A: Math. Gen. – 1985. – Vol. 18. – P. 2403–2408.
6. Gomez, S.S. Few-electron semiconductor quantum dots with Gaussian confinement / S.S. Gomez, R.H. Romero // Central Eur. J. Phys. 2009. – Vol. 7. – P. 12–21.
7. Koksals, K. A simple analytical expression for bound state energies for an attractive Gaussian confining potential / K. Koksals // Phys. Scr. – 2012. – Vol. 86. – P. 035006.
8. Кудряшов, В.В. Решение радиального уравнения Шредингера для потенциала Гаусса в модифицированном ВКБ-приближении / В.В. Кудряшов, А.В. Баран // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2013. – Т. 57, № 5. – С. 43–48.
9. Mutuk, H. Asymptotic iteration and variational methods for Gaussian potential / H. Mutuk // Pramana – J. Phys. – 2019. – P. 66.
10. Гришечкин, Ю.А. Об одном приближенном аналитическом методе решения уравнения Шредингера с гауссовым потенциалом / Ю.А. Гришечкин, А.В. Павленко, В.Н. Капшай // Проблемы физики, математики и техники. – 2019. – № 4 (41). – С. 7–10.
11. Logunov, A.A. Quasi-Optical Approach in Quantum Field Theory / A.A. Logunov, A.N. Tavkhelidze // Nuovo Cimento. – 1963. – Vol. 29, № 2. – P. 380–399.
12. Кадышевский, В.Г. Трёхмерная формулировка релятивистской проблемы двух тел / В.Г. Кадышевский, Р.М. Мир-Касимов, Н.Б. Скачков // ЭЧАЯ. – 1972. – Т. 2, № 3. – С. 635–690.
13. Арфкен, Г. Математические методы в физике / Г. Арфкен. – Москва: Атомиздат, 1970. – 712 с.
14. Градштейн, И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и производных / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – Изд. 7-е. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 1232 с.

Поступила в редакцию 04.06.2020.