УДК 539.12

В. В. Андреев[1], К. С. Бабич[1], А. Ф. Крутов[2]

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ВАРИАЦИОННЫХ ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

[1]Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины, ул. Советская, 109, 246019, Гомель, Беларусь
vik.andreev@gsu.by
[2] Самарский университет, ул. Академика Павлова, 1, 443011, Самара, Россия
krutov@ssau.ru

Одной из основных задач квантовой механики является решение уравнения вида

$$H\Phi=\left[T\left(\mathbf{k}^2\right)+V\left(\mathbf{r}\right)\right]\Phi=E\Phi\,, \tag{1}$$

которое описывает систему двух частиц с энергией E, взаимодействие которых определяется потенциалом $V\left(\mathbf{r}\right)$. Наиболее распространенным методом решения уравнения (1) является линейный вариационный метод. В этом подходе решение уравнения (1) сводится к задаче на собственные значения

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\ell m} a_{n\ell m}\left\langle \Psi_{n'\ell' m'}\left|H\right|\Psi_{n\ell m}\right\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\ell m} a_{n\ell m}\left\langle H\right\rangle_{n'\ell' m',n\ell m}=E\,a_{n'\ell' m'} \tag{2}$$

с использованием разложения исходной волновой функции (ВФ) Φ по некоторому полному набору состояний “пробных” ВФ – Ψ:

$$\Phi=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\ell m} a_{n\ell m}\Psi_{n\ell m}\,. \tag{3}$$

Для приближенного решения уравнения ряд (3) обрывают на некотором значении N и получают задачу на собственные значения

$$\sum_{n=0}^{N}\sum_{\ell m} a_{n\ell m}\left\langle H\right\rangle_{n'\ell' m',n\ell m}=\hat{E}\,a_{n'\ell' m'} \tag{4}$$

для матрицы $\left\langle H\right\rangle$. Решение системы уравнений (4) позволяет найти верхние границы $\hat{E}$ энергетического спектра E для (1). Элементы матрицы $\left\langle H\right\rangle$ с использованием пробных ВФ вида

$$\Psi_{n\ell m}(\mathbf{r})=\psi_{n\ell}(r,\beta)Y_{\ell m}(\Omega_r)\,,\ \ \bar{\Psi}_{n\ell m}(\mathbf{k})=\bar{\psi}_{n\ell}(k,\beta)Y_{\ell m}(\Omega_k)\,,\ \ d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi \tag{5}$$

представляют интегралы вида

$$\left\langle H\right\rangle_{n'\ell' m',n\ell m}=\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}\int_0^{\infty}\bar{\psi}^{*}_{n'\ell'}\left(k\right)T\left(\mathbf{k}^2\right)\bar{\psi}_{n\ell}\left(k\right)k^2dk+\int\Psi^{*}_{n'\ell' m'}\left(\mathbf{r}\right)V\left(\mathbf{r}\right)\Psi_{n\ell m}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{6}$$

Здесь $\bar{\Psi}_{n\ell m}(\mathbf{k})$ фурье-образ ВФ $\Psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$. Очевидно, что наиболее точного решения уравнения (1) необходимы матричные элементы, где n и n' достаточно велико. Поэтому важно найти аналитические выражения для интегралов входящих в (6), что и позволить находить энергетический спектр с высокой точностью.

Целью данной работы является расчет матричных элементов для потенциалов вида

$$V\left(\mathbf{r}\right)=r^{p}f(\Omega_r),\quad (p>-2)\,, \tag{7}$$

где функция $f(\Omega_r)$ представима в виде

$$f(\Omega_r)=\sum_{\ell=0}^{k}\sum_{m=-\ell}^{\ell} d_{\ell m}Y_{\ell m}(\Omega_r)\,, \tag{8}$$

используя радиальные пробные ВФ псевдокулоновского типа

$$\psi_{n\ell}^{C}(r,\beta)=N_{n\ell}^{C}\left(2\beta\right)^{3/2}(2\beta r)^{\ell}e^{-\beta r}L_{n}^{2\ell+2}(2\beta r)\,,\ \ N_{n\ell}^{C}=\sqrt{\frac{n!}{(n+2\ell+2)!}}\,. \tag{9}$$

Для пробных ВФ псевдокулоновского типа (9) потенциальная часть уравнения (6) с потенциалом (7) запишется в виде

$$<V(\mathbf{r})>_{n'\ell'm',n\ell m}=<r^{p}>_{n'\ell',n\ell}<f(\Omega_r)>_{\ell'm',\ell m}\,, \tag{10}$$

где

$$<r^{p}>_{n'\ell',n\ell}=\int_{0}^{\infty}\psi_{n'\ell'}^{C}(r,\beta)r^{p}\psi_{n\ell}^{C}(r,\beta)r^{2}dr=$$

$$=N_{n\ell}^{C}N_{n'\ell'}^{C}\left(2\beta\right)^{\ell+\ell'+3}\int_{0}^{\infty}dr\,r^{\ell+\ell'+2+p}\,e^{-2\beta r}\,L_{n}^{2\ell+2}(2\beta r)L_{n'}^{2\ell'+2}(2\beta r)\,, \tag{11}$$

$$<f(\Omega_r)>_{\ell'm',\ell m}=\int d\Omega_r Y_{\ell'm'}^{*}(\Omega_r)\,f(\Omega_r)Y_{\ell m}(\Omega_r)=$$

$$=\sum_{\tilde{\ell}=0}^{k}\sum_{\tilde{m}=-\tilde{\ell}}^{\tilde{\ell}} d_{\tilde{\ell}\tilde{m}}\sqrt{\frac{\left(2\ell+1\right)\left(2\tilde{\ell}+1\right)}{4\pi\left(2\ell'+1\right)}}C_{000}^{\ell\tilde{\ell}\ell'}C_{m\tilde{m}m'}^{\ell\tilde{\ell}\ell'}\,. \tag{12}$$

После замены переменных $z=2\beta r$ в (11) приходим к выражению

$$<r^{p}>_{n'\ell',n\ell}=\frac{N_{n\ell}^{C}N_{n'\ell'}^{C}}{\left(2\beta\right)^{p}}\int_{0}^{\infty}dz\,z^{\ell+\ell'+2+p}\,e^{-z}\,L_{n}^{2\ell+2}(z)L_{n'}^{2\ell'+2}(z)\,. \tag{13}$$

Далее используя соотношение Чу-Вандермонде (Chu-Vandermonde) [1],

$$L_{n-1}^{\alpha}(z)=\sum_{j=1}^{n}\frac{(\alpha-\beta)_{n-j}}{(n-j)!}\,L_{j-1}^{\beta}(z), \tag{14}$$

где $(z)_N$ –символ Похгаммера и соотношение ортогональности для полиномов Лагерра получаем общее соотношение для интеграла (11)

$$<r^{p}>_{n'\ell',n\ell}=\frac{1}{\left(2\beta\right)^{p}}\sqrt{\frac{n'!\,n!}{(n'+2\ell'+2)!(n+2\ell+2)!}}\times$$

$$\times\sum_{j=1}^{n+1}\frac{\left(\ell-\ell'-p\right)_{n+1-j}\left(\ell'-\ell-p\right)_{n'+1-j}}{\left(n+1-j\right)!\left(n'+1-j\right)!}\frac{\Gamma\left(\ell+\ell'+p+2+j\right)}{\left(j-1\right)!}\,,\ n\le n'\,. \tag{15}$$

Формула (15) обобщает соотношения работы [2], где вычисления были проведены для частных случаев с $p=-1$, $p=1$ и $\ell=\ell'$.

[1] Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – 4-е переработанное. – Москва: Гос.изд-во физ.-мат. литературы, 1963. – 1110 .

[2] Fulcher, L. P. Energies of quark - anti-quark systems, the Cornell potential, and the spinless Salpeter equation / L. P. Fulcher, Z. Chen, K. C. Yeong // Phys. Rev. – 1993. – Vol. D47. – P. 4122–4132.