

А. Д. Кулинич, В. И. Дубовик
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА В КООРДИНАТНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ В СЛУЧАЕ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Введение. Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера записывается в следующем виде [1]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x), \quad (1)$$

где $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, $\hbar = h/2\pi$;

m – масса частицы;

$V(x)$ – потенциальная энергия, зависящая от координаты x ;

$\psi(x)$ – волновая функция;

E – энергия частицы.

Пусть потенциальная энергия имеет вид:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} U(x); \quad U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases} \quad (2)$$

Рассмотрим случай связанных состояний, которым соответствуют отрицательные значения энергии:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \beta^2. \quad (3)$$

Используя выражение (3) для энергии E , уравнение Шрёдингера перепишем в виде

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \beta^2 \right) \psi(x) = U(x) \psi(x). \quad (4)$$

Интегральное уравнение для связанных состояний. Функция Грина $G(x)$ уравнения Шрёдингера для связанных состояний [1] определяется так, что

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \beta^2 \right) G(x) = \delta(x). \quad (5)$$

Это уравнение можно решить методом преобразования Фурье, в результате чего получим интегральное представление функции Грина:

$$G(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{-1}{k^2 + \beta^2} dk. \quad (6)$$

С помощью метода замыкания контура для вычисления интеграла Фурье, леммы Жордана и теоремы Коши о вычетах, получаем:

$$G(x-y) = \frac{-1}{2\beta} e^{-\beta|x-y|} = \begin{cases} \frac{-1}{2\beta} e^{-\beta x} e^{\beta y}, & x \geq y, \\ \frac{-1}{2\beta} e^{\beta x} e^{-\beta y}, & x \leq y. \end{cases} \quad (7)$$

Теперь, с использованием этой функции Грина уравнение (4) можно записать в виде интегрального уравнения

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x)U(y)\psi(y)dy. \quad (8)$$

Четные решения интегрального уравнения. Целью данной работы является использование интегрального уравнения (8) для нахождения волновых функций и дискретных уровней энергии. Учитывая явный вид функции Грина (7) и симметричный вид потенциала (2) предположим, что решением (8) при $|y| < a$ является следующая чётная комбинация экспонент:

$$\psi(y) = A_2 \cos(k_2 y) = A_2 \frac{1}{2} (e^{ik_2 y} + e^{-ik_2 y}); \quad -a \leq y \leq a. \quad (9)$$

Тогда, используя (7) и (8), получим, что для всех x волновая функция имеет вид

$$\psi(y) = \int_{-a}^a \left(\frac{-1}{2\beta} e^{-\beta|x-y|} \right) (-U_0) A_2 \frac{1}{2} (e^{ik_2 y} + e^{-ik_2 y}) dy. \quad (10)$$

Этот интеграл при $-a \leq x \leq a$ должен давать волновую функцию (9). Это может привести к необходимости выполнения некоторых условий. Упростим интеграл (10):

$$\psi(x) = \frac{1}{4\beta} U_0 A_2 \left[\int_{-a}^a e^{-\beta|x-y|} e^{ik_2 y} dy + \int_{-a}^a e^{-\beta|x-y|} e^{-ik_2 y} dy \right]. \quad (11)$$

Поскольку при $|x| < a$ (11) должно давать ответ (9), рассмотрим вначале случай $|x| < a$. Вычисляя интегралы в (11), получаем

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{U_0 A_2}{4\beta} \left(\frac{1}{\beta + ik_2} (e^{ik_2 x} - e^{-\beta x} e^{-(\beta + ik_2)a} - e^{\beta x} e^{-(\beta + ik_2)a} + e^{-ik_2 x}) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\beta - ik_2} (-e^{\beta x} e^{-(\beta + ik_2)a} + e^{ik_2 x} + e^{-ik_2 x} - e^{-\beta x} e^{-(\beta - ik_2)a}) \right). \end{aligned}$$

Упрощая, это можно привести к следующему виду:

$$\psi(x) = \frac{U_0 A_2}{\beta^2 + k_2^2} \cos(k_2 x) + \frac{U_0 A_2}{4\beta} (e^{\beta x} + e^{-\beta x}) \left(\frac{-e^{-(\beta + ik_2)a}}{\beta + ik_2} + \frac{-e^{-(\beta + ik_2)a}}{\beta - ik_2} \right). \quad (12)$$

Это выражение, полученное при $|x| < a$, должно совпадать с $\psi(x)$, определяемым формулой (9). Для того, чтобы такое совпадение состоялось, необходимо чтобы выполнялись следующие условия:

$$\begin{cases} \frac{U_0}{\beta^2 + k_2^2} = 1, \\ \frac{U_0}{4\beta} (e^{\beta x} + e^{-\beta x}) \left(\frac{-e^{-(\beta + ik_2)a}}{\beta + ik_2} + \frac{-e^{(-\beta + ik_2)a}}{\beta - ik_2} \right) = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Условие квантования. Первое из условий (13) означает, что должно выполняться равенство, определяющее константу k_2 :

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - (-U_0)). \quad (14)$$

Второе из условий (13) означает необходимость выполнения равенства

$$-e^{-\beta a} \left(\frac{e^{-ik_2 a}}{\beta + ik_2} + \frac{e^{ik_2 a}}{\beta - ik_2} \right) = -e^{-\beta a} \frac{2\beta \cos(k_2 a) - 2k_2 \sin(k_2 a)}{\beta^2 + k_2^2} = 0. \quad (15)$$

Это означает, что для полного совпадения выражений (12) и (9) должно выполняться условие

$$k_2 \operatorname{tg}(k_2 a) = \beta. \quad (16)$$

Это условие представляет собой трансцендентное уравнение для определения допустимых значений энергии в случае четных волновых функций. Действительно, учитывая условие (14) и определения U_0 и β^2 , из (19) получаем ($E = -|E|$):

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - |E|)} \operatorname{tg} \left(a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - |E|)} \right) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|}. \quad (17)$$

Это условие квантования энергии E можно решать только численно.

Чётная волновая функция при $|x| > a$. Поскольку интегрирование в (8) и (10) эффективно осуществляется только по $y \in [-a, a]$, то выражение для функции Грина в интегралах (8), (10), при $|x| > a$ можно упростить:

$$G(x-y) = \frac{-1}{2\beta} e^{-\beta|x-y|} = \begin{cases} \frac{-1}{2\beta} e^{-\beta x} e^{\beta y}, & x > a, \\ \frac{-1}{2\beta} e^{\beta x} e^{-\beta y}, & x < -a. \end{cases} \quad (18)$$

Подставляя $G(x-y)$ из (18) в интеграл (10), и производя вычисления, получим представление для четной волновой функции $\psi(x)$ в областях $x > a$ и $x < -a$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{U_0 A_2}{4\beta} e^{-\beta x} \left[\frac{e^{(\beta+ik_2)a} - e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} + \frac{e^{(\beta-ik_2)a} - e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} \right], & x > a, \\ \frac{U_0 A_2}{4\beta} e^{\beta x} \left[\frac{e^{(\beta-ik_2)a} - e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} + \frac{e^{(\beta+ik_2)a} - e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} \right], & x < -a. \end{cases} \quad (19)$$

Нетрудно убедиться, что определяемые из этих формул предельные значения $\psi(x)$ при $x = a$ и при $x = -a$ совпадают, при учёте условия квантования, одно с другим, а также со значениями, получаемыми на основе формулы (9), то есть волновая функция чётна и непрерывна при всех значениях аргумента.

Нечетные решения интегрального уравнения. Предположим теперь, что решением уравнения (8) является нечетная волновая функция $\psi(y)$, которая при $|y| < a$ имеет вид

$$\psi(y) = B_2 \sin(k_2 y) = B_2 \frac{1}{2i} (e^{ik_2 y} - e^{-ik_2 y}); \quad |y| \leq a. \quad (20)$$

Используя формулы (7) и (8), для нечетной волновой функции при любых x тогда получим:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-a}^a \left(\frac{-1}{2\beta} e^{-\beta|x-y|} \right) (-U_0) B_2 \frac{1}{2i} (e^{ik_2 y} - e^{-ik_2 y}) dy = \\ &= \frac{U_0 B_2}{4i\beta} \left[\int_{-a}^a e^{-\beta|x-y|} e^{ik_2 y} dy - \int_{-a}^a e^{-\beta|x-y|} e^{-ik_2 y} dy \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Вычисляя, аналогично тому, как это было сделано выше, этот интеграл при $|x| \leq a$, получим для $\psi(x)$ выражение

$$\psi(x) = \frac{U_0 B_2}{\beta^2 + k_2^2} \sin(k_2 x) + \frac{U_0 B_2}{4i\beta} (e^{\beta x} - e^{-\beta x}) \left(\frac{e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} + \frac{e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} \right). \quad (22)$$

Для того, чтобы (22) при $|x| < a$ совпадало с (20), должны выполняться два условия:

$$\begin{cases} \frac{U_0}{\beta^2 + k_2^2} = 1, \\ \frac{U_0}{4i\beta} (e^{\beta x} - e^{-\beta x}) \left(\frac{e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} + \frac{e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} \right) = 0. \end{cases} \quad (23)$$

Первое из них – такое же, как (14), то есть определяет константу k_2 аналогичным предыдущему образом. Второе из этих условий дает:

$$k_2 \operatorname{ctg}(k_2 a) = -\beta. \quad (24)$$

Это условие – трансцендентное уравнение для определения допустимых значений энергии в случае нечетных волновых функций. Действительно, учитывая первое из условий (23) и определения U_0 и β^2 , получаем ($E = -|E|$):

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)} \operatorname{ctg} \left(a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - |E|)} \right) = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}. \quad (25)$$

Это уравнение можно решать только численно.

Проводя с использованием (18) и (20) вычисления, аналогичные предыдущему случаю, получаем нечётную волновую функцию $\psi(x)$ при $|x| > a$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{U_0 B_2}{4i\beta} e^{-\beta x} \left[\frac{e^{(\beta+ik_2)a} - e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} - \frac{e^{(\beta-ik_2)a} - e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} \right], & x > a, \\ \frac{U_0 B_2}{4i\beta} e^{\beta x} \left[\frac{e^{(\beta-ik_2)a} - e^{-(\beta-ik_2)a}}{\beta-ik_2} - \frac{e^{(\beta+ik_2)a} - e^{-(\beta+ik_2)a}}{\beta+ik_2} \right], & x < -a. \end{cases} \quad (26)$$

Нетрудно убедиться, что эти формулы и (20) удовлетворяют условию нечетности ($\psi(-x) = -\psi(x)$), а также условию непрерывности волновой функции в точках $x = \pm a$.

Литература

1. Киселев, В. В. Квантовая механика / В. В. Киселев. – М. : МЦНМО, 2023. – 720 с.