А.В. Бужан, Ю.А. Гришечкин, В.Н. Капшай
УО «Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины», Гомель, Беларусь

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ ОБОБЩЁННОГО АНГАРМОНИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Введение

Рассмотрим решение трёхмерного уравнения Шрёдингера в сферически-симметричном случае с потенциалом следующего вида:

$$V(r) = g^2\left[\operatorname{ch}(\alpha r) - 1\right],\ r \geq 0, \tag{1}$$

где g, α – постоянные величины. Данное выражение можно рассматривать как один из вариантов обобщения потенциала ангармонического осциллятора [1]. Так как при разложении функции (1) в ряд Маклорена по степеням r получается формула, содержащая как слагаемое с r^2, так и слагаемые с более высокими степенями аргумента:

$$V(r) = \frac{g^2\alpha^2}{2!}r^2 + \frac{g^2\alpha^4}{4!}r^4 + \frac{g^2\alpha^6}{6!}r^6 + \frac{g^2\alpha^8}{8!}r^8 + \ldots\ . \tag{2}$$

Если в формуле (2) отбросить слагаемые, содержащие r в степени больше, чем 4, то мы получим хорошо известный в квантовой механике потенциал [1].

1. Решение уравнения Шредингера

Уравнение Шрёдингера с потенциалом (1) представим в форме

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + q^2\right)\Psi(r) = g^2\left[\operatorname{ch}(\alpha r) - 1\right]\Psi(r), \tag{3}$$

где параметр q связан с энергией E частицы массы m как $q^2 = 2mE/\hbar^2$, $\Psi(r)$ – волновая функция. Дополнив уравнение (3) граничными условиями, налагаемыми на волновую функцию

$$\Psi(0) = 0, \qquad \Psi(\infty) \cong 0, \tag{4}$$

получим задачу Штурма-Лиувилля.

Воспользуемся экспоненциальным представлением гиперболического косинуса в уравнении (3) и выполним следующую замену переменной:

$$z = g/\alpha\,\sqrt{2}e^{\frac{\alpha r}{2}}. \tag{5}$$

После указанной замены уравнение (3) представим в следующей форме:

$$\left[\left(z\frac{d}{dz}\right)^2+\frac{4}{\alpha^2}\left(q^2+g^2\right)-z^2\right]\Psi(z)=\frac{4g^4}{\alpha^4}\frac{1}{z^2}\Psi(z). \qquad (6)$$

Граничные условия (4) для волновой функции, зависящей теперь от переменной z, примут вид

$$\Psi\left(g/\alpha\sqrt{2}\right)=0, \qquad \Psi(\infty)\cong 0. \qquad (7)$$

Уравнение (3) (так же, как и уравнение (6)) является модифицированным уравнением Матье [2]. Точное решение задачи Штурма-Лиувилля для этого уравнения – громоздкая задача. Поэтому, найдём приближенное аналитическое решение уравнения (6).

При малых значениях величины $4g^4/\alpha^4$, слагаемым в правой части уравнения (6) можно пренебречь. Полученное таким образом уравнение является модифицированным уравнением Бесселя [3, 4], общее решение которого может быть представлено в виде суперпозиции модифицированной функции Бесселя и функции Макдональда:

$$\Psi(z)=A_\nu I_{i\nu}(z)+C_\nu K_{i\nu}(z), \quad \nu=2/\alpha\sqrt{q^2+g^2}\,. \qquad (8)$$

Второму из граничных условий (7), удовлетворяет функция Макдональда [3, 4]. Поэтому, упростим выражение (8) до вида

$$\Psi(z)=C_\nu K_{i\nu}(z). \qquad (9)$$

Учёт первого из граничных условий (7) приводит к следующему трансцендентному уравнению для величины ν:

$$K_{i\nu}\left(g/\alpha\sqrt{2}\right)=0, \qquad (10)$$

которое фактически является условием квантования энергии. Таким образом, энергия частицы, в случае потенциала (1) будет определяться по формуле

$$E_{(n)}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\alpha^2}{4}\nu^2-g^2\right). \qquad (11)$$

где n – номер состояния частицы. Множитель C_ν в выражении (9) может быть определён исходя из условия нормировки волновой функции:

$$\int_0^\infty\left|\Psi(r)\right|^2dr=1. \qquad (12)$$

Уравнение (10) имеет бесконечно большое количество корней. При этом спектр возможных значений энергии частицы дискретен. На рисунке 1 приведена диаграмма распределения первых десяти энергетических уровней, которые может занимать частица в поле с потенциалом (1), при значениях параметров $g = 1$ и $\alpha = 10$.

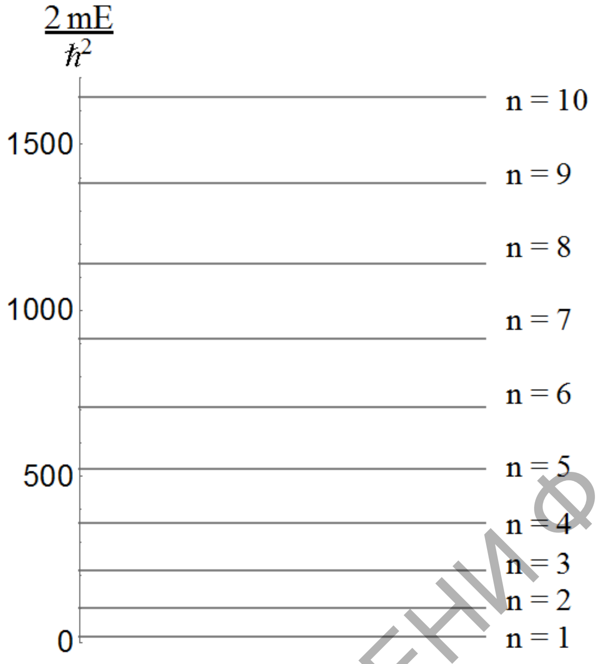

Рисунок 1 – Спектр энергетических состояний частицы

На рисунке 2 приведены графики волновых функций $\Psi(r)$ первых четырёх состояний при тех же значениях параметров g и α.

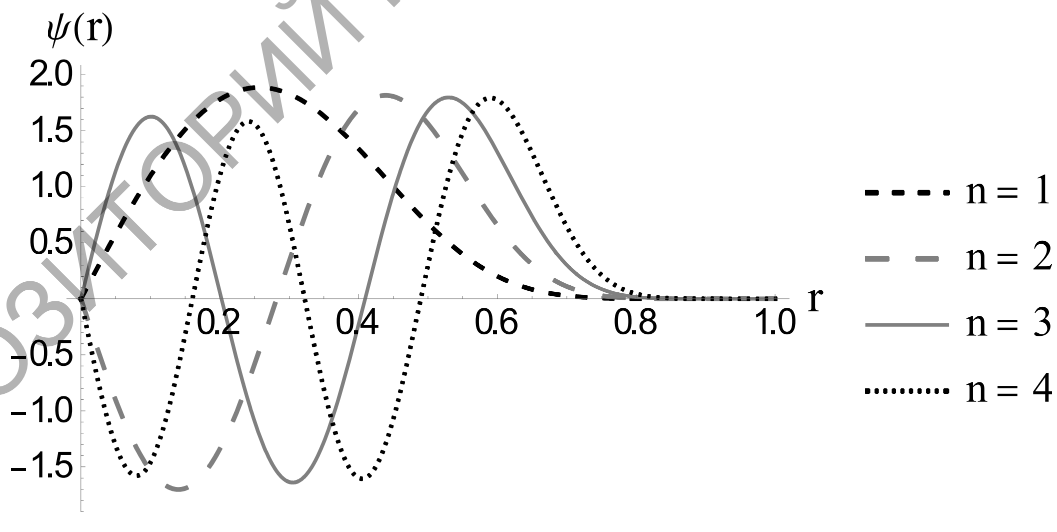

Рисунок 2 – Графики волновых функций для первых четырёх состояний

Как видно на рисунке 1, расстояние между соседними энергетическими уровнями увеличивается с ростом номера состояния, то есть спектр энергетических уровней частицы в случае обобщенного ангармонического потенциала (1) не обладает свойством эквидистантности, в отличие от случая потенциала гармонического осциллятора [1]. На рисунке 2 видно, что число нулей функции $\Psi(r)$ равно номеру состояния, что оказывается в согласии с теоремой об узлах волновых функций связанных состояний [5].

Заключение

В данной работе получено приближенное аналитическое решение уравнения Шрёдингера для одного из вариантов обобщения ангармонического потенциала. Найденные волновые функции выражены через функцию Макдональда. Собственные значения энергии являются корнями трансцендентного уравнения. Частица в таком потенциале может иметь дискретный спектр, состоящий из бесконечного числа энергетических уровней, не обладающих свойством эквидистантности. В дальнейшем мы планируем провести исследование границ применимости рассмотренного приближённого метода, а также получить решения уравнения Шрёдингера и релятивистских уравнений квантовой теории с другими вариантами потенциалов, содержащих гиперболические функции.

Литература

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 5-е изд. – Москва: Физматлит, 2002. – Т. 3: Квантовая механика: нерелятивистская теория. – 808 с.

2. Мак-Лахлан, Н.В. Теория и приложения функций Матье / Н.В. Мак-Лахлан. – М.: издательство иностранной литературы, 1953. – 475 с.

3. Бейтмен, Г. Высшие трансцендентные функции: в 3 т. / Г. Бейтмен, А. Эрдейн. – 2-е изд. – М.: Наука, гл. ред. физ-мат. лит., 1974. – Т 2: Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены. –296 с.

4. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами; под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. – М.: Наука. – 1979. – 830 с.

5. Мессиа, А. Квантовая механика: в 2 т. / А. Мессиа. – М.: Наука. – 1978. – Т 2. – 480 с.