

УДК 539.12.01

ОБ ОДНОМ ПРИБЛИЖЕННОМ АНАЛИТИЧЕСКОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ГАУССОВЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Ю.А. Гришечкин, А.В. Павленко, В.Н. Капшай

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

ON AN APPROXIMATE ANALYTICAL METHOD FOR SOLVING THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH THE GAUSSIAN POTENTIAL

Yu.A. Grischechkin, A.V. Paulenka, V.N. Kapshai

F. Scorina Gomel State University

Предложен приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера с гауссовым потенциалом. Суть метода состоит в представлении искомой волновой функции в виде суперпозиции волновых функций точно решенной задачи. Также в целях контроля точности задача была решена численным способом в импульсном представлении.

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

The approximate analytical method for solving the Schrödinger equation with the Gaussian potential is proposed. The essence of the method is to represent the wave function as a superposition of wave functions of exact solving problem. Also, in order to control the accuracy, the problem was solved numerically in the momentum representation.

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

Введение

Для моделирования короткодействующих взаимодействий в нерелятивистской квантовой теории широко используется уравнение Шредингера с гауссовым потенциалом [1]–[6]

$$U(r) = -V_0 \exp(-ar^2), \quad (0.1)$$

где $V_0 > 0$ – глубина потенциала, $a > 0$ – параметр, характеризующий его ширину. Для решения этой задачи были предложены различные приближенные аналитические и численные методы [1]–[6]. В данной работе предложен новый приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера с потенциалом (0.1), основанный на представлении искомой волновой функции в виде суперпозиции волновых функций трехмерного гармонического осциллятора. Этот метод, в отличие от других, может быть применен для решения релятивистских уравнений с потенциалами аналогичными (0.1). Решения найдены в случае связанных состояний.

1 Приближенный аналитический метод

Парциальное уравнение Шредингера в сферических координатах для произвольного орбитального момента частицы имеет вид [7]

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi_l(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi_l(r) = 0, \quad (1.1)$$

где m – масса частицы, \hbar – приведенная постоянная Планка, r – координата, $\psi_l(r)$ – волновая

функция, $U(r)$ – потенциал, $E < 0$ – энергия частицы, $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное квантовое число. Приведем уравнение (1.1) с потенциалом (0.1) к безразмерному виду. Для этого выполним замену переменных и энергии по формулам

$$r = \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}} \zeta; \quad E = -\lambda V_0,$$

где ζ – безразмерная переменная, $\lambda > 0$ – безразмерный спектральный параметр. В результате получим уравнение

$$\frac{d^2}{d\zeta^2} \psi_l(\zeta) + \left[-\lambda + \exp(-q\zeta^2) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right] \psi_l(\zeta) = 0, \quad (1.2)$$

где $q = \hbar^2 a / 2mV_0$.

Решение уравнения (1.2) будем искать в виде суммы

$$\psi_l(\zeta) = \sum_{n=0}^M C_n \phi_n^l(\zeta),$$

$$\phi_n^l(\zeta) = N_n^l \zeta^{l+1} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) L_n^{l+1/2}(\zeta^2), \quad (1.3)$$

где $\phi_n^l(\zeta)$ – парциальные волновые функции трехмерного гармонического осциллятора [8], $N_n^l = \sqrt{2n! / \Gamma(l+3/2+n)}$ – нормирующий множитель, $\Gamma(z)$ – гамма функция, $L_n^{l+1/2}(z)$ – обобщенный полином Лагерра [9], C_n – неизвестные постоянные коэффициенты. Выбор количества

слагаемых в сумме (1.3) обусловлен точностью, с которой нужно найти решение. Подставив (1.3) в уравнение (1.2), умножив полученное таким образом равенство на $\phi'_k(\zeta)$ и затем проинтегрировав его на полуоси $\zeta \in [0; \infty)$, получим:

$$\sum_{n=0}^M C_n \int_0^\infty \phi'_k(\zeta) \frac{d^2 \phi'_n(\zeta)}{d\zeta^2} d\zeta + \sum_{n=0}^M C_n \int_0^\infty \left[-\lambda + \exp(-q\zeta^2) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right] \times \phi'_n(\zeta) \phi'_k(\zeta) d\zeta = 0. \quad (1.4)$$

Для упрощения равенства (1.4) воспользуемся уравнением Шредингера в безразмерных переменных в случае трехмерного гармонического осциллятора, выразив из него вторую производную волновой функции:

$$\frac{d^2 \phi'_n(\zeta)}{d\zeta^2} = \left(\zeta^2 - 2l - 3 - 4n + \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right) \phi'_n(\zeta). \quad (1.5)$$

Заменяя в равенстве (1.4) вторую производную функции $\phi'_n(\zeta)$ правой частью уравнения (1.5), выполнив замену переменной $\zeta^2 = t$, а также учитывая условие ортогональности обобщенных полиномов Лагерра [9], получим следующую систему уравнений для коэффициентов C_n :

$$-\sum_{n=0}^M C_n (2l + 3 + 4n) \delta_{nk} + \sum_{n=0}^M C_n I_{nk}^l + \sum_{n=0}^M C_n T_{nk}^l = C_k \lambda. \quad (1.6)$$

В равенстве (1.6) использованы следующие обозначения для интегралов:

– при $n, k > 1$

$$I_{nk}^l = \int_0^\infty \sqrt{t} \phi'_k(t) \phi'_n(t) dt = N_n^l N_k^l \left[g(n) \delta_{n,m} - g(n) \delta_{n,m-1} - g(m) \delta_{n-1,m} + g(n-1) \delta_{n-1,m-1} \right], \quad (1.7)$$

– при $n = 0$ или $k = 0$

$$I_{nk}^l = \int_0^\infty \sqrt{t} \phi'_k(t) \phi'_n(t) dt = N_n^l N_k^l \frac{\Gamma(l+5/2)\Gamma(l+n+3/2)}{n! \Gamma(l+3/2)} \times {}_2F_1 \left(-n, l + \frac{5}{2}, l + \frac{3}{2}; 1 \right),$$

а также

$$T_{nk}^l = \int_0^\infty \exp(-qt) \phi'_k(t) \phi'_n(t) dt = N_n^l N_k^l \frac{\Gamma(k+n+l+3/2) q^{n+k}}{k! n! (q+1)^{n+k+l+3/2}} \times {}_2F_1 \left(-n, -m, -n-m-l - \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{q^2} \right) = N_n^l N_k^l \frac{\Gamma(k+n+l+3/2) q^{n+k}}{k! n! (q+1)^{n+k+l+3/2}} \times {}_2F_1 \left(-n, -m, -n-m-l - \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{q^2} \right),$$

где $g(n) = \Gamma(5/2 + n + l)/n!$, ${}_2F_1(a, b, c; z)$ – гипергеометрический ряд, $\delta_{i,j}$ – дельта-символ Кронекера [9]. Значения интегралов (1.7) взяты из [10].

Таким образом, задача о решении уравнения Шредингера (1.1) с потенциалом (0.1) в случае связанных состояний сведена к задаче о нахождении собственных значений λ линейной алгебраической системы однородных уравнений

$$\sum_{n=0}^M C_n A_{nk} = \lambda C_k, \quad A_{nk} = I_{nk} + T_{nk} - (2l + 3 + 4n) \delta_{nk}.$$

Результаты нахождения λ для некоторых значений орбитального момента и $q = 0,005$ приведены в таблице 1.1.

Как видно из таблицы, для указанного значения q существуют состояния до $l = 7$. Вычисления показывают, что при увеличении q количество состояний уменьшается. Это естественно,

Таблица 1.1 – Собственные значения λ , найденные приближенно аналитически

l	n	M		
		300	600	1200
0	1	0,797388006692130	0,797388006692108	0,797388006692111
	2	0,553887457151760	0,553887457151750	0,553887457151752
	3	0,345015684742373	0,345015684819078	0,345015684819068
	4	0,175228714966775	0,175229048241779	0,175229048243878
	5	0,052202862855601	0,052522311841011	0,052522779950358
1	1	0,668962196177320	0,668962196176221	0,668962196177254
	2	0,442295685076343	0,442295685076715	0,442295685076913
	3	0,252234946770758	0,252234952063932	0,252234952063506
	4	0,104599176941210	0,104611683610239	0,104611684774289
	5	0,007846098905027	0,011733398009518	0,011860935223178
5	1	0,214944363991333	0,214944365068264	0,214944365068257
	2	0,067320876652722	0,067328054279784	0,067328056076097
6	1	0,118768189153335	0,118768251153473	0,118768251154782
7	1	0,031312330222893	0,031315796089122	0,031315798724903

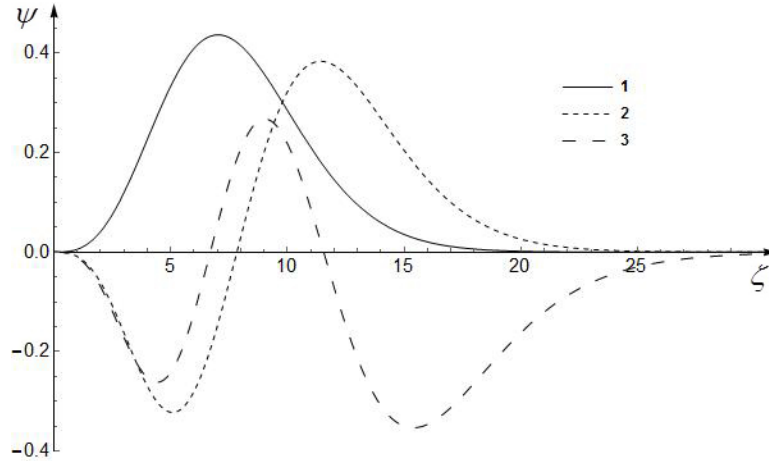


Рисунок 1.1 – Волновые функции первых трех состояний

так как согласно (1.2) величина q обратно пропорциональна глубине потенциала V_0 , а с ростом глубины число энергетических уровней возрастает. Графики волновых функций для $l = 2$, показаны на рисунке 1.1.

Для построения графиков волновых функций было использовано выражение (1.3). При этом количество слагаемых в сумме было выбрано равным 300.

2 Численный метод

Для проверки точности рассмотренного метода мы также найдём решение уравнения Шредингера с потенциалом (0.1) в импульсном представлении [8]

$$(k^2 + \lambda)\psi_l(k) = \frac{4\pi k}{2l+1} \int_0^\infty k' a_l(k, k') \psi_l(k') dk'. \quad (2.1)$$

Коэффициенты разложения $a_l(k, k')$ в уравнении (2.1) определяются по формуле

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

где $I_{l+1/2}(z)$ – модифицированная функция Бесселя [9]. Волновая функция в импульсном представлении связана с волновой функцией в координатном представлении интегральным преобразованием:

$$\psi_l(k) = \int_0^\infty j_l(k\zeta) \psi_l(\zeta) d\zeta,$$

где $j_l(z)$ – сферическая функция Бесселя [9]. Коэффициенты $a_l(k, k')$ для первых трёх l имеют вид

$$a_0(k, k') = \frac{1}{8\sqrt{\pi^3 q}} \frac{1}{kk'} \left[\exp\left(-\frac{(k-k')^2}{4q}\right) - \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4q}\right) \right],$$

$$a_1(k, k') = \frac{2\sqrt{\pi q}}{(kk')^2} \times \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4q}\right) \left[\frac{kk'}{2q} \operatorname{ch}\left(\frac{kk'}{2q}\right) - \operatorname{sh}\left(\frac{kk'}{2q}\right) \right],$$

Таблица 2.1 – Собственные значения λ , найденные решением уравнения Шредингера в импульсном представлении

l	n	Метод прямоугольников		
		$N = 30$	$N = 60$	$N = 90$
0	1	0,797388006726273	0,797388006692112	0,797388006692111
	2	0,553887457585389	0,553887457151757	0,553887457151759
	3	0,345015689266612	0,345015684819084	0,345015684819085
	4	0,175229080177297	0,175229048243896	0,175229048243894
	5	0,052440491069795	0,052522779990877	0,052522779993554
1	1	0,668962196239081	0,668962196177262	0,668962196177261
	2	0,442295685889170	0,442295685076919	0,442295685076918
	3	0,252234961928702	0,252234952063518	0,252234952063518
	4	0,104613508887479	0,104611684774312	0,104611684774313
	5	0,012860582741014	0,011862582930241	0,011862302764435
5	1	0,214944365133800	0,214944365068268	0,214944365068266
	2	0,067328124317414	0,067328056076143	0,067328056076143
6	1	0,118768250897164	0,118768251154786	0,118768251154786
7	2	0,031315799093730	0,031315798725291	0,031315798725289

$$a_2(k, k') = \frac{5}{4\sqrt{\pi^3 q} (kk')^3} \exp\left(-\frac{(k+k')^2}{4q}\right) \times \left[(12q^2 + (kk')^2) \operatorname{sh}\left(\frac{kk'}{2q}\right) - 6qkk' \operatorname{ch}\left(\frac{kk'}{2q}\right) \right].$$

Решение интегрального уравнения (2.1) было получено методом прямоугольных квадратур [11]. Результаты вычисления значений λ для некоторых l при $q = 0,005$ показаны в таблице 2.1.

Для сравнения точности методов нахождения λ результаты приведены в таблице 2.2.

Таблица 2.2 – сравнения точности нахождения спектрального параметра λ

l	n	Приближенный метод	Численный метод
		$M = 300$	$N = 90$
0	1	0,797388006692130	0,797388006692111
	2	0,553887457151760	0,553887457151759
	3	0,345015684742373	0,345015684819085
	4	0,175228714966775	0,175229048243894
	5	0,052202862855601	0,052522779993554
1	1	0,668962196177320	0,668962196177261
	2	0,442295685076343	0,442295685076918
	3	0,252234946770758	0,252234952063518
	4	0,104599176941210	0,104611684774313
	5	0,007846098905027	0,011862302764435
5	1	0,214944363991333	0,214944365068266
	2	0,067320876652722	0,067328056076143
6	1	0,118768189153335	0,118768251154786
7	1	0,031315799093730	0,031315798725289

Сравнивая результаты, полученные двумя способами, можно сделать вывод о высокой эффективности приближенного метода. Анализ решений показал, что метод эффективен для значений $q > 10^{-8}$.

Заключение

Таким образом, в работе был предложен приближенный аналитический метод нахождения энергетического спектра связанных состояний частицы в случае потенциала Гаусса. Основная идея метода состоит в представлении искомой волновой функции в виде суммы волновых функций трехмерного гармонического осциллятора с неизвестными коэффициентами и сведе-

нии уравнения Шредингера к линейной алгебраической системе уравнений для этих коэффициентов. В целях контроля за точностью также получено численное решение уравнения Шредингера с потенциалом (0.1) в импульсном представлении. Сравнение результатов продемонстрировало эффективность предложенного метода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Stephenson, G. Eigenvalues of the Schrodinger equation with a Gaussian potential / G. Stephenson // J. Phys. A: Math Gen. – 1977. – Vol. 10, L229–L232.
2. 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.
3. Crandale, R.E. Fast eigenvalue algorithm for central potentials / R.E. Crandale // J. Phys. A: Math Gen. – 1983. – Vol. 16. – L395–L399.
4. Chatterjee, A. $1/N$ expansion for Gaussian potential / A. Chatterjee // J. Phys. A: Math. Gen. – 1985. – Vol. 18. – P. 2403–2408.
5. 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.
6. 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.
7. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – 3-е изд., – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 699 с.
8. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – 3-изд. – Москва: ЛКИ, 2010. – Т. 1. – 344 с.
9. Арфкен, Г. Математические методы в физике / Г. Арфкен. – Москва: Атомиздат, 1970. – 712 с.
10. Градштейн, И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и производных / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – 4-е изд. – Москва, 1963. – 1108 с.
11. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.

Поступила в редакцию 26.10.19.