КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 530.145

# СПЕКТР РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПРИТЯГИВАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

**О. С. Павлова, А. Р. Френкин**

(*кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

E-mail: th180@phys.msu.su

**Методом, основанным на исследовании аналитических свойств лапласовских образов волновых функций, определяется дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с произвольным притягивающим потенциалом. С помощью нового подхода задача сведена к приближенному нахождению корней характеристического уравнения, соответствующего бесконечной системе линейных алгебраических уравнений.**

В работах [1–3] развит метод определения дискретного спектра радиального уравнения Шрёдингера (УШ) с удерживающим и притягивающим потенциалами. Этот метод, который был назван методом интегральных преобразований, основан на исследовании поведения лапласовских образов волновых функций (ВФ). В настоящей работе предлагается новый и чрезвычайно простой вариант метода интегральных преобразований, основанный на использовании операторного подхода. Такой подход позволяет решить задачу определения спектра УШ с произвольным гладким притягивающим потенциалом, убывающим на бесконечности и имеющим кулоновскую особенность $z/r$ и особенность типа $A/r^2$.

Рассмотрим радиальное уравнение Шрёдингера (использована система единиц $\hbar = 2m = 1$)

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Psi - U(r)\Psi + E\Psi = 0 \qquad (1)$$

($l = 0, 1, 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число) с потенциалом

$$U(r) = V(r) - \frac{z}{r} + \frac{A}{r^2}.$$

При этом будем считать, что потенциал $V(r)$ может быть разложен в ряд по степеням $(r/a)^N$ начиная с $N=-2$:

$$V(r) = V(r/a) = \sum_{N=-2}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N \quad (a > 0).$$

Если ввести обозначения $Z = z - b_{-1}a$, $\mathcal{A} = A + b_{-2}a^2$ и $B = \mathcal{A} + l(l+1)$, то (1) можно записать в виде

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{B}{r^2}\Psi + \frac{Z}{r}\Psi - \sum_{N=0}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N \Psi + E\Psi = 0.$$

Это уравнение может иметь дискретный спектр энергий $E = -|E| < 0$ при $\mathcal{A} > -(2l+1)^2/4$.

Введем новую переменную $x = |E|^{1/2}r$, тогда УШ принимает следующую форму:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{\gamma}{x}\Psi - \frac{B}{x^2}\Psi - \sum_{N=0}^{\infty} B_N x^N \Psi - \Psi = 0, \qquad (2)$$

где $\gamma = Z|E|^{-1/2}$, $B_N = b_N a^{-N}|E|^{-N/2-1}$.

Следуя работам [1–3], применим к УШ преобразование Лапласа вида

$$\langle\varphi\rangle \equiv \varphi(\omega) = \frac{\omega^{-2\delta}}{\Gamma(2\delta)} \int_0^{\infty} e^{-x/\omega} \varphi(x) x^{\delta-1} dx, \qquad (3)$$

где величина $\delta = (1 + \sqrt{1+4B})/2$ определяет поведение волновой функции в нуле: $\Psi \sim x^\delta$ при $x \to 0$. Заметим, что для квадратично интегрируемого решения УШ лапласовский образ ВФ $\Phi(\omega) \equiv \langle\Psi\rangle$ должен быть регулярным в точке $\omega = 1$ [1–3].

В лапласовском представлении после интегрирования по частям УШ (2) принимает вид

$$(1-\omega^2)\frac{d\Phi}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi + \gamma\Phi = \sum_{N=0}^{\infty} B_N \langle x^{N+1}\Psi\rangle. \qquad (4)$$

Из преобразования Лапласа (3) следует равенство

$$\langle x^{N+1}\Psi\rangle = \frac{1}{\omega^{2\delta}} L^{N+1}\{\omega^{2\delta}\Phi(\omega)\},$$

где оператор $L = \omega^2 \frac{d}{d\omega}$. С помощью оператора $L$ запишем УШ (4) так:

$$(1-\omega^2)\frac{d\Phi}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi + \gamma\Phi = \frac{1}{\omega^{2\delta}} \sum_{N=0}^{\infty} B_N L^{N+1}\{\omega^{2\delta}\Phi(\omega)\}. \qquad (5)$$

Переходя в (5) к переменной $y = (1-\omega)/(1+\omega)$ и используя представление

$$\Phi(\omega) = (1+y)^{2\delta} D(y), \quad D(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k,$$

получаем уравнение

$$y\frac{dD}{dy} + \left(\delta - \frac{\gamma}{2}\right) D = = -\frac{1}{2}(1-y)^{-2\delta} \sum_{N=0}^{\infty} B_N \sum_{k=0}^{\infty} a_k L^{N+1}\{(1-y)^{2\delta} y^k\}. \tag{6}$$

Введем переменную $\xi = (1-y)^{-1}$, через которую оператор $L$ выражается крайне просто:

$$L = -\frac{1}{2}\mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \frac{d}{d\xi}.$$

Теперь уравнение (6) примет более простой вид:

$$y\frac{dD}{dy} + (\delta - \frac{\gamma}{2})D = = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N B_N}{2^{N+2}} \xi^{2\delta} \mathcal{L}^{N+1} \left\{ \xi^{-2\delta} \left(1 - \frac{1}{\xi}\right)^k \right\}.$$

Теперь разложим $(1-1/\xi)^k$ по степеням $1/\xi$:

$$(1-\frac{1}{\xi})^k = \sum_{m=0}^{k} \frac{(-1)^m k!}{m!\Gamma(k-m+1)} \xi^{-m}.$$

Легко видеть, что

$$\xi^{2\delta}\mathcal{L}^{N+1}\xi^{-(2\delta+m)} = = (-1)^{N+1} \frac{\Gamma(m+N+2\delta+1)}{\Gamma(m+2\delta)} \xi^{-(m+N+1)}.$$

Это соотношение позволяет, возвращаясь к переменной $y$, УШ (6) записать в виде

$$y\frac{dD}{dy} + (\delta - \frac{\gamma}{2})D = -\sum_{k=0}^{\infty} k! a_k \sum_{N=0}^{\infty} \frac{B_N}{2^{N+2}} \times \sum_{m=0}^{k} \frac{(-1)^m \Gamma(m+N+2\delta+1)}{m!(k-m)!\Gamma(m+2\delta)} (1-y)^{m+N+1}. \tag{7}$$

Далее будем пользоваться разработанной схемой [1] и разложим выражение $(1-y)^{m+N+1}$ по степеням $y$, затем приравняем в (7) коэффициенты при одинаковых степенях $y^n$ $(n \leqslant m+N+1)$. В результате получим систему алгебраических уравнений относительно величин $a_n$, которую удобно записать в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \mathcal{B}_{nk} - \left(n + \delta - \frac{\gamma}{2}\right) \delta_{nk} \right\} a_k = 0, \qquad \mathcal{B}_{nk} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{B_N}{2^{N+2}} \beta_{nk}(N), \tag{8}$$

где

$$\beta_{nk}(N) = \frac{(-1)^{n+1}k!}{n!} \times \sum_{\substack{m=\max\{0,\\ n-N-1\}}}^{k} \frac{(-1)^m \Gamma(m+N+2\delta+1)\Gamma(m+N+2)}{m!(k-m)!\Gamma(m+2\delta)\Gamma(m+N-n+2)}.$$

Спектр УШ находится из уравнения

$$\det\left|\left| \mathcal{B}_{nk} - \left(n + \delta - \frac{\gamma}{2}\right) \delta_{nk} \right|\right| = 0. \tag{9}$$

Величину $\mathcal{B}_{nk}$ удобно выразить через начальные коэффициенты разложения потенциала, т.е. $b_N$:

$$\mathcal{B}_{nk} = \frac{1}{4} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{b_N}{|E|(2a|E|^{1/2})^N} \beta_{nk}(N). \tag{10}$$

Заметим, что для всех исследуемых потенциалов $V(r)$ множители $\beta_{nk}(N)/[4|E|(2a|E|^{1/2})^N]$ одинаковы, отличие заключается только в коэффициентах разложения потенциала $b_N$. Следует отметить, что поскольку разложение (10) — это разложение по обратным степеням энергии, то уравнение (9) должно давать лучшее приближение при больших $|E|$, т.е. для нижних уровней спектра УШ.

По формулам (8), (9) был рассчитан энергетический спектр для потенциала $V(r) = -V_0 \mathrm{e}^{-r/a}$ при $l=0$. Полученные приближенные результаты уже при $N=15$ хорошо совпадают с известным точным решением УШ для этого потенциала [4], например для значения параметра $2a\sqrt{V_0}$, равного 5.1356223, приближенное значение энергии основного состояния отличается от точного всего на 0.005%.

Авторы глубоко благодарны А.В. Борисову за плодотворное обсуждение результатов работы.

**Литература**


1. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 1. С. 58 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 1. P. 69).
2. *Павлова О.С., Баскаран Д., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 5. С. 14 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 5. P. 18).
3. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // ТМФ. 2000. **125**. № 2. С. 242.
4. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. М: Мир, 1969.


Поступила в редакцию
10.11.00