

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.171

МЕТОД МОДЕЛИРУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

В. Н. Сидоренко

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Рассматривается метод моделирующих потенциалов для построения энергетического спектра уравнения Шрёдингера в рамках квазиклассики. Идея метода заключается в построении для исходного потенциала более простого моделирующего потенциала, не обязательно локально близкого исходному, но повторяющего его глобальную структуру спектра.

Рассмотрим задачу отыскания энергетического спектра для одномерного уравнения Шрёдингера (УШ) с непрерывным действительным потенциалом $U(x)$:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + W(x, E)\Psi(x) = 0, \quad (1)$$

где $W(x, E) = E - U(x)$ и $\Psi(x) \in L_2(R^1)$.

В реальных задачах функция $W(y, E)$ является довольно сложной, что приводит к множеству проблем как при определении решений уравнения (1), так и при нахождении энергетического спектра E_n . Решить некоторые из этих проблем удастся путем преобразования уравнения (1) к уравнению того же вида с новой более простой функцией $\widetilde{W}(y, \widetilde{E})$. Для этого сделаем следующую замену переменных (преобразование Лиувилля):

$$x = f(y), \quad \frac{d}{dx} = \frac{1}{f'(y)} \frac{d}{dy}, \quad (2)$$

$$\Psi(x) \Big|_{x=f(y)} = \sqrt{f'(y)} \Phi(y).$$

Условие взаимной однозначности замены (2) приводит к требованию знакоопределенности функции $f'(y)$. Далее будем полагать, что $f'(y) > 0$. Подстановка (2) в (1) даст уравнение той же структуры, что и (1):

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Phi''(y) + \widetilde{W}(y, \widetilde{E})\Phi(y) = 0, \quad (3)$$

где

$$\widetilde{W}(y, \widetilde{E}) = W(f(y), E) f'^2(y) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2} \{f(y), y\} \quad (4)$$

— функция, которую в дальнейшем будем называть моделирующим потенциалом (МП) для $W(x, E)$, а

$$\{f(y), y\} = \frac{f'''(y)}{f'(y)} - \frac{3}{2} \left(\frac{f''(y)}{f'(y)} \right)^2 \quad (5)$$

— производная в смысле Шварца [1].

При определенном выборе $f(y)$ первое слагаемое в МП будет иметь более простой вид, нежели исходный потенциал. Отметим, что если функция $\{f(y), y\}$ довольно гладкая, то можно считать второе слагаемое в (4) малым по сравнению с $W(f(y), E) f'^2(y)$, так как оно пропорционально \hbar^2 . Тогда нулевым приближением при отбрасывании второго слагаемого в (4) является квазиклассическое, которое также называется приближением Лиувилля–Грина. Энергетический спектр E_n можно найти как стандартным методом, фиксируя граничные условия для $\Psi(x)$, так и из зависимости $E_n(\widetilde{E}_n)$, определив \widetilde{E}_n . При этом

$$\widetilde{E}_n = \widetilde{E}_n^{(0)} + \hbar^2 \widetilde{E}_n^{(1)} + \dots \quad (6)$$

Поскольку предполагается, что точная замена (2) существует, то получим МП с той же, что и у моделируемого потенциала, глобальной структурой спектра, т. е. если $W(y, E)$ имеет непрерывный спектр, то $\widetilde{W}(y, \widetilde{E})$ также должен иметь непрерывный спектр. То же относится к количеству уровней в дискретном спектре. Это связано с тем, что преобразования Лиувилля при выбранных ограничениях на функцию $f(y)$ образуют бесконечномерную группу диффеоморфизмов. В общем случае задача построения точной замены (2), переводящей исходное уравнение (1) в (3) с МП заданного вида, не проще решения уравнения (1). В то же время на основе уравнения (3) можно сформулировать регулярный подход к отысканию приближенных значений E_n . При заданном потенциале $W(x, E)$ подбирается потенциал $V(y, \widetilde{E})$, для которого спектральная задача решается точно. Глобальная структура спектра обоих потенциалов предполагается одинаковой. Последнее окончательно выясняется из анализа функции $f(y)$. В качестве такого потенциала можно выбрать кусочно-линейный потенциал. Далее определяем функцию $x = f(y)$ из уравнения

$$f'^2(y) = \frac{V(y, \widetilde{E})}{W(f(y), E)}. \quad (7)$$

Тогда получаем

$$\widetilde{W}(y, \widetilde{E}) = V(y, \widetilde{E}) + \frac{\hbar^2}{2m^2} \{f(y), y\}, \quad (8)$$

где $V(y, \widetilde{E}) = \widetilde{E} - \widetilde{U}(y)$, а $\{f(y), y\}$ рассматривается как возмущение при достаточно гладкой функции $f(y)$. Таким образом, $V(y, \widetilde{E})$ представляет собой МП в нулевом приближении. Поскольку $f'(y) > 0$, то получаем требования, которым должен удовлетворять потенциал $V(y, \widetilde{E})$: 1) совпадение числа точек поворота для потенциалов $V(y, \widetilde{E})$ и $W(x, E)$, т.е. корней x_n, y_n уравнений $W(x, E) = 0$ и $V(y, \widetilde{E}) = 0$; 2) равенство «классических действий» между соответствующими точками поворота: $S_n(E) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} \sqrt{W(x, E)} dx = \int_{y_n}^{y_{n+1}} \sqrt{V(y, \widetilde{E})} dy = S_n(\widetilde{E})$ (следует из (7) при интегрировании между соответствующими точками поворота).

При выполнении этих условий формула (7) определяет замену переменной, удовлетворяющую условию $f'(y) > 0$. Тогда схема нахождения энергетического спектра исходного уравнения (1) строится следующим образом: а) в нулевом приближении спектр (1) находится путем разрешения относительно E_n уравнений $S_n(E) = S_n(\widetilde{E}_n^{(0)})$, где $\widetilde{E}_n^{(0)}$ являются собственными значениями энергии в потенциале $V(y, \widetilde{E})$; б) последующие приближения находятся подстановкой в точные уравнения $S_n(E) = S_n(\widetilde{E})$ приближенных собственных значений для потенциала (8), получаемых по теории возмущений, и разрешения их относительно E_n .

Таким образом, уравнения $S_n(E) = S_n(\widetilde{E}_n^{(0)})$ и $S_n(E) = S_n(\widetilde{E})$ задают связь энергетических спектров для исходного и моделирующего потенциалов, зная которую можно определить E_n . Оценки величины поправок к приближенным собственным значениям \widetilde{E}_n потенциала $\widetilde{W}(y, \widetilde{E})$ (в системе единиц $\hbar = 2m = 1$) даны в работе [2]. Так, полагая, что \widetilde{E}_n монотонно зависят от $\widetilde{E}_n^{(0)}$ и могут быть представлены в нулевом приближении в виде

$$\widetilde{E}_n = \widetilde{E}_n^{(0)} + R_n^{(0)},$$

где остаточный член $|R_n^{(0)}| < R_n$, получим следующую оценку сверху для $R_n^{(0)}$:

$$|R_n^{(0)}| \leq \sqrt{\frac{M}{1 - MA(R_n^{(0)})}} \equiv B(R_n^{(0)}), \quad MA(R_n^{(0)}) \leq 1,$$

$$\text{где } M \equiv \frac{1}{4} \max_y \{f(y), y\}^2 \geq 0 \text{ и } A(R_n^{(0)}) = \sum_{m \neq n} \left(|\widetilde{E}_n^{(0)} - \widetilde{E}_m^{(0)}| - |R_n^{(0)}| \right)^{-2}.$$

В первом приближении, учитывая, что

$$\widetilde{E}_n = \widetilde{E}_n^{(0)} + \frac{1}{2} \{f(y), y\}_{nn} + R_n^{(1)},$$

где $\{f(y), y\}_{nn}$ — матричный элемент, вычисленный по волновым функциям нулевого приближения $\Phi_n^{(0)}(y)$, получим следующую оценку сверху для остаточного члена $R_n^{(1)}$:

$$|R_n^{(1)}| \leq \sqrt{\frac{M^2 A(R_n^{(0)})}{1 - MA(R_n^{(0)})}} = \sqrt{MA(R_n^{(0)})} B(R_n^{(0)}).$$

Проверка показала [2], что метод МП дает точный результат для спектра гармонического осциллятора при МП вида $V(y, \widetilde{E}) = \widetilde{E} - \theta(|y| - a)(|y| - a)$ и $n = 1, 2, 3, \dots$, а для симметричного потенциала $W(x, E) = E - (|x| - B)^2$ данный метод позволяет определить энергетический спектр с точностью до 0,05% (в нулевом приближении) при кусочно-линейном МП и $n = 2, 3, 4, \dots$. Кроме того, метод позволил изучить спектр системы двух заряженных частиц с диполь-дипольным взаимодействием, что не удавалось сделать численными и обычными квазиклассическими методами, поскольку получаемый эффективный потенциал радиального УШ имел вид очень глубокой и узкой ямы, что приводило к неустойчивостям в работе численных методов и большим погрешностям при использовании обычного квазиклассического приближения. Альтернативные подходы к данной проблеме можно найти, например, в работе [3] и в цитируемой там литературе.

Литература

1. Свешников Н.А., Сидоренко В.Н. // Современные проблемы квантовой теории: Сб. статей: Препр. НИИЯФ МГУ № 98-23/524. М., 1998. С. 235.
2. Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990.
3. Singh C.A., Devi T.H. // Phys. Lett. 1992. A171. P. 249.

Поступила в редакцию
05.03.99