

УДК 530.145.6

СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

О. С. Павлова, А. Р. Френкин

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

Предложен метод определения спектра радиального уравнения Шрёдингера с некоторыми удерживающими и притягивающими потенциалами. Этот метод связан с исследованием лапласовских образов волновых функций. Задача сводится к решению бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. Подробно исследованы потенциалы степенного вида, их комбинации с кулоновским потенциалом и потенциал Юкавы.

Нахождение спектра уравнения Шрёдингера (УШ) является важнейшей задачей ядерной и атомной физики. Например, один из методов исследования кваркониумных состояний (ψ , Υ) связан с введением межкваркового потенциала в виде комбинации удерживающего потенциала (обычно степенного вида) и кулоновского [1]. В ряде физических задач используются потенциалы Юкавы и их комбинации с кулоновским. Именно такого типа потенциалы будут исследованы в данной работе с помощью предлагаемого метода.

1. Рассмотрим радиальное УШ с удерживающим потенциалом $V(r) = r^N + A/r^2 - Z/r$, $N = 1, 2, \dots$, и с произвольным квантовым орбитальным числом $l = 0, 1, 2, \dots$:

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - V_l\Psi + E\Psi = 0, \quad V_l = V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Введем новую переменную $x = r^\nu/\nu$, где $\nu = 1 + N/2$, и следующее обозначение: $B = A + l(l+1)$, тогда УШ принимает вид

$$\nu x \frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\nu - 1) \frac{d\Psi}{dx} - \frac{B}{\nu} \frac{1}{x} \Psi - \nu x \Psi + (\nu x)^{1/\nu-1} Z \Psi + (\nu x)^{2/\nu-1} E \Psi = 0.$$

Отметим, что квадратично интегрируемые решения этого уравнения имеют следующее поведение в нуле и на бесконечности:

$$\Psi(x) \sim x^\beta \text{ при } x \rightarrow 0, \quad \Psi(x) \sim e^{-x} \text{ при } x \rightarrow \infty, \quad (1)$$

где

$$\beta = \frac{1}{2\nu} (1 + \sqrt{1 + 4B}).$$

Применим к УШ обобщенное преобразование Лапласа вида

$$\langle \Psi \rangle = \frac{\omega^{-(\beta+\sigma)}}{\Gamma(\beta+\sigma)} \int_0^\infty e^{-x/\omega} \Psi(x) x^{\sigma-1} dx,$$

специально подобранное для функций $\Psi(x)$ с заданным асимптотическим поведением при $x \rightarrow 0$ и

$x \rightarrow \infty$ (1). Параметр σ будет определен в дальнейшем.

Интегрируя по частям величины $\langle x\Psi'' \rangle$ и $\langle \Psi' \rangle$ с учетом обращения в нуль внеинтегральных членов, при $\sigma + \beta > 1$ получаем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\omega^2} - 1 \right) \langle x\Psi \rangle - \frac{1}{\omega} (2\nu\sigma + 1 - \nu) \langle \Psi \rangle + \\ & + Z\nu^{1/\nu-1} \langle x^{1/\nu-1}\Psi \rangle + \\ & + [\nu\sigma(\sigma - 1) - (\nu - 1)(\sigma - 1) - B/\nu] \langle \frac{1}{x}\Psi \rangle + \\ & + E\nu^{2/\nu-1} \langle x^{2/\nu-1}\Psi \rangle = 0. \end{aligned}$$

Если за основную функцию принять лапласовский образ волновой функции $\Phi(\omega) \equiv \langle \Psi \rangle$, то только $\langle x\Psi \rangle$ просто записывается через $\Phi(\omega)$, остальные лапласовские образы в этом уравнении при $\nu \neq 2$ выражаются через интегралы от $\Phi(\omega)$. Имеет смысл уменьшить число таких функций. Например, подбором параметра $\sigma = \beta - 1/\nu + 1$ можно исключить из уравнения лапласовский образ $\langle x^{-1}\Psi \rangle$. Так как из преобразования Лапласа следует, что $\omega^{-2} \langle x\Psi \rangle = \Phi' + (\beta + \sigma)\Phi$, получаем общее уравнение при произвольных ν и Z :

$$\begin{aligned} & (1 - \omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\omega\alpha\Phi = \\ & = -Z\nu^{1/\nu-2} \langle x^{1/\nu-1}\Psi \rangle - E\nu^{2/\nu-2} \langle x^{2/\nu-1}\Psi \rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\alpha = \beta + \frac{1-1/\nu}{2}$.

Из теории интегральных преобразований Лапласа следует, что функция $\Psi(x)$ удовлетворяет граничному условию (1), когда $\omega = 1$ — правильная точка ее лапласовского образа. Поэтому спектр задачи получается из требования регулярности функции $\Phi(\omega)$ в точке $\omega = 1$ (см. [2])^{*}.

^{*} При $Z = 0$, $\nu = 2$ из (2) получаем уравнение осциллятора [3]:

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} + \left(\frac{E}{2} - 2\alpha\omega \right) \Phi = 0, \quad \alpha = \frac{1}{4} (2 + \sqrt{1 + 4B}).$$

Точное решение этого уравнения $\Phi = (1 - \omega^2)^{-\alpha} [(1 - \omega)/(1 + \omega)]^{E/4}$ регулярно в точке $\omega = 1$ при $(E/4) - \alpha = n_r$. Это дает спектр осциллятора с произвольным l :

$$E = 2(2n_r + 1 + \sqrt{1 + 4B}/2), \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

Выразим теперь входящие в уравнение функции $\langle x^\epsilon \Psi \rangle$ (при $\epsilon = 1/\nu - 1; 2/\nu - 1$) через интегралы от $\Phi(\omega)$. Это можно сделать, воспользовавшись разложением волновой функции $\Psi(x)$ по степеням $x^{n/\nu}$:

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^{n/\nu + \alpha + 1/(2\nu) - 1/2},$$

$$\Phi(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \omega^{n/\nu} \Gamma\left(\frac{n}{\nu} + 2\alpha\right),$$

$$\langle x^\epsilon \Psi \rangle = \frac{\omega^\epsilon}{\Gamma(2\alpha)\Gamma(-\epsilon)} \times \sum_{n=0}^{\infty} B\left(-\epsilon, \frac{n}{\nu} + 2\alpha + \epsilon\right) A_n \omega^{n/\nu} \Gamma\left(\frac{n}{\nu} + 2\alpha\right).$$

Используя определение бета-функции, получаем

$$\langle x^\epsilon \Psi \rangle = \frac{\omega^\epsilon}{\Gamma(-\epsilon)} \int_0^1 (1-t)^{-(\epsilon+1)} t^{2\alpha+\epsilon-1} \Phi(t\omega) dt.$$

Основное уравнение для вычисления спектра принимает вид

$$(1-\omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi + \frac{Z\nu^{1/\nu-2} \omega^{1/\nu-1}}{\Gamma(1-1/\nu)} \times \int_0^1 (1-t)^{-1/\nu} t^{2\alpha+1/\nu-2} \Phi(t\omega) dt = \quad (3)$$

$$= -\frac{E\nu^{2/\nu-2} \omega^{2/\nu-1}}{\Gamma(1-2/\nu)} \int_0^1 (1-t)^{-2/\nu} t^{2\alpha+2/\nu-2} \Phi(t\omega) dt.$$

Перейдем к новой переменной $y = (1-\omega)/(1+\omega)$. При этом функция $\Phi(y)$ должна быть регулярна в точке $y=0$. Для удобства представим $\Phi(y)$ в виде $\Phi(y) = [(1+y)/2]^{2\alpha} D(y)$, причем функция $D(y)$, как и $\Phi(y)$, может быть разложена в ряд по степеням y . Замена переменной в уравнении (3) приводит к выражению

$$y \frac{dD}{dy} + \alpha D = Z I(1/\nu, y) + E I(2/\nu, y), \quad (4)$$

где

$$I(\epsilon, y) = \frac{2^{-\epsilon} \nu^{\epsilon-2}}{\Gamma(1-\epsilon)} (1-y)^{\epsilon-2\alpha} \times \int_y^1 (1-v)^{2\alpha+\epsilon-2} (1-y/v)^{-\epsilon} v^{-\epsilon} D(v) dv.$$

Далее подставляем разложение $D(y) = \sum_n a_n y^n$ в (4) и приравниваем коэффициенты при одинаковых

степенях y^n в левой и правой частях уравнения. Это проще всего сделать с помощью прямого и обратного преобразования Меллина. Тогда приходим к бесконечной системе линейных уравнений относительно величин a_n . Эта система довольно сложна, хотя и содержит лишь произведения Γ -функций. Спектр задачи получается из условия равенства нулю определителя этой системы. Эта процедура может быть выполнена с помощью вычислений на ЭВМ с любой степенью точности.

2. Рассмотрим в качестве примера притягивающий потенциал Юкавы:

$$V = -V_0 e^{-r/a} r.$$

В этом случае УШ при $E = -|E| < 0$ выглядит так:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \left[\frac{l(l+1)}{x^2} + 1 \right] \Psi + \lambda e^{-x/b} \Psi = 0.$$

Здесь введены обозначения:

$$x = |E|^{1/2} r, \quad b = |E|^{1/2} a, \quad \lambda = V_0/|E|^{1/2}.$$

Применяя далее к УШ преобразование Лапласа, получаем уравнение для лапласовских образов:

$$(1-\omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi + \lambda \langle e^{-x/b} \Psi \rangle = 0, \quad (5)$$

при этом выбрано $\sigma = \alpha = \beta = l+1$. Отсюда при $b \rightarrow \infty$ можно получить уравнение в случае кулоновского потенциала:

$$(1-\omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} + (\lambda - 2\alpha\omega)\Phi = 0,$$

решение которого $\Phi = (1-\omega^2)^{-\alpha} [(1-\omega)/(1+\omega)]^{\lambda/2}$ регулярно в точке $\omega=1$ при $\lambda = 2(n_r + \alpha)$, т.е. спектр энергии имеет вид $E = -V_0^2/[4(n_r + \alpha)^2]$, $n_r = 0, 1, 2, \dots$.

Вводя новую величину $\Omega = b\omega/(b+\omega)$, уравнение (5) можно привести к виду

$$(1-\omega^2) \frac{d\Phi(\omega)}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi(\omega) + \lambda(\Omega/\omega)^{2\alpha}\Phi(\Omega) = 0.$$

Следуя далее схеме, описанной в разделе 1, из этого уравнения получаем основную формулу, позволяющую найти спектр:

$$(n+\alpha)a_n = 2^{2\alpha-1} \lambda b^{2\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\substack{m=n-k \\ m \geq 0}}^n a_k \times \frac{(2b+1)^{-(k+m+2\alpha)} (2b-1)^{n-m} \Gamma(m+k+2\alpha) k!}{\Gamma(k+2\alpha) m! (n-m)! \Gamma(k+m-n+1)}.$$

Например, ограничиваясь лишь коэффициентами a_0 и a_1 при $l=0$, получаем приближенное характеристическое уравнение для нахождения двух нижних уровней системы:

$$8(k\lambda+1)^6 - 2\lambda(k\lambda+1)^2 [3 + 4k\lambda(k\lambda+1)] + \lambda^2 = 0,$$

где $k = (2V_0 a)^{-1}$. Отсюда легко получить спектр УШ с кулоновским потенциалом ($k \rightarrow 0$): $\lambda_0 = 2$ при $n_r = 0$; $\lambda_1 = 4$ при $n_r = 1$.

Авторы глубоко благодарны В. Ф. Березницкой за постоянное внимание, А. В. Борисову, В. Ч. Жуковскому и Ю. М. Лоскутову за плодотворное обсуждение результатов работы.

УДК 517.958

О ВОЛНОВОДЕ В РЕЖИМЕ НЕВОЗБУЖДЕНИЯ ВОЛН

А. Н. Боголюбов, А. Л. Делицын, А. Г. Свешников

(кафедра математики)

Рассматривается задача излучения электромагнитных волн в волноводе. Устанавливается существование токов, не излучающих бегущие волны. Рассматриваемое явление согласуется с известной схемой Л. А. Вайнштейна. В то же время известные методы не позволяют выделить подобный класс решений.

В работе авторов [1] рассматривалась достаточно общая схема решения задачи возбуждения волновода с неоднородным заполнением. В настоящей работе предлагается подход, который позволяет доказать, что существуют комбинации токов и зарядов, не возбуждающие бегущие волны в волноводе.

Рассмотрим полый волновод, возбуждаемый переменным током и зарядами, расположенными в конечной области $(x, y) \in \Omega' \subset \Omega, z \in [z_1, z_2]$. Ток и заряды имеют вид (j_z -компонента — произвольна)

$$j_x = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad j_y = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \rho = -i\frac{\omega}{c^2}\psi,$$

где $\psi(x, y, z)$ — решение задачи

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + k^2 \psi = \frac{\partial j_z}{\partial z}, \quad (x, y) \in \Omega, \quad \psi|_{\partial\Omega} = 0, \quad (1)$$

параметр $k = \omega/c$. Таким образом, $\psi(x, y, z)$ является решением двумерной задачи, в которую переменная z входит как параметр, и функция ψ не равна тождественно нулю при $z_1 < z < z_2$. Данный ток определяется своей j_z -компонентой. Легко видеть, что таким образом выбранный ток удовлетворяет уравнению неразрывности

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} - i\omega\rho = 0.$$

Рассмотрим задачу возбуждения полого волновода этим током и покажем, что токи указанного вида не возбуждают бегущих волн. Для этого используем развиваемый авторами подход [1–3]. Запишем уравнения Максвелла в виде

$$a_1 A_1 = \frac{\partial A_2}{\partial z}, \quad a_2 A_2 = \frac{\partial A_1}{\partial z} + J, \quad (2)$$

Литература

1. Quigg C., Rosner J.L. // Phys. Rep. 1979. **56**. С. 167.
2. Вишивцев А.С., Норин Н.В., Сорокин В.Н. // ТМФ. 1996. **109**, №1. С. 107.
3. Вишивцев А.С., Вишивцев В.А., Татаринцев А.В., Френкин А.Р. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. №5. С. 62 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 5).

Поступила в редакцию 04.06.99

$$(\text{rot } H)_z + ikE_z = \frac{4\pi}{c}j_z, \quad (\text{rot } E)_z - ikH_z = 0,$$

где $A_1 = (H_x, H_y, E_z)$, $A_2 = (E_x, E_y, H_z)$, $J = (4\pi/c)(-j_y, j_x, -c\rho)$,

$$a_1 = \begin{pmatrix} 0 & ik & \frac{\partial}{\partial x} \\ -ik & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial}{\partial x} & -\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} 0 & -ik & \frac{\partial}{\partial x} \\ ik & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial}{\partial x} & -\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix}.$$

Граничные условия имеют вид

$$Hn|_{\partial Q} = 0, \quad E \times n|_{\partial Q} = 0.$$

Покажем, что существует решение задачи (2), имеющее вид

$$A_2 \equiv 0,$$

$$(A_{1x}, A_{1y}) = \text{rot}(\phi e_z), \quad A_{1z} = ik\phi,$$

где $\phi = \int_{z_1}^z \psi dz$. При этом вне области $z_1 < z < z_2$

поле $A_1(x, y, z) = 0$. То есть ток указанного вида не возбуждает бегущих волн. Действительно, в силу того что, по предположению,

$$A_1 = (\text{rot}(\phi e_z), ik\phi), \quad A_2 = 0,$$

и, как легко проверить, $a_1 A_1 = 0$, первое уравнение (2) выполняется для любого вектора указанного типа. Второе уравнение имеет вид

$$-\frac{\partial A_1}{\partial z} = J.$$

Это уравнение имеет решение, обращающееся в нуль при $z \leq z_1$, вида

$$A_1 = - \int_{-\infty}^z J dz.$$