УДК 517.8; 530.1

ПЕРВЫЙ КЛАСС ТОЧНО РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Гришкан Ю.С., Усольцев О.А.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, e-mail: ugrish@yandex.ru

Показано, что можно построить точные решения уравнения Шрёдингера, обладающие определённым типом конформной симметрии. Эти решения удобно находить, как решения присоединённого к уравнению Шрёдингера уравнения Риккати. Выделен класс I точных решений. Найдены точные решения некоторых потенциалов, входящих в этот класс, в частности, для потенциала линейного гармонического осциллятора с нелинейным членом 4-го порядка и для потенциала Леннарда – Джонса.

Ключевые слова: групповые методы, классы точных решений, уравнение Шрёдингера

THIRST CLASS OF EXACTLY SOLVABLE TASKS QANTUM MECAHANICS STATIONARY SCHRODINGER EUQATION

Grishkan Y.S., Usoltsev O.A.

Southern Federal University, Rostov-on-Don, e-mail: ugrish@yandex.ru

It is shown how to find some exact solutions of Schrodinger equation with some type of conformal symmetry. To find these solutions, it may be used an attached Riccati equation. It is selected the I class of its solutions. The exact solutions for I class is find. In particular, it is find solutions for linear harmonic oscillator with 4-order term and Lennard – Jones potential.

Keywords: group methods, classes of exact solutions, Schrodinger equation

Поиск точных решений стационарного уравнения Шрёдингера является пограничной областью между физикой и математикой. Как правило, физикам известен очень ограниченный набор таких решений. Однако, такие решения могут быть найдены для многих систем электромагнитного и сильного взаимодействий, таких как молекулы, атомы и кварконии. Для поиска этих решений выделим несколько классов потенциалов, обладающих конформной симметрией, и найдём решения для этих классов. Затем, приспособим найденные решения к конкретным 2-х и 3-х параметрическим потенциалам квантовых систем, хорошо известных в физике электромагнитного и сильного взаимодействий.

Как известно [1], уравнение Шрёдингера в координатном представлении

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (1)$$

после введения цепочки лестничных пары лестничных операторов

$$\hat{a}_n = \hat{p} + if_n(x); \quad \hat{a}_n^+ = \hat{p} - if_n(x),$$

сводится к нелинейному операторному уравнению Риккати для операторной функции $f_n = f_n(x)$ в координатном представлении:

$$\frac{df_n}{dx} + f_n^2 = U_n(x) - E_n. \qquad (2)$$

Цепочка операторов $\{E_n\}$ образует спектр оператора гамильтона $H = H_0 = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$.

Для простоты, не будем писать шляп над операторами.

Цепочка операторов $\{H_n\}$ факторизуется

$$H_n = a_n^+ a_n + E_n.$$

Для нахождения спектра E_n рассмотрим одномерное движение $f_n = f_n(q)$ и построим I класс точно решаемых задач для потенциалов

$$U_0(q) = A_0 Q^{2m} + B_0 Q^m + U_0, \qquad (3)$$

где m – произвольное действительное число; $Q = Q(x)$ – некоторая функциональная форма, которую необходимо задать.

Будем искать точное решение уравнения (2) в виде

$$f_n = \alpha_n Q^m + \beta_n;$$

$$\frac{dQ}{dx} = aQ^{2m} + bQ^m + c, \qquad (4)$$

где α_n, β_n – цепочки функций, подлежащих определению; a, b, c – известные константы.

Поставленная задача требует нахождения цепочек α_n, β_n, E_n, в виде функций констант A_0, B_0, U_0, a, b, c.

Собирая коэффициенты при одинаковых степенях Q в уравнениях (3)–(4), получим следующие уравнения для неизвестных α_0, β_0, E_0:

$$\alpha_0^2 + ma\alpha_0 = A_0;$$
$$\alpha_0(mb + 2\beta_0) = B_0; \qquad (5)$$
$$E_0 = U_0 - \beta_0^2 - mc\alpha_0.$$

Операторы цепочки находятся по рекуррентной формуле

$$H_n = H_{n-1} + \left[a_{n-1,}^+ a_{n-1}\right]. \qquad (6)$$

Построим первый оператор цепочки (2)

$$H_1 = a_1^+ a_1 + E_1.$$

Собирая коэффициенты при одинаковых степенях Q, построим систему уравнений для коэффициентов, подлежащих определению.

$$\alpha_1^2 + ma\alpha_1 = A_1;$$
$$\alpha_1(mb + 2\beta_1) = B_1; \qquad (7)$$
$$E_1 = U_1 - \beta_1^2 - mc\alpha_1,$$

где

$$U_1 = U_0 - 2\alpha_0 mc; \quad A_1 = A_0 - 2\alpha_0 ma;$$
$$B_1 = B_0 - 2\alpha_0 mb.$$

Для уравнений цепочки с индексом n получим

$$\alpha_n^2 + ma\alpha_n = A_n;$$
$$\alpha_n(mb + 2\beta_n) = B_n; \qquad (8)$$
$$E_n = U_n - \beta_n^2 - mc\alpha_n.$$

Из (8) следуют тогда решения

$$E_n = U_n - \frac{b^2}{4} + \frac{bB_n}{2\alpha_n} - \frac{B_n^2}{4\alpha_n} - mc\alpha_n, \qquad (9)$$

где

$$U_n = U_0 - 2mc\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k;$$
$$A_n = A_0 - 2ma\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k; \qquad (10)$$
$$B_n = B_0 - 2mb\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k.$$

Решение уравнения (9) даёт

$$\alpha_k = -\frac{ma}{2} + s_k\left(\frac{(ma)^2}{4} + A_k\right)^{1/2}, \qquad (11)$$

где знак $s_k = \pm 1$, $s_k^2 = 1$ устанавливается с учётом условий максимальности уровней энергии при факторизации.

Из (11) следует, что при $k = 0$

$$\alpha_0 = -\frac{ma}{2} + s_0\left(\frac{(ma)^2}{4} + A_0\right)^{1/2} = \frac{s_0}{2}\left((ma)^{1/2} - s_0\tilde{a}\right); \qquad (12)$$
$$\tilde{a} = ((ma)^2 + 4A_0)^{1/2}.$$

Тогда

$$\alpha_1 = -\frac{ma}{2} + \frac{s_1}{2}\left((ma)^2 + 4A_1\right)^{1/2} = -\frac{ma}{2} + \frac{s_1}{2}\left((ma)^2 + 4(A_0 - 2\alpha_0 ma)\right)^{1/2};$$
$$\alpha_1 = -\frac{ma}{2} + \frac{s_1}{2}\left((\tilde{a} - 2s_0 ma)^2\right)^{1/2} = -\frac{ma}{2} + \frac{s_1}{2}(a - 2s_0 a), \qquad (13)$$

то есть, $\alpha_1 = \frac{s_1}{2}\left[\tilde{a} - (2s_0 + s_1)ma\right]$.

Продолжая эту процедуру, получим

$$A_2 = A_0 - 2ma(\alpha_0 + \alpha_1); \quad \alpha_2 = \frac{s_2}{2}\left[\tilde{a} - (2s_0 + 2s_1 + s_2\right];$$
$$\alpha_0 + \alpha_1 = \frac{1}{2}(s_0 + s_1)\tilde{a} - \frac{1}{2}(s_0 + s_1)^2 ma. \qquad (14)$$

Продолжая эту процедуру по индукции, получаем

$$\alpha_k = \frac{1}{2}s_k\left[\tilde{a} - ma\left(2\sum_{m=0}^{k-1}s_m + s_k\right)\right]; \qquad (15)$$
$$\sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k = \frac{1}{2}\tilde{a}\sum_{k=0}^{n-1}s_k - \frac{1}{2}ma\left(\sum_{k=0}^{n-1}s_k^2\right).$$

Упорядоченный дискретный спектр E_n будет существовать только при $s_k = s$. Тогда из выражений (15) следует

$$\alpha_n = \frac{1}{2}s\tilde{a} - \frac{1}{2}(2n+1)ma; \qquad \sum_{k=0}^{n-1}\alpha_k = \frac{s}{2}\tilde{a}n - \frac{1}{2}man^2; \tag{16}$$

$$\begin{gathered} U_n = U_0 - mcs\tilde{a}n + m^2can^2; \\ A_n = A_0 - mas\tilde{a} + m^2a^2n^2; \\ B_n = B_0 - bs\tilde{a}n + m^2abn^2; \end{gathered} \tag{17}$$

$$\begin{gathered} E_n = U_0 - \frac{(mb)^2}{4} - \frac{1}{2}mc(s\tilde{a}) + mc\left[man^2 + (ma - s\tilde{a})\right] - \frac{\left(B_0 - mbs\tilde{a} + m^2abn^2\right)^2}{(2man + ma - s\tilde{a})^2} - \\ - \frac{mb\left(B_0 - mbs\,an + \tilde{m}^2abn^2\right)}{(2man + ma - s\tilde{a})}. \end{gathered} \tag{18}$$

I-1. Линейный гармонический осциллятор.

Пусть $m = 1$, $U_0 = B_0 = 0$, $a = 0$, $b = 0$, $c = 1$.

Потенциал линейного гармонического осциллятора имеет вид:

$$U(x) = A_0x^2 + B_0x + U_0. \tag{19}$$

Отсюда следует

$$E_n = -s\tilde{a}\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{20}$$

Из (19) видно что $s = -1$ и, следовательно,

$$E_n = \tilde{a}\left(n + \frac{1}{2}\right) = 2\sqrt{A_0}\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{21}$$

Подставляя в (20) $A_0 = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2$ получаем стандартный спектр.

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{22}$$

I-2. Нелинейный осциллятор.

Рассмотрим потенциал

$$U(x) = A_0x^4 + B_0x^2 + U_0; \tag{23}$$

$$m = 2,\ U_0 = B_0 \neq 0;$$

$$a \neq 0;\ b = 0;\ c = 1.$$

Полагая $2a = \frac{3}{4}\varepsilon_2$, $\tilde{a} = \hbar\omega$, получаем из (18), (19) спектр нелинейного осциллятора, совпадающий с [2] с точностью до первого порядка теории возмущений (второй член в (22), $a << 1$).

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3}{4}\varepsilon_2\left(2n^2 + 2n + 1\right) - \frac{(B_0)^2}{(4an + 2a + \tilde{a})^2} + U_0. \tag{24}$$

С более высокими порядками ТВ рассматриваемый спектр может совпасть при отличных от нуля коэффициентах A_0, B_0, U_0, $b = 0$, $a << 1$.

I-3. Потенциал Леннарда – Джонса.

Молекулярный потенциал Леннарда – Джонса имеет вид:

$$U(r) = 4\varepsilon_0\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right). \tag{25}$$

То есть, $m = -6$; $A_0 = 4\varepsilon_0\sigma^{12}$; $B_0 = 4\varepsilon_0\sigma^6$; $U_0 = 0$; $a, b, c \neq 0$.

$$\begin{gathered} E_n = U_0 - \frac{(6b)^2}{4} + 3c(\tilde{a}) + 6c\left[6an^2 + (6a + \tilde{a})\right] - \frac{\left(B_0 + 6b\tilde{a} + 36\,abn^2\right)^2}{(12an + 6a + \tilde{a})^2} - \\ - \frac{mb\left(B_0 + 6b\tilde{a}n + 36abn^2\right)}{(12an + 6a + \tilde{a})}; \end{gathered} \tag{26}$$

$$\tilde{a} = \left((6a)^2 + 36A_0\right)^{1/2}.$$

Список литературы

1. Infeld L., Hall T.E. The factorization method // Reviews of modern Physics – Vol. 23, № 1. – P. 21–69.

2. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. – М.: Мир, 1974. – С. 1–338.