Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Сорокин, А. С. Вшивцев, Н. В. Норин, Решение спектральной задачи для уравнения Шредингера с вырожденным полиномиальным потенциалом четной степени, *ТМФ*, 1996, том 109, номер 1, 107–123

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1215>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.45.116

26 апреля 2023 г., 15:16:13

А. С. Вшивцев*, Н. В. Норин*, В. Н. Сорокин†

РЕШЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ВЫРОЖДЕННЫМ ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ЧЕТНОЙ СТЕПЕНИ

Для стационарного уравнения Шредингера с вырожденным типом потенциалов $U(x) = x^{2r}$, где $r \in Z_+$, описывающим ситуации, связанные с фазовыми переходами в квантовых системах, вскрыта симметрия задачи путем приведения ее к алгебраической для нахождения спектра. Построена аналитическая процедура сходящейся теории возмущений нахождения собственных значений для потенциалов указанного типа, которая реализована численно при $r = 2, 3, \dots, 18$. Найдены нижние уровни энергии и описаны их свойства.

ВВЕДЕНИЕ

Нахождение спектра и построение сходящегося ряда теории возмущений для ангармонического осциллятора — одна из проблем. Эта задача квантовой механики, сформулированная в работах Шредингера и Фока [1, 2], не потеряла своей актуальности и по настоящее время. Несмотря на то что ее изучению отводится почетное место в любом учебнике по квантовой механике, а также посвящено значительное число статей, включающих как некоторые эвристические рассуждения, так и строгие математические результаты, тема еще далека от полного понимания. Интерес к этой теме обусловлен рядом причин. Одна из них — неудовлетворенность, с которой теоретики обращаются с расходящимися рядами теории возмущений, а также неумение в полной степени осознать их поведение и, что наиболее важно, аналитическую структуру по константе связи и как следствие утрату тех или иных физических особенностей при решении конкретных задач. В самом деле, основная часть достижений современной квантовой теории поля основана на результатах обычной теории возмущений, ряды которой в большинстве случаев асимптотические. По мере того как этот факт осознается, у исследователей возникает интерес к формулировке различных непертурбативных методов. Так,

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет)

†Московский государственный университет

например, одномерным аналогом полевых теорий с потенциалом типа ϕ^4 является ангармонический осциллятор.

В данной работе мы рассмотрим решение уравнения

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^{2r} \right\} \phi(x) = E\phi(x).$$

Решение задачи нахождения спектра и волновых функций при помощи вскрытия симметрии уравнения сводится к алгебраической задаче. Реализация этой процедуры состоит в выполнении следующих этапов:

1. Изучение асимптотического поведения ($x \rightarrow \infty$) решений уравнения — $\phi(x) \sim e^{-\frac{x^{r+1}}{r+1}}$. Для $r = 4$ это может быть выполнено на основе группового подхода или так называемого метода квазиточно решаемых задач [3–8].

2. Далее с помощью методов теории функций (аналогично тому, как это реализовали Лаггер, Эрмит и т.д.) с весами $e^{-x^{r+1}}$ строятся так называемые биортогональные многочлены $\Lambda_n^p(x)$ [9, 10]:

$$\Lambda_n^p(x) = e^{x^r} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \right\}^n x^{n+p} \frac{e^{-x^r}}{n!}.$$

Этот шаг позволяет правильно описывать возбужденные состояния спектра.

3. На третьем этапе на основе знания структуры решения рассматриваемого уравнения (аналогично тому, как это имеет место при решении обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами при использовании метода интегральных преобразований с рядом Лапласа e^{-px}) задача сводится к алгебраической.

Мы не будем описывать различные подходы к решению уравнения Шредингера, чтобы не загромождать данную работу. Если все же у читателя имеется соответствующий интерес, то по этим вопросам опубликован обширный материал [11–16]. Отметим лишь тот факт, что наш подход ранее в литературе не обсуждался.

Более практический (физический) интерес к обсуждению решения уравнения Шредингера с потенциалом x^{2r} , не связанный с построением формальной теории, обусловливается следующими причинами. При реализации процедуры разделения переменных релятивистские уравнения Дирака и Клейна–Гордона–Фока в ряде случаев (после преобразований систем координат) могут быть приведены к такому виду [17, 18].

Следующий аспект представляется нам более важным с точки зрения приложений к физическим задачам. Рассмотрение потенциалов типа x^{2r} соответствует критической ситуации обращения в нуль всех коэффициентов полинома $P_{2r}(x)$, кроме старшего. Эта ситуация отвечает вырождению и обычно связывается с фазовыми переходами в системе [19–21]. Так, рассмотрим тривиальный пример с таким типом потенциала: $x^4 + \varepsilon x^2 = P_4^+(x)$, $\varepsilon > 0$. Этот потенциал достаточно гладкий, выпуклый вниз, и для него выполнены все условия процедуры ВКБ-приближения [14, 16]. В точке $\varepsilon = 0$, соответствующей “началу” фазового перехода, имеется вырождение (при $x_0 = 0$) и, как

известно (см., например, [19, 22, 23]), должна происходить перестройка спектра. Затем потенциал изменяет симметрию $P_4^-(x) = x^4 - \varepsilon x^2$, $\varepsilon > 0$, и соответственно могут происходить изменения физических свойств системы, определяемые спектром. Таким образом, точка вырождения (при управляющем параметре $\varepsilon = 0$, вообще говоря, зависящем от внешних параметров задачи) должна быть хорошо изучена. Возможно, что знание тонких спектральных свойств исследуемой задачи позволит точнее сформулировать дополнительные критерии фазовых переходов в реальных физических системах. Это оказывается тем более важным фактом, что спектральные задачи, рассмотренные ранее [14, 16], касались асимптотических свойств спектра изучаемого уравнения без подробного исследования поведения нижних уровней. Наше рассмотрение позволяет ликвидировать этот пробел в теории уравнения Шредингера для потенциалов такого типа.

Данная статья организована следующим образом. В разделе 1 описана процедура сведения решения исследуемого уравнения Шредингера к алгебраической задаче. В разделе 2 обсужден ангармонический осциллятор с потенциалом вида $(x^2 - \varepsilon)^2$. В разделе 3 представлены численные результаты решения полученной алгебраической задачи при $r = 2, 3, \dots, 18$ и дано их обсуждение.

1. АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР С ВЫРОЖДЕНИЕМ

Перейдем теперь к ангармоническому осциллятору. Зафиксируем натуральное число r и поставим следующую задачу.

Требуется найти все значения параметра λ , при каждом из которых дифференциальное уравнение

$$\phi'' - x^{2r}\phi = -\lambda\phi \quad (1)$$

имеет решение $\phi(x)$ из пространства $L_2(R)$, т.е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx < +\infty. \quad (2)$$

В частности, при $r = 1$ получим задачу о гармоническом осцилляторе.

Найдем асимптотику решений уравнения (1) при $x \rightarrow \pm\infty$. Записывая волновую функцию в виде $\phi(x) = \exp s(x)$, приходим к уравнению

$$s'' + s'^2 - x^{2r} = -\lambda.$$

При больших x решения этого уравнения эквивалентны решениям уравнения $s'^2 = x^{2r}$, т.е. функциям $s(x) = \pm |x|^{r+1}/(r+1)$. Таким образом, при любом значении параметра λ общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\phi(x) = A \exp\left\{\frac{|x|^{r+1}}{r+1}(1 + o(1))\right\} + B \exp\left\{-\frac{|x|^{r+1}}{r+1}(1 + o(1))\right\}, \quad x \rightarrow \pm\infty,$$

где A и B — произвольные постоянные. Поэтому условие (2) можно заменить граничными условиями

$$\phi(x) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad x \rightarrow \pm\infty \quad (2a)$$

или условиями

$$\phi(x) = \exp\left\{-\frac{|x|^{r+1}}{r+1}(1+o(1))\right\} \quad \text{при} \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (2b)$$

Дифференциальное выражение $-\phi'' + x^{2r}\phi$ определяет положительный неограниченный самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве $L_2(R)$, который тем самым имеет положительный дискретный спектр (заметим, что спектр (1) является невырожденным),

$$0 < \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n < \dots, \quad \lambda_n \rightarrow \infty.$$

Обозначим через

$$N(\lambda) = \sum_{\lambda_n < \lambda} 1$$

функцию распределения собственных значений этого оператора. По теореме Титчмарша–Карлемана о распределении собственных значений полуограниченных операторов Штурма–Лиувилля имеем следующую асимптотическую формулу:

$$N(\lambda) \sim \frac{1}{\pi} \int_{x^{2r} < \lambda} \sqrt{\lambda - x^{2r}} dx, \quad \lambda \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Вычисляя интеграл (3), получим

$$N(\lambda) \sim \lambda^{(r+1)/2r} B(3/2, 1/2r) / \pi r, \quad \lambda \rightarrow \infty. \quad (4)$$

К решению задачи нахождения спектра ангармонического осциллятора при $r > 1$ можно применить метод, основанный на ее связи с многочленами совместной ортогональности, которые описывались нами ранее [10].

Воспользуемся явной симметрией задачи относительно преобразования $x \rightarrow -x$ и будем вначале искать все четные решения уравнения (1), которые удовлетворяют начальному условию $\phi(0, \lambda) = 1$. Напишем разложение волновой функции в ряд Тейлора

$$\phi(x, \lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p(\lambda) x^{2p}. \quad (5)$$

Подстановка ряда (5) в уравнение (1) приводит к рекуррентному соотношению

$$(2p+2)(2p+1)a_{p+1} - a_{p-r} = -\lambda a_p, \quad p = 0, 1, 2, \dots, \quad (6a)$$

с начальными условиями

$$a_{-r} = \dots = a_{-1} = 0, \quad a_0 = 1. \quad (66)$$

Таким образом, мы пришли к многочленам совместной ортогональности с матрицей Якоби, соответствующей (6а). Для того чтобы в этом убедиться, достаточно положить $b_p(\lambda) = \eta^p a_p(-\lambda/\eta)$, где $\eta = \exp(\pi i/(r+1))$. Действительно, при этом преобразовании рекуррентное соотношение (6а) перейдет в соотношение

$$(2p+2)(2p+1)b_p(\lambda) + b_{p-r}(\lambda) = \lambda b_p(\lambda), \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

Другими словами, спектральные функции оператора (6) определены на луче $\Delta = \{t\eta : t > 0\}$. Многочлены $a_p(\lambda)$ инвариантны относительно группы Z_{r+1} .

Примем нормировку, при которой матрица Якоби станет почти симметричной, а именно, положим

$$q_p(\lambda) = k_p a_p(\lambda),$$

где

$$k_p = (r+1)^{\frac{2p}{r+1}} \Gamma\left(\frac{2p+r}{r+1}\right) / \Gamma\left(\frac{r}{r+1}\right), \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

Тогда многочлены $q_p(\lambda)$ будут удовлетворять рекуррентному соотношению

$$(p+1)q_{p+1} - (p-r/2)q_{p-r} = -\frac{\lambda}{2(r+1)^{\frac{r-1}{r+1}} \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right)} B\left(\frac{2p+1}{r+1}, \frac{r-1}{r+1}\right) q_p, \\ p = 0, 1, 2, \dots, \quad q_{-r} = \dots = q_{-1} = 0, \quad q_0 = 1, \quad (7)$$

которому соответствует нормированная матрица Якоби

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & \beta_0 & & \\ \alpha_0 & 0 & \dots & 0 & \beta_1 & \\ & \alpha_1 & 0 & \dots & 0 & \beta_2 \\ & & \ddots & \ddots & & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

где

$$\alpha_p = \frac{2(p+1)(r+1)^{\frac{r-1}{r+1}} \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right)}{B\left(\frac{2p+1}{r+1}, \frac{r-1}{r+1}\right)}, \quad (7a)$$

$$\beta_p = -\frac{2(p+r/2)(r+1)^{\frac{r-1}{r+1}} \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right)}{B\left(\frac{2p+1}{r+1}, \frac{r-1}{r+1}\right)} \quad (76)$$

и $p = 0, 1, 2, \dots$. Начиная с этого момента считаем, что $r > 1$.

Из формул (7), (7а), (7б) и формулы Стирлинга вытекает, что элементы нормированной матрицы Якоби имеют следующую асимптотику:

$$\alpha_p \sim (2p)^{\frac{2r}{r+1}}, \quad \beta_p \sim (2p)^{\frac{2r}{r+1}}, \quad p \rightarrow \infty.$$

Однако тогда в соответствии с теорией потенциала Гончара–Рахманова мы можем сделать вывод, что спектральные функции оператора (7) асимптотически ведут себя как

$$\cos^{-1}(d\lambda^\mu), \quad |\lambda| \rightarrow \infty, \quad (8)$$

где $d = B(1/2r, 1/2)/(2r+2)$, $\mu = (r+1)/2r$. Положительные полюсы функции (8) равны (сравни с результатом, полученным методом ВКБ)

$$\lambda_n = \{\pi r(2n+1)/B(3/2, 1/2r)\}^{2r/(r+1)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

что согласуется с формулой (4). Напомним, что мы пока изучаем лишь четную часть спектра.

Рассмотрим производящую функцию многочленов $q_p(\lambda)$:

$$\Phi(\lambda, w) = \sum_{p=0}^{\infty} q_p(\lambda) w^{\frac{2p}{r+1}}.$$

Умножим обе части равенства (7) на $w^{\frac{2p+1-r}{r+1}}$ и просуммируем по всем $p = 0, 1, 2, \dots$. Имеем

$$\sum_{p=0}^{\infty} (p-r/2) q_{p-r} w^{\frac{2p+1-r}{r+1}} = \frac{r+1}{2} w^{\frac{r+2}{r+1}} \frac{\partial}{\partial w} w^{\frac{r}{r+1}} \Phi(\lambda, w).$$

Таким образом, в левой части равенства мы получим следующий дифференциальный оператор:

$$\frac{r+1}{2} \left\{ (1-w^2) \frac{\partial}{\partial w} \Phi(\lambda, w) - \frac{r}{r+1} w \Phi(\lambda, w) \right\}.$$

Записывая интегральное представление бета-функции, получим

$$\sum_{p=0}^{\infty} B\left(\frac{2p+1}{r+1}, \frac{r-1}{r+1}\right) q_p(\lambda) w^{\frac{2p+1-r}{r+1}} = w^{-\frac{r-1}{r+1}} \int_0^1 (1-t)^{-\frac{2}{r+1}} t^{-\frac{r}{r+1}} \Phi(t, w) dt.$$

Обозначим

$$\tilde{\lambda} = \lambda(r+1)^{-2r/(r+1)} / \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right).$$

Окончательно приходим к выводу, что производящая функция $\Phi(w) = \Phi(\lambda, w)$ является решением следующего интегродифференциального уравнения:

$$(1 - w^2)\Phi' - \frac{r}{r+1}w\Phi = -\tilde{\lambda}w^{-\frac{r-1}{r+1}}\Phi^*, \quad (9a)$$

где $\Phi^*(w)$ – результат применения к $\Phi(w)$ интегрального оператора

$$\Phi^*(w) = \int_0^1 t^{-\frac{r}{r+1}}(1-t)^{-\frac{2}{r+1}}\Phi(tw)dt, \quad (9b)$$

при этом должно выполняться начальное условие $\Phi(0) = 1$. По существу, функция $\Phi(w) = \Phi(\lambda, w)$ получается применением к волновой функции $\phi(x) = \phi(x, \lambda)$ следующего обобщенного преобразования Лапласа:

$$\phi(x) \Rightarrow \Phi(w) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{r}{r+1}\right)} r^{+1} \sqrt{\frac{r+1}{w^r}} \int_0^{+\infty} \phi(x) \exp\left\{-\frac{x^{r+1}}{r+1} \frac{1}{w}\right\} x^{r-1} dx, \quad (10)$$

действительно,

$$x^{2p} \Rightarrow \frac{1}{\Gamma\left(\frac{r}{r+1}\right)} r^{+1} \sqrt{\frac{r+1}{w^r}} \int_0^{+\infty} x^{2p+r-1} \exp\left\{-\frac{x^{r+1}}{r+1} \frac{1}{w}\right\} dx = k_p w^{\frac{2p}{r+1}}.$$

Следующее обобщенное преобразование Миттаг-Лефлера будет обратным к (10):

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|w|=\rho} \Phi\left(w^{\frac{r+1}{2}}\right) E\left(\frac{x^2}{w}\right) \frac{dw}{w},$$

где $0 < \rho < 1$, и $E(z) = \sum_{p=0}^{\infty} z^p/k_p$ – функция Миттаг-Лефлера.

Отсюда мы можем сделать важный вывод, что граничные условия (2б) выполняются в том и только в том случае, если $w = 1$ – правильная точка функции $\Phi(w)$, и, значит, эта функция регулярна в правой полуплоскости $\Re w > 0$.

Этим замечанием, по существу, обуславливается выбор производящей функции в форме, предложенной выше. Конечно, мы могли бы с самого начала решать уравнение ангармонического осциллятора (1) с помощью интегрального преобразования (10). Формально этот метод полностью эквивалентен предложенному нами методу рекуррентных соотношений, который мы тем не менее считаем здесь более удачным, поскольку, как было отмечено выше, известные в теории функций результаты о матрицах Якоби позволяют сразу же получить асимптотику спектра и асимптотику спектральной меры дискретного оператора Штурма–Лиувилля (7). Последнее обстоятельство также может быть использовано при построении эффективного численного метода, отличающегося от описанного в настоящей работе.

При $\tilde{\lambda} = 0$ уравнение (9а) обращается в дифференциальное уравнение первого порядка

$$(1 - w^2)\Phi' - \frac{r}{r+1}w\Phi = 0.$$

Решая его методом разделения переменных и учитывая начальное условие, получим

$$\Phi(w) = (1 - w^2)^{-\frac{r}{2(r+1)}}.$$

Поэтому решения интегродифференциального уравнения (9а) удобно искать в виде

$$\Phi(w) = H(w)(1 - w^2)^{-\frac{r}{2(r+1)}}. \quad (11)$$

Подстановка формулы (11) в уравнение (9а) приводит к уравнению

$$(1 - w^2)H' = \tilde{\lambda}w^{-\frac{r-1}{r+1}}(1 - w^2)^{\frac{r}{2(r+1)}} \int_0^1 t^{-\frac{r}{r+1}}(1 - t)^{-\frac{2}{r+1}}(1 - t^2w^2)^{-\frac{r}{2(r+1)}} H(tw) dt. \quad (12)$$

Имея в виду дальнейшую алгебраизацию задачи, сделаем в уравнении (12) дробно-линейную замену переменной

$$x = (1 - w)/(1 + w), \quad (13)$$

при которой правая полуплоскость $\Re w > 0$ переходит в единичный круг $|x| < 1$, и введем новую неизвестную функцию по формуле

$$\tilde{\Lambda}(x) = H(w). \quad (14)$$

Тогда левая часть уравнения (12) примет вид

$$\left(1 - \left(\frac{1-x}{1+x}\right)^2\right) \cdot \tilde{\Lambda}'(x) \cdot \left(-\frac{2}{(1+x)^2}\right)^{-1} = -2x\tilde{\Lambda}'(x).$$

Прежде чем сделать замену (13) в правой части уравнения (12), введем новую переменную интегрирования $\theta = tw$. Тогда справа получим

$$-\tilde{\lambda}w^{\frac{2-r}{r+1}}(1 - w^2)^{\frac{r}{2(r+1)}} \int_0^w \theta^{-\frac{r}{r+1}}(w - \theta)^{-\frac{2}{r+1}}(1 - \theta^2)^{-\frac{r}{2(r+1)}} H(\theta) d\theta. \quad (15)$$

Теперь в (15) можно сделать замену (13) и одновременно аналогичную замену переменной интегрирования $u = (1 - \theta)/(1 + \theta)$. В результате (15) примет вид

$$-\tilde{\lambda}2^{-\frac{2}{r+1}}(1 - x)^{\frac{2-r}{r+1}}x^{\frac{r}{2(r+1)}} \int_x^1 (1 - x/u)^{-\frac{2}{r+1}}(1 - u)^{-\frac{r}{r+1}}u^{\frac{r-2}{2(r+1)}} \tilde{\Lambda}(u) \frac{du}{u}.$$

И, наконец, положим $\nu = \tilde{\lambda} \cdot 2^{-\frac{2}{r+1}}$. Тем самым мы показали, что функция $\tilde{\Lambda}(x)$ удовлетворяет следующему интегродифференциальному уравнению:

$$x^{\frac{r+2}{2(r+1)}}(1-x)^{\frac{r-2}{r+1}}\tilde{\Lambda}'(x) = \nu \int_x^1 (1-x/u)^{-\frac{2}{r+1}}(1-u)^{-\frac{r}{r+1}}u^{\frac{r-2}{2(r+1)}}\tilde{\Lambda}(u)\frac{du}{u}. \quad (16)$$

Начальное условие перейдет в начальное условие $\tilde{\Lambda}(1) = 1$. Напомним, что спектральное условие на функцию $\Phi(w)$ заключалось в том, что эта функция должна быть регулярной в правой полуплоскости $\Re w > 0$. Учитывая (11) и (14), мы можем сформулировать спектральное условие на функцию $\tilde{\Lambda}(x)$, а именно, функция

$$\tilde{\Lambda}(x)x^{-\frac{r}{2(r+1)}} = (1-x)^{\frac{3}{r+1}}\Lambda(x)$$

должна быть регулярной в единичном круге $|x| < 1$.

В результате уравнение (16) преобразуется в уравнение

$$x(1-x)\Lambda'(x) + \frac{r-(r+6)x}{2(r+1)}\Lambda(x) = \nu \int_x^1 (u-x)^{-\frac{2}{r+1}}(1-u)^{\frac{3-r}{r+1}}\Lambda(u)du. \quad (17)$$

Отметим, что в левой части уравнения (17) стоит дифференциальный оператор гипергеометрического типа, а в правой части – интеграл типа свертки Меллина.

Спектральная задача ставится теперь следующим образом. Требуется найти все значения параметра ν , при каждом из которых уравнение (17) имеет своим решением не равную тождественно нулю функцию $\Lambda(x)$, регулярную в единичном круге.

Алгебраизация задачи. Сведем задачу (17) к алгебраической. Будем искать решение этого уравнения в виде степенного ряда

$$\Lambda(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n. \quad (18)$$

Подстановка ряда (18) в левую часть уравнения (17) даст степенной ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[c_n \left(n + \frac{r}{2(r+1)} \right) - c_{n-1} \left(n + \frac{4-r}{2(r+1)} \right) \right] x^n. \quad (19)$$

Для того чтобы найти разложение в степенной ряд правой части уравнения (17), обозначим

$$J(x) = \int_x^1 (u-x)^{-\frac{2}{r+1}}(1-u)^{\frac{3-r}{r+1}}\Lambda(u)du$$

и вычислим преобразование Меллина этой функции. Получим $J(x) = \sum_{n=0}^{\infty} R_n x^n$, где $R_n = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho_{n,m}$. Здесь

$$\rho_{n,m} = \frac{\left(\frac{2}{r+1}\right)_n}{n!} B\left(\frac{r-1}{r+1}, \frac{4}{r+1}\right) b_{m-n},$$

$$b_k = \begin{cases} \left(\frac{r-1}{r+1}\right)_k / \left(\frac{r+3}{r+1}\right)_k, & \text{если } k > 0, \\ 1, & \text{если } k = 0, \\ \left(-\frac{2}{r+1}\right)_{|k|} / \left(\frac{2}{r+1}\right)_{|k|}, & \text{если } k < 0. \end{cases}$$

При этом используется обозначение $(c)_n = c(c+1) \dots (c+n-1)$ для символа Похгаммера.

Таким образом, учитывая (19) и вводя обозначение

$$\varkappa = \left\{ \nu B\left(\frac{r-1}{r+1}, \frac{4}{r+1}\right) \right\}^{-1},$$

приходим к следующей задаче на собственные числа:

$$\sum_{m=0}^{\infty} b_{m-n} c_m = \varkappa \frac{n!}{\left(\frac{2}{r+1}\right)_n} \left[c_n \left(n + \frac{r}{2(r+1)} \right) - c_{n-1} \left(n + \frac{4-r}{2(r+1)} \right) \right]. \quad (20)$$

Можно считать последовательность $\bar{c} = (c_0, c_1, c_2, \dots)$ элементом гильбертова пространства l_2 . Тогда соотношение (20) будет иметь вид $B\bar{c} = xA\bar{c}$, где A и B – операторы, определяемые левой и правой частями соотношения (20), соответственно. Полученное уравнение также можно записать в виде $K\bar{c} = x\bar{c}$, где $K = A^{-1}B$. Нетрудно убедиться в том, что K – компактный оператор. Таким образом, соотношение (20) представляет собой задачу на собственные числа некоторого компактного оператора в гильбертовом пространстве l_2 . Заметим, что спектр полученного компактного оператора состоит из чисел C/λ_n , где λ_n – собственные значения исходного уравнения Шредингера, а C – некоторая постоянная.

Методы приближенного вычисления собственных значений таких операторов хорошо известны. Мы покажем, что даже простейший вариант приближения компактного оператора (20) конечномерными позволяет получить большую информацию о спектрах ангармонических осцилляторов, хотя при проведении расчетов можно существенно улучшить скорость сходимости методом Рунге и другими численными методами.

Аналогичным образом будем искать нечетную часть спектра ангармонических осцилляторов.

Пусть $\phi(x, \lambda)$ – нечетные решения уравнения (41), удовлетворяющие начальному условию $\phi'_x(0, \lambda) = 1$. Напишем разложение этой функции в ряд Тейлора

$$\phi(x, \lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p(\lambda) x^{2p+1},$$

подстановка которого в уравнение (1) приводит к рекуррентному соотношению

$$(2p+3)(2p+2)a_{p+1} - a_{p-r} = -\lambda a_p, \quad p = 0, 1, 2, \dots,$$

с начальными условиями

$$a_{-r} = \dots = a_{-1} = 0, \quad a_0 = 1.$$

Таким образом, мы пришли к многочленам совместной ортогональности. Применим нормировку

$$q_p(\lambda) = k_p a_p(\lambda), \quad k_p = (2r+1)^{\frac{2p}{r+1}+1} \Gamma\left(\frac{2p+r+2}{r+1}\right) / \Gamma\left(\frac{1}{r+1}\right).$$

Тогда многочлены $q_p(\lambda)$ будут удовлетворять рекуррентному соотношению

$$(p+1)q_{p+1} - \left(p - \frac{r-2}{2}\right)q_{p-r} = -\frac{\lambda}{2(r+1)^{\frac{r-1}{r+1}} \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right)} B\left(\frac{2p+3}{r+1}, \frac{r-1}{r+1}\right) q_p, \\ q_{-r} = \dots = q_{-1} = 0, \quad q_0 = 1. \quad (21)$$

Из (21) получим, что производящая функция многочленов $q_p(\lambda)$ удовлетворяет интегро-дифференциальному уравнению

$$(1-w^2)\Phi' - \frac{r+2}{r+1}w\Phi = -\tilde{\lambda}w^{\frac{1-r}{1+r}}\Phi^*(w), \quad (22)$$

где

$$\Phi^*(w) = \int_0^1 t^{\frac{2-r}{r+1}} (1-t)^{-\frac{2}{r+1}} \Phi(tw) dt,$$

при этом выполняется начальное условие $\Phi(0) = 1$.

Функция $\Phi(w)$ получается из $\phi(x, \lambda)$ интегральным преобразованием, аналогичным (10).

Сделаем в уравнении (22) подстановку $\Phi(w) = H(w)(1-w^2)^{-\frac{1}{2}\frac{r+2}{r+1}}$, а затем замену переменной $\tilde{\Lambda}(x) = H(w)$, где $x = \frac{1-w}{1+w}$, получим уравнение на функцию $\tilde{\Lambda}(x)$:

$$x^{\frac{r}{2(r+1)}} (1-x)^{\frac{r}{r+1}} \Lambda'(x) = \nu \int_x^1 (1-x/u)^{-\frac{r}{r+1}} u^{\frac{r-4}{2(r+1)}} (1-u)^{\frac{2-r}{r+1}} \Lambda(u) \frac{du}{u}.$$

И, наконец, после подстановки

$$\tilde{\Lambda}(x) = x^{\frac{r+2}{2(r+1)}} (1-x)^{\frac{1}{r+1}} \Lambda(x)$$

приходим к следующей спектральной задаче. Требуется найти все значения параметра ν , при каждом из которых уравнение

$$x(1-x)\Lambda'(x) + \frac{(r+2)-(r+4)x}{2(r+1)}\Lambda(x) = \nu \int_x^1 (u-x)^{-\frac{2}{r+1}} (1-u)^{\frac{3-r}{r+1}} \Lambda(u) du \quad (23)$$

имеет своим решением не равную тождественно нулю функцию $\Lambda(x)$, регулярную в единичном круге.

Отметим, что уравнение (23) вполне аналогично уравнению (17) и сводится к алгебраическому так же, как описано выше.

2. АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР С ПОТЕНЦИАЛОМ ВИДА $(x^2 - \varepsilon)^2$

Во введении мы отмечали, что потенциал вида $(x^2 - \varepsilon)^2$ может описывать две физически различные ситуации: $\varepsilon > 0$ отвечает нарушенной, а $\varepsilon \leq 0$ – восстановленной симметрии системы. Для изучения спектра уравнения Шредингера с потенциалом заданного типа можно использовать предложенную нами выше процедуру. Как и ранее, будем искать четные и нечетные решения уравнения

$$\psi'' - (x^2 - \varepsilon)^2 \psi = -\lambda \psi \quad (24)$$

раздельно. Вначале ищем четные решения (24) в виде

$$\psi(x) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \frac{x^{2p}}{f_p}, \quad f_p = 3^{2p/3} \frac{\Gamma(\frac{2p+2}{3})}{\Gamma(2/3)}, \quad p \in Z_+. \quad (25)$$

Подставляя (25) в (24) и учитывая явный вид f_p , найдем рекуррентные соотношения

$$(p+1)a_{p+1} + \varepsilon \sqrt[3]{3} \frac{\Gamma(\frac{2p+1}{3})}{\Gamma(2p/3)} a_{p-1} - (p-1)a_{p-2} = (\varepsilon^2 - \lambda) \frac{\Gamma(\frac{2p+1}{3})}{\Gamma(\frac{2p+2}{3})} 2 \sqrt[3]{3} a_p.$$

После введения производящей функции

$$\Phi(W) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p W^{2p/3}$$

и проведения некоторых несложных преобразований придем к уравнению

$$\frac{3}{2} W^{1/3} \left\{ (1 - W^2) \Phi' - \frac{2}{3} W \Phi \right\} + \frac{\varepsilon \sqrt[3]{3}}{\Gamma(2/3)} \left\{ \frac{2}{3} W^{2/3} \Phi^{\#} + W^{5/3} \Phi^{\#'} \right\} = \frac{(\varepsilon^2 - \lambda)}{2 \sqrt[3]{3} \Gamma(1/3)} \Phi^*,$$

здесь

$$\begin{aligned} \Phi^{\#}(W) &= \int_0^1 (1-t)^{-1/3} \Phi(tW) dt, \\ \Phi^*(W) &= \int_0^1 (1-t)^{-2/3} t^{-2/3} \Phi(tW) dt. \end{aligned}$$

Далее воспользуемся подстановками, аналогичными описанным выше,

$$x^{2/3} \tilde{\Lambda}'(x) + b(1-x)^{2/3} [\tilde{\Lambda}^{\#} + 3(1+x) \tilde{\Lambda}^{\#'}] = \mu \tilde{\Lambda}^*, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} b &= \varepsilon [2^{1/3} 3^{5/3} \Gamma(2/3)]^{-1}, \quad \mu = (\lambda - \varepsilon^2) [2^{2/3} 3^{4/3} \Gamma(1/3)]^{-1}, \\ \tilde{\Lambda}^{\#}(x) &= \int_x^1 \left(1 - \frac{x}{u}\right)^{-1/3} u^{-1/3} \tilde{\Lambda}(u) \frac{du}{1+u}, \\ \tilde{\Lambda}^*(x) &= \int_x^1 \left(1 - \frac{x}{u}\right)^{-2/3} (1-u)^{-2/3} \tilde{\Lambda}(u) \frac{du}{u}. \end{aligned} \quad (27)$$

В полном соответствии с изложенным в разделе 1, т.е. с ситуацией ненарушенной симметрии, решение (26) ищется в виде

$$\tilde{\Lambda}(x) = x^{1/3} \Lambda(x). \quad (28)$$

В итоге для четных решений получим уравнение

$$x\Lambda' + \frac{1}{3}\Lambda + b(1-x)^{2/3} [\Lambda^{\#} + 3(1+x)\Lambda^{\#'}] = \mu\Lambda^*. \quad (29)$$

Соответственно для нечетных решений найдем

$$x(1-x)\Lambda' + \left(\frac{2}{3} - x\right)\Lambda + b(1-x)^{2/3} [\Lambda_1^{\#} + 3(1+x)\Lambda_1^{\#'}] = \mu\Lambda^*. \quad (30)$$

Отметим, что функция $\Lambda(x)$ – решение (29) и (30) является регулярной в единичном круге. Функции $\Lambda^{\#}(x)$, $\Lambda_1^{\#}(x)$ и $\Lambda^*(x)$, фигурирующие в (29) и (30), определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \Lambda^{\#}(x) &= \int_x^1 (u-x)^{-1/3} \Lambda(u) \frac{du}{1+u}, \\ \Lambda_1^{\#}(x) &= \int_x^1 (u-x)^{-1/3} (1-u) \Lambda(u) \frac{du}{1+u}, \\ \Lambda^*(x) &= \int_x^1 (u-x)^{-2/3} (1-u)^{-2/3} \Lambda(u) \frac{du}{u}. \end{aligned} \quad (31)$$

Следует указать, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ (29) и (30) переходят в соответствующие уравнения для потенциала с вырождением x^4 . Сведение задачи к алгебраической осуществляется приемом, описанным выше. Дальнейшее решение задачи о нахождении спектра (даже в приближенном виде) указывает на сложную зависимость собственных значений от параметра ε , и получение ее в замкнутом виде затруднительно. Вместе с тем грубая оценка для основного состояния потенциала x^4 , основанная на решении кубических уравнений (для четных и нечетных уровней), осуществляемая без использования компьютера, дает результат $\lambda_0 = 1.089$, что отличается от найденного нами (с точностью до десяти

знаков) по процедуре, описанной ниже, следующего значения $\lambda_0 = 1.060352090$ на величину 0.03, т.е. порядка 3%. Последнее обстоятельство позволяет надеяться на возможное использование для основного уровня энергии уравнения Шредингера с нарушенной симметрией соответствующего выражения, аналитически учитывающего зависимость от параметра ε .

3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ x^{2r} ($r = 2, 3, \dots, 18$)

Как было показано нами выше, вопрос о нахождении спектра уравнения Шредингера для потенциала x^{2r} в точке вырождения может быть сведен к решению алгебраической задачи.

Для того чтобы не искать явное выражение для этой задачи, вновь запишем ее в виде, удобном для проведения численных расчетов и учитывающем четности решений, а также компактную форму записи констант,

$$(n + \beta)a_n + (1 - n + \alpha)a_{n-1} = \nu B\left(\frac{r-1}{r+1}, \frac{4}{r+1}\right) \frac{\left(\frac{2}{r+1}\right)_n}{n!} \sum_{m=0}^{\infty} a_m b_{m-n}, \quad (32)$$

где

$$\nu = \lambda(r+1)^{-2r/(r+1)} 2^{-2/(r+1)} \bigg/ \Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right), \quad (33)$$

а значения α и β для четных и нечетных решений следует положить равными

$$\alpha = \begin{cases} -\frac{r+6}{2(r+1)} & \text{для четных,} \\ -\frac{r+4}{2(r+1)} & \text{для нечетных,} \end{cases} \quad \beta = \begin{cases} \frac{r}{2(r+1)} & \text{для четных,} \\ \frac{r+2}{2(r+1)} & \text{для нечетных,} \end{cases} \quad (34)$$

соответственно имеем

$$b_k = \begin{cases} \frac{\Gamma\left(k + \frac{r-1}{r+1}\right) \Gamma\left(\frac{r+3}{r+1}\right)}{\Gamma\left(\frac{r-1}{r+1}\right) \Gamma\left(k + \frac{r+3}{r+1}\right)} & \text{при } k > 0, \\ 1 & \text{при } k = 0, \\ \frac{\Gamma\left(k - \frac{2}{r+1}\right) \Gamma\left(\frac{2}{r+1}\right)}{\Gamma\left(-\frac{2}{r+1}\right) \Gamma\left(k + \frac{2}{r+1}\right)} & \text{при } k < 0. \end{cases} \quad (35)$$

Мы видим, что несмотря на то что такая алгебраическая задача также оказывается не решаемой точно, все же имеется возможность построить ее приближенное решение как для спектра, так и для собственных значений. Более точно, бесконечные вектор и матрица в (32) могут быть приближены посредством использования процедуры конечномерной аппроксимации, т.е. индекс n будет пробегать значения до некоторых конечных величин $N_1, N_2, \dots, N_k$. Такая возможность обуславливается тем, что, как отмечалось

№	x^4	x^6	x^{14}
0	1.060352090	1.144892454	1.421438884
1	3.799673030	4.338598712	5.636185031
2	7.455697938	9.073084561	12.51210199
3	11.64474551	14.93516963	21.87477520
4	16.26182602	21.71416542	33.54989074
5	21.23837292	29.29964594	47.38927498
$\vdots$			
27	181.38226662	326.6885012	783.8625859
28	190.2292387	344.6661934	834.3977651
29	199.1799188	362.9621614	886.2808594

выше, операторы в (32) компактные и могут быть аппроксимированы последовательностью конечномерных операторов [24]. При такой аппроксимации мы будем воспроизводить соответствующее число собственных значений приближаемого оператора, причем $\{\lambda_0^{(N_i)}, \dots, \lambda_{N_i}^{(N_i)}\} \xrightarrow{N_i \rightarrow \infty} \{\lambda_0, \dots, \lambda_{N_i}\}$.

Сделаем несколько замечаний относительно предложенной вычислительной схемы. Во-первых, такая итерационная схема сходящаяся. Во-вторых, она позволяет без обращения к ЭВМ вычислить приближенно первые четыре уровня энергии осциллятора, т.к. при этом мы должны решать алгебраическое уравнение четвертой степени на четвертом итерационном шаге. В-третьих, обратим внимание, что сам итерационный процесс организован следующим образом. На пятом шаге мы должны решать задачу о нахождении корней полинома пятой степени. Напомним, что на предыдущем шаге мы уже приближенно вычислили четыре корня. Таким образом, приближенно оценить границы пятого корня с учетом того факта, что последовательность собственных значений является монотонно возрастающей, не представляет особого труда. На шестом шаге идет уточнение предыдущих значений первых пяти корней и оцениваются границы расположения шестого. В качестве примера мы приведем результаты (которые совпадают с результатами работы [25]) вычислений спектра для потенциалов x^4 , x^6 и x^{14} (см. таблицу).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена регулярная аналитическая процедура нахождения спектра уравнения Шредингера с вырожденным потенциалом типа x^{2r} [26]. Эта процедура основана на сведении исходной задачи на собственные векторы и собственные значения дифференциального оператора к алгебраической. Показано, что при решении этой задачи можно реализовать несколько путей, предложенных в явном виде в настоящей ра-

боте. Один из них – построение нового интегрального преобразования со специальным ядром (см. формулу (10) настоящей работы), для осуществления второго необходимо построить новые классы специальных функций, используя многочлены совместной ортогональности с соответствующими весами.

Авторы выражают благодарность А. В. Борисову, В. В. Владимирскому, П. В. Елютину, В. Ч. Жуковскому, Л. В. Келдышу, В. Д. Муру, В. С. Попову и И. В. Тютину за полезные советы и обсуждение, а также Д. В. Перегудову за подготовку рукописи к печати. Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 93-01-278), INTAS (грант № 93-219) за частичную финансовую поддержку данной работы.

Публикация данной работы частично поддержана Международным научным фондом Сороса (грант № MRU300 и N7N000) и Российским правительством.

Список литературы

- [1] *E. Schrödinger*. Ann. Phys. 1926. V. 79. P. 361; 489.
- [2] *В. А. Фок*. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
- [3] *В. Г. Багров, А. С. Вшивцев, С. В. Кетов*. Дополнительные главы математической физики (калибровочные поля). М.: Изд-во МИРЭА, 1990; *В. Г. Багров, А. С. Вшивцев*. Простейшие применения алгебр симметрии к решению задач квантовой механики: Препринт № 31. Томск: Томский филиал СО АН СССР, 1986.
- [4] *О. Б. Заславский, В. В. Ульянов*. ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 5. С. 1724–1733.
- [5] *M. A. Shifman, A. V. Turbiner*. Quantal problems with partial algebraization of the spectrum: Preprint ITEP-174. Moscow: Atominform, 1988.
- [6] *A. Yu. Morozov, A. M. Perelomov, A. A. Rosly, M. A. Shifman, A. V. Turbiner*. Quasi-exactly-solvable quantal problems: one-dimensional analogue of rational conformal field theories: Preprint MIT.CPT # 1741, 1989; *A. V. Turbiner*. Contemporary Math. 1990. V. 160. P. 263–310.
- [7] *А. Г. Ушверидзе*. ЭЧАЯ. 1989. Т. 20. № 5. С. 1185–1245.
- [8] *А. С. Вшивцев, В. Ч. Жуковский, Р. А. Потапов, А. О. Старинец*. Изв. Вузов. Физика. 1993. Т. 2. С. 76–88.
- [9] *В. Н. Сорокин*. Обобщение классических ортогональных многочленов и сходимость совместных аппроксимаций Паде. Тр. семинара им. Г. И. Петровского. М.: МГУ, 1986. Т. 11. С. 125–165.
- [10] *А. С. Вшивцев, В. Н. Сорокин*. Изв. Вузов. Физика. 1994. Т. 1. С. 95–101.
- [11] *М. Рид, Б. Саймон*. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.
- [12] *Т. Като*. Теория возмущений линейных операторов. М.: Мир, 1972.
- [13] *В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, П. П. Питаевский*. Теория солитонов: метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.
- [14] *В. П. Маслов*. Асимптотические методы и теория возмущений. М.: Наука, 1988.
- [15] *Н. Я. Виленкин*. Специальные функции и теория представлений групп. М.: Наука, 1991.
- [16] *М. В. Федорюк*. Асимптотические методы для линейных ОДУ. М.: Наука, 1983.
- [17] *В. Г. Багров, Д. М. Гитман, И. М. Тернов, В. Р. Халилов, В. Н. Шаповалов*. Точные решения релятивистских волновых уравнений. Новосибирск: Наука, 1982.
- [18] *V. G. Bagrov, D. M. Gitman*. Exact Solutions of Relativistic Wave Equations. London: Kluwer Academic Publishers Dordrecht (Boston), 1990.

- [19] *Р. Гилмор*. Прикладная теория катастроф. М.: Мир, 1984.
- [20] *Т. Постон, И. Стюарт*. Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980.
- [21] *В. И. Арнольд*. Теория катастроф. М.: МГУ, 1983.
- [22] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Статистическая физика (Теоретическая физика, т. 5). М.: Наука, 1964.
- [23] *Г. Стенли*. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973.
- [24] *А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин*. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972.
- [25] *A. Hautot, A. Magnus*. J. Comp. Appl. Math. 1979. V. 5. № 1. P. 3–15.
- [26] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Квантовая механика. Нерелятивистская теория (Теоретическая физика, т. 3). М.: Наука, 1989.

Поступила в редакцию 8.VIII.1995 г.

A. S. Vshivzev, N. V. Norin, V. N. Sorokin
SOLUTION OF SPECTRAL PROBLEM FOR
SCHRÖDINGER EQUATION WITH DEGENERATE
POLINOMIAL POTENTIAL OF EVEN POWER

The symmetry of the stationary Schrödinger equation with a degenerate potential $U(x) = x^{2r}$, $r \in Z_+$, describing phase transitions in quantum systems, is reveled. The analytical procedure of finding the eigenvalues of the potentials in question is constructed and realized numerically for $r = 2, 3, \dots, 18$. The low energy levels are found.