Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

О. С. Павлова, А. Р. Френкин, Радиальное уравнение Шредингера. Спектральная задача, *ТМФ*, 2000, том 125, номер 2, 242–252

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf666>

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: 3.85.7.115

26 апреля 2023 г., 06:27:51

РАДИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА

Методом интегральных преобразований, связанным с исследованием лапласовских образов волновых функций, находятся дискретные спектры радиального уравнения Шредингера с удерживающим потенциалом степенного роста и обобщенным ядерно-кулоновским притягивающим потенциалом. Задача сведена к приближенному решению системы линейных алгебраических уравнений. Приведены результаты расчетов дискретных спектров S -состояния уравнения Шредингера с линейно растущим удерживающим потенциалом и ядерным потенциалом Юкавы.

Нахождение спектра уравнения Шредингера (УШ) является одной из важнейших задач ядерной и атомной физики. Так, при исследовании кваркониевых J/Ψ - и Υ -состояний вводится межкварковый потенциал в виде комбинации удерживающего потенциала степенного роста и кулоновского потенциала [1]. В ряде задач ядерной физики используются короткодействующие притягивающие потенциалы (обычно типа потенциала Юкавы) и их комбинации с далекодействующими потенциалами. Поскольку для большинства физически интересных потенциалов радиальное УШ с произвольным орбитальным квантовым числом не имеет точного решения в замкнутой форме, имеет смысл рассмотреть способы приближенного вычисления спектров энергии УШ, отличные от традиционных (например, теории возмущений). В этой связи мы используем примененный в работах [2–4] метод определения дискретного спектра УШ, который будем называть методом интегральных преобразований.

1. Рассмотрим радиальное УШ

$$\frac{d^2 \Psi}{dr^2} + \left[\mathcal{E} - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Psi = 0 \quad (1)$$

с удерживающим потенциалом

$$V(r) = ar^N + \sum_{q=-2}^{N-1} c_q r^q, \quad a > 0, \quad (2)$$

где $N = 1, 2, \dots$, а орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2, \dots$.

*Московский государственный университет, Москва, Россия

Заметим, что в потенциале (2) специально выделено слагаемое ar^N , т.к. именно оно определяет асимптотическое поведение решения УШ при $r \rightarrow \infty$. Для исключения возможности падения на центр при заданном орбитальном числе l и при $c_{-2} < 0$ следует потребовать выполнения условия

$$c_{-2} \geq -\frac{1}{4}(2l+1)^2.$$

УШ (1) с потенциалом (2) можно записать в виде

$$\frac{d^2 \Psi}{dr^2} - \sum_{q=-2}^N b_q r^q \Psi = 0, \quad (3)$$

где $b_N = a$, $b_0 = -\mathcal{E} + c_0$, $b_{-2} = l(l+1) + c_{-2}$, $b_q = c_q$ при $q \neq -2, 0, N$.

Введем новую переменную $x = a^{1/2} r^\nu / \nu$, где $\nu = 1 + N/2$, тогда уравнение (3) примет вид

$$\begin{aligned} \nu x \left(\frac{d^2 \Psi}{dx^2} - \Psi \right) + (\nu - 1) \frac{d\Psi}{dx} - \frac{B_{-2}}{\nu x} \Psi - \\ - \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^{N-1} B_q (\nu x)^{\epsilon_q - 1} \Psi + E (\nu x)^{-1 + \frac{2}{\nu}} \Psi = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$B_q = b_q a^{-\frac{\epsilon_q}{2}}, \quad \epsilon_q = \frac{q+2}{\nu} = \frac{2(q+2)}{N+2}, \quad E = -B_0 = a^{-\frac{1}{\nu}} (\mathcal{E} - c_0). \quad (5)$$

Если при заданных значениях коэффициентов c_q , $q = -2, \dots, N-1$, найдена величина $E = E(c_q)$, $q \neq 0$, то спектр УШ определяется формулой

$$\mathcal{E}_n = a^{\frac{1}{\nu}} E_n (a^{-\frac{\epsilon_q}{2}} b_q) + c_0, \quad q = -2, -1, 1, \dots, N-1. \quad (6)$$

Квадратично интегрируемые решения УШ имеют следующее поведение в нуле и на бесконечности:

$$\Psi(x) \sim x^\beta \quad \text{при } x \rightarrow 0, \quad \Psi(x) \sim e^{-x} \quad \text{при } x \rightarrow \infty, \quad (7)$$

где

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

Применим к УШ (4) обобщенное преобразование Лапласа, специально подобранное для функций с асимптотическим поведением вида (7)

$$\langle \phi \rangle = \frac{\omega^{-(\beta+\sigma)}}{\Gamma(\beta+\sigma)} \int_0^\infty e^{-\frac{x}{\omega}} \phi(x) x^{\sigma-1} dx, \quad (8)$$

в котором параметр σ будет доопределен в дальнейшем, а множитель перед интегралом для удобства выбран так, чтобы выполнялось условие $\langle x^\beta \rangle = 1$.

Специально отметим, что волновая функция (ВФ) удовлетворяет условиям (7) только тогда, когда $\omega = 1$ — правильная точка ее лапласовского образа $\langle \Psi \rangle \equiv \Phi(\omega)$. Поэтому, как и в работе [2], спектр УШ может быть получен из требования регулярности функции $\Phi(\omega)$ в точке $\omega = 1$.

Для того чтобы при интегрировании по частям лапласовских образов $\langle x\Psi'' \rangle$ и $\langle \Psi' \rangle$ внеинтегральные члены обращались в нуль, на параметр σ следует наложить условие $\sigma + \beta > 1$. Тогда из (4) следует, что

$$\left(\frac{1}{\omega^2} - 1\right) \langle x\Psi \rangle - \frac{1}{\omega} [2\nu\sigma + 1 - \nu] \langle \Psi \rangle - \sum_{q=-1}^{N-1} B_q \nu^{\epsilon_q-2} \langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle + \left[\nu\sigma(\sigma-1) - (\nu-1)(\sigma-1) - \frac{B_{-2}}{\nu} \right] \left\langle \frac{1}{x} \Psi \right\rangle = 0. \quad (9)$$

Выразим все функции, входящие в уравнение (9), через лапласовский образ волновой функции $\Phi(\omega)$. Тогда только величина $\langle x\Psi \rangle$ сравнительно просто выражается через $\Phi(\omega)$, остальные лапласовские образы $\langle x^{-1}\Psi \rangle$ и $\langle x^{\epsilon_q-2}\Psi \rangle$ в этом уравнении при $\nu \neq 2$ представляются интегралами от $\Phi(\omega)$. Имеет смысл упростить уравнение (4), уменьшив число таких функций. Например, выбором параметра $\sigma = \beta + 1 - 1/\nu$ можно исключить из уравнения лапласовский образ $\langle x^{-1}\Psi \rangle$. Тогда с учетом преобразования (8), откуда следует $\omega^{-2} \langle x\Psi \rangle = \Phi' + (\beta + \sigma)\Phi$, получаем УШ в лапласовском представлении

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\omega\alpha\Phi = \sum_{q=-1}^{N-1} B_q \nu^{\epsilon_q-2} \langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle, \quad (10)$$

где

$$\alpha = \beta + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\nu}\right), \quad \sigma = \alpha + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\nu}\right), \quad \beta + \sigma = 2\alpha.$$

При заданном выборе параметра σ преобразование Лапласа имеет вид

$$\langle \phi \rangle = \frac{\omega^{-2\alpha}}{\Gamma(2\alpha)} \int_0^\infty e^{-\frac{x}{\omega}} \phi(x) x^{\alpha-\frac{1}{2}(1+\frac{1}{\nu})} dx. \quad (11)$$

Выразим входящие в уравнение (10) функции $\langle x^{\epsilon_q-1}\Psi \rangle$ при $q = -1, 0, \dots, N-1$ через интегралы от $\Phi(\omega)$. Это можно сделать, пользуясь разложением функции $\Psi(x)$ по степеням $x^{1/\nu}$, т.е. по степеням r , с учетом поведения ВФ в нуле (7). Будем иметь

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^{\frac{1}{\nu}(n+\frac{1}{2})+\alpha-\frac{1}{2}}. \quad (12)$$

Тогда согласно (11)

$$\Phi(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(2\alpha)} A_n \omega^{\frac{n}{\nu}} \Gamma\left(\frac{n}{\nu} + 2\alpha\right), \quad (13)$$

а лапласовский образ $\langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle$ есть

$$\langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle = \frac{\omega^{\epsilon_q-1}}{\Gamma(2\alpha)\Gamma(1-\epsilon_q)} \sum_{n=0}^{\infty} B \left(1 - \epsilon_q, \frac{n}{\nu} + 2\alpha + \epsilon_q - 1 \right) A_n \omega^{\frac{n}{\nu}} \Gamma \left(\frac{n}{\nu} + 2\alpha \right). \quad (14)$$

Воспользовавшись определением бета-функции

$$B \left(1 - \epsilon_q, \frac{n}{\nu} + 2\alpha + \epsilon_q - 1 \right) = \int_0^1 (1-t)^{-\epsilon_q} t^{2\alpha+\epsilon_q-2+\frac{n}{\nu}} dt,$$

из (13) и (14) получаем

$$\langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle = \frac{\omega^{\epsilon_q-1}}{\Gamma(1-\epsilon_q)} \int_0^1 (1-t)^{-\epsilon_q} t^{2\alpha+\epsilon_q-2} \Phi(\omega t) dt. \quad (15)$$

Заметим, что представление ВФ в виде разложения по степеням $x^{1/\nu}$ (12) в нашем подходе необходимо только для установления связи лапласовских образов $\langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle$ и $\langle \Psi \rangle = \Phi(\omega)$. В дальнейшем это представление нигде не используется.

Так как при $N = 2$ ($\nu = 2, \epsilon_0 = 1$) величина $\langle x^{\epsilon_0-1} \Psi \rangle = \Phi(\omega)$, имеет смысл записать уравнение (10) в виде

$$\begin{aligned} (1-\omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\omega\alpha\Phi + \frac{E}{2} \delta_{\nu 2} \Phi = \\ = -(1-\delta_{\nu 2}) E \nu^{\epsilon_0-2} \langle x^{\epsilon_0-1} \Psi \rangle + \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^N B_q \nu^{\epsilon_q-2} \langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\delta_{\nu 2} = \begin{cases} 1 & \text{для } \nu = 2, \\ 0 & \text{для } \nu \neq 2. \end{cases}$$

После подстановки в уравнение (16) интегральных представлений (15) функций $\langle x^{\epsilon_0-1} \Psi \rangle$ и $\langle x^{\epsilon_q-1} \Psi \rangle$ основное уравнение задачи (16) принимает вид

$$\begin{aligned} (1-\omega^2) \frac{d\Phi}{d\omega} - 2\omega\alpha\Phi + \frac{E}{2} \delta_{\nu 2} \Phi = \\ = -(1-\delta_{\nu 2}) E \frac{\nu^{\epsilon_0-2} \omega^{\epsilon_0-1}}{\Gamma(1-\epsilon_0)} \int_0^1 (1-t)^{-\epsilon_0} t^{2\alpha+\epsilon_0-2} \Phi(\omega t) dt + \\ + \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^{N-1} B_q \frac{\nu^{\epsilon_q-2} \omega^{\epsilon_q-1}}{\Gamma(1-\epsilon_q)} \int_0^1 (1-t)^{-\epsilon_q} t^{2\alpha+\epsilon_q-2} \Phi(\omega t) dt. \end{aligned} \quad (17)$$

Заметим, что при $\nu \neq 2$ входящие в уравнения (17) величины $\epsilon_q \neq 1$ ($q = -1, 0, 1, \dots, N-1$), и поэтому Г-функции в правой части (17) нигде не имеют особенностей.

Перейдем в уравнении (17) к новой переменной $y = (1-\omega)/(1+\omega)$. Такая замена переводит правую полуплоскость комплексной переменной ω во внутреннюю область $|y| < 1$

единичного круга. Тогда точке $\omega = 1$ соответствует точка $y = 0$. Поэтому спектр задачи теперь будет определяться из требования регулярности функции $\tilde{\Phi}(y) \equiv \Phi(\omega)$ в точке $y = 0$ [2–4].

При $B_q = 0$ ($q = -1, 0, 1, \dots, N-1$) (B_{-2} фиксировано) основное уравнение (17), принимающее вид ($\Phi(\omega) \rightarrow \Phi_0(\omega)$)

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi_0}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi_0 = 0,$$

имеет следующее решение (при выборе $\Phi_0(0) = 1$):

$$\Phi_0(\omega) \equiv \tilde{\Phi}_0(y) = (1 + \omega)^{-2\alpha} \left(\frac{1 - \omega}{1 + \omega} \right)^{-\alpha},$$

т.е.

$$\tilde{\Phi}_0(y) = 2^{-2\alpha}(1 + y)^{2\alpha}y^{-\alpha}.$$

Поскольку множитель $2^{-2\alpha}(1 + y)^{2\alpha}y$ в функции $\tilde{\Phi}_0(y)$ регулярен в точке $y = 0$, удобно и при $B_q \neq 0$ ($q = -1, 0, 1, \dots, N-1$) представлять функцию в виде

$$\tilde{\Phi}(y) = 2^{-2\alpha}(1 + y)^{2\alpha}D(y), \quad (18)$$

причем функция $D(y)$, как и функция $\tilde{\Phi}(y)$, для квадратично интегрируемых решений УШ (1) может быть разложена в ряд Тейлора по степеням y

$$D(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n. \quad (19)$$

Из дальнейшего будет видно, что представление функции $\tilde{\Phi}(y)$ в виде (18), (19) приводит к максимально возможной (в этом подходе) диагонализации характеристического уравнения задачи, из которого определяется спектр УШ.

Замена переменных ω и t в (17):

$$\omega = \frac{1 - y}{1 + y}, \quad \omega t = \frac{1 - v}{1 + v},$$

и подстановка представления (18) приводят к уравнению

$$y \frac{dD}{dy} + \left(\alpha - \frac{E}{4} \delta_{\nu 2} \right) D = E(1 - \delta_{\nu 2}) I(\epsilon_0, y) - \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^{N-1} B_q I(\epsilon_q, y), \quad (20)$$

где

$$I(\epsilon, y) = \frac{2^{-\epsilon} \nu^{\epsilon-2}}{\Gamma(1 - \epsilon)} (1 - y)^{\epsilon-2\alpha} \int_0^1 (1 - v)^{2\alpha+\epsilon-2} (v - y)^{-\epsilon} D(v) dv. \quad (21)$$

Входящая в правую часть уравнения (20) функция $I(\epsilon, y)$ (при $\epsilon = \epsilon_q$, $q = -1, 0, 1, \dots, N-1$) подобно (19) может быть разложена в ряд по степеням y , т.е.

$$I(\epsilon, y) = \sum_{n=0}^{\infty} I(\epsilon) y^n.$$

Тогда, приравнивая в (20) коэффициенты при одинаковых степенях y^n , можно свести задачу определения спектра УШ (1) к решению бесконечной системы линейных алгебраических уравнений относительно величин a_n ,

$$\left(n + \alpha - \frac{E}{4}\delta_{\nu 2}\right) a_n = (1 - \delta_{\nu 2})EI_n(\epsilon_0) - \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^{N-1} I_n(\epsilon_q). \quad (22)$$

Значения коэффициентов разложения $I_n(\epsilon)$ для интегралов, подобных (21), можно получить с помощью прямого и обратного преобразований Меллина, как делалось, например, в работе [2], но мы считаем, что такой подход весьма неудобен, т.к. требует хотя и несложных, но весьма громоздких вычислений. Выражение для $I_n(\epsilon)$ может быть получено и другим, чрезвычайно простым способом, который мы здесь приводим.

Вводя новую переменную $\xi = (1 - v)/(1 - y)$ в интеграле (21) и пользуясь разложением (19), можно представить выражение для $I(\epsilon, y)$ в следующем виде:

$$I(\epsilon, y) = \frac{2^{-\epsilon}\nu^{\epsilon-2}}{\Gamma(1-\epsilon)}(1-y)^{\epsilon-1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \int_0^1 \xi^{2\alpha+\epsilon-2} (1-\xi)^{-\epsilon} [1 - (1-y)\xi]^k d\xi,$$

откуда, раскладывая множитель $[1 - (1-y)\xi]^k$ по степеням $[(1-y)\xi]^m$, $0 \leq m \leq k$, получаем

$$\begin{aligned} I(\epsilon, y) &= \frac{2^{-\epsilon}\nu^{\epsilon-2}}{\Gamma(1-\epsilon)} \sum_{k=0}^{\infty} a_k k! \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m (1-y)^{m+\epsilon-1}}{m! (k-m)!} \int_0^1 \xi^{2\alpha+m+\epsilon-2} (1-\xi)^{-\epsilon} d\xi = \\ &= 2^{-\epsilon}\nu^{\epsilon-2} \sum_{k=0}^{\infty} a_k k! \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m \Gamma(2\alpha + m + \epsilon - 1) (1-y)^{m+\epsilon-1}}{m! (k-m)! \Gamma(2\alpha + m)}. \end{aligned}$$

Разложив множитель $(1-y)^{m+\epsilon-1}$ по степеням y , приходим к формуле

$$I_n(\epsilon) = 2^{-\epsilon}\nu^{\epsilon-2} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{k=0}^{\infty} a_k k! \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m \Gamma(m + \epsilon) \Gamma(2\alpha + m + \epsilon - 1)}{m! (n-m)! \Gamma(m + \epsilon - n) \Gamma(2\alpha + m)}. \quad (23)$$

Уравнение (22) теперь может быть представлено в виде бесконечной системы линейных алгебраических уравнений относительно величин a_n

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{B_{nk} + [E\delta_{\nu 2} - 4(n + \alpha)]\delta_{nk}\} a_k = 0, \quad (24)$$

где

$$B_{nk} = E(1 - \delta_{\nu 2})B_{nk}(\epsilon_0) - \sum_{\substack{q=-1 \\ q \neq 0}}^{N-1} B_q B_{nk}(\epsilon_q), \quad (25)$$

$$B_{nk}(\epsilon) = \left(\frac{\nu}{2}\right)^{\epsilon-2} \frac{(-1)^n k!}{n!} \sum_{m=0}^k \frac{(-1)^m}{m! (k-m)!} \frac{\Gamma(m + \epsilon) \Gamma(2\alpha + m + \epsilon - 1)}{\Gamma(m + \epsilon - n) \Gamma(2\alpha + m)}. \quad (26)$$

Спектр УШ (1) находится из характеристического уравнения

$$\det \|\mathcal{B}_{nk} + [E\delta_{\nu 2} - 4(n + \alpha)]\delta_{nk}\| = 0 \quad (27)$$

по формуле (6), причем при определении корней E_n этого уравнения бесконечная матрица $\mathcal{B}_{nk}$ заменяется конечной квадратной матрицей ранга K . Несколько нижних уровней энергии E_n можно получить из (27) с помощью теории возмущений, однако в общем случае (при $\nu \neq 2$) высшие уровни энергии могут быть получены только с помощью вычислений на ЭВМ.

Из формулы (27) видно, что в характеристическом уравнении достигнута максимальная диагонализация матрицы, что связано с удачным выбором представления (18). Например, для потенциала $V(r) = r^2 + A/r^2$ в матрице (27) присутствуют только диагональные члены, что сразу дает спектр осциллятора $\mathcal{E}_{nl} = E_{nl} = 4(n + \alpha)$, причем $\alpha = (1 + \sqrt{1 + 4l(l + 1) + 4A})/4$, $l = 0, 1, \dots$, $n = 0, 1, \dots$.

Заметим, что предложенная процедура нахождения спектра УШ очень быстро сходится с ростом ранга конечной матрицы K . Например, для потенциала $V(r) = r$ при $l = 0$ основной уровень энергии $\mathcal{E}_0$ (совпадающий с первым нулем функции Эйри $\text{Ai}(x)$), полученный из характеристического уравнения, имеет точность 5 знаков после запятой уже для $K = 9$, причем вычисления на ЭВМ занимают несколько минут. Максимальная диагонализация матрицы в уравнении (27) приводит к тому, что корни уравнения $E_n(K)$ с ростом ранга K монотонно (без осцилляций) приближаются к предельным значениям $E_n(\infty)$, известным из таблиц нулей функций Эйри [5].

2. Рассмотрим теперь радиальное УШ с короткодействующим притягивающим потенциалом. В этом случае задача определения дискретного спектра с помощью метода интегральных преобразований имеет ряд специфических особенностей, которые нагляднее всего проявляются при исследовании ядерных потенциалов (например, потенциала Юкавы).

В качестве примера рассмотрим типичный ядерно-кулоновский потенциал, к которому добавлен центробежный член,

$$V = -\frac{V_0}{r}e^{-\frac{r}{a}} + \frac{Z}{r} + \frac{A}{r^2}, \quad V_0 > 0. \quad (28)$$

Тогда радиальное УШ с заданным орбитальным квантовым числом $l = 0, 1, \dots$ имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{B}{r^2}\Psi - \frac{Z}{r}\Psi + \frac{V_0}{r}e^{-\frac{r}{a}}\Psi + \mathcal{E}\Psi = 0, \quad (29)$$

где $B = A + l(l + 1)$. При $A > -(2l + 1)^2/4$ и $V_0 > Z$ уравнение (29) может иметь дискретный спектр энергий $\mathcal{E} = -|\mathcal{E}| < 0$.

Введем новую переменную $x = |\mathcal{E}|^{1/2}r$, тогда УШ принимает вид

$$x\frac{d^2\Psi}{dx^2} - x\Psi - \frac{B}{x}\Psi + \gamma\Psi + \lambda e^{-\frac{x}{b}}\Psi = 0, \quad (30)$$

где использованы обозначения

$$b = \frac{V_0}{\lambda}a, \quad \gamma = \frac{Z}{V_0}\lambda, \quad \text{причем} \quad |\mathcal{E}| = \left(\frac{V_0}{\lambda}\right)^2.$$

Квадратично интегрируемые решения УШ (30) имеют следующее поведение при $x \rightarrow 0$ и $x \rightarrow \infty$:

$$\Psi(x) \sim x^\delta \text{ при } x \rightarrow 0, \quad \Psi(x) \sim e^{-x} \text{ при } x \rightarrow \infty, \quad \delta = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4B}).$$

Применяя к (30) преобразование Лапласа вида

$$\langle \phi \rangle = \frac{\omega^{-2\delta}}{\Gamma(2\delta)} \int_0^\infty e^{-\frac{x}{\omega}} \phi(x) x^{\delta-1} dx,$$

сведем задачу к исследованию уравнения

$$\left(\frac{1}{\omega^2} - 1\right) \langle x\Psi \rangle - \frac{2\delta}{\omega} \langle \Psi \rangle - \gamma \langle \Psi \rangle + \lambda \langle e^{-\frac{x}{b}} \Psi \rangle = 0.$$

Приняв за основную функцию лапласовский образ ВФ $\Phi(\omega) \equiv \langle \Psi \rangle$, выразим через нее все остальные функции в уравнении

$$\langle x\Psi \rangle = \omega^2 \frac{d\Phi(\omega)}{d\omega} + 2\delta\omega\Phi(\omega), \quad \langle e^{-\frac{x}{b}} \Psi \rangle = \left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^{2\delta} \Phi(\Omega),$$

где $\Omega = b\omega/(b + \omega)$. Тогда УШ в лапласовском представлении выглядит как

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi(\omega)}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi(\omega) - \gamma\Phi(\omega) + \lambda \left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^{2\delta} \Phi(\Omega) = 0. \quad (31)$$

Уравнение (31) соответствует основному уравнению (17) для удерживающих потенциалов степенного роста, однако в отличие от последнего является чисто дифференциальным и не содержит никаких интегральных членов.

Дискретный спектр энергий УШ (29) по-прежнему определяется из условия регулярности функции $\tilde{\Phi}(y) \equiv \Phi(\omega)$ в точке $y = 0$ (т.е. $\omega = 1$). Поскольку при $\lambda \rightarrow 0$ уравнение (31) принимает вид $(\Phi(\omega) \rightarrow \Phi_0(\omega))$

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi_0}{d\omega} - 2\delta\omega\Phi_0 = 0$$

и имеет решение $\Phi_0(\omega) \equiv \Phi_0(y) \sim 2^{-2\delta}(1 + y)^{2\delta}y^{-\delta}$, то и при $\lambda \neq 0$ можно представить функцию $\tilde{\Phi}(y)$ в виде

$$\tilde{\Phi}(y) = 2^{-2\delta}(1 + y)^{2\delta}D(y), \quad D(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n. \quad (32)$$

Замена переменной в (31) и подстановка представления (32) приводит к следующему уравнению:

$$y \frac{dD(y)}{dy} + \left(\delta + \frac{\gamma}{2}\right) D(y) = \frac{\lambda}{2} \left(\frac{b}{b+1}\right)^{2\delta} \left(1 + \frac{b-1}{b+1}y\right)^{-2\delta} (1 + Y)^{2\delta} D(Y), \quad (33)$$

где

$$Y = \frac{1 - \Omega}{1 + \Omega} = \frac{1 + (2b - 1)y}{1 + 2b - y}.$$

Заметим, что при $a \rightarrow \infty$ величина $b \rightarrow \infty$ и уравнение (33) принимает вид ($Y \rightarrow y$, $D(Y) \rightarrow D_\infty(y)$)

$$y \frac{dD_\infty}{dy} + \left[\delta + \frac{1}{2}(\gamma - \lambda) \right] D_\infty = 0.$$

Его решение $D_\infty \sim y^{-[\delta + (\gamma - \lambda)/2]}$ регулярно в точке $y = 0$ при условии $\lambda_n = 2V_0(n + \delta)/(V_0 - Z)$ ($n = 0, 1, \dots$), т.е. спектр УШ задается формулой $\mathcal{E}_n = -(V_0 - Z)^2/[4(n + \delta)^2]$ и является чисто кулоновским, соответствующим спектру потенциала $V(r) = -(V_0 - Z)/r + A/r^2$.

Выражая в (33) переменную Y через y и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях y^n в левой и правой частях уравнения, можно получить бесконечную систему алгебраических уравнений для величин a_n , $n = 0, 1, \dots$:

$$\left(n + \delta + \frac{Z}{2V_0} \lambda \right) a_n = 2^{2\delta-1} \lambda \left(\frac{b}{2b+1} \right)^{2\delta} S(n),$$

где

$$S(n) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k k!}{\Gamma(k+2\delta)} \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(2b+1)^{-(k+m)} (2b-1)^{n-m} \Gamma(k+m+2\delta)}{m! (n-m)! (k+m-n)!}.$$

Эту систему, обозначив $\mu^{-1} = 2V_0 a$, $b^{-1} = 2\mu\lambda$, можно записать в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} (A_{nk} - \delta_{nk}) a_k = 0, \quad (34)$$

где

$$A_{nk} = \frac{\lambda}{2} \frac{k! (1 + \mu\lambda)^{-(n+k+2\delta)}}{(n + \delta + \frac{Z\lambda}{2V_0}) \Gamma(k+2\delta)} \Sigma(n), \quad (35)$$

$$\Sigma(n) = \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(\mu\lambda)^{(k-n+2m)} (1 - \mu^2 \lambda^2)^{n-m} \Gamma(k+m+2\delta)}{m! (n-m)! (k+m-n)!}.$$

Спектр УШ (29) определяется из характеристического уравнения

$$\det \|A_{nk} - \delta_{nk}\| = 0, \quad (36)$$

откуда находятся собственные значения λ_n , $n = 0, 1, \dots$ (т.е. уровни энергии $\mathcal{E}_n$). Как и в случае удерживающего потенциала, при определении спектра бесконечная матрица $\|A_{nk} - \delta_{nk}\|$ заменяется конечной квадратной матрицей ранга K ($K = 1, 2, \dots$).

Заметим, что характеристическое уравнение (36) существенно отличается от соответствующего уравнения (27) в случае удерживающего потенциала, т.к. при замене бесконечной матрицы конечной ранга K уравнение (27) становится алгебраическим уравнением степени K относительно переменной E , тогда как уравнение (36) – уравнением

степени $K(K+1)$ по переменной λ . В этом смысле уравнение (36) сложнее, чем (27), хотя аналитический вывод уравнения (36) значительно проще. Корни уравнения (36) могут быть найдены с помощью расчетов на ЭВМ, причем с ростом ранга K конечной матрицы точность определения спектра возрастает.

В подтверждение сказанного приведем результаты вычисления спектра УШ для S -состояния ($l=0$) с чисто ядерным притягивающим потенциалом Юкавы

$$V(r) = -\frac{V_0}{r} e^{-\frac{r}{a}}. \quad (37)$$

В этом случае матрица A_{nk} , входящая в характеристическое уравнение, имеет достаточно простой вид ($Z=0$, $l=0$, $\delta=1$)

$$A_{nk} = \frac{\lambda(1+\mu\lambda)^{-(n+k+2)}}{2(n+1)(k+1)} \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(\mu\lambda)^{(k-n+2m)}(1-\mu^2\lambda^2)^{n-m}(k+m+1)!}{m!(n-m)!(k+m-n)!}.$$

Вычисления на ЭВМ показывают, что с увеличением ранга K конечной матрицы $\|A_{nk} - \delta_{nk}\|$ параметр $\mu_0(K)$, начиная с которого УШ (36) не имеет дискретного спектра, возрастает и приближается к известному значению $\mu_0 \approx 0.29765$ [6]. При этом уравнение (36) с фиксированным значением K для $\mu \leq \mu_0(K)$ может иметь максимально K физических корней, которые последовательно появляются при уменьшении параметра μ , причем каждый физический корень $\lambda_n(K)$ возникает в паре с нефизическим $\tilde{\lambda}_n(K)$. При появлении нового состояния корни $\lambda_n(K)$ и $\tilde{\lambda}_n(K)$ характеристического уравнения (36) совпадают. Затем с уменьшением параметра μ эти пары решений расходятся: величины $\lambda_n(K)$ при любом K стремятся к известным значениям $\lambda_n = 2(n+1)$ кулоновского поля, а величины $\tilde{\lambda}_n(K)$ возрастают и стремятся к бесконечности, что соответствует переходу $\tilde{\mathcal{E}}_n = -(V_0/\tilde{\lambda}_n)^2 \rightarrow 0$ при $\mu \rightarrow 0$. Именно по этой причине решения второго типа мы называем нефизическими. Мы принимаем за основу требование: физические значения уровней энергии $\mathcal{E}_n$ (и соответственно величин $\lambda_n(K)$) должны непрерывно зависеть от радиуса действия ядерных сил a , т.е. при фиксированном значении величины V_0 от параметра μ . Так как при $a \rightarrow \infty$ потенциал Юкавы (37) переходит в притягивающий кулоновский потенциал $V(r) = -V_0/r$, за физические решения мы принимаем решения первого типа $\lambda_n(K)$, а решения второго типа $\tilde{\lambda}_n(K)$ отбрасываем. Подобная ситуация довольно часто встречается в квантовой физике, например появление ложных полюсов при исследовании аналитических свойств S -матрицы [7].

Проведенные расчеты на ЭВМ показывают, что процедура нахождения спектра УШ с потенциалом Юкавы хорошо сходится с ростом ранга K конечной матрицы. Например, при параметре $\mu = 0.01$ значение $\lambda_0 = 2.082498$ физического корня характеристического уравнения (36), определяющее энергию основного состояния $\tilde{\mathcal{E}}_0 = -(V_0/\lambda_0)^2$, имеет точность 6 знаков после запятой уже для $K = 4$. Естественно, что при заданном значении ранга K конечной матрицы нижние уровни энергии имеют большую точность, т.к. они вычисляются в более высоком приближении. Например, рангу матрицы $K = 4$ соответствует (при малых значениях μ) четвертое приближение физического корня λ_0 характеристического уравнения (36), тогда как корень λ_3 при этом может быть вычислен только в первом приближении.

Следует отметить, что в нашем подходе определение энергетического спектра радиального уравнения Шредингера значительно проще, чем при использовании стандартной теории возмущений [7], когда для получения подобной точности требуется проведение значительно более сложных вычислений. Подобным образом могут быть определены и уровни энергии УШ (29) с $A \neq 0$ и произвольными значениями l и Z .

В заключение отметим, что рассмотренный метод может быть использован и для определения спектра УШ с рядом других потенциалов, например для комбинации короткодействующего притягивающего потенциала $V(r) = -\tilde{V}_0 e^{-r/a}$, $\tilde{V}_0 > 0$, с дальнедействующим кулоновским потенциалом и потенциалом вида $1/r^2$.

Предложенный способ приближенного нахождения спектра УШ может быть использован для решения ряда практических задач ядерной физики и физики элементарных частиц. Например, один из методов исследования J/Ψ - и Υ -состояний кваркония связан именно с введением межкваркового потенциала вида (1) с $N = 1$ или $N = 2$. Использование даже таких простых потенциалов дает хорошее совпадение низших состояний кварковых систем с экспериментальными данными [1]. Естественно, более точное совпадение с опытными данными (в том числе и для высоких возбужденных состояний) можно ожидать при использовании удерживающих потенциалов вида

$$V(r) = ar^2 + br - \frac{Z}{r} + \frac{A}{r^2} + a_0,$$

которые будут рассмотрены в следующей работе.

Благодарности. Авторы глубоко благодарны А. А. Логунову и Ю. М. Лоскутову за плодотворное обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] *C. Quigg, J. L. Rosner.* Phys. Rep. 1979. V. 56. P. 167.
- [2] *А. С. Вишивцев, Н. В. Норин, В. Н. Сорокин.* ТМФ. 1996. Т. 109. № 1. С. 107.
- [3] *А. С. Вишивцев, В. А. Вишивцев, А. В. Татаринцев, А. Р. Френкин.* Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 5. С. 62.
- [4] *О. С. Павлова, А. Р. Френкин.* Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 1. С. 58.
- [5] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. Ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. М.: Наука, 1979.
- [6] *Дж. Блатт, В. Вайскопф.* Теоретическая ядерная физика. М.: ИЛ, 1954.
- [7] *А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.

Поступила в редакцию 13.IV.2000 г.