Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. Ю. Славянов, Рекуррентные вычисления мультипольных матричных элементов, *ТМФ*, 1999, том 120, номер 3, 473–481

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf791>

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: 54.80.97.219

26 апреля 2023 г., 07:45:09

© 1999 г.

С. Ю. Славянов*

РЕКУРРЕНТНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Предложен новый метод вычисления степенных (мультипольных) матричных элементов на волновых собственных функциях одномерного уравнения Шредингера. Метод основан на переходе к вспомогательным уравнениям третьего и четвертого порядков и применении к ним аналога преобразования Лапласа. Получившаяся в результате рекуррентная процедура позволяет вычислять матричные элементы через считающиеся известными собственные значения и несколько базовых матричных элементов. В качестве примера рассмотрены мультипольные матричные элементы на волновых функциях гармонического и ангармонического осцилляторов.

Эта работа посвящается памяти создателя школы математической физики в Санкт-Петербургском государственном университете академика В. А. Фока и семидесятилетию моего учителя, проф. В. С. Булдырева.

ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей публикации автора [1] был предложен метод вычисления диагональных мультипольных матричных элементов на волновых собственных функциях одномерного уравнения Шредингера. Данная публикация расширяет методику на вычисление произвольных недиагональных матричных элементов. В основе метода лежат переход к вспомогательному уравнению четвертого порядка, которому удовлетворяет произведение волновых функций, и применение к нему аналога преобразования Лапласа. Чтобы исключить необходимость обращения к тексту статьи [1], все важнейшие формулы оттуда воспроизводятся в тексте этой статьи. По вопросу же доказательств даны ссылки. Разобранные примеры можно разделить на два типа: а) те, в которых результаты допускают представление в явном виде, и б) те, в которых результаты требуют вычисления (численного или асимптотического) собственных значений, а также некоторых первичных базовых матричных элементов.

Во втором разделе сформулированы и доказаны основные общие леммы и теоремы. В третьем разделе рассмотрены простейшие примеры типа “а”, а в четвертом разделе

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: slav@slav.usr.pu.ru

– примеры типа “б”. В пятом разделе обсуждаются возможные обобщения предложенной методики на уравнения с весом. Отметим, что история построения рекуррентных соотношений для матричных элементов довольно давняя. Упомянем работу [2], которая была одной из первых и где использовался метод интегрирования по частям, и более современную работу [3], основанную на аппарате теории групп и вычислении коммутаторов.

Пусть $\psi_n(z)$, λ_n – собственные функции и собственные значения задачи на всей оси для одномерного уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} (-L + \lambda)\psi &= \frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + (\lambda - q(z))\psi(z) = 0, \\ \lim \psi(z)_{z \rightarrow -\infty} &= 0, \quad \lim \psi(z)_{z \rightarrow \infty} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Предполагается выполненным условие

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(z)\psi_m(z) dz = \delta_{nm},$$

где δ_{nm} – символ Кронекера. Функция $q(z)$ – потенциал в уравнении Шредингера – считается полиномом четного порядка, причем $q(z)|_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow \infty$. Под степенными матричными элементами понимаются интегралы

$$V_{nm}^{(k)} = \int_{-\infty}^{\infty} z^k \psi_n(z)\psi_m(z) dz \quad (2)$$

с положительными целыми k . В том случае, когда $n = m$, матричные элементы называются диагональными, в противном случае – недиагональными.

2. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

В основе метода лежит получение уравнений, которым удовлетворяют квадрат волновой функции и произведение волновых функций, отвечающих разным собственным значениям. Первым шагом будет доказательство двух простых лемм.

ЛЕММА 1. *Квадрат $w_{nn}(z) = (\psi_n(z))^2$ волновой собственной функции уравнения (1) удовлетворяет уравнению третьего порядка*

$$w_{nn}'''(z) + 4(\lambda_n - q)w_{nn}'(z) - 2q'w_{nn}(z) = 0. \quad (3)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Производные функции $w(z)$ имеют вид (индексы для краткости опускаются)

$$w' = 2\psi\psi', \quad w'' = 2(\psi\psi'' + (\psi')^2), \quad w''' = 2(\psi\psi''' + 3\psi'\psi'').$$

Кроме того, из уравнения (1) следует, что

$$2\psi''\psi' = (q - \lambda)w', \quad \psi''\psi = (q - \lambda)w, \quad 2\psi'''\psi + 3(\lambda - q)w' = w''.$$

Исключив из этих равенств функцию ψ , придем к равенству (3).

Рассмотрим два уравнения

$$y''(z) - f(z)y(z) = 0, \quad u''(z) - g(z)u(z) = 0. \quad (4)$$

Введем функцию $v(z)$, равную произведению решений этих уравнений, $v = yu$. Согласно этому определению выполнены тождества

$$\begin{aligned} v' &= y'u + yu', \quad v'' = y''u + yu'' + 2y'u', \\ v''' &= y'''u + yu''' + 3(y''u' + y'u''), \\ v'''' &= y''''u + yu'''' + 4(y'''u' + y'u''') + 6y''u''. \end{aligned}$$

Из уравнений (4) также следует

$$\begin{aligned} y''u &= fv, \quad yu'' = gv, \quad y''u'' = fgv, \quad 2y'u' = v'' - (f + g)v, \\ y'''u + y''u' &= f'v + fv', \quad yu''' + y'u'' = g'v + gv', \\ y''''u + 2y'''u' + y''u'' &= f''v + 2f'v' + fv'', \\ yu'''' + 2y'u''' + y''u'' &= g''v + 2g'v' + gv''. \end{aligned}$$

Исключив из этих равенств, насколько возможно, функции y, u , получим

$$\begin{aligned} v''''(z) - 2y'''u' - 2y'u''' - (f + g)v''(z) - \\ - 2(f' + g')v'(z) - 4fgv(z) - (f'' + g'')v(z) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Воспользуемся равенствами

$$y''u' = fyu', \quad y'u'' = gy'u, \quad y'''u' = fy'u' + f'yu', \quad y'u''' = gy'u' + g'y'u.$$

Положим $f = q - \lambda_n$, $g = q - \lambda_m$ и используем равенства $f' = g'$, $f'' = g''$. В результате приходим к следующему утверждению.

ЛЕММА 2. Произведение $v_{nm}(z) = \psi_n(z)\psi_m(z)$ волновых собственных функций (1) удовлетворяет уравнению четвертого порядка

$$v''''_{nm}(z) + 2(\lambda_n + \lambda_m - 2q)v''_{nm}(z) - 6q'v'_n(z) + ((\lambda_n - \lambda_m)^2 - 2q'')v_{nm}(z) = 0. \quad (6)$$

Заметим, что, продифференцировав уравнение (3), получим уравнение (6) при $n = m$. Уравнения (3), (6) могут быть записаны также в виде

$$T_4(z, D)v_{nm}(z) = 0, \quad T_3(z, D)w_{nn}(z) = 0, \quad D \equiv \frac{d}{dz}, \quad (7)$$

где $T_m(z, D)$ – полином по обоим переменным z, D , причем по переменной D – третьего или четвертого порядка. На функциях $w_{nn}(z), v_{nm}(z)$ определен аналог преобразования Лапласа ($w_{nn}(z), v_{nm}(z) \mapsto u_{nm}(p)$):

$$\begin{aligned} u_{nm}(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-pz) u_{nm}(z) dz, \\ u_{nn}(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-pz) u_{nn}(z) dz. \end{aligned} \quad (8)$$

Сходимость интегралов гарантируется поведением функций $\psi_n(z)$ на бесконечности. Кроме того, согласно свойствам преобразования Лапласа, легко переносимым на используемую модификацию, функция $u_{nm}(p)$ должна удовлетворять уравнению

$$T(D_p, -p)u_{nm}(p) = 0. \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет в точке $p = 0$ регулярную особую точку, однако нужное решение особенностей в этой точке не имеет. Противоречия здесь нет, что будет видно из рассмотренных примеров.

Члены разложения функции $u_{nm}(p)$ и есть изучаемые матричные элементы:

$$u_{nm}(p) = \sum_0^{\infty} \frac{1}{k!} V_{nm}^{(k)} (-p)^k \equiv \sum_0^{\infty} g_k p^k. \quad (10)$$

Основной результат проведенных выше выкладок можно сформулировать следующим образом.

ТЕОРЕМА. Матричные элементы от волновых собственных функций $V_{nn}^{(k)}$, отвечающих задаче Штурма–Лиувилля для одномерного уравнения Шредингера (1), с точностью до сомножителей $(-1)^k k!$ совпадают с коэффициентами разложения в ряд Тейлора регулярного в нуле решения уравнения (9).

Доказательство приведено выше.

Сформулированная общая теорема оставляет большое число вопросов. Действительно, функция $u_{nm}(p)$ регулярна в нуле, но она может иметь в этой точке нуль высокого порядка, что отразится на матричных элементах. Другая конкретная проблема – каковы начальные условия для решения рекуррентной системы? Ответы на эти вопросы можно получить, анализируя случай “общего положения” и конкретные примеры со специально выбранным потенциалом $q(z)$. Рассмотрим в этом разделе случай “общего положения”.

ЛЕММА 3. Уравнение (9) для $n \neq m$ имеет вид

$$\left(p^2 q(D_p) + \frac{1}{2} p q'(D_p) - \frac{1}{4} ((\delta\lambda)^2 + 2\Sigma\lambda p^2 + p^4) \right) u_{nm}(p) = 0. \quad (11)$$

Для доказательства надо написать на основании уравнения (6) уравнение (9) и воспользоваться равенствами

$$\begin{aligned} q(D_p)p^2u &= p^2q(D_p)u + 2pq'(D_p)u + q''(D_p)u, \\ q'(D_p)pu &= pq'(D_p)u + q''(D_p)u. \end{aligned}$$

Уравнение (11) имеет $2N$ -й порядок, совпадающий с порядком полинома $q(z)$. Точка $p = 0$ является регулярной особой точкой уравнения (11) и на формальном уровне имеет характеристическими показателями $\rho = 0, 1, \dots, 2N - 1$. Однако из решений нас в общем случае интересует лишь то, которое голоморфно в начале координат и разложение которого в ряд Тейлора начинается с первой степени p , т.е. решение

$$u_{nm}(p) = \sum_0^{\infty} g_k p^{k+1}. \quad (12)$$

Пусть функция $q'(D)$ представляется в виде

$$q'(D) = \sum_0^{2N-1} a_j D^j. \quad (13)$$

Тогда исходное уравнение, с которого начинается рекуррентная процедура отыскания коэффициентов,

$$\sum_1^{2N-1} a_j j! g_{j-1} - \frac{1}{4}(\delta\lambda)^2 g_0 = 0 \quad (14)$$

связывает коэффициенты $g_0, \dots, g_{2N-2}$. Таким образом, при фиксированных m, n , зная численно или асимптотически собственные значения λ_n, λ_m и несколько “базовых” матричных элементов (в нашем случае “общего положения” это $g_0, \dots, g_{2N-3}$), остальные мы можем вычислять по рекуррентной процедуре “от начала”. Возможно также, полагая, что коэффициенты g_k быстро убывают с номером k , производить вычисления “от конца”. В этом случае нужны только собственные значения.

Аналогом уравнения (11) при $n = m$ является уравнение

$$\left(pq(D_p) + \frac{1}{2}q'(D_p) - \lambda p + \frac{p^3}{4} \right) u_{nn}(p) = 0. \quad (15)$$

Здесь начальная степень разложения функции $u_{nn}(p)$ в ряд по степеням p всегда фиксирована, поскольку первый матричный элемент — это нормировка функции

$$u_{nn}(p) = \sum_0^{\infty} g_k p^k. \quad (16)$$

Исследование рекуррентной системы для коэффициентов g_k производится так же, как и в случае (11).

3. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Рассматривается задача о гармоническом осцилляторе на интервале $(-\infty, \infty)$:

$$\psi''(z) + (\lambda - z^2)\psi(z) = 0, \quad |\psi(\pm\infty)| < \infty. \quad (17)$$

Волновые функции ψ_n и собственные значения λ_n определены соотношениями

$$\psi_n(z) = e^{-z^2/2} H_n(z), \quad \lambda_n = 2n + 1.$$

Функции $H_n(z)$ – полиномы Эрмита. Уравнение третьего порядка для квадрата собственной функции имеет вид

$$w'''_{nn}(z) + 4(\lambda - z^2)w'_{nn}(z) - 4zw_{nn}(z) = 0, \quad (18)$$

а уравнение четвертого порядка для произведений собственных функций –

$$v''''_{nm}(z) + 2(\lambda_n + \lambda_m - 2z^2)v''_{nm}(z) - 12zv'_{nm}(z) + ((\lambda_n - \lambda_m)^2 - 4)v_{nm}(z) = 0. \quad (19)$$

Решение в виде ряда уравнения (18) обсуждается в публикации [1]. Здесь мы рассмотрим решение уравнения (19). Пусть $n - m = l$. Перейдем к уравнению для функции u_{nm} :

$$p^2 u''_{nm}(p) + p u'_{nm}(p) - l^2 u_{nm}(p) - \left((n + m + 1)p^2 + \frac{p^4}{4} \right) u_{nm}(p) = 0. \quad (20)$$

Это уравнение второго порядка с регулярной особой точкой в нуле и иррегулярной особой точкой на бесконечности, являющееся частным случаем биконфлюэнтного уравнения Гойна [4, 5]. Характеристические показатели в нуле равны $\pm l$. Регулярное в нуле решение строится в виде

$$u_{nm}(p) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k^{(nm)} p^{l+k}. \quad (21)$$

Подставив решение (21) в уравнение (20), получим трехчленную рекуррентную систему для коэффициентов c_k

$$\begin{aligned} 4(l+1)c_2 - (n+m+1)c_0 &= 0, \\ k(k+2l)c_k - (n+m+1)c_{k-2} - \frac{1}{4}c_{k-4} &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Из рекуррентной системы (22) видно, что все матричные элементы при фиксированных n, m выражаются через первый отличный от нуля матричный элемент.

4. АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Рассмотрим одну из возможных моделей ангармонического осциллятора на $(-\infty, \infty)$:

$$\psi''(z) + (\lambda - t^2(z^2 + 1)^2)\psi(z) = 0, \quad |\psi(\pm\infty)| < \infty. \quad (23)$$

Уравнение (23) представляет собой частный случай так называемого триконфлюэнтного уравнения Гойна [4, 5]. Масштабным преобразованием независимой переменной $z \mapsto zt^{-1/2}$ оно приводится к более привычной для физиков форме:

$$\psi''(z) + (\tilde{\lambda} - (2z^2 + t^{-1}z^4))\psi(z) = 0, \quad (24)$$

где $\tilde{\lambda} = \lambda t^{-1} - t$. Введем, как и выше, число $l = n - m$. Тогда четность подынтегральной функции в определении матричного элемента совпадает с $k + l$, и если $k + l$ — нечетное число, то соответствующий матричный элемент равен нулю. Уравнение (8) в рассматриваемом случае имеет вид

$$\begin{aligned} v_{nm}''''(z) + 2(\Sigma\lambda - 2t^2(z^2 + 1)^2)v_{nm}''(z) - 24t^2z(z^2 + 1)v_{nm}'(z) + \\ + ((\delta\lambda)^2 - 24t^2z^2 - 8t^2)v_{nm}(z) = 0, \end{aligned} \quad (25)$$

где введены обозначения

$$\Sigma\lambda = \lambda_n + \lambda_m, \quad \delta\lambda = \lambda_n - \lambda_m.$$

После преобразования Лапласа получается уравнение

$$\begin{aligned} p^2 u_{nm}''''(p) + 2p u_{nm}'''(p) + 2p^2 u_{nm}''(p) + 2p u_{nm}'(p) + \\ + \left(-\frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2} + \left(1 - \frac{\Sigma\lambda}{2t^2} \right) p^2 - \frac{p^4}{4t^2} \right) u_{nm}(p) = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Точка $z = 0$ является регулярной особой точкой уравнения (26). Характеристические числа равны $\rho_1 = 0$, $\rho_{2,3} = 1$, $\rho_4 = 2$. Одно из решений, отвечающих корню $\rho_{2,3} = 1$, и решение, отвечающее корню $\rho_4 = 2$, представляют собой регулярные в нуле функции и могут быть построены в виде рядов Тейлора

$$u_{nm}(p) = \sum_0^\infty c_{k+1} p^{k+1}, \quad (27)$$

$$u_{nm}(p) = \sum_0^\infty d_{k+2} p^{k+2}. \quad (28)$$

Подстановка разложения в уравнение приводит к рекуррентным соотношениям для коэффициентов c_k

$$\begin{aligned} 12c_3 + \left(-2 - \frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2} \right) c_1 = 0, \\ 240c_5 + \left(6 - \frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2} \right) c_3 + \left(1 - \frac{\Sigma\lambda}{2t^2} \right) c_1 = 0, \\ (k+6)^2(k+7)(k+5)c_{k+7} + \left(2(k+5)(k+3) - \frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2} \right) c_{k+5} + \\ + \left(1 - \frac{\Sigma\lambda}{2t^2} \right) c_{k+3} - \frac{1}{4t^2} c_{k+1} = 0, \quad k = 2j, \end{aligned} \quad (29)$$

и для коэффициентов d_k

$$\begin{aligned}
 72d_4 - \left(\frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2}\right)d_2 &= 0, \\
 600d_6 + \left(16 - \frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2}\right)d_4 + \left(1 - \frac{\Sigma\lambda}{2t^2}\right)d_2 &= 0, \\
 (k+7)^2(k+8)(k+6)d_{k+8} + \left(2(k+6)(k+4) - \frac{(\delta\lambda)^2}{4t^2}\right)d_{k+6} + \\
 + \left(1 - \frac{\Sigma\lambda}{2t^2}\right)d_{k+4} - \frac{1}{4t^2}d_{k+2} &= 0, \quad k = 2j.
 \end{aligned} \tag{30}$$

При $n = m$, т.е. в случае диагональных матричных элементов, регулярное в нуле решение допускает представление

$$u_{nn}(p) = \sum_0^{\infty} g_k p^k, \tag{31}$$

ведущее к следующей рекуррентной системе для коэффициентов:

$$\begin{aligned}
 24g_4 + 6g_2 + \left(1 - \frac{\lambda_n}{t^2}\right)g_0 &= 0, \\
 (k+4)(k+3)(k+2)^2g_{k+4} + (k+2)(2k+3)g_{k+2} + \\
 + \left(1 - \frac{\lambda_n}{t^2}\right)g_k - \frac{1}{4t^2}g_{k-2} &= 0.
 \end{aligned} \tag{32}$$

Все четные матричные элементы выражаются через нормировку, и еще один матричный элемент – квадрупольный.

5. ОБОБЩЕНИЯ

Теория и примеры, разобранные в статье, касались одномерного уравнения Шредингера, не содержащего производной. Однако во многих прикладных задачах, возникающих при разделении переменных, мы встречаемся с другой формой уравнения, а именно,

$$(-L + \lambda)\psi = \frac{d}{dz}r(z)\frac{d}{dz}\psi(z) + (\lambda - q(z))\psi(z) = 0. \tag{33}$$

К таким уравнениям относятся уравнения для классических ортогональных полиномов – полиномов Якоби, Лежандра и Лагерра. Сюда же надо отнести и уравнения, возникающие в более сложных задачах (задача двух кулоновских центров, эффект Штарка на водороде и т.д.). Полное рассмотрение всех этих задач выходит за рамки данной публикации. Мы приведем в справочных целях лишь аналог уравнения (3) для квадрата волновой функции

$$\begin{aligned}
 w_{nn}'''(z) + 3r'w_{nn}''(z) + \left(4(\lambda_n - q) + r'' + \frac{r'^2}{r}\right)w_{nn}'(z) + \\
 + \left(-2q' + \frac{2(\lambda - q)r'}{r}\right)w_{nn}(z) &= 0
 \end{aligned} \tag{34}$$

и аналог уравнения (6) для произведения волновых функций

$$\begin{aligned}
 &rv_{nm}'''' + 5r'v_{nm}''' + \left(2\Sigma\lambda - 4q + 4r'' + \frac{4r'^2}{r}\right)v_{nm}'' + \\
 &+ \left(-6q' - \frac{3(2q - \Sigma\lambda)r'}{r} + r''' + \frac{3r'r''}{r}\right)v_{nm}' + \\
 &+ \left(\frac{(\delta\lambda)^2}{r} - 2q'' - \frac{4q'r'}{r} - \frac{(2q - \Sigma\lambda)r''}{r}\right)v_{nm} = 0.
 \end{aligned} \tag{35}$$

Вывод этих уравнений требует выкладок, аналогичных проведенным при доказательствах лемм 1 и 2, однако более громоздких. Домножив уравнения (34), (35) на r , мы приведем их к форме уравнений с полиномиальными коэффициентами. Нетрудно проверить, что дифференцирование уравнения (34) приводит к уравнению, получающемуся из уравнения (35) при $\lambda_n = \lambda_m$.

Для определения матричных элементов следует, как и выше, перейти к уравнениям, преобразованным по Лапласу, и вычислять разложение решения в нуле.

Благодарности. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант №99-01-01362.

Список литературы

- [1] *S. Yu. Slavyanov.* J. Phys A. 1999. V. 32. P. 1773.
- [2] *W. Gordon.* Ann. Phys. 1929. V. 2. P. 1031.
- [3] *Н. Ф. Трускова.* Линейная алгебра интегралов задачи двух центров в квантовой механике. Препринт Р2-11269. Дубна: ОИЯИ, 1978.
- [4] *A. Ronveaux.* Heun's Differential Equations. Oxford, New York, Tokyo: Oxford University Press, 1995.
- [5] *А. Зеегер, В. Лай, С. Ю. Славянов.* ТМФ. 1995. Т. 104. № 2. С. 233.

Поступила в редакцию 5.V.1999 г.