Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. У. Матрасулов, Волновые функции и энергетические уровни уравнения Шредингера с потенциалом, являющимся суммой потенциала двух кулоновских центров и потенциала гармонического осциллятора, *ТМФ*, 1998, том 117, номер 3, 364–369

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf938>

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: 54.224.187.69

26 апреля 2023 г., 18:16:48

© 1998 г.

Д. У. Матрасулов*

**ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ
УРОВНИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С ПОТЕНЦИАЛОМ, ЯВЛЯЮЩИМСЯ СУММОЙ
ПОТЕНЦИАЛА ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ
И ПОТЕНЦИАЛА
ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА**

Уравнение Шредингера для потенциала двух кулоновских центров плюс потенциал гармонического осциллятора решается методом эталонного уравнения при больших расстояниях между центрами. Получены асимптотические разложения для энергетических уровней и волновых функций.

1. ВВЕДЕНИЕ

Уравнение Шредингера с потенциалом двух кулоновских центров представляет значительный интерес с точки зрения различных задач, относящихся к системам нескольких тел, рассматриваемым в приближении Борна–Оппенгеймера. Оно описывает связанные состояния легкой частицы в поле двух тяжелых частиц. Обычно такие системы встречаются в молекулярной физике. Однако в последние годы возник значительный интерес к другим системам подобного рода: моделям барионов с двумя тяжелыми кварками (QQq -барионы) [1] и моделям тяжелых гибридных мезонов с открытым флейвором (QQg -мезоны) [2]. В настоящее время эти системы становятся предметом широких исследований. В нерелятивистском приближении движение легкого кварка (глюона) в поле двух тяжелых кварков (пары кварк–антикварк) может быть описано уравнением Шредингера с потенциалом, который представляет собой сумму потенциала двух кулоновских центров и потенциала конфайнмента.

В данной работе рассматривается уравнение Шредингера с потенциалом, который является суммой потенциала двух кулоновских центров и потенциала гармонического осциллятора. Насколько нам известно, этот потенциал – единственный потенциал такого рода, допускающий разделение переменных. Используя метод эталонного уравнения, широко применяемый в молекулярной физике для решения уравнения Шредингера с потенциалом двух кулоновских центров, мы получаем собственные функции и собственные

* Отдел теплофизики Академии наук Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан

значения уравнения Шредингера с потенциалом двух кулоновских центров плюс потенциал гармонического осциллятора в виде асимптотических разложений по обратным степеням расстояния между центрами.

Итак, мы хотим найти собственные значения энергии и волновые функции следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \omega^2(r_1^2 + r_2^2) \right] \psi = E\psi. \quad (1)$$

В вытянутых сфероидальных координатах, которые определяются как

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R} \quad (1 < \xi < \infty), \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R} \quad (-1 < \eta < 1),$$

где R – расстояние между кулоновскими центрами, этот потенциал можно записать в виде

$$V(r_1, r_2) = -\frac{2}{R^2} \frac{a(\xi) + b(\eta)}{\xi^2 - \eta^2} + \frac{\omega^2 R^2}{2}, \quad (2)$$

здесь

$$a(\xi) = 2ZR\xi - \frac{\omega^2 R^4}{4}\xi^2(\xi^2 - 1), \quad b(\eta) = \frac{\omega^2 R^4}{4}\eta^2(\eta^2 - 1).$$

Хорошо известно [3], что уравнение Шредингера с потенциалом вида (2) допускает разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах. После разделения переменных мы имеем три обыкновенных дифференциальных уравнения, связанных константами разделения λ и m :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + a\xi + (p^2 - \gamma'\xi^2)(\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)} - \lambda \right] X(\xi) &= 0, \\ \left[\frac{\partial}{\partial \eta}(\eta^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \eta} + (p^2 - \gamma'\eta^2)(\eta^2 - 1) - \frac{m^2}{(\eta^2 - 1)} - \lambda \right] Y(\eta) &= 0, \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + m^2 \right) Z(\phi) &= 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} p &= \frac{R}{2}\sqrt{2E'}, \quad E' = E - \frac{\omega^2 R^2}{2}, \\ \gamma' &= \frac{\omega^2 R^4}{4}, \quad a = 2ZR. \end{aligned}$$

Подстановка

$$\begin{aligned} U(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{\xi^2 - 1}} X(\xi), \\ V(\eta) &= \frac{1}{\sqrt{1 - \eta^2}} Y(\eta) \end{aligned}$$

приводит эти уравнения к следующему каноническому виду:

$$U''(\xi) + \left[\frac{h^2}{4} + \frac{h(\alpha\xi - \lambda)}{\xi^2 - 1} - h^4\gamma\xi^2 + \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad (3)$$

$$V''(\eta) + \left[\frac{h^2}{4} + \frac{h\lambda}{1 - \eta^2} - h^4\gamma\eta^2 + \frac{1 - m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0, \quad (4)$$

где

$$\alpha = 2Z/\sqrt{2E'}, \quad \gamma = \omega^2/8E'^2, \quad h = 2p. \quad (5)$$

Граничные условия для функций U и V имеют вид

$$U(\xi)|_{\xi=1} = 0, \quad U(\xi)|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad (6)$$

$$V(\eta)|_{\eta=\pm 1} = 0. \quad (7)$$

2. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ “КВАЗИУГЛОВОГО” УРАВНЕНИЯ

Мы решаем уравнения (3) и (4) приближенно при больших R методом эталонного уравнения. Этот метод успешно применялся при решении нерелятивистской задачи двух кулоновских центров [3–5] и в теории дифракции волн. Детали метода эталонного уравнения приведены в [3–6]. Начнем с “углового” уравнения (4). В качестве эталонного уравнения для (4) мы выбираем уравнение Уиттэкера [7]

$$W'' + \left[-\frac{h^4}{4} + \frac{h^2k}{z} + \frac{1 - m^2}{4z^2} \right] W = 0 \quad (8)$$

и ищем решение в виде

$$V = [z'(\eta)]^{-\frac{1}{2}} M_{k, \frac{m}{2}}(h^2 z), \quad (9)$$

где $M_{k, m/2}(h^2 z)$ есть регулярное в нуле решение уравнения (8). После подстановки (9) в (4) получаем следующее уравнение для z :

$$\begin{aligned} \frac{z'^2}{4} - \gamma(x-1)^2 - \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{4} + \frac{kz'^2}{z} - \frac{\lambda}{2x(1 - \frac{x}{2})} \right) + \\ + \frac{\tau}{h^2} \left(\frac{1}{x^2(1-x^2)} - \frac{z'^2}{z^2} \right) - \frac{1}{2h^2} [z, x] = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\tau = (1 - m^2)/4$, $x = 1 + \eta$, $[z, x] = -(3/2)(z''/z')^2 + z'''/z'$ (z' – производная z по x). Требование совпадения переходных точек

$$z(x)|_{x=0} = 0$$

приводит к следующему “квантовому условию”:

$$\lambda = 2kz'(0) + \frac{2\tau}{h^2} \left[\frac{z''(0)}{z'(0)} - 1 \right]. \quad (11)$$

Будем искать решение уравнения (10) и собственные значения λ в виде следующих асимптотических разложений:

$$z = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z_k}{h^k}, \quad \lambda = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_k}{h^k}.$$

Подстановка этих разложений в (10) дает рекуррентную систему дифференциальных уравнений для z :

$$\begin{aligned} z'_0 &= 2\gamma^{\frac{1}{2}}(x-1), \\ z'_1 &= 0, \\ z'_2 &= \frac{1}{2z'_0} + \frac{2kz'_0}{z_0} - \frac{(z'_1)^2}{2z'_0} - \frac{2\lambda_0}{z'_0 x(1-x/2)} - \frac{z_2'^2}{2}, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

и рекуррентные соотношения для λ :

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= 2kz'_0(0), \\ \lambda_1 &= 2kz'_1(0), \\ \lambda_2 &= 2kz'_2(0) + 2\tau \left(\frac{z''_0(0)}{z'_1(0)} - 1 \right), \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

Решая эти рекуррентные уравнения, имеем

$$\lambda^{(\eta)} = 4k\gamma^{\frac{1}{2}} + \frac{2k\beta - 4\tau}{h^2} + O\left(\frac{1}{h^4}\right), \quad (12)$$

$$z = \gamma^{\frac{1}{2}}x(2-x) + \frac{1}{h^2}\beta \ln(1-x) + O\left(\frac{1}{h^4}\right). \quad (13)$$

Из граничных условий можно получить следующее выражение для квантового числа k [5, 6]:

$$k = q + \frac{m+1}{2},$$

где $q = 0, 1, 2, \dots$.

3. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ КВАЗИРАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

В качестве эталонного уравнения для (3) возьмем уравнение

$$W'' + \left[h^2 s - h^4 y^2 - \frac{4\tau + 3}{4y^2} \right] W = 0, \quad (14)$$

решения которого выражаются через вырожденные гипергеометрические функции [1, 7]

$$W = y^c \exp\left\{-\frac{h^4 y^2}{2}\right\} F\left(\frac{s-2c-1}{4}, c + \frac{1}{2}, h^4 y^2\right),$$

где

$$c = \frac{1 + \sqrt{m^2 + 3}}{2}.$$

Граничные условия (6) и свойства функций F [7, 8] дают $s = 4n + \sqrt{m^2 + 3} + 2$. Подставляя

$$U = [y(\xi)]^{-\frac{1}{2}} W(y(\xi))$$

в уравнение (3), получим

$$\begin{aligned} & \frac{y^2 y'^2}{4} - \gamma \xi^2 + \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{4} - s y'^2 - \frac{\lambda}{\xi^2 - 1} \right) + \frac{1}{h^3} \frac{\alpha \xi}{\xi^2 - 1} + \\ & + \frac{4\tau}{h^4 (\xi^2 - 1)^2} - \frac{3 - 4\tau}{4h^4} \frac{y'^2}{y^2} - \frac{1}{2h^4} [y, \xi] = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

После подстановки $\phi = y^2(t)/4$ это уравнение можно привести к виду

$$\begin{aligned} & \phi'^2 - \gamma(t+1) + \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{4} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\phi'^2}{\phi} - \frac{\lambda}{t(t+2)} \right) + \frac{1}{h^3} \frac{\alpha(t+1)}{t(t+2)} + \\ & + \frac{\tau}{h^4} \left(\frac{\phi'^2}{\phi^2} - \frac{4}{t^2(t+2)^2} \right) - [\phi, t] = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

где $t = \xi - 1$. Условие квантования, которое следует из условия $\phi(t) = 0$, записывается в виде

$$\lambda = -2s\phi'(0) + \frac{\alpha}{h} - \frac{1}{h^2} \left[\frac{\phi''}{\phi'} + 1 \right] \Big|_{t=0}. \quad (17)$$

Подставляя в уравнение (16) асимптотические выражения

$$\phi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\phi_k}{h^k}, \quad \lambda = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_k}{h^k}$$

и решая полученные уравнения, имеем

$$\begin{aligned} y &= 2\gamma^{\frac{1}{4}}(t^2 + 2t)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{h^2} \delta \gamma^{-\frac{1}{4}}(t^2 + 2t)^{-\frac{1}{2}} \ln(t+1) + \\ &+ \frac{1}{h^3} \alpha \gamma^{-\frac{3}{4}}(t^2 + 2t)^{-\frac{1}{2}} \ln \frac{2(t+1)}{t+1} + O\left(\frac{1}{h^4}\right), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\lambda(\xi) = -2s\gamma^{\frac{1}{2}} - \frac{\alpha}{h} + \frac{4\tau - s\delta}{h^2} - \frac{s\alpha\gamma^{-\frac{1}{4}}}{2h^3} + O\left(\frac{1}{h^4}\right). \quad (19)$$

4. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ

Асимптотические разложения (12) и (19) дают выражение для энергии в виде мультипольного разложения. Чтобы получить это разложение, нужно подставить выражение

$$E' = E_0 + \frac{E_1}{R} + \frac{E_2}{R^2} + \dots$$

в разложения (12) и (19). Приравнявая $\lambda^{(\eta)}$ и $\lambda^{(\xi)}$ и учитывая равенства (5), получаем следующие выражения для коэффициентов $E_1, E_2, \dots$:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{1}{6Z} \left[(s\omega - 2k\omega^{-1})(2E_0)^{\frac{5}{2}} + (4s^2 - 16k^2 - 16\tau)(2E_0)^{\frac{3}{2}} \right], \\ E_2 &= \frac{5}{2}E_1^2 + 2s\omega^{-1}E_0 + E_1(2E_0)^{\frac{1}{2}}Z^{-1}(16\tau^2 + 16k^2 - 4s^2), \\ &\dots \end{aligned}$$

Теперь необходимо найти E_0 . Для этого заметим, что при $R \rightarrow \infty$ имеем $E' = E_0$ или

$$E = E_0 + \frac{\omega^2 R^2}{2}. \quad (20)$$

С другой стороны, при больших R

$$\begin{aligned} V(r_1, r_2) &= \frac{2Z}{R} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r}{R} \right)^l P_l(\cos \theta) + \omega^2 \left[\left(r^2 + 2rR \cos \theta + \frac{R^2}{4} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(r^2 - 2rR \cos \theta + \frac{R^2}{4} \right) \right] \approx \omega^2 \left(2r^2 + \frac{R^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Для такого потенциала энергетические уровни имеют вид

$$E = 2\omega \left(N + \frac{3}{2} \right) + \frac{\omega^2 R^2}{2}, \quad (22)$$

где $N = 2n + q + m$ есть главное квантовое число. Сравнивая формулы (20) и (22), видим, что

$$E_0 = 2\omega \left(N + \frac{3}{2} \right).$$

Таким образом, получены асимптотические разложения для волновых функций и собственных значений энергий уравнения Шредингера с потенциалом, представляющим собой сумму потенциала двух кулоновских центров и потенциала гармонического осциллятора. Полученные формулы могут оказаться полезными при дальнейших численных расчетах, а также могут быть использованы для оценки энергетических спектров QQq-барионов.

Список литературы

- [1] J. M. Richard. Phys. Rep. 1992. V. 212. P. 1.
- [2] S. N. Mukherjee, R. Nag, S. Sanyal, T. Morii, J. Morishita, M. Tsuge. Phys. Rep. 1993. V. 231. P. 203.
- [3] В. И. Комаров, Л. И. Пономарев, Ю. С. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1978.
- [4] Ю. С. Славянов. Асимптотики одномерного уравнения Шредингера. Л.: Изд-во Ленингр. университета, 1991.
- [5] В. И. Комаров, Ю. С. Славянов. ЖЭТФ. 1967. Т. 52. С. 1368.
- [6] V. I. Komarov, Yu. S. Slavyanov. J. Phys. B. 1968. V. 1. P. 1066.
- [7] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1974.
- [8] М. Абрамович, И. Стиган (ред.). Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979.

Поступила в редакцию 13.IV.1998 г.