Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Д. Алхайдари, Четырехпараметрический короткодействующий потенциал с особенностью типа $1/r^2$ и обширный спектр его связанных состояний и резонансов, *ТМФ*, 2018, том 195, номер 3, 422–436

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9445>

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: 18.234.156.22

26 апреля 2023 г., 12:43:57

© 2018 г.

А. Д. Алхайдари*

ЧЕТЫРЕХПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПОТЕНЦИАЛ С ОСОБЕННОСТЬЮ ТИПА $1/r^2$ И ОБШИРНЫЙ СПЕКТР ЕГО СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ И РЕЗОНАНСОВ

Метод трехдиагонального представления применяется с целью расширить класс точно решаемых квантовых систем, для чего используется квадратично интегрируемый базис, в котором матрица волнового оператора трехдиагональна. При этом волновое уравнение принимает вид рекуррентного соотношения для коэффициентов разложения волновой функции трех последовательных порядков, решение которого в терминах ортогональных полиномов эквивалентно решению исходной задачи. Получены S-волновые связанные состояния для нового четырехпараметрического потенциала с особенностью типа $1/r^2$, но короткодействующего, который обладает сложной конфигурационной структурой и богатыми спектральными свойствами. Частица при рассеянии на таком потенциале должна преодолевать потенциальный барьер, а затем может быть захвачена в ловушку в потенциальной яме в резонансном или связанном состоянии. С использованием комплексного вращения продемонстрированы богатые спектральные свойства потенциала в случае ненулевого углового момента и показано, как эта структура изменяется с изменением параметров потенциала.

Ключевые слова: потенциал с сингулярностью типа $1/r^2$, трехдиагональное представление, рекуррентное соотношение, спектр параметров, связанные состояния, резонансы.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9445>

*Мы считаем за честь посвятить эту статью
профессору Хасиму Ямани по поводу его семидесятилетия.*

1. ВВЕДЕНИЕ

Точные решения волнового уравнения позволяют лучше понять физическую систему, описываемую этим уравнением. Такого понимания нельзя достичь, используя приближенные или численные методы, особенно в точках фазовых переходов

*Saudi Center for Theoretical Physics, Jeddah, Saudi Arabia.
E-mail: a.d.alhaidari@gmail.com

или вблизи них, в режиме критической связи, в асимптотических пределах, при наличии сингулярностей и т. д. Чтобы получить точные решения волнового уравнения, необходимо найти собственные функции, отвечающие всем энергиям (дискретного и непрерывного спектра), и рассчитать дискретный спектр связанных состояний (если они существуют), а также фазовый сдвиг состояний рассеяния, отвечающих непрерывному спектру. Класс потенциалов, для которых волновое уравнение Шредингера точно решается, хорошо известен, и за многие годы такие потенциалы были найдены и классифицированы многими авторами (см., например, работы [1]–[3]).

Для получения точного решения задачи мы используем метод трехдиагонального представления (МТП) [4]–[9]. В рамках этого подхода волновая функция записывается как бесконечный ряд из квадратично интегрируемых базисных функций в конфигурационном пространстве с коэффициентами, заданными как ортогональные полиномы от энергии. Все физические свойства системы (структурные и динамические) получаются из этих ортогональных полиномов. Например, их асимптотика дает фазовый сдвиг состояний рассеяния, отвечающих непрерывному спектру, а спектральные формулы определяют собственные энергии связанных состояний.

В настоящей статье мы решаем задачу с ранее не изучавшимся четырехпараметрическим радиально-симметричным потенциалом

$$V(r) = \frac{1}{\text{sh}^2(\lambda r)} [V_0 + V_1 \text{th}^2(\lambda r) + V_2 \text{th}^4(\lambda r)], \quad (1)$$

где λ , V_0 , V_1 , V_2 – действительные параметры, причем $\lambda > 0$, $V_0 > 0$ и $V_2 \neq 0$. Параметр λ имеет размерность обратной длины и определяет ширину потенциала. Данный потенциал фактически является обобщением гиперболического потенциала Пёшля–Теллера [1]–[3], который получается, если взять $V_2 = 0$. Вблизи нуля потенциал (1) имеет особенность типа $1/r^2$, а при $r \rightarrow \infty$ он экспоненциально стремится к нулю (т. е. является короткодействующим).

Существуют три характерные конфигурации данного потенциала, показанные на рис. 1. В первом случае потенциал имеет два локальных экстремума (локальный минимум и локальный максимум), и в этой конфигурации либо имеются резонансы, но отсутствуют связанные состояния (см. рис. 1а), либо мы наблюдаем и то, и другое (см. рис. 1б). Вторая конфигурация имеет место, если два экстремума совпадают в точке перегиба (см. рис. 1в), или потенциал не имеет локальных экстремумов (см. рис. 1г). В обоих этих случаях не существует ни связанных состояний, ни резонансов. В третьей конфигурации (см. рис. 1д) потенциал имеет один локальный минимум, и в этом случае возникают связанные состояния, но отсутствуют резонансы. В силу короткодействующего характера потенциала мы ожидаем, что энергетический спектр связанных состояний конечен, и проверим эту гипотезу ниже. Потенциал (1) можно рассматривать как частичную сумму ряда

$$\mathcal{V}(r) = \frac{1}{\text{sh}^2(\lambda r)} \sum_n V_n \text{th}^{2n}(\lambda r).$$

Далее мы ставим задачу и решаем ее, используя МТП [4]–[9].

Рис. 1. Конфигурации потенциала, для которых присутствуют только резонансы (а), имеются и резонансы, и связанные состояния (б), и резонансы, и связанные состояния отсутствуют (в), (г), присутствуют только связанные состояния (д).

2. ФОРМУЛИРОВКА МТП

Гамильтониан системы (в атомных единицах $\hbar = m = 1$) зададим как S-волновой дифференциальный оператор второго порядка по радиальной переменной,

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r),$$

и запишем волновую функцию в виде конечной суммы

$$\psi(E, r) = \sum_n f_n(E) \phi_n(r);$$

здесь мы используем $\{\phi_n(r)\}$ – полный набор квадратично интегрируемых базисных функций и $\{f_n(E)\}$ – надлежащий набор коэффициентов, зависящих от энергии. Применим преобразование координат $x(r) = 2 \operatorname{th}^2(\lambda r) - 1$, тогда уравнение Шредингера в новом конфигурационном пространстве примет вид

$$(H - E)|\psi\rangle = -\frac{1}{2} \left[(x')^2 \frac{d^2}{dx^2} + x'' \frac{d}{dx} - 2V(x) + 2E \right] |\psi\rangle = 0, \quad (2)$$

где штрихом обозначена производная по r . При $x \in [-1, +1]$ в качестве базисных мы можем выбрать следующие квадратично интегрируемые функции в новом конфигурационном пространстве:

$$\phi_n(x) = A_n (1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta P_n^{(\mu, \nu)}(x), \quad (3)$$

где $P_n^{(\mu, \nu)}(x)$ – полиномы Якоби степени $n = 0, 1, 2, \dots$ и нормировочная постоянная равна

$$A_n = \sqrt{\frac{2n + \mu + \nu + 1}{2^{\mu + \nu + 1/2}} \frac{\Gamma(n + 1) \Gamma(n + \mu + \nu + 1)}{\Gamma(n + \nu + 1) \Gamma(n + \mu + 1)}}.$$

Параметры μ и ν должны быть больше -1 , чтобы выполнялись граничные условия, а условие квадратичной интегрируемости (по мере dr) приводит к равенствам $2\alpha = \mu$ и $2\beta = \nu + 1/2$.

Имеет смысл дать следующее обоснование этих значений параметров. В рамках МТП мы требуем, чтобы матрица волнового оператора из (2) была трехдиагональной. К базисным функциям (3) мы в конечном итоге должны применить дифференциальное уравнение второго порядка для полиномов Якоби. Учитывая, что это уравнение начинается с оператора $(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2}$, перепишем (2) как

$$(H - E)|\psi\rangle = -\frac{1}{2} \frac{(x')^2}{1 - x^2} \left[(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x''}{(x')^2} (1 - x^2) \frac{d}{dx} + 2 \frac{1 - x^2}{(x')^2} (E - V) \right] |\psi\rangle = 0.$$

Матричные элементы волнового оператора (3) в базисе полиномов Якоби таковы:

$$\begin{aligned} J_{n,m} &= \langle \phi_n | H - E | \phi_m \rangle = \lambda \int_0^\infty \phi_n (H - E) \phi_m dr = \\ &= -\frac{\lambda}{2} \int_0^\infty \frac{(x')^2}{1 - x^2} \phi_n[\cdot] \phi_m dr = -\frac{\lambda}{2} \int_{-1}^1 \frac{x'}{1 - x^2} \phi_n[\cdot] \phi_m dx = \\ &= -\frac{\lambda}{2} A_n A_m \int_{-1}^1 \frac{x'}{1 - x^2} (1 - x)^{2\alpha} (1 + x)^{2\beta} P_n^{(\mu, \nu)}(x) [\cdot] P_m^{(\mu, \nu)}(x) dx, \end{aligned} \quad (4)$$

где $[\cdot]$ означает оператор в квадратных скобках из предыдущей формулы; при этом мы использовали интегральное преобразование

$$\lambda \int_0^\infty (\cdot) dr = \lambda \int_{-1}^1 (\cdot) \frac{dx}{x'}. \quad (5)$$

На основании этого представления потребуем, чтобы

$$\frac{x'}{1-x^2}(1-x)^{2\alpha}(1+x)^{2\beta} \propto (1-x)^\mu(1+x)^\nu,$$

как это требует ортогональность полиномов Якоби. Поэтому $2\alpha = \mu$ и $2\beta = \nu + 1/2$, поскольку $x' = \sqrt{2}\lambda(1-x)\sqrt{1+x}$.

Используя уравнение (2), мы можем представить волновой оператор $J = H - E$ в виде

$$J = -\lambda^2(1-x) \left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1+3x}{2} \frac{d}{dx} + \frac{\varepsilon}{1-x} - \frac{u_1}{2} - \frac{u_0}{1+x} - \frac{u_2}{4}(1+x) \right], \quad (6)$$

где $\varepsilon = E/\lambda^2$, $u_i = V_i/\lambda^2$ и, применив равенство $x''/(x')^2 = -(1+3x)/2(1-x^2)$, мы записали функцию потенциала в зависимости от новой координаты x как

$$V(x) = (1-x) \left[\frac{V_1}{2} + \frac{V_0}{1+x} + \frac{V_2}{4}(1+x) \right].$$

Таким образом, действие волнового оператора на базисные элементы (3) рассчитывается по формуле

$$\begin{aligned} J|\phi_n\rangle = & -\lambda^2 A_n (1-x)^{1+\mu/2} (1+x)^{1/4+\nu/2} \times \\ & \times \left[\frac{1}{2} \frac{2\varepsilon + \mu^2}{1-x} - \frac{1}{2} \frac{2u_0 - \nu^2 + 1/4}{1+x} - \right. \\ & \left. - \frac{u_2}{4}(1+x) - \left(n + \frac{\mu + \nu + 1}{2} \right)^2 + \frac{1}{16} - \frac{u_1}{2} \right] P_n^{(\mu, \nu)}(x), \end{aligned} \quad (7)$$

где мы применили дифференциальное уравнение для полиномов Якоби

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_n^{(\mu, \nu)} - [(\mu + \nu + 2)x + \mu - \nu] \frac{d}{dx} P_n^{(\mu, \nu)} + n(n + \mu + \nu + 1) P_n^{(\mu, \nu)} = 0. \quad (8)$$

В результате матричные элементы волнового оператора принимают вид

$$J_{m,n} = \langle \phi_m | J | \phi_n \rangle = -\lambda^2 \frac{A_m A_n}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 (1-x)^\mu (1+x)^\nu F(x) P_m^{(\mu, \nu)}(x) P_n^{(\mu, \nu)}(x) dx, \quad (9)$$

где через $F(x)$ обозначено выражение в квадратных скобках в (7) и использовано интегральное преобразование (5).

В МТП требуется, чтобы матрица волнового оператора с элементами (9) была трехдиагональной и симметричной. Из рекуррентного соотношения для полиномов Якоби и условия их ортогональности [10] следует, что это требование для матрицы выполнено тогда и только тогда, когда функция $F(x)$ под интегралом в (9) является линейной. Таким образом, чтобы исключить из выражения для $F(x)$ два нелинейных слагаемых, пропорциональных $1/(1 \pm x)$, необходимо задать параметры как

$$\mu^2 = -2\varepsilon, \quad \nu^2 = 2u_0 + \frac{1}{4}. \quad (10)$$

Отсюда вытекает, что решение ограничено условием отрицательности энергий и, кроме того, должно быть выполнено неравенство $u_0 > -1/8$, которое автоматически справедливо, поскольку $V_0 > 0$. Решения с отрицательными энергиями отвечают связанным состояниям и указывают на то, что конфигурация потенциала должна быть такой, как показано на рис. 1б или на рис. 1д. Равенства (10) вместе с рекуррентным соотношением для трех полиномов Якоби

$$\begin{aligned} xP_n^{(\mu,\nu)}(x) = & \frac{2(n+\mu)(n+\nu)}{(2n+\mu+\nu)(2n+\mu+\nu+1)}P_{n-1}^{(\mu,\nu)}(x) + \\ & + \frac{\nu^2 - \mu^2}{(2n+\mu+\nu)(2n+\mu+\nu+2)}P_n^{(\mu,\nu)}(x) + \\ & + \frac{2(n+1)(n+\mu+\nu+1)}{(2n+\mu+\nu+1)(2n+\mu+\nu+2)}P_{n+1}^{(\mu,\nu)}(x) \end{aligned} \quad (11)$$

и условием ортогональности полиномов

$$\frac{1}{\sqrt{2}}A_n^2 \int_{-1}^1 (1-x)^\mu (1-x)^\nu P_n^{(\mu,\nu)}(x) P_m^{(\mu,\nu)}(x) dx = \delta_{n,m} \quad (12)$$

дают следующее трехдиагональное симметричное матричное представление волнового оператора (9):

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda^2}J_{n,m} = & \left[\left(n + \frac{\mu+\nu+1}{2} \right)^2 - \frac{1}{16} + \frac{u_1}{2} + \frac{u_2}{4}(1+C_n) \right] \delta_{n,m} + \\ & + \frac{u_2}{4}(D_{n-1}\delta_{n,m+1} + D_n\delta_{n,m-1}), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} C_n = & \frac{\nu^2 - \mu^2}{(2n+\mu+\nu)(2n+\mu+\nu+2)}, \\ D_n = & \frac{2}{2n+\mu+\nu+2} \sqrt{\frac{(n+1)(n+\mu+1)(n+\nu+1)(n+\mu+\nu+1)}{(2n+\mu+\nu+1)(2n+\mu+\nu+3)}}. \end{aligned} \quad (14)$$

В итоге матричное волновое уравнение $\langle \phi_n | J | \psi \rangle = \sum_m J_{n,m} f_m = 0$ приводит к симметричному трехиндексному рекуррентному соотношению для коэффициентов разложения волновой функции:

$$\left(\frac{1}{4} - 2u_1 \right) P_n = [(2n+\mu+\nu+1)^2 + u_2(1+C_n)]P_n + u_2(D_{n-1}P_{n-1} + D_nP_{n+1}), \quad (15)$$

где мы положили $f_n(E) = f_0(E)P_n(\varepsilon)$ и $P_0 = 1$. Это соотношение справедливо для $n = 1, 2, 3, \dots$; начав с $P_0 = 1$ и

$$P_1 = -\frac{1}{u_2 D_0} \left[2u_1 + 2u_2 \frac{\nu+1}{\mu+\nu+2} + (\mu+\nu+1)^2 - \frac{1}{4} \right], \quad (16)$$

можно получить полином любой требующейся степени.

Кроме того, соотношение (15) определяет P_n как полином от $(1/4 - 2u_1)$ степени n . Нам не удалось найти этот полином в математической литературе. Его аналитические свойства, такие как весовая и производящая функции, ортогональность,

расположение нулей и т. д., еще ожидают своего вывода. Однако этот полином часто встречался в физических публикациях при решении различных задач в квантовой механике [4]–[9]. Если бы мы знали, например, асимптотику полинома $\lim_{n \rightarrow \infty} P_n$, то мы могли бы без труда найти спектр энергий $\{\varepsilon_m\}$ из условия, что при этих энергиях асимптотика обращается в нуль. Это же условие задает дискретизацию полинома $P_n(\varepsilon_m)$, которая входит как коэффициент разложения в соответствующую волновую функцию $\psi(E_m, r)$. Асимптотика полинома имеет вид

$$P_n(\varepsilon) \approx n^{-\tau} A(\varepsilon) \cdot \cos[n^\xi \theta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon)], \quad (17)$$

где τ и ξ – положительные вещественные постоянные. Анализ, проведенный в работах [11]–[13], показывает, что $A(\varepsilon)$ есть амплитуда рассеяния и $\delta(\varepsilon)$ – фазовый сдвиг. И та, и другая величина зависят от энергии и физических параметров системы. Связанные состояния, если они существуют, возникают при энергиях $E(\varepsilon_m)$, для которых амплитуда рассеяния исчезает, $A(\varepsilon_m) = 0$. И все же, даже не имея сведений об аналитических свойствах этих полиномов, мы используем в следующем разделе процедуру, в результате которой найдем *спектр параметров потенциала* (СПП) [7], [8], [14], чтобы получить спектр энергий и соответствующие волновые функции.

Заметим, что если $V_2 = 0$, то потенциал (1) становится хорошо известным потенциалом Пёшля–Теллера, который принадлежит традиционному классу точно решаемых потенциалов в стандартной формулировке квантовой механики [1]–[3]. Тогда трехдиагональное представление сводится к диагональному, и спектр энергий, который получается из (13) или (15), имеет вид $(1/4 - 2u_1) = (2n + \mu + \nu + 1)^2$ и задает хорошо известную спектральную формулу

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{2} \left(2n + 1 + \sqrt{\frac{1}{4} + 2u_0} - \sqrt{\frac{1}{4} - 2u_1} \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, n_{\max}, \quad (18)$$

где $n_{\max}$ – наибольшее целое, не превосходящее $|1 + \sqrt{1/4 + 2u_0} - \sqrt{1/4 - 2u_1}|/2$.

3. ПРОЦЕДУРА НАХОЖДЕНИЯ СПП

Процедура выглядит следующим образом. Запишем рекуррентное соотношение (15) как уравнение на собственные значения $\Sigma|P\rangle = (1/4 - 2u_1)|P\rangle$, где Σ – трехдиагональная симметричная матрица с элементами

$$\Sigma_{n,m} = [(2n + \mu + \nu + 1)^2 + u_2(1 + C_n)]\delta_{n,m} + u_2(D_{n-1}\delta_{n,m+1} + D_n\delta_{n,m-1}). \quad (19)$$

Эта матрица зависит от энергии через параметр μ . Следовательно, для заданной отрицательной энергии при фиксированных параметрах u_0, u_2 (бесконечное) множество собственных значений $\{1/4 - 2u_1\}$ этой матрицы отвечает множеству всех потенциалов, зависящих от (бесконечного) множества параметров $\{u_1\}$ и от u_0, u_2 , для которых мы имеем решение волнового уравнения при данной энергии.

На рис. 2а показано несколько наименьших значений дискретного спектрального параметра u_1 для заданного диапазона отрицательных значений энергии и фиксированных параметров (u_0, u_2) . Абсциссы точек пересечения кривых с горизонтальной линией $u_1 = w$ дают спектр энергий для потенциала (1) с параметрами

Рис. 2. Нижние уровни дискретного спектра параметра u_1 в заданном диапазоне отрицательных энергий при $(u_0, u_2) = (1.0, 2.0)$ (а) и энергии связанных состояний (б) для потенциала с параметрами $(V_0, V_1, V_2) = \lambda^2(u_0, w, u_2)$, которые получаются как точки пересечения горизонтальной линии $u_1 = w$ с кривыми.

$(V_0, V_1, V_2) = \lambda^2(u_0, w, u_2)$, как это показано на рис. 2б. Из рис. 2 видно, что спектр энергий в заданном диапазоне конечен, поскольку горизонтальная линия пересекает кривые в конечном числе точек. Количество этих точек, которое определяет размер спектра, возрастает по мере того, как понижается горизонтальная линия (т. е. w как отрицательная величина убывает, и потенциальная яма становится глубже). Заметим, что при вычислении СПП можно использовать любую подходящую численную аппроксимацию собственных значений $\{u_1\}$ для m -й отдельной кривой на рис. 2а, что дает $u_1(\varepsilon_m)$ для $m = 0, 1, 2, \dots$ сверху вниз на рисунке. Обращая эти функции, мы получаем $\{\varepsilon_m(u_1)\}$, что и определяет спектр энергий для потенциала (1) с параметрами (u_0, u_1, u_2) .

В табл. 1 приведены результаты расчета первых собственных значений в спектре энергий, полученные с помощью метода СПП при заданных параметрах потенциала для различных рамеров базиса. Параметры выбраны так, что потенциал имеет вид, аналогичный изображенному на 1д. Отчетливо видна быстрая сходимость значений с ростом размера базиса, что является уникальным свойством метода СПП. При расчете мы использовали приближение непрерывной функции дробью, основанное на методе Хэймейкера–Шлезингера [15] аппроксимации рациональной дробью, аналогичном аппроксимации Паде. Чтобы показать исключительно высокую точность результатов, полученных с помощью метода СПП, мы сравнили их с результатами прямой численной диагонализации матрицы гамильтониана при том же размере базиса. Матрица рассчитывалась по формуле (13) как $H = J|_{E=\mu=0}$. Спектр энергий мы находили из волнового уравнения $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ как набор обобщенных собственных значений $\{E\}$ в задаче

$$\sum_m H_{n,m} f_m = E \sum_m \Omega_{n,m} f_m, \quad \Omega_{n,m} = \langle \phi_n | \phi_m \rangle.$$

Таблица 1. Энергии E_n в единицах $-\lambda^2$, полученные с помощью расчета СПП при значениях параметров потенциала $(u_0, u_1, u_2) = (1, -50, 2)$ для различных размеров матрицы Σ . Быстрая сходимость собственных значений с ростом размера базиса очевидна.

n	4×4	6×6	10×10	100×100
0	27.878950096075	27.878950096074	27.878950096074	27.878950096074
1	14.799140053549	14.799140053574	14.799140053574	14.799140053574
2	5.854540858323	5.854541479288	5.854541479288	5.854541479288
3	0.994844848888	0.996376819202	0.996376819225	0.996376819225

Табл. 2 показывает, как выглядят результаты, полученные с помощью метода СПП, в сравнении с результатами, полученными диагонализацией гамильтониана, для размера базиса, равного 50. В таблице мы привели только значащие цифры, которые не меняются при увеличении размера базиса (от 50 до 60). Видно, что метод СПП обладает очень высокой точностью. В следующем разделе мы получим независимое подтверждение этого наблюдения, используя еще один метод расчета, а именно метод комплексного масштабирования, который позволяет рассчитать не только энергии связанных состояний, но и энергии резонансов. Результаты этого расчета приведены в столбце табл. 2, озаглавленном КМ. Вновь мы приводим только значащие цифры. Хотя метод комплексного масштабирования является более точным, чем метод диагонализации гамильтониана, он все же менее точен, чем метод СПП. Особенно хорошо это видно для самого высокого уровня энергии (последняя строка таблицы).

Таблица 2. Результаты из табл. 1 для энергий E_n в единицах $-\lambda^2$, полученные с помощью расчета СПП, в сравнении с результатами, полученными методом диагонализации гамильтониана (ДГ) и методом комплексного масштабирования (КМ), при размере базиса, равном 50. В численных выражениях сохранены только значащие цифры.

n	СПП	ДГ	КМ
0	27.878950096074	27.878950096074	27.878950096074
1	14.799140053574	14.79914005357	14.799140053574
2	5.854541479288	5.85454148	5.854541479288
3	0.996376819225	0.9967	0.996376819

На рис. 3 изображены волновые функции связанных состояний, отвечающих физическим конфигурациям и энергиям из табл. 1. Найдём m -е связанное состояние, используя сумму

$$\psi(E_m, r) \approx \sum_{n=0}^{N-1} P_n(\varepsilon_m) \phi_n(r),$$

где N – некоторое достаточно большое целое число. Заметим, что когда N возрастает начиная с малых значений, график становится устойчивым, а когда N превосходит некоторое критическое значение, сумма становится неустойчивой, и ее график представляет собой только колебания, увеличивающиеся по частоте и амплитуде.

Рис. 3. Волновые функции связанных состояний, отвечающие физической конфигурации потенциала и четырем собственным значениям из табл. 1. Радиальная координата измеряется в единицах λ^{-1} .

Данное критическое значение возрастает с ростом номера уровня m . На рис. 3 для первых четырех связанных состояний оно лежит в диапазоне от 6 до 9. Кроме того, если мы попробуем рассчитать сумму при энергии, отличной от энергии связанных состояний, результаты никогда не станут устойчивыми, а все время будут осциллировать с возрастающими частотой и амплитудой.

4. СПЕКТРАЛЬНОЕ СВОЙСТВО ПОТЕНЦИАЛА

Точное решение для потенциала $V(r)$ из (1), полученное выше с помощью МТП, подходит только для связанных состояний и нулевого углового момента. Однако в случае ненулевого углового момента, чтобы получить с высокой точностью и энергии связанных состояний, и энергии резонансов, можно использовать метод комплексного масштабирования (также известный как метод комплексного вращения) [16]–[26].

Запишем разложение потенциала (1) вблизи нуля:

$$\lim_{r \rightarrow 0} V(r) \approx \frac{V_0/\lambda^2}{r^2} + \left(V_1 - \frac{V_0}{3} \right) + (\lambda r)^2 \left(V_2 - V_1 + \frac{V_0}{15} \right). \quad (20)$$

Тогда, если положить $V(r) = u_0/r^2 + \tilde{V}(r)$, то $\tilde{V}(r)$ есть несингулярный короткодействующий потенциал, при этом полный гамильтониан имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1) + 2u_0}{2r^2} + \tilde{V}(r). \quad (21)$$

Поскольку $u_0 > 0$, этот гамильтониан отвечает трехмерной системе со сферической симметрией, короткодействующим несингулярным потенциалом $\tilde{V}(r)$ и эффективным нецелочисленным угловым моментом

$$\tilde{\ell} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + 2u_0}. \quad (22)$$

Такая система хорошо подходит для использования метода комплексного масштабирования, который состоит в следующем.

Запишем квадратично интегрируемый базис, связанный с полиномами Лагерра,

$$\chi_n(r) = \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2\tilde{\ell}+2)}} (\gamma r)^{\tilde{\ell}+1} e^{-\gamma r/2} L_n^{2\tilde{\ell}+1}(\gamma r), \quad (23)$$

где $L_n^\nu(z)$ – полином Лагерра степени n , а γ^{-1} – вычислительный параметр, масштабирующий длину. В этом базисе кинетическая часть гамильтониана (21) представляется как симметричная трехдиагональная матрица:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \chi_n | -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1)}{r^2} | \chi_m \rangle = \\ = \frac{\gamma^2}{4} \left[(n + \tilde{\ell} + 1) \delta_{n,m} + \frac{1}{2} \sqrt{n(n+2\tilde{\ell}+1)} \delta_{n,m+1} + \frac{1}{2} \sqrt{(n+1)(n+2\tilde{\ell}+2)} \delta_{n,m-1} \right]. \end{aligned}$$

Чтобы вычислить матричные элементы $\langle \chi_n | \tilde{V} | \chi_m \rangle$ для потенциала, используем гауссово квадратурное приближение интеграла, ассоциированное с полиномами Лагерра. Благодаря короткодействующему характеру потенциала и отсутствию в нем сингулярности можно вычислить матричные элементы с высокой точностью. После добавления матричных элементов, отвечающих кинетической энергии, получаем матрицу полного гамильтониана. Комплексное масштабирование завершается выбором параметра $\gamma = \rho e^{-i\theta}$, где ρ и θ – вещественные нефизические параметры, причем $\theta < \pi/2$.

В итоге, используя волновое уравнение $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, мы получаем комплексные собственные значения гамильтониана как обобщенные собственные значения в матричной задаче

$$\sum_{m=0}^{N-1} H_{n,m} f_m = E \sum_{m=0}^{N-1} \Omega_{n,m} f_m, \quad (24)$$

где N – размер базиса $\{\chi_n\}_{n=0}^{N-1}$ и

$$\begin{aligned} \Omega_{n,m} &= \langle \chi_n | \chi_m \rangle = \\ &= 2(n + \tilde{\ell} + 1) \delta_{n,m} - \sqrt{n(n+2\tilde{\ell}+1)} \delta_{n,m+1} - \sqrt{(n+1)(n+2\tilde{\ell}+2)} \delta_{n,m-1}. \end{aligned}$$

В результате из N найденных собственных значений в комплексной плоскости значений энергии физически значимы те из них, которые не меняются (в пределах выбранной точности) при изменении расчетных параметров ρ и θ . Эти собственные

Таблица 3. Энергии связанных состояний и резонансов в единицах λ^2 при $(u_0, u_1, u_2) = (2, -80, 120)$. Не имеющие физического смысла расчетные параметры выбраны следующим образом: $N=50$ и $\theta = 0$ рад. для связанных состояний, $\theta = 0.8$ рад. для резонансов. Значения ρ выбираются, как указано в таблице. Опять же сохранены только значащие цифры.

ℓ	Связанные состояния	Резонансы
0	-27.66703017245	$5.1432 - i1.73656$
	-4.96995355885	$5.7767 - i12.3187$
	$(\rho = 40\lambda)$	$1.61 - i29.27$
		$(\rho = 40\lambda)$
1	-21.21593606495	$6.2706 - i3.4478$
	-0.8517865495	$6.038 - i15.8152$
	$(\rho = 25\lambda)$	$1.154 - i33.87$
		$(\rho = 40\lambda)$
2		$4.3251234 - i0.244407$
	-11.58530264744	$7.998469 - i7.512996$
	$(\rho = 50\lambda)$	$6.5784 - i22.0054$
		$0.53 - i41.6$
3		$(\rho = 50\lambda)$
	-1.44701935596	$8.59697 - i2.2622$
	$(\rho = 30\lambda)$	$10.2802 - i13.407$
		$7.414 - i29.9473$
		$(\rho = 35\lambda)$

значения разбиваются на два множества: те, у которых отрицательна действительная часть энергии, отвечают связанным состояниям, тогда как те, которые расположены в нижней половине комплексной плоскости между действительной осью и лучом, выходящим под углом -2θ , соответствуют резонансам.

В табл. 3 приведены энергии связанных состояний и резонансов при заданных параметрах потенциала для различных значений углового момента. Значения параметров потенциала отвечают конфигурации, аналогичной показанной на рис. 1б. Размер базиса выбран равным 50. На рис. 4 приведены спектральные диаграммы потенциала (1) в комплексной плоскости значений энергии для тех же физических параметров потенциала, что и в табл. 3. На этих диаграммах квадратики отвечают связанным состояниям, а кружочки – резонансам.

Мы исследовали¹⁾, как двигаются по комплексной плоскости значения энергий связанных состояний и резонансов с изменением параметра V_1 при фиксированных прочих параметрах. С ростом V_1 (когда поднимается дно потенциальной ямы) связанные состояния смещаются направо по комплексной плоскости (т.е. энергетические уровни поднимаются) до тех пор, пока они не пройдут через начало координат.

¹⁾См. анимацию в электронной версии настоящей статьи.

Рис. 4. Энергии связанных состояний (квадратики) и резонансов (кружочки) в комплексной плоскости значений энергии при $(u_0, u_1, u_2) = (2, -80, 120)$ для различных квантовых чисел ℓ . Расчетные параметры выбраны следующим образом: $N = 100$, $\theta = 0.8$ рад., а ρ взято из табл. 3.

нат, а затем медленно перемещаются в нижнюю половину комплексной плоскости, превращаясь в резонансы. Таким образом, пропадает одно связанное состояние, и возникает один новый резонанс. Кроме того, резонансы двигаются по диагонали (вниз и вправо) плоскости значений энергии, и появляются резонансы, которые были спрятаны в нижней половине комплексной плоскости энергии между отрицательной частью действительной оси и лучом, направленным по углу -2θ .

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе, используя трехдиагональное представление, мы получили точные связанные состояния для S-волновых решений в случае радиально-симметричного потенциала (1), который ранее не рассматривался в физической литера-

туре и не принадлежит к классу традиционных точно решаемых потенциалов. Для данного потенциала в задаче могут возникать связанные состояния и/или резонансы в зависимости от того, какая из трех возможных конфигураций реализуется. Применяв метод комплексного масштабирования, мы показали, что спектр связанных состояний и резонансов в данной задаче имеет богатую структуру. Мы также показали, как этот спектр меняется с изменением параметров потенциала. Один очень важный вопрос остался нерешенным: как получить аналитические свойства ортогонального полинома, который удовлетворяет рекуррентному соотношению (15). Это чисто математическая задача, решение которой, мы надеемся, возьмут на себя специалисты в соответствующей области.

Список литературы

- [1] Г. А. Натанзон, “Общие свойства потенциалов, для которых уравнение Шредингера разрешимо в гипергеометрических функциях”, *ТМФ*, **38**:2 (1979), 219–229.
- [2] R. De, R. Dutt, U. Sukhatme, “Mapping of shape invariant potentials under point canonical transformations”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25**:13 (1992), L843–L850.
- [3] А. М. Ишханян, “Потенциалы, для которых разрешимо уравнение Шредингера”, *ТМФ*, **188**:1 (2016), 20–35.
- [4] A. D. Alhaidari, “An extended class of L^2 -series solutions of the wave equation”, *Ann. Phys.*, **317**:1 (2005), 152–174.
- [5] A. D. Alhaidari, “Analytic solution of the wave equation for an electron in the field of a molecule with an electric dipole moment”, *Ann. Phys.*, **323**:7 (2008), 1709–1728.
- [6] A. D. Alhaidari, H. Bahloul, “Extending the class of solvable potentials: I. The infinite potential well with a sinusoidal bottom”, *J. Math. Phys.*, **49**:8 (2008), 082102, 13 pp.
- [7] A. D. Alhaidari, “Extending the class of solvable potentials: II. Screened Coulomb potential with a barrier”, *Phys. Scr.*, **81**:2 (2010), 025013, 12 1004.3905 pp.
- [8] H. Bahloul, A. D. Alhaidari, “Extending the class of solvable potentials: III. The hyperbolic single wave”, *Phys. Scr.*, **81**:2 (2010), 025008, 7 pp.
- [9] A. D. Alhaidari, “Solution of the nonrelativistic wave equation using the tridiagonal representation approach”, *J. Math. Phys.*, **58**:7 (2017), 072104, 37 pp.
- [10] R. Koekoek, R. F. Swarttouw, “The Askey-scheme of hypergeometric orthogonal polynomials and its q-analogues”, *Reports of the Faculty of Technical Mathematics and Informatics*, Number 98-17, Delft University of Technology, Delft, 1998, 38–44, [arXiv: math/9602214](https://arxiv.org/abs/math/9602214).
- [11] A. D. Alhaidari, M. E. H. Ismail, “Quantum mechanics without potential function”, *J. Math. Phys.*, **56**:7 (2015), 072107, 19 pp.
- [12] K. M. Case, “Orthogonal polynomials from the viewpoint of scattering theory”, *J. Math. Phys.*, **15**:12 (1974), 2166–2174.
- [13] J. S. Geronimo, K. M. Case, “Scattering theory and polynomials orthogonal on the real line”, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **258**:2 (1980), 467–494.
- [14] A. D. Alhaidari, “Representation reduction and solution space contraction in quasi-exactly solvable systems”, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **40**:24 (2007), 6305–6328.
- [15] R. W. Haymaker, L. Schlessinger, “Padé approximants as a computational tool for solving the Schrödinger and Bethe–Salpeter equations”, *The Padé Approximation in Theoretical Physics*, Mathematics in Science and Engineering, **71**, eds. G. A. Baker, J. L. Gammel, Academic Press, New York, 1970, 257–287.
- [16] J. Aquilar, J. M. Combes, “A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians”, *Commun. Math. Phys.*, **22**:4 (1971), 269–279.
- [17] E. Balslev, J. M. Combes, “Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation-analytic interactions”, *Commun. Math. Phys.*, **22**:4 (1971), 280–294.

- [18] B. Simon, “Quadratic form techniques and the Balslev–Combes theorem”, *Commun. Math. Phys.*, **27**:1 (1972), 1–9.
- [19] B. Simon, “Resonances in n -body quantum systems with dilatation analytic potentials and the foundations of time-dependent perturbation theory”, *Ann. Math.*, **97**:2 (1973), 247–274.
- [20] C. Cerjan, R. Hedges, C. Holt, W. P. Reinhardt, K. Scheibner, J. J. Wendoloski, “Complex coordinates and the Stark effect”, *Internat. J. Quantum Chem.*, **14**:4 (1978), 393–418.
- [21] W. P. Reinhardt, “Complex coordinates in the theory of atomic and molecular structure and dynamics”, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **33** (1982), 223–255.
- [22] B. R. Junker, “Recent computational developments in the use of complex scaling in resonance phenomena”, *Adv. Atom. Mol. Phys.*, **18** (1982), 207–263.
- [23] A. Maquet, S.-I. Chu, W. P. Reinhardt, “Stark ionization in dc and ac fields: An L^2 complex-coordinate approach”, *Phys. Rev. A*, **27**:6 (1983), 2946–2970.
- [24] Y. K. Ho, “The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes”, *Phys. Rep.*, **99**:1 (1983), 1–68.
- [25] M. Bylicki, “Methods involving complex coordinates applied to atoms”, *Adv. Quantum Chem.*, **32** (1998), 207–226.
- [26] N. Moiseyev, “Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling”, *Phys. Rep.*, **302**:5–6 (1998), 212–293.

Поступила в редакцию 10.08.2017,
после доработки 4.09.2017