Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Марихина, В. Г. Марихин, Вычисление дискретного спектра некоторых двумерных уравнений Шредингера с магнитным полем, *ТМФ*, 2018, том 197, номер 3, 464–474

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9573>

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: 54.162.27.143

26 апреля 2023 г., 11:40:07

© 2018 г.

А. В. Марихина*, В. Г. Марихин†

ВЫЧИСЛЕНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА НЕКОТОРЫХ ДВУМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА С МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Ранее одним из авторов были получены и проинтегрированы первые примеры двумерных уравнений Шредингера с магнитным полем, относящиеся к классу квазиточно решаемых задач. Было показано, что волновые функции выражаются через вырождения функции Гойна – биконфлюэнтную и конфлюэнтную функции Гойна. Также были найдены алгебраические условия, определяющие дискретный спектр и волновые функции. Цель настоящей работы – численное решение упомянутых выше алгебраических уравнений. В некоторых случаях удается найти аналитическое приближение дискретного спектра.

Ключевые слова: квантовая механика, функции Гойна, квазиточно решаемые задачи.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9573>

1. ВВЕДЕНИЕ

Считается, что история квантовой механики начинается с 1900 года, когда Планк предположил, что радиационное излучение атома квантуется пропорционально постоянной Планка [1]. Лишь к 1926 году Шредингер окончательно сформулировал свои знаменитые уравнения [2]. С этого времени был получен целый ряд точно решаемых уравнений Шредингера (в основном одномерных). Обычно считается, что задача является точно решаемой (не только в квантовой механике), если ее решение выражается через элементарные функции или простые специальные функции. В квантовой механике целесообразно добавить следующее условие: задача является точно решаемой, если существуют квантовые числа (как правило, натуральные или неотрицательные целые) такие, что дискретный спектр аналитически выражается через эти числа. Отметим, что таких задач не так уж много – почти все их

Исследования В. Г. Марихина выполнены при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-01-00289).

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

†Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия. E-mail: mvg@itp.ac.ru

можно найти в знаменитом курсе Ландау и Лифшица [3]. Рассматриваемые ниже случаи относятся к классу квазиточно решаемых моделей. В данном случае это означает, что нахождение решения уравнения Шредингера и дискретного спектра сводится к решению определенных алгебраических уравнений. Решение этих уравнений в общем случае можно найти только численно, чему и посвящена основная часть настоящей работы, а именно интегрированию впервые найденных в работе [4] двумерных уравнений Шредингера с магнитным полем, относящихся к классу квазиточно решаемых. Отметим, что с 70-х годов прошлого столетия было найдено много квазиточно решаемых задач не только в квантовой механике, но и в других областях науки, например в астрофизике, биологии и др. Что касается задач квантовой механики такого типа, следует отметить работу Турбинера [5], где был развит регулярный подход к нахождению одномерных примеров такого класса с помощью группы $sl(2)$. Следует также упомянуть работы [6], [7].

План работы состоит в следующем: мы рассмотрим рациональный и иррациональный случаи, найденные в работе [4], указывая соответствующие этим примерам векторный и скалярный потенциалы, проинтегрируем уравнение Шредингера

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + u(r, \phi), \quad \hat{H}\psi = E\psi, \quad (1)$$

сведя его решение к решению некоторых алгебраических уравнений, являющихся необходимыми условиями для нахождения дискретного спектра и его волновых функций. Для нахождения этих условий будут построены рекуррентные соотношения. Граничные условия на них определяют полиномиальные уравнения в обоих случаях. Отметим, что для рационального случая это уравнение совпадает с характеристическим уравнением трехдиагональной матрицы

$$A_{n+1} = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_0 & a_1 & b_1 & \cdots & 0 \\ 0 & c_1 & a_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix}, \quad (2)$$

коэффициенты a_j , b_j , c_j которой определяются вышеупомянутыми рекуррентными соотношениями и будут определены ниже, а n – степень полинома Гойна, входящего в волновую функцию (см. ниже). В некоторых случаях эти уравнения будут решены численно, а также будут найдены аналитические приближенные формулы для дискретного спектра. В заключение мы обсудим смысл полученных результатов, а также важность использования функций Гойна для решения многих квазиточно решаемых задач. Для удобства читателей часть формул из работы [4] приведены и в настоящей работе.

2. РАЦИОНАЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ

В этом случае векторный и скалярный потенциалы имеют вид

$$A_\phi = \frac{c\hbar}{2ea^2} r \left(\epsilon + 3 \frac{r^2}{a^2} \right), \quad A_r = 0, \quad u = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(2 \frac{r^6}{a^6} + \epsilon \frac{r^4}{a^4} + 2k \frac{r^2}{a^2} \right). \quad (3)$$

Энергия в этом случае имеет вид

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda. \quad (4)$$

Ищем решение в полярных координатах, где переменные разделяются. В соответствии с правилами квантовой механики выделим асимптотики волновых функций в нуле и на бесконечности. Проинтегрировав, имеем два подслучая. В первом из них регулярная волновая функция имеет вид

$$\psi = e^{-r^4/8a^4} e^{-\epsilon r^2/4a^2} r^l e^{il\phi} \text{HeunB}\left(l, \epsilon, 3l + 2k, -\epsilon l - \lambda, \frac{r^2}{2a^2}\right), \quad l \geq 0, \quad (5)$$

и выражается через биконфлюэнтную функцию Гойна $y(z) = \text{HeunB}(\alpha, \beta, \gamma, \delta, z)$, удовлетворяющую уравнению [8]

$$y''(z) + \left(-2z - \beta + \frac{1 + \alpha}{z}\right) y'(z) + \left(\gamma - \alpha - 2 - \frac{1}{2z}((1 + \alpha)\beta + \delta)\right) y(z) = 0. \quad (6)$$

В случае (5) $\alpha = l$, $\beta = \epsilon$, $\gamma = 3l + 2k$, $\delta = -l\epsilon - \lambda$, $z = r^2/2a^2$.

Для того чтобы волновая функция была квадратично-интегрируемой, данная биконфлюэнтная функция Гойна должна быть полиномом. Этот полином $P_n(z) = \sum_{j=0}^n p_j z^j$ находится с помощью рекуррентной последовательности с граничными условиями

$$RB(j) = c_{j-1}p_{j-1} + a_j p_j + b_j p_{j+1} = 0, \quad p_{-2} = 0, \quad p_{-1} = 0, \quad p_{n+2} = 0, \quad (7)$$

где

$$a_j = -(\delta + \beta(2j + \alpha + 1)), \quad b_j = 2(j(j + \alpha + 2) + \alpha + 1), \quad c_j = 2(\gamma - \alpha - 2j - 2). \quad (8)$$

Тогда коэффициент p_{n+1} будет полиномом по λ , определяющим уровни энергии. Также должно быть выполнено условие на параметры

$$k + l = n + 1. \quad (9)$$

Кроме того, полученный полином Гойна удовлетворяет уравнению на биконфлюэнтную функцию Гойна с заданными параметрами в том и только том случае, когда коэффициент p_{n+1} обращается в нуль.

Алгоритм вычисления дискретного спектра состоит в следующем: численно находим полином p_{n+1} , зависящий от λ , корни которого определяют дискретный спектр.

Мы вычислили целый ряд примеров с различными параметрами k , ϵ гамильтониана, а также магнитного квантового числа l . Проведенные вычисления чисто дискретные. Определим параметр ϵ следующим образом. Введем дискретную величину $\epsilon(m) = \epsilon_0 m$, соединим на графике все пары точек $E(j, m) - E(j, m + 1)$, где j – номер дискретного уровня при фиксированном $\epsilon(m) \rightarrow \epsilon$, получая таким образом график зависимости $E_j(\epsilon)$ с непрерывным параметром ϵ . Мы будем строить графики $E_j(\epsilon)$ для безразмерного параметра энергии $E_j(\epsilon) = \lambda_j(\epsilon)\hbar^2/2ma^2$, записывая для простоты E вместо λ . Было замечено, что при достаточно большом значении параметра ϵ можно применить теорию возмущений и получить аналитическое приближение для дискретных уровней энергии (см. рис. 1, 2).

Рис. 1. Дискретный спектр, случай $k = 15$, $l = 5$, $\epsilon_0 = 1000$.

Рис. 2. Точность приближения, случай $k = 15$, $l = 5$, $\epsilon_0 = 1000$.

Рис. 3. Дискретный спектр, случай $k = 15$, $l = 5$, $\epsilon_0 = 1/1000$.

Рис. 4. Точность приближения, случай $k = 15$, $l = 5$, $\epsilon_0 = 1/1000$.

Аналитическое приближение в этом подслучае имеет вид

$$E_j = \epsilon(2j - 1), \quad j = 1, \dots, n. \quad (10)$$

Уже в этом случае приближение (10) хорошо аппроксимирует численный результат (см. (2)). Отметим, что члены первого порядка по теории возмущений вообще отсутствуют, поскольку при подстановке приближения (10) элементы на главной диагонали матрицы (2) обращаются в нуль.

Рассмотрим другой предел. При $\epsilon_0 \ll 1$ получаем результаты, приведенные на рис. 3, 4. Приближение в этом случае имеет вид

$$E_j = 22.1j - 213.1, \quad j = 1, \dots, n. \quad (11)$$

Это приближение не является аналитическим, поскольку содержит числа, которые не удастся выразить через параметры гамильтониана и число l . Проблема заключается в отсутствии малого параметра, что обусловлено алгебраической связью между параметрами k, l, n (9).

Во втором подслучае данного примера регулярная в нуле и на бесконечности волновая функция принимает вид

$$\psi = e^{-r^4/8a^4} e^{-\epsilon r^2/4a^2} r^l e^{-il\phi} w(r), \quad (12)$$

где $l \geq 0$, как и раньше. В этом подслучае

$$w(r) = \text{HeunB}\left(l, \epsilon, -3l + 2k, \epsilon l - \lambda, \frac{r^2}{2a^2}\right). \quad (13)$$

Таким образом, $\alpha = l, \beta = \epsilon, \gamma = -3l + 2k, \delta = -\epsilon l - \lambda$.

Чтобы получить рекуррентное соотношение для этого случая, необходимо подставить данные параметры в формулу (7). С помощью описанного выше алгоритма аналогично получаем искомый дискретный спектр. Отметим, что этот подслучай мало отличается от предыдущего.

3. ИРРАЦИОНАЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ

В этом случае векторный и скалярный потенциалы имеют вид

$$A_\phi = -\frac{c\hbar}{e} k \frac{a}{r\sqrt{r^2 + a^2}}, \quad A_r = 0, \quad u = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \left(\frac{3a^4}{(r^2 + a^2)^2} - \epsilon \frac{a^2}{r^2 + a^2} \right), \quad (14)$$

энергия в этом случае имеет вид

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \chi^2. \quad (15)$$

Так же, как и в рациональном случае, после интегрирования уравнения Шредингера имеем два подслучая. В первом из них волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \psi = e^{il\phi} \sqrt{2t-1} t^{(k-l)/2} (t-1)^{(k+l)/2} \times \\ \times e^{2\chi t} \text{HeunC}\left(4\chi, -l+k, k+l, 0, \frac{1}{2}(k^2-l^2) + \frac{1}{4}(\epsilon+1) - \chi^2, t\right), \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$t = \frac{1}{2a}(a + \sqrt{r^2 + a^2}), \quad (17)$$

она выражается через конфлюэнтную функцию Гойна $y(z) = \text{HeunC}(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, z)$, удовлетворяющую уравнению [8]

$$y''(z) + \left(\alpha + \frac{\beta+1}{z} + \frac{\gamma+1}{z-1}\right)y'(z) + \left(\frac{\mu}{z} + \frac{\nu}{z-1}\right)y(z) = 0. \quad (18)$$

В случае (16) $\alpha = 4\chi$, $\beta = -l + k$, $\gamma = k + l$, $\delta = 0$, $\eta = (k^2 - l^2)/2 + (\epsilon + 1)/4 - \chi^2$, $z = t$.

В обоих подслучаях иррационального случая число $k + l$ должно быть целым неотрицательным. Как и в рациональном случае, ищем условия полиномиальности конфлюэнтной функции Гойна. Рекуррентное соотношение имеет вид

$$RC(j) = c_{j-1}p_{j-1} + a_j p_j + b_j p_{j+1} = 0, \quad p_{-2} = 0, \quad p_{-1} = 0, \quad p_{n+2} = 0, \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} a_j &= \mu - j(j - \alpha + \beta + \gamma + 1), & b_j &= (j+1)(j + \beta + 1), & c_j &= (n-j)\alpha, \\ \mu &= \frac{1}{2}(\alpha - \beta - \gamma + \alpha\beta - \gamma\beta) - \eta, & \nu &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta + \gamma + \gamma\alpha + \gamma\beta) + \delta + \eta. \end{aligned} \quad (20)$$

В иррациональном случае полином p_{n+1} зависит от параметра χ . Его отрицательные корни, подставленные в формулу (15), определяют дискретный спектр. В данном подслучае должны быть выполнены условия $l \geq 0$, $n + k + 1 = 0$. Алгоритм вычисления дискретного спектра и волновых функций аналогичен рациональному случаю.

При больших ϵ получаем картину, приведенную на рис. 5, 6.

Приближение для энергии в этом случае определяется решением уравнения $a_j = 0$ по χ (см. (20)), поскольку квадратичные члены по χ лежат на главной диагонали и можно применить теорию возмущений, как и в рациональном случае при $\epsilon \gg 1$, учитывая, однако, что в иррациональном случае параметры χ лежат не только над главной диагональю матрицы (2), но и на диагонали непосредственно ниже ее, что ухудшает точность приближения:

$$E_j = -\left(l - 1 - 2j - k - \frac{1}{2}(-8l - 16lj - 8kl + 5 + 20j + 12k + 20j^2 + 24jk + 8k^2 + \epsilon)^{1/2}\right)^2. \quad (21)$$

При малых ϵ получаем картину, приведенную на рис. 7, 8.

Приближение и в этом случае не аналитично: $E_j = -390j + 2400$, $j = 1, \dots, n$.

Для второго подслучая иррационального случая регулярная волновая функция выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi &= e^{i\ell\phi} \sqrt{2t-1} t^{(l-k)/2} (t-1)^{(k+l)/2} \times \\ &\times e^{2\chi t} \text{HeunC}\left(4\chi, l-k, k+l, 0, \frac{1}{2}(k^2 - l^2) + \frac{1}{4}(\epsilon + 1) - \chi^2, t\right), \end{aligned} \quad (22)$$

где переменная t определяется формулой (17). Таким образом, волновая функция выражается через конфлюэнтную функцию Гойна с параметрами $\alpha = 4\chi$, $\beta = l - k$,

Рис. 5. Дискретный спектр, случай $k = -20$, $l = 22$, $\epsilon_0 = 1000$.

Рис. 6. Поправка к аппроксимации, случай $k = -20$, $l = 22$, $\epsilon_0 = 1000$.

Рис. 7. Дискретный спектр, случай $k = -20$, $l = 22$, $\epsilon = 1/1000$.

Рис. 8. Поправка к аппроксимации, случай $k = -20$, $l = 22$, $\epsilon = 1/1000$.

Рис. 9. Дискретный спектр, случай $k = 15$, $l = 5$, $\epsilon = 1$.

$\gamma = k + l$, $\delta = 0$, $\eta = (k^2 - l^2)/2 + (\epsilon + 1)/4 - \chi^2$. В данном подслучае должны быть выполнены условия $l \geq 0$, $n + l + 1 = 0$. Чтобы получить рекуррентное соотношение для этого случая, необходимо подставить данные параметры в формулу (7). Как и в рациональном случае, получаем искомый дискретный спектр.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В квантовой механике вычисление дискретного спектра и соответствующих волновых функций оператора Шредингера является важной и актуальной задачей. В настоящей работе вычислен дискретный спектр для различного набора параметров двух первых двумерных операторов Шредингера с магнитным полем, относящихся к классу квазиточно решаемых задач. Найдены приближения к вычисленному спектру. Следует отметить, что только в случае большого ϵ построены аналитические приближения для вычисленных спектров, причем только в рациональном случае приближение можно считать удовлетворительным. В обоих случаях при $\epsilon \ll 1$ вычислены неалгебраические приближения, т.е. зависящие явно от конкретных чисел. Данный факт говорит о том, что применение численных методов в данных примерах следует считать оправданным. Видимо, это касается и других квазиточно решаемых задач.

Еще один пример, относящийся к рациональному случаю с промежуточным по величине набором параметров, приведен на рис. 9. Попытка получить даже численное приближение для дискретного спектра в этом примере не приводит к желаемому результату.

Необходимость использования численного анализа при рассмотрении квазиточно решаемых моделей в значительной степени обусловлено использованием функций Гойна и их вырождением. Главная функция Гойна [8] является обобщением гипергеометрической функции, но в отличие от последней обладает более сложной

математической структурой, что не позволяет в различных случаях получать те или иные аналитические результаты. Тем не менее уже на данный момент десятки, если не сотни, задач из разных областей науки были решены с помощью функций Гойна, роль которых будет возрастать в будущем.

Список литературы

- [1] M. Planck, “Über eine Verbesserung der Wienschen Spectralgleichung”, *Verhandl. Dtsch. Phys. Ges.*, **2** (1900), 202–204.
- [2] E. Schrödinger, “Quantisierung als Eigenwertproblem”, *Ann. Phys.*, **384**:4 (1926), 361–376.
- [3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 3: *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, М., 1989.
- [4] V. G. Marikhin, “Two new integrable cases of two-dimensional quantum mechanics with a magnetic field”, *Письма в ЖЭТФ*, **103**:7 (2016), 552–556.
- [5] A. Turbiner, “Quasi-exactly-solvable problems and $sl(2)$ algebra”, *Commun. Math. Phys.*, **118** (1988), 467.
- [6] А. Г. Ушверидзе, “Квазиточнорешаемые модели в квантовой механике”, *ЭЧАЯ*, **20**:5 (1989), 1185–1245.
- [7] A. M. Ishkhanyan, “Exact solution of the Schrödinger equation for the inverse square root potential $V_0/\sqrt{x}$ ”, *Europhys. Lett.*, **112**:1 (2015), 10006, 6 pp.
- [8] A. Ronveaux (ed.), *Heun’s Differential Equations*, Oxford Univ. Press, New York, 1995.

Поступила в редакцию 2.04.2018