И. В. Андрианов, Новый асимптотический метод интегрирования уравнений квантовой механики при наличии сильной связи, *Докл. РАН*, 1993, том 328, номер 5, 557–558

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК. 1993, том 328, № 5.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 530.145.6

НОВЫЙ АСИМПТОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ПРИ НАЛИЧИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

© 1993 г. И. В. Андрианов

Представлено академиком И.Ф. Образцовым 05.08. 92 г.

Поступило 29.09.92 г.

Проблема сильной связи в квантовой теории – одна из центральных [1 - 8]. В частности, большой интерес представляет построение последовательной асимптотики уравнения Шредингера

$$\psi_{xx} + x^{2N}\psi - E\psi = 0, \qquad (1)$$

$$\psi(\pm\infty) = 0 \ \text{ при } \ N \to \infty. \qquad (2)$$

В работе [8] приближенное решение построено при помощи техники δ-разложений [5] в сочетании с методом сращиваемых асимптотических разложений, однако при этом приходится использовать достаточно много членов разложения и проводить весьма громоздкие выкладки.

В настоящей статье используется новая техника, позволяющая строить разложения сразу же по степеням $1/N$ и добиваться успеха в низких степенях метода возмущений.

При $N \to \infty$ из (1), (2) имеем

$$\psi_{xx} + E\psi = 0,$$

$$\psi(\pm 1) = 0.$$

Решение этой задачи дает следующие уровни энергии:

$$E_n = 0.25\pi^2(n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Сравнение E_0 с точными значениями (см. табл. 1) показывает, что приемлемая точность достигается только для больших N, поэтому необходимо построение уточненного решения.

Рассмотрим функцию

$$\varphi = x^{2N} \ \text{ при } 0 \le x \le 1.$$

Разложение функции φ по $1/N$ при больших N таково:

$$\varphi = \delta(x-1)\,(2N+1)^{-1} - \delta^{(1)}(x-1)\,(2N+1)^{-1}(2N+2)^{-1} + \ldots$$
$$\ldots - \delta^{(2i-1)}(x-1)\,(2N+1)^{-1}(2N+2)^{-1} \times \ldots \times (2N+i)^{-1} + \ldots = \sum_{i=0}^{\infty}(-1)^i\delta^{(i)}(x-1) \times$$
$$\times\,(2N+1)^{-1}(2N+2)^{-1}\ldots\,(2N+1+i)^{-1}. \qquad (3)$$

Здесь $\delta(x)$ – функция Дирака.

Разложение (3) получается следующим образом: переходим в пространство изображений по Лапласу [9]

$$\varphi \to p^{-2N-1}\gamma(2N+1, p),$$

раскладываем полученное выражение в ряд по $1/(2N+1)$ и затем почленно переходим к оригиналу в пространстве обобщенных функций [10]. Обоснование подобной процедуры см., например, в [11].

Итак, в области $0 \le x \le 1$ уравнение (1) может быть представлено так:

$$\psi_{1xx} + \varphi\psi_1 - E\psi_1 = 0. \qquad (4)$$

Разыскивая решение уравнения (4) в виде

$$\psi = \sum_{k=0}^{\infty}\psi_{1k}(2N+1)^{-1}\ldots(2N+1+i)^{-1},$$

$$E = \sum_{k=0}^{\infty}E^{(k)}(2N+1)^{-1}\ldots(2N+1+i)^{-1},$$

после расщепления по $(2N+1)^{-1}$ получаем следующую рекуррентную систему уравнений:

$$-\psi_{10xx} - E^{(0)}\psi_{10} = 0, \qquad (5)$$

$$-\psi_{11xx} - E^{(0)}\psi_{11} - E^{(1)}\psi_{10} + \delta(x-1)\psi_{10} = 0, \qquad (6)$$

$$\ldots$$

Решение уравнения (5) для случая симметрии относительно линии $x = 0$ (антисимметричный случай рассматривается аналогично) таково:

$$\psi_1 = C\cos\lambda x,\ \lambda = (E^{(0)})^{1/2}. \qquad (7)$$

Днепропетровский инженерно-строительный институт

Перейдем к исследованию области $x > 1$. Здесь в нулевом приближении можно опустить член $E\psi_2$

$$\psi_{2xx}^{(0)} - x^{2N}\psi_2^{(0)} = 0. \tag{8}$$

Для функции $\psi_2^{(0)}$ должно быть поставлено условие затухания

$$\psi_2^{(0)} \to 0 \text{ при } x \to \infty. \tag{9}$$

Решение уравнения (8) при учете граничного условия (9) запишем в виде [8, 10]

$$\psi_2^{(0)} = C_1 x^{1/2} K_\nu (\nu x^{N+1}),$$

где K_ν – функция Бесселя, $\nu = 0.5/(N + 1)$.

При $x = 1$ решения ψ_1 и ψ_2 должны быть сращены, отсюда имеем:

при $x = 1$

$$\psi_1^{(i)} = \psi_2^{(i)}, \tag{10}$$

$$\psi_{1x}^{(i)} = \psi_{2x}^{(i)}, \; i = 0, 1, 2, \ldots$$

Из условий (10) при $i = 0$ имеем трансцендентное уравнение для определения λ

$$-\operatorname{ctg}\lambda = \frac{4\lambda K_\nu(\nu)}{2K_\nu(\nu) - K_{1-\nu}(\nu) - K_{1+\nu}(\nu)}. \tag{11}$$

Минимальные действительные решения этого уравнения при различных N приведены в табл. 1. Видно, что точность предложенного приближения вполне удовлетворительна.

Разберем вопрос о построении следующих приближений в области $x > 1$. Представив ψ_2 в виде $\psi_2 = \bar{\psi}(\bar{x})$, где $\bar{x} = x^{N+1}/(N+1)$, получим уравнение для определения функции $\bar{\psi}$:

$$\bar{\psi}_{\bar{x}\bar{x}} + Nx^{-N-1}\bar{\psi}_{\bar{x}} + Ex^{-2N}\bar{\psi} - \bar{\psi} = 0. \tag{12}$$

Раскладывая теперь функции x^{-2N} и x^{-N-1} в ряды по $1/(2N + 1)$ и $1/(N + 2)$ по описанной ранее методике, имеем

$$x^{-2N} = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \delta^{(i)} (1 - 1/x)(2N+1)^{-1} \times \ldots \tag{13}$$
$$\ldots \times (2N + 1 + i)^{-1},$$

$$x^{-N-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \delta^{(i)} (1 - 1/x)(N+2)^{-1} \times \ldots \tag{14}$$
$$\ldots \times (N + 1 + i)^{-1}.$$

Подставляя выражения (13), (14) в уравнение (12) и производя расщепление по $1/N$, получим рекуррентную последовательность уравнений, решение которых позволяет поставить граничные условия для $\psi_1^{(i)}$.

Далее совместное решение систем (6, 12) дает возможность определить уточненные значения E.

Перейдем к возможным обобщениям. Предложенный подход является естественным асимптотическим методом решения дифференциальных уравнений, содержащих слагаемые вида $x^{1+\alpha}\psi$ при $\alpha \to \infty$. Напомним, что в работах [6, 7] разработан метод построения асимптотики подобных уравнений для малых α. Наличие решений при $\alpha \to 0$ и $\alpha \to \infty$ позволяет применить в дальнейшем аппарат двухточечных аппроксимант Паде [12, 13] и получать единое решение для любых α.

Таблица 1.

N	Точное значение E_0 [8]	E_0	Погрешность, %
1	1.0000	0.9100	9.00
2	1.0604	1.0422	1.72
4	1.2258	1.2385	1.04
10	1.5605	1.5731	0.81
50	2.1052	2.1074	0.10
200	2.3379	2.3383	0.02
500	2.4058	2.4032	0.01
1500	2.4431	2.4428	0.01
3500	2.4558	2.4555	0.01

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Турбинер А.В.* // УФН. 1984. Т. 144. № 1. С. 35 - 78.
2. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Анализ операторов. М.: Мир, 1982. Т. 4. С. 428.
3. *Вайнберг В.С., Мур В.Д., Попов В.С. и др.* // ТМФ. 1988. Т. 74. № 3. С. 399 - 411.
4. *Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В.* // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. № 1. С. 32 - 46.
5. *Славянов С.Ю.* Асимптотика решений одномерного уравнения Шредингера. Л.: Изд-во ЛГУ, 1990. С. 256.
6. *Bender C.M., Milton K.A., Pinsky S.S., Simmons Z. M. Jr.* // J. Math. Phys. 1989. V. 20. N. 7. P. 1447 - 1455.
7. *Bender C.M., Milton K.A., Pinsky S.S., Simmons Z. M. Jr.* // Ibid. 1990. V. 31. N. 11. P. 2722 - 2725.
8. *Bender C.M., Boettcher S.* // Ibid. N. 11. P. 2579 - 2585.
9. Таблицы интегральных преобразований. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. М.: Наука, 1969. Т. 1. С. 344.
10. *Брычков Б.А., Прудников А.П.* Интегральные преобразования обобщенных функций. М.: Наука, 1977. С. 288.
11. Pade and rational approximation. N.Y.: Acad. press. 1977. P. 491.
12. *Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П.* Аппроксимации Паде. М.: Мир, 1986. С. 502.
13. *Образцов И.Ф., Андрианов И.В., Нерубайло Б.В.* Асимптотические методы в строительной механике тонкостенных конструкций. М.: Машиностроение. 1991. С. 402.