

УДК 530.145

В. В. КУДРЯШОВ, А. В. БАРАН

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА  
ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ДВУХЪЯМНОГО ПОТЕНЦИАЛА

(Представлено членом-корреспондентом Л. М. Томильчиком)

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Поступило 19.05.2014

Модели с двухъямными потенциалами используются в различных отраслях физики и исследованы в большом числе работ. Обширную библиографию можно найти, например, в [1–4]. В настоящей работе рассматривается случай симметричного потенциала  $V(q) = V(-q)$ , который имеет два минимума в точках  $\pm q_0$  и максимум  $V_0 = V(0)$ . С помощью выбора аддитивной постоянной без потери общности минимумы можно приравнять нулю. Величины  $q_0$  и  $V_0$  являются естественными единицами измерения для расстояния и энергии. Исходное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2\Psi}{dq^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(q) - E)\Psi(q)$$

удобно преобразовать к безразмерной форме

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = p^2(v(x) - e)\Psi(x), \quad (1)$$

где использованы обозначения

$$q = q_0x, \quad V(q) = V_0v(x), \quad E = V_0e, \quad p^2 = \frac{2mq_0^2V_0}{\hbar^2}.$$

Специфика модели определяется видом редуцированного потенциала  $v(x)$ , а безразмерный параметр  $p^2$  является общей характеристикой для различных моделей.

В подавляющем большинстве работ [1–4] исследуется редуцированный гладкий потенциал вида  $v(x) = (x^2 - 1)^2$  с точки зрения применимости приближенных методов решения уравнения Шрёдингера (1), поскольку в этом случае точное аналитическое решение неизвестно. В недавней работе [5] рассмотрен потенциал  $v(x) = (|x| - 1)^2$ , состоящий из двух параболических ям. Этот потенциал допускает точное решение, однако он не является гладким, так как первая производная терпит разрыв при  $x = 0$ .

Если при построении симметричного двухъямного потенциала задаться целью совместить требование точной решаемости модели с требованием гладкости потенциальной функции  $v(x)$ , то прямым обобщением потенциала  $(|x| - 1)^2$  будет потенциал, который получается гладким сшиванием параболического барьера в центральной области с параболическими ямами вне ее. Предлагаемая в настоящей работе однопараметрическая потенциальная функция является результатом такого сшивания:

$$v(x, g) = \begin{cases} 1 - \frac{x^2}{g}, & |x| < g, \\ \frac{(|x| - 1)^2}{(1 - g)}, & |x| > g, \end{cases} \quad (2)$$

где  $0 < g < 1$ . Точки  $x_{\mp} = \mp g$  являются точками перегиба, в которых терпит разрыв вторая производная, однако как функция  $v(x, g)$ , так и ее первая производная являются непрерывными. При

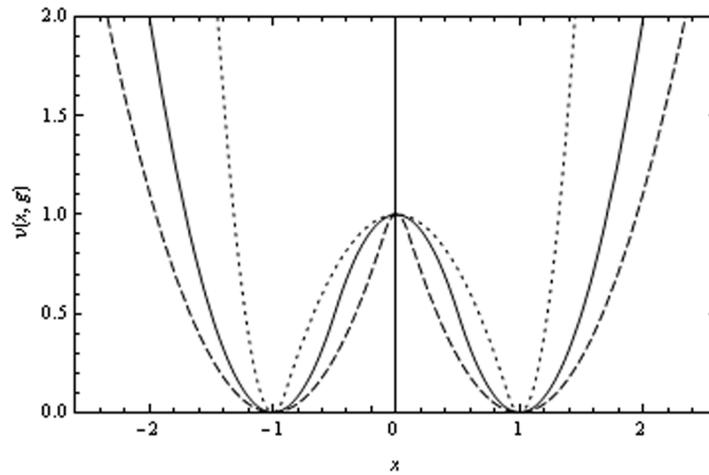


Рис. 1. Поведение редуцированного потенциала при разных значениях параметра  $g$

$g \rightarrow 0$  потенциал (2) стремится к виду  $(|x|-1)^2$ . При  $g \rightarrow 1$  предлагаемый потенциал выглядит как потенциальный барьер  $1-x^2$ , заключенный между непроницаемыми стенками в точках  $x = \pm 1$ . При  $g = 0,5$  рассматриваемый потенциал близок к потенциалу  $(x^2 - 1)^2$  для  $-1 < x < 1$ . На рис. 1 показано поведение редуцированного потенциала  $v(x, g)$  при  $g = 0,1$  (штриховая линия),  $g = 0,5$  (сплошная линия),  $g = 0,9$  (пунктирная линия).

В центральной области  $|x| < g$  уравнение Шрёдингера (1) для потенциала (2) переписывается следующим образом:

$$\frac{d^2 \psi_c}{dz_c^2} = \left( -\frac{z_c^2}{4} - d_c \right) \psi_c,$$

где

$$z_c = \left( \frac{4p^2}{g} \right)^{1/4} x, \quad d_c = \left( \frac{gp^2}{4} \right)^{1/2} (e-1).$$

Четные  $\psi_{c1}(x)$  и нечетные  $\psi_{c2}(x)$  решения этого уравнения выражаются через вырожденные гипергеометрические функции [6] с помощью формул

$$\psi_{c1}(p, g, e, x) = e^{-iz_c^2/4} M\left(\frac{id_c}{2} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{iz_c^2}{2}\right) + e^{iz_c^2/4} M\left(-\frac{id_c}{2} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, -\frac{iz_c^2}{2}\right),$$

$$\psi_{c2}(p, g, e, x) = z_c e^{-iz_c^2/4} M\left(\frac{id_c}{2} + \frac{3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{iz_c^2}{2}\right) + z_c e^{iz_c^2/4} M\left(-\frac{id_c}{2} + \frac{3}{4}, \frac{3}{2}, -\frac{iz_c^2}{2}\right).$$

Подчеркнем, что данные решения являются действительными.

В обеих боковых областях  $x < -g$  и  $x > g$ , прилегающих к центральной области слева и справа, волновая функция удовлетворяет одному уравнению

$$\frac{d^2 \psi_s}{dz_s^2} = \left( \frac{z_s^2}{4} - d_s \right) \psi_s,$$

где

$$z_s = \left( \frac{4p^2}{1-g} \right)^{1/4} (|x|-1), \quad d_s = \left( \frac{(1-g)p^2}{4} \right)^{1/2} e.$$

Убывающее при  $|x| \rightarrow \infty$  решение этого уравнения выражается через функцию параболического цилиндра [6]

$$\psi_s(p, g, e, x) = D_{d_s-1/2}(z_s).$$

На всей действительной оси  $-\infty < x < \infty$  непрерывные четные ( $i = 1$ ) и нечетные ( $i = 2$ ) решения уравнения Шрёдингера с симметричным гладким потенциалом (2) могут быть представлены в виде

$$\psi_i(p, g, e, x) = N \begin{cases} \Psi_{ci}(p, g, e, -g)\Psi_s(p, g, e, x), & x < -g, \\ \Psi_s(p, g, e, g)\Psi_{ci}(p, g, e, x), & -g < x < g, \\ \Psi_{ci}(p, g, e, g)\Psi_s(p, g, e, x), & x > g. \end{cases} \quad (3)$$

Нормировочный коэффициент  $N$  определяется условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^2(p, g, e, x) dx = 1.$$

Дополнительное требование непрерывности первой производной  $\psi'_i(p, g, e, x) = d\psi_i(p, g, e, x)/dx$  в точке сшивания  $x = g$  приводит к правилу квантования энергии для четных и нечетных состояний

$$\Psi_s(p, g, e, g)\Psi'_{ci}(p, g, e, g) = \Psi_{ci}(p, g, e, g)\Psi'_s(p, g, e, g). \quad (4)$$

Вследствие симметрии потенциала этим условием обеспечивается непрерывность первой производной и в точке  $x = -g$ . Собственные значения энергии  $e$  легко находятся как численные решения трансцендентного уравнения (4). Пронумеруем целым числом  $n$  уровни энергии  $e_n$  так, что  $e_{n+1} > e_n$ . Четным  $n$  соответствуют четные волновые функции, а нечетным  $n$  – нечетные волновые функции. Подставляя значения  $e_n$  в формулу (3), окончательно получаем собственные функции для параболического двухъямного потенциала.

В качестве иллюстрации решений уравнения (4) в таблице приведем зависимость первых шести уровней энергии от параметра  $g$  при фиксированном значении  $p = 5$ . Заметим, что расщепление между энергией  $e_0$  основного состояния и энергией  $e_1$  первого возбужденного состояния является чрезвычайно малым.

Зависимость уровней энергии от параметра  $g$

$g$	$e_0$	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$e_5$
0,1	0,207469	0,213305	0,602891	0,652937	0,979515	1,127040
0,3	0,236012	0,240354	0,683365	0,730081	1,083440	1,249030
0,5	0,277934	0,281496	0,786495	0,842325	1,192460	1,414800
0,7	0,348199	0,351841	0,912672	1,009370	1,334720	1,641250
0,9	0,503004	0,510337	1,051910	1,274700	1,666930	2,107040

Точно решаемая модель с параболическим потенциалом  $v(x) = x^2$  (гармонический осциллятор) является эталонной для класса потенциальных ям с единственным минимумом. Можно предположить, что и предложенная точно решаемая модель с параболическим двухъямным потенциалом окажется эталонной для класса потенциальных ям с двумя минимумами.

Обычное ВКБ-приближение не пригодно в окрестности точек поворота, где  $v(x) = e$ . Кроме того, трудности возникают и при описании волновых функций с энергиями, близкими к вершине потенциального барьера. В [7] на примере потенциала  $(x^2 - 1)^2$  была продемонстрирована эффективность модифицированного ВКБ-приближения [8], которое основано на явном суммировании лидирующих ВКБ-рядов, дает правильную квазиклассическую асимптотику вдали от точек поворота и удовлетворительно воспроизводит поведение решений в окрестности точек поворота. В случае потенциала  $(x^2 - 1)^2$  приходилось проводить сравнения с результатами численного решения уравнения Шрёдингера. В случае потенциала (2) появляется возможность сравнивать результаты точного аналитического решения и приближенного аналитического решения.

Приведем основные формулы рассматриваемого приближения для уравнения (1). Логарифмические производные  $Y(x) = d \ln \psi(x) / dx$  аппроксимируются следующими функциями:

$$Y_{\text{app}}^{\pm}(x) = b \left( \frac{y^+(a) + y^-(a)}{2} \right) \pm |b| \left( \frac{y^+(a) - y^-(a)}{2} \right)$$

в классически разрешенных областях, где  $e > v(x)$ , и

$$\tilde{Y}_{\text{app}}^{\pm}(x) = b \left( \frac{\tilde{y}^{+}(a) + \tilde{y}^{-}(a)}{2} \right) \pm |b| \left( \frac{\tilde{y}^{+}(a) - \tilde{y}^{-}(a)}{2} \right)$$

в классически запрещенных областях, где  $e < v(x)$ . Здесь введены обозначения

$$a(x) = p^{2/3} \frac{v(x) - e}{|dv(x)/dx|^{2/3}}, \quad b(x) = p^{2/3} \frac{dv(x)/dx}{|dv(x)/dx|^{2/3}},$$

$$y^{+}(a) = \frac{d}{da} \ln(\text{Ai}(a) \pm i\text{Bi}(a)), \quad \tilde{y}^{-}(a) = \frac{d}{da} \ln \text{Ai}(a), \quad \tilde{y}^{+}(a) = \frac{d}{da} \ln \text{Bi}(a),$$

где  $\text{Ai}(a)$  и  $\text{Bi}(a)$  – функции Эйри [6]. Соответствующие аппроксимации для двух пар частных решений уравнения Шрёдингера имеют вид

$$\Psi_{\text{app}}^{\pm}(x) = \exp\left(\int_{t_k}^x Y_{\text{app}}^{\pm}(x') dx'\right), \quad \tilde{\Psi}_{\text{app}}^{\pm}(x) = \exp\left(\int_{t_k}^x \tilde{Y}_{\text{app}}^{\pm}(x') dx'\right),$$

где  $t_k$  – точки поворота. Приближенные волновые функции  $\psi_{\text{app}}(x)$  получаются путем непрерывного сшивания в точках поворота линейных комбинаций  $\Psi_{\text{app}}^{+}(x)$  и  $\Psi_{\text{app}}^{-}(x)$  в классически разрешенных областях с линейными комбинациями  $\tilde{\Psi}_{\text{app}}^{+}(x)$  и  $\tilde{\Psi}_{\text{app}}^{-}(x)$  в классически запрещенных областях. Заметим, что при  $e < 1$  имеются четыре точки поворота, а при  $e > 1$  есть только две действительные точки поворота. Детали построения  $\psi_{\text{app}}(x)$  можно найти в [7].

Сравнение точных и приближенных результатов проведем для случая  $p = 5, g = 0,5$ . Прежде всего представим приближенные значения редуцированной энергии  $e_0 = 0,279996, e_1 = 0,283801$ ,

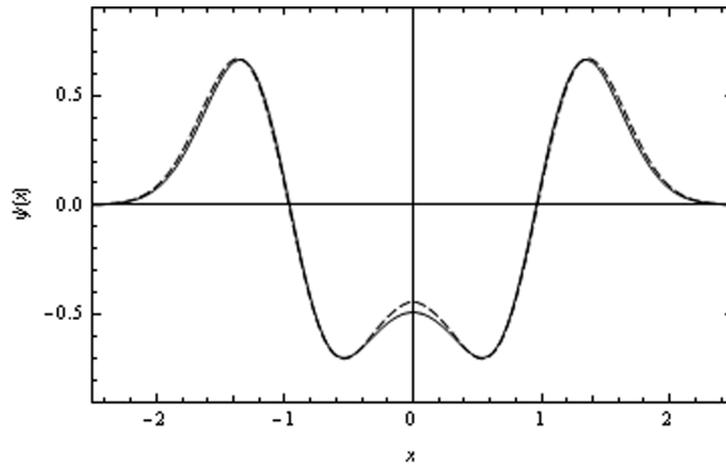


Рис. 2. Точная и приближенная волновая функция при  $n = 2$

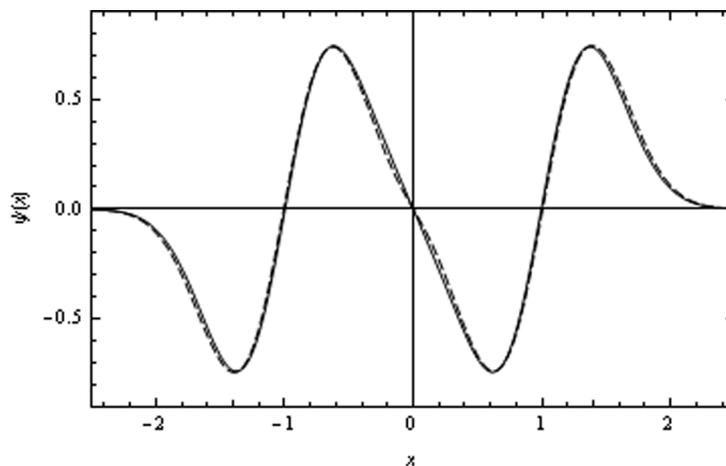


Рис. 3. Точная и приближенная волновая функция при  $n = 3$

$e_2 = 0,787692$ ,  $e_3 = 0,844502$ ,  $e_4 = 1,187060$ ,  $e_5 = 1,415130$ . Сопоставление с соответствующими точными значениями из таблицы показывает удовлетворительную точность модифицированного ВКБ-приближения. Важно отметить, что данное приближение пригодно и для состояний с энергиями, близкими к вершине барьера.

Проведем сравнение точных и приближенных волновых функций для представляющих наибольший интерес состояний с энергиями ниже вершины барьера. На рис. 2 и 3 сплошными линиями показаны точные волновые функции, а штриховыми – приближенные. На рис. 2 четные функции соответствуют  $n = 2$ , а на рис. 3 нечетные функции соответствуют  $n = 3$ . Рисунки демонстрируют удовлетворительную степень близости точных и приближенных волновых функций. В связи с этим следует отметить, что обычное ВКБ-приближение дает для волновых функций совершенно неприемлемые результаты.

### Литература

1. *Chebotarev L. V.* // Am. J. Phys. 1998. Vol. 66. P. 1086–1095.
2. *Park Chang-Soo* // J. of the Korean Phys. Soc. 2003. Vol. 42. P. 830–834.
3. *Pedram P., Mirzaei M., Gousheh S. S.* // Mol. Phys. 2010. Vol. 108. P. 1949–1955.
4. *Turbiner A. V.* // Int. J. Mod. Phys. A. 2010. Vol. 25. P. 647–658.
5. *Jelic V., Marsiglio F.* // Eur. J. Phys. 2012. Vol. 33. P. 1651–1666.
6. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М., 1978.
7. *Кудряшов В. В., Ваннэ Ю. В.* // Докл. НАН Беларуси. 2001. Т. 45, № 5. С. 60–63.
8. *Кудряшов В. В.* // Докл. НАН Беларуси. 1998. Т. 42, № 5. С. 45–49.

*V. V. KUDRYASHOV, A. V. BARAN*

kudryash@dragon.bas-net.by; a.baran@dragon.bas-net.by

### SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION FOR PARABOLIC DOUBLE-WELL POTENTIAL

#### Summary

The symmetric double-well potential is constructed by means of a smooth combination of three parabolic potentials. The exact analytical solution of the Schrödinger equation is obtained. The comparison is made with the results of application of the modified WKB-approximation.