

ISSN 1561-8323 (Print)

ISSN 2524-2431 (Online)

УДК 530.145

<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2020-64-1-36-41>

Поступило в редакцию 02.12.2019

Received 02.12.2019

В. В. Кудряшов, А. В. Баран*Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси,
Минск, Республика Беларусь***ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ КОМПОЗИЦИИ
КУЛОНОВСКОГО И ОСЦИЛЛЯТОРНОГО ПОТЕНЦИАЛОВ***(Представлено членом-корреспондентом Л. М. Томильчиком)*

Аннотация. Рассматривается сферически симметричный потенциал, зависимость которого от расстояния r описывается гладкой композицией кулоновского при $r < r_0$ и осцилляторного при $r > r_0$ потенциалов. Граничное расстояние r_0 определяется параметрами этих потенциалов. Точное непрерывное решение радиального уравнения Шрёдингера выражено через вырожденные гипергеометрические функции. Получены дискретные уровни энергии. Представлены графические иллюстрации для спектра энергии и радиальных волновых функций.

Ключевые слова: композиция кулоновского и осцилляторного потенциалов, радиальные волновые функции, уровни энергии

Для цитирования: Кудряшов, В. В. Точное решение уравнения Шрёдингера для композиции кулоновского и осцилляторного потенциалов / В. В. Кудряшов, А. В. Баран // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2020. – Т. 64, № 1. – С. 36–41. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2020-64-1-36-41>

Vladimir V. Kudryashov, Aleksandr V. Baran*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus***EXACT SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION FOR A COMPOSITION OF COULOMB AND
OSCILLATOR POTENTIALS***(Communicated by Corresponding Member Lev M. Tomilchik)*

Abstract. The spherically symmetric potential is considered, whose dependence on the distance r is described by the smooth composition of Coulomb at $r < r_0$ and oscillator at $r > r_0$ potentials. The boundary distance r_0 is determined by the parameters of these potentials. The exact continuous solution of the radial Schrödinger equation is expressed in terms of the confluent hypergeometric functions. The discrete energy levels are obtained. The graphic illustrations for the energy spectrum and the radial wave functions are presented.

Keywords: composition of Coulomb and oscillator potentials, radial wave functions, energy levels

For citation: Kudryashov V. V., Baran A. V. Exact solution of the Schrödinger equation for a composition of Coulomb and oscillator potentials. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2020, vol. 64, no. 1, pp. 36–41 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2020-64-1-36-41>

Введение. Важнейшими сферически симметричными потенциалами в теоретической физике являются кулоновский и осцилляторный. Решения уравнения Шрёдингера в случае этих потенциалов хорошо известны [1]. С точки зрения приложений в различных областях физики рассматривается (см., напр., [2–4]) потенциал, представляющий собой сумму кулоновского и осцилляторного потенциалов:

$$V_s(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta r^2}{2}. \quad (1)$$

Однако для такого потенциала точное решение уравнения Шрёдингера при произвольных значениях α и β не известно. Потенциал (1) переходит в кулоновский при малых r и в осцилляторный при больших r . На наш взгляд, представляет интерес и другой тип объединения двух

потенциалов, когда на промежутке от нуля до некоторого r_0 потенциал является чисто кулоновским, а при $r > r_0$ потенциал становится чисто осцилляторным.

Требование непрерывности потенциала и его первой производной в точке сшивания приводит к следующему выражению:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\alpha}{r}, & r < r_0, \\ \frac{\beta r^2}{2} - \frac{3}{2}(\alpha^2 \beta)^{1/3}, & r > r_0, \end{cases} \quad (2)$$

где

$$r_0(\alpha, \beta) = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{1/3}.$$

При $\alpha = 0$ потенциал (2) превращается в осцилляторный, а при $\beta = 0$ – в кулоновский для всей области изменения $r > 0$. Структура предлагаемого потенциала (2) такова, что в обеих областях $r < r_0$ и $r > r_0$ общие решения уравнения Шрёдингера известны. Для получения точных волновых функций требуется только сделать корректный выбор частных решений в каждой из областей, а затем провести процедуру гладкого сшивания.

Решения уравнения Шрёдингера. Представив волновую функцию в виде $\Psi(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)w(r)/r$, где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферическая функция, запишем радиальное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2 w}{dr^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right) w = 0, \quad (3)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное квантовое число.

Если $\alpha \neq 0$ и $\beta \neq 0$, то удобно перейти к безразмерным величинам

$$x = \frac{r}{\alpha} = \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{1/3} r, \quad e = \frac{2mr^2}{\hbar^2} E = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{2/3} E, \quad a(\alpha, \beta) = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\alpha^4}{\beta}\right)^{1/3}$$

и переписать уравнение (3) в виде

$$\frac{d^2 w}{dx^2} + \left(e - \frac{l(l+1)}{x^2} - av(x) \right) w = 0, \quad (4)$$

где

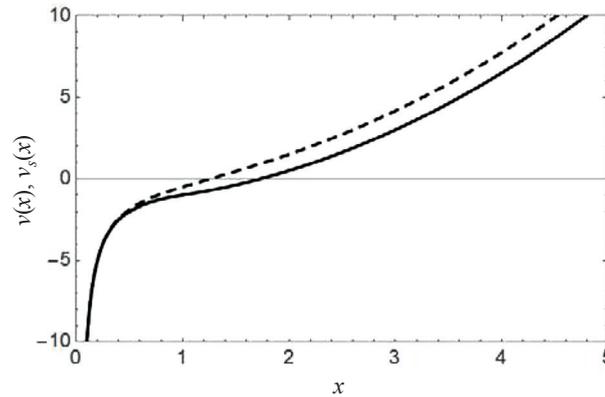
$$v(x) = \begin{cases} -\frac{1}{x}, & x < 1, \\ \frac{x^2}{2} - \frac{3}{2}, & x > 1. \end{cases}$$

С помощью безразмерных величин x , e и a радиальное уравнение Шрёдингера для потенциала (1) также приводится к виду (4), где вместо $v(x)$ будет присутствовать функция $v_s(x) = -1/x + x^2/2$. Функции $v(x)$ и $v_s(x)$ представлены на рис. 1 соответственно сплошной и штриховой линиями.

Выбирается такое решение уравнения (4), которое стремится к 0 при $x \rightarrow 0$ и при $x \rightarrow \infty$. Это решение выражается следующим образом:

$$w(x) = N \begin{cases} w_o(1)w_c(x), & x < 1, \\ w_c(1)w_o(x), & x > 1, \end{cases}$$

где

Рис. 1. Функции $v(x)$ и $v_s(x)$ Fig. 1. Functions $v(x)$ and $v_s(x)$

$$w_c(x) = x^{l+1} \exp(-\sqrt{-ex}) M\left(\frac{-a}{2\sqrt{-e}} + l + 1, 2l + 2, 2\sqrt{-ex}\right),$$

$$w_o(x) = x^{l+1} \exp\left(\frac{-\sqrt{ax^2}}{2\sqrt{2}}\right) U\left(\frac{-(e+3a/2)}{2\sqrt{2a}} + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}, l + \frac{3}{2}, \sqrt{\frac{a}{2}}x^2\right).$$

Здесь используются вырожденные гипергеометрические функции [5], а также введено обозначение N для нормировочного коэффициента.

Условие непрерывности первой производной функции $w(x)$ в точке $x = 1$ может быть представлено уравнением

$$k(a, l, e) = 0, \quad (5)$$

где функция $k(a, l, e)$ имеет довольно громоздкий вид

$$k(a, l, e) = \sqrt{-e} \exp(-\sqrt{-e}) U\left(\frac{-(e+3a/2)}{2\sqrt{2a}} + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}, l + \frac{3}{2}, \sqrt{\frac{a}{2}}\right) \times$$

$$\times \left[-M\left(\frac{-a}{2\sqrt{-e}} + l + 1, 2l + 2, 2\sqrt{-e}\right) + \left(\frac{-a}{2(l+1)\sqrt{-e}} + 1\right) M\left(\frac{-a}{2\sqrt{-e}} + l + 2, 2l + 3, 2\sqrt{-e}\right) \right] +$$

$$+ \sqrt{\frac{a}{2}} \exp(-\sqrt{-e}) M\left(\frac{-a}{2\sqrt{-e}} + l + 1, 2l + 2, 2\sqrt{-e}\right) \times$$

$$\times \left[U\left(\frac{-(e+3a/2)}{2\sqrt{2a}} + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}, l + \frac{3}{2}, \sqrt{\frac{a}{2}}\right) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{-(e+3a/2)}{\sqrt{2a}} + l + \frac{3}{2}\right) U\left(\frac{-(e+3a/2)}{2\sqrt{2a}} + \frac{l}{2} + \frac{7}{4}, l + \frac{5}{2}, \sqrt{\frac{a}{2}}\right) \right].$$

На рис. 2 приведена функция $k(10, 0, e)$ на промежутке, включающем первые четыре нуля.

Трансцендентное уравнение (5) является правилом квантования для безразмерной величины e . Решения этого уравнения легко находятся численно.

Численные иллюстрации. Линии на рис. 3 и 4 показывают зависимость от a первых четырех нулей $e(a, l)$ осциллирующей функции $k(a, l, e)$ для $l = 0$ и $l = 1$. Номеру этих нулей можно сопоставить целое число $n = 0, 1, 2, \dots$, характеризующее номер уровня энергии.

Специфика зависимости энергии $E = \hbar^2 e(a) / 2mr_0^2$ от исходных параметров α и β потенциала состоит в том, что E пропорциональна одной комбинации из этих параметров $r_0^{-2}(\alpha, \beta)$, а зависимость от другой комбинации $a(\alpha, \beta)$ является нетривиальной.

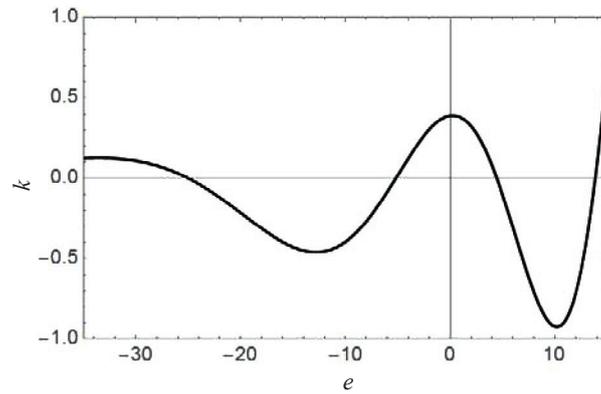


Рис. 2. Функция $k(10, 0, e)$

Fig. 2. Function $k(10, 0, e)$

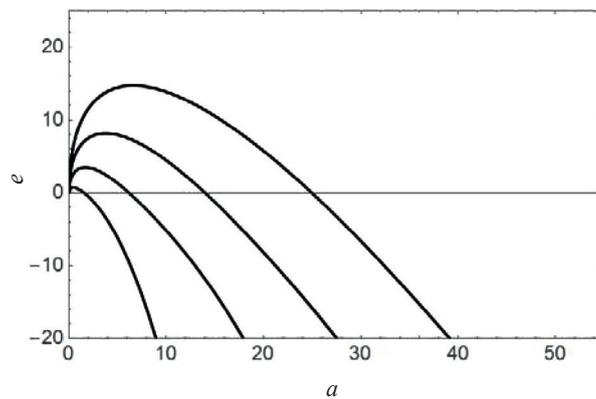


Рис. 3. Зависимость e от a для $l = 0$

Fig. 3. Dependence of e on a for $l = 0$

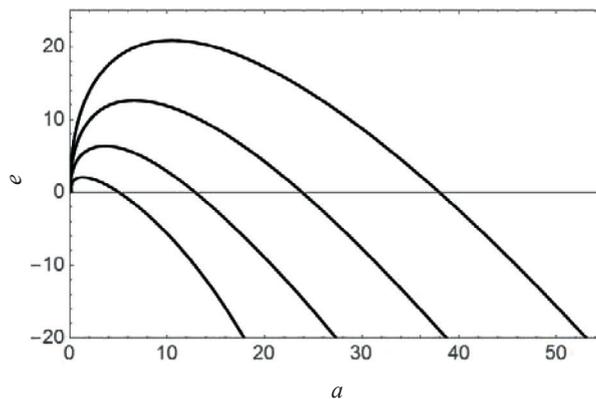


Рис. 4. Зависимость e от a для $l = 1$

Fig. 4. Dependence of e on a for $l = 1$

При $\alpha \rightarrow 0$ имеем переход к известному выражению для спектра энергии в случае изотропного осциллятора:

$$E \rightarrow E_o = \sqrt{\frac{\hbar^2 \beta}{m}} (2n + l + 3/2).$$

Вместе с тем, если $\alpha \rightarrow 0$, то $a \rightarrow 0$, что позволяет найти предельное поведение функции $e(a)$ при малых значениях a :

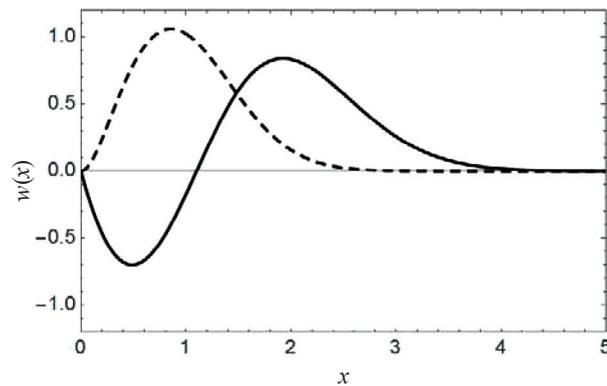


Рис. 5. Радиальные волновые функции

Fig. 5. Radial wave functions

$$e(a) \rightarrow \frac{2mr_0^2}{\hbar^2} E_o = \sqrt{2a}(2n+l+3/2).$$

С другой стороны, при $\beta \rightarrow 0$ имеем переход к известному выражению для энергетического спектра в кулоновском случае:

$$E \rightarrow E_c = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n+l+1)^2}.$$

Если $\beta \rightarrow 0$, то $a \rightarrow \infty$, что позволяет получить асимптотическое поведение функции $e(a)$ при больших значениях a :

$$e(a) \rightarrow \frac{2mr_0^2}{\hbar^2} E_c = -\frac{a^2}{4(n+l+1)^2}.$$

Наконец, на рис. 5 приведены нормированные на единицу радиальные волновые функции $w(x)$ для $l=0$, $a=2$, $e=3,475$ (сплошная линия) и для $l=1$, $a=8$, $e=-3,092$ (штриховая линия).

Заключение. Предложенный вариант объединения кулоновского и осцилляторного потенциалов (2), являясь конкурирующим для суммы этих потенциалов (1) применительно к моделированию физических процессов, обладает тем преимуществом, что допускает точное решение уравнения Шрёдингера. На наш взгляд, представляет интерес и решение уравнения движения в рамках классической механики для потенциала (2).

Список использованных источников

1. Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М., 1973. – 704 с.
2. Skupsky, S. X-ray line shift as a high-density diagnostic for laser-imploded plasmas / S. Skupsky // *Phys. Rev. A.* – 1980. – Vol. 21, N 4. – P. 1316–1326. <https://doi.org/10.1103/physreva.21.1316>
3. Alberg, M. Exact solutions to the Schrodinger equation for potentials with Coulomb and harmonic oscillator terms / M. Alberg, L. Willets // *Phys. Lett. A.* – 2001. – Vol. 286, N 1. – P. 7–14. [https://doi.org/10.1016/s0375-9601\(01\)00385-1](https://doi.org/10.1016/s0375-9601(01)00385-1)
4. Ciftci, H. Coulomb plus power-law potentials in quantum mechanics / H. Ciftci, R. L. Hall, Q. D. Katatbeh // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 2003. – Vol. 36, N 25. – P. 7001–7007. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/25/307>
5. Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables / eds. M. Abramovitz, I. A. Stegun. – New York, 1970. – 1060 p.

References

1. Davydov A. S. *Quantum mechanics*. Moscow, 1973. 704 p. (in Russian).
2. Skupsky S. X-ray line shift as a high-density diagnostic for laser-imploded plasmas. *Physical Review A*, 1980, vol. 21, no. 4, pp. 1316–1326. <https://doi.org/10.1103/physreva.21.1316>

3. Alberg M., Wilets L. Exact solutions to the Schrödinger equation for potentials with Coulomb and harmonic oscillator terms. *Physics Letters A*, 2001, vol. 286, no. 1, pp. 7–14. [https://doi.org/10.1016/s0375-9601\(01\)00385-1](https://doi.org/10.1016/s0375-9601(01)00385-1)

4. Ciftci H., Hall R. L., Katatbeh Q. D. Coulomb plus power-law potentials in quantum mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2003, vol. 36, no. 25, pp. 7001–7007. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/25/307>

5. Abramovitz M., Stegun I. A. (eds.) *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York, 1970. 1060 p.

Информация об авторах

Кудряшов Владимир Викторович – канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник. Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kudryash@dragon.bas-net.by.

Баран Александр Валерьевич – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник. Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: a.baran@dragon.bas-net.by.

Information about the authors

Kudryashov Vladimir V. – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading researcher. B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kudryash@dragon.bas-net.by.

Baran Aleksandr V. – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher. B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a.baran@dragon.bas-net.by.