YU ISSN 0015-3206
FZKAAA 13 (2) 163 (1981)

ПРИМЕРЫ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С СИНГУЛЯРНЫМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

А. М. Эйшинский

Вечерняя школа 46 *г. Днепропетровск*, СССР

Received 24 March 1981

UDC 530.145

Original scientific paper

Some examples of the one-dimensional Schrödinger equation with strongly singular potentials are considered and solutions vanishing at the origin are constructed using the well-known transcedental functions.

Рассмотрим дифференциальные уравнения[12]

$$f'' + \frac{2m}{\hbar^2}[\varepsilon - U(x)]f = 0, \ -\infty < x < +\infty, \tag{1}$$

$$f'' + \frac{2m}{\hbar^2}[\varepsilon - U(\tau)]f = 0, \ 0 < \tau < +\infty. \tag{2}$$

Предлагается исследование указанных уравнений не опирающееся на метод ВКБ.

Пример 1

Рассмотрим (2) при $\tau \to 0$ с потенциалом Леннарда-Джонса[6,9,10]

$$U(\tau) = \frac{A}{\tau^{12}} - \frac{B}{\tau^6}, \ A > 0, \ B > 0. \tag{3}$$

Применяя к (2) с (3) подстановку

$$y = \tau y_1(\xi),\ \xi = \frac{1}{\tau},\ \tau \to +0,\ \xi \to +\infty, \tag{4}$$

получаем

$$\frac{d^2 y_1}{d\xi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\varepsilon}{\xi^4} - A\,\xi^8 + B\,\xi^2\right) y_1 = 0. \tag{5}$$

Подстановка

$$5u = \xi^5,\ \xi \to +\infty,\ u \to +\infty \tag{6}$$

преобразует уравнение (5) в уравнение

$$\frac{d^2 y_1}{du^2} + \frac{4}{5u}\frac{d y_1}{du} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{\varepsilon}{(5u)^{4/5}} - A + \frac{B}{(5u)^{6/5}}\right] y_1 = 0. \tag{7}$$

Подстановка

$$y_1 = y_2 \cdot u^{-2/5} \tag{8}$$

преобразует уравнение (7) в уравнение

$$\frac{d^2 y_2}{du^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\varepsilon}{(5u)^{4/5}} - A + \frac{B}{(5u)^{6/5}}\right) + \frac{6}{25\,u^2}\right] y_2 = 0. \tag{9}$$

С помощью уравнения (9) окончательно получаем

$$f_{\tau\to 0} \sim \tau^3 \exp\left(-\frac{1}{2\tau^3}\sqrt{\frac{2m\,A}{\hbar^2}}\right). \tag{10}$$

Формула (10) с точностью до постоянного множителя совпадает с формулой (14) из статьи 10.

Примеры 2, 3

Нам понадобится дифференциальное уравнение

$$f'' + \frac{a}{\tau^{2\beta+2}} f = 0 \tag{11}$$

с общим решением

$$f = \begin{cases} \sqrt{\tau}\left(C_1 \mathcal{J}_{\frac{1}{2\beta}}\left(\frac{i\sqrt{-a}}{2\beta\, x^\beta}\right) + C_2 \mathcal{J}_{-\frac{1}{2\beta}}\left(\frac{i\sqrt{-a}}{2\beta\, x^\beta}\right)\right),\ i = \sqrt{-1},\ a < 0, \\[2ex] \sqrt{\tau}\left(C_1 \mathcal{J}_{\frac{1}{2\beta}}\left(\frac{\sqrt{a}}{2\beta\, x^\beta}\right) + C_2 \mathcal{J}_{-\frac{1}{2\beta}}\left(\frac{\sqrt{a}}{2\beta\, x^\beta}\right)\right),\ a > 0. \end{cases}$$

При $\beta = 5, a = -\frac{2mA}{\hbar^2}$ получаем результат из статы 10.

При $\beta = \frac{1}{2}, a = -\frac{2mA}{\hbar^2}$ получаем результат из статей 1—5.

Примеры 4, 5

Рассмотрим уравнение (30) из статьи 10

$$f'' = \frac{2mA}{\hbar^2 \tau^4} e^{\frac{2a}{\tau}} f. \tag{12}$$

Применяя к уравнению (12) подстановку (4), получаем

$$f_{\tau\to 0} \sim \tau J_0 \left(i \sqrt{\frac{2mA}{a^2 \hbar^2}} e^{\frac{2a}{\tau}} \right), \; i = \sqrt{-1}. \tag{13}$$

Если взять уравнение (2) для частицы, находящейся в потенциальной яме

$$U(\tau) = \frac{A}{\tau^4} e^{\frac{2a}{\tau}} - \frac{B}{\tau^3}, \tag{14}$$

то (14) нельзя заменить потенциалом

$$U(\tau) = \frac{a}{\tau} + \frac{\beta}{\tau^2} \tag{15}$$

как это делает автор статьи 10, ибо решения (2) с (14) при $\tau \to 0$ имеет существенно особую точку, а решения (2) с (15) при $\tau \to 0$ регулярны[13].

Применяя подстановку (4) к уравнению (2) с потенциалом (14), получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 y}{d\xi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\varepsilon}{\xi^4} - A\, e^{2a\xi} - \frac{B}{\xi} \right) y = 0. \tag{16}$$

Подстановка

$$e^{a\xi} = u, \; a > 0, \; \xi \to +\infty, \; u \to +\infty$$

преобразует дифференциальное уравнение (16) в уравнение

$$\frac{d^2 y}{du^2} + \frac{1}{u} \frac{dy}{du} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\varepsilon\, a^2}{u^2 \ln^4 u} - \frac{A}{a} - \frac{B}{a u^2 \ln u} \right) y = 0. \tag{17}$$

Подстановка

$$y = y_2 \cdot u^{-1/2} \tag{18}$$

преобразует дифференциальное уравнение (17) в уравнение

$$\frac{d^2 y_1}{d u^2} + \left(- \frac{2m A}{a \hbar^2} + \frac{1}{4u^2} - \frac{2m B}{a \hbar^2 u^2 \ln u} + \frac{2m \varepsilon a^2}{\hbar^2 u^2 \ln^4 u} \right) y_1 = 0. \tag{19}$$

Окончательно

$$f_{\tau \to 0} \sim \tau \exp \left(- \exp \left(\frac{a}{\tau} \sqrt{\frac{2m A}{\hbar^2 a}} \right) - \frac{a}{2 \tau} \right). \tag{20}$$

Заметим, что общее решение уравнения (12) (сравнить с Ст. 10) имеет вид

$$f = C_1 \tau J_0 \left(i \sqrt{\frac{2m A}{a^2 \hbar^2}} e^{\frac{a}{\tau}} \right) + C_2 \tau Y_0 \left(i \sqrt{\frac{2m A}{a^2 \hbar^2}} e^{\frac{a}{\tau}} \right).$$

Пример 6

Рассмотрим дифференциальное уравнение (2) с потенциалом

$$U(\tau) = \pm \frac{A}{\tau^n}, \; n > 0. \tag{21}$$

Применяя подстановку (4) к уравнению (2) с (21), получаем

$$\frac{d^2 \eta}{d \xi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\varepsilon}{\xi^4} \mp A \, \xi^{n-4} \right) \eta = 0. \tag{22}$$

Случай $n > 2$

Подстановка

$$\xi = \left[\left(\frac{n-2}{2} \right) \varrho \right]^{\frac{2}{n-2}}, \tau \to +0, \; \xi \to +\infty, \; \varrho \to +\infty \tag{23}$$

преобразует дифференциальное уравнение (22) к виду

$$\frac{d^2 \eta}{d^2 \varrho} + \frac{n-4}{n-2} \cdot \frac{1}{\varrho} \cdot \frac{d \eta}{d \varrho} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\varepsilon}{\left[\left(\frac{n-2}{2} \right) \varrho \right]^{\frac{2n}{n-2}}} \mp A \right] \eta = 0. \tag{24}$$

Подстановка

$$\eta = \eta_1 \cdot \varrho^{-\frac{n-4}{2(n-2)}} \tag{25}$$

преобразует дифференциальное уравнение (24) к виду

$$\frac{d^2 \eta_1}{d \varrho^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\varepsilon}{\left[\left(\frac{n-2}{2} \varrho \right) \right]^{\frac{2n}{n-2}}} \mp A \right) + \frac{n(n-4)}{4 \varrho^2 (n-2)^2} \right] \eta_1 = 0, \qquad (26)$$

откуда для верхнего знака в (26) получаем

$$f_{\tau \to 0} \sim \tau^{\frac{n}{4}} \exp \left(- \frac{2}{n-2} \sqrt{\frac{2m A}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{\tau^{\frac{n-2}{2}}} \right). \qquad (27)$$

При $n = 3$ получаем результаты статей 1—5.

Для нижнего знака в (26) получаем

$$f_{\tau \to 0} \sim \tau^{\frac{n}{4}} \sin \left(\frac{2}{n-2} \sqrt{\frac{2m A}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{\tau^{\frac{n-2}{2}}} + \Psi \right), \qquad (27')$$

где Ψ -некоторое действительное число.

Случай $0 < n < 2$

При $\xi \to + \infty$ уравнение (22) эквивалентно уравнению

$$\frac{d^2 \eta}{d \xi^2} \mp \frac{2m A}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{\xi^{4-n}} \eta = 0.$$

С помощью уравнения (11) окончательно получаем

$$f_{\tau \to 0} \sim \begin{cases} \sqrt{\tau}\, \mathcal{J}_{\frac{1}{2-n}} \left(\frac{i}{2-n} \sqrt{\frac{2m A}{\hbar^2}}\, \tau^{\frac{2-n}{2}} \right), \quad i = \sqrt{-1}; \\ \sqrt{\tau}\, \mathcal{J}_{\frac{1}{2-n}} \left(\frac{1}{2-n} \sqrt{\frac{2m A}{\hbar^2}}\, \tau^{\frac{2-n}{2}} \right). \end{cases}$$

Случай $n = 2$

Для верхнего знака в (22) получаем

$$f_{\tau \to 0} \sim \tau^{\frac{1 + \sqrt{1 - \frac{8m A}{\hbar^2}}}{2}}.$$

Для нижнего знака в (22) получаем

$$1-\frac{8mA}{\hbar^2}>0,\ f_{\tau\to 0}\sim\tau^{\frac{1+\sqrt{1-\frac{8mA}{\hbar^2}}}{2}};$$

$$1-\frac{8mA}{\hbar^2}=0,\ f=C_1\sqrt{\tau}+C_2\sqrt{\tau}\ln\tau+0\,(1);$$

$$1-\frac{8mA}{\hbar^2}<0,\ f=C_1\sqrt{\tau}\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mA}{\hbar^2}-1}\,\tau\right)+$$

$$+\,C_2\sqrt{\tau}\cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mA}{\hbar^2}-1}\,\tau\right)+0\,(1).$$

Пример 7

Рассмотрим уравнение (1) при $x\to\pm\infty$ с потенциалом (см. Ст. 10)

$$U(x)=x^2\exp(ax^2). \tag{28}$$

Заметим, что уравнение (1) с (28) не меняется при замене x на $-x$.

Подстановка

$$x=\sqrt{\frac{2}{a}\ln\varrho\,a},\ x\to+\infty,\ \varrho\to+\infty$$

преобразует уравнение (1) с (28) в уравнение

$$\frac{d^2f}{d\varrho^2}+\left(\frac{1}{\varrho}+\frac{1}{2\,\varrho\ln\varrho\,a}\right)\frac{df}{d\varrho}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\varepsilon}{2\,a\,\varrho^2\ln\varrho\,a}-A\right)f=0. \tag{29}$$

Подстановка

$$f=f_1\cdot\varrho^{-1/2}\ln\varrho\,a$$

преобразует уравнение (29) в уравнение

$$\frac{d^2f_1}{d\varrho^2}+\left(-\frac{2mA}{\hbar^2}+\frac{1}{4\varrho^2}+\frac{m\varepsilon}{a\,\hbar^2\,\varrho^2\ln\varrho\,a}+\frac{3}{16\,\varrho^2\ln^2\varrho\,a}\right)f_1=0,$$

откуда получаем

$$f_{x\to\pm x} \sim |x|^{-1/2} \exp\left(-\frac{a\,x^2}{4} - \frac{1}{a}\sqrt{\frac{2m\,A}{\hbar^2}} e^{\frac{ax^2}{2}}\right).$$

Другие примеры

Для уравнения (2) с потенциалами, взятыми из Ст. 8 соответственно со страниц 47, 120, 121, 131, 132, 156, 516, 614, 677 при $\tau \to 0$ получаем

$$f = C_1 \sin\left(\sqrt{\frac{2m\,a}{\hbar^2}}\tau\right) + C_2 \cos\left(\sqrt{\frac{2m\,a}{\hbar^2}}\tau\right) + 0\,(1).$$

Для уравнения (2) с потенциалом $\pm\, a\,\tau^{-4}$ результат следует из формул (27) и (27′).

Для уравнения (2) с потенциалом

$$V = -\,\varepsilon f_1 \cdot x^{-6}(1 + \beta\, x^{-2})$$

стр. 572 из Ст. 8 результат следует из (27) и (27′).

Литература

1) I. E. Tamm, Phys. Rev. **58** (1940) 952;
2) H. C. Corben, J. Schwinger, Phys. Rev, **58** (1940) 953;
3) И. Е. Тамм, ДАН СССР, 29, №8—9, (1940), 952;
4) Л. Д. Ландау, И. Е. Тамм, ДАН СССР, 29, №8—9, (1940) 953;
5) И. Е. Тамм, Изв. АН СССР, ОМЕН, сер. физ., №4—5, (1941) 555;
6) C. M. Case, Phys. Rev. **80** (1950) 797;
7) В. Паули, *Мезонная теория ядерных сил.* ГИИЛ, М, 1947;
8) Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, »Мир«, М, 1959;
9) S. Flugge, H. Krüger, Z. Phys. **216** (1968) 213;
10) Н. И. Жирнов, Журнал вычисл. мат и мат. физики, том 8, №2 (1968);
11) R. Blomer, Z. Phys. **229** (1969) 347;
12) Československy časopis pro fysiku, **A 20** (1970) 189;
13) В. В. Голубев, *Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений*, М, 1950.

PRIMJERI ZA SCHRÖDINGEROVU JEDNADŽBU SA SINGULARNIM POTENCIJALOM

A. M. EIŠINSKIJ

Večernja škola 46, *Dnepropetrovsk, SSSR*

UDK 530.145

Originalni znanstveni rad

Razmatrani su neki primjeri jednodimenzionalne Schrödingerove jednadžbe s jako singularnim potencijalom. Pomoću dobro poznatih transcedentnih funkcija konstruirana su rješenja koja iščezavaju u ishodištu.