

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 14 за 2020 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Поздняков С.Г., Валиев И.В.

Асимптотические разложения для основных состояний уравнения Шредингера

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Поздняков С.Г., Валиев И.В. Асимптотические разложения для основных состояний уравнения Шредингера // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 14. 28 с. <u>http://doi.org/10.20948/prepr-2020-14</u> URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-14</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

С.Г. Поздняков, И.В. Валиев

Асимптотические разложения для основных состояний уравнения Шредингера

Поздняков С.Г., Валиев И.В.

Асимптотические разложения для основных состояний уравнения Шредингера

В случае гладких потенциалов предложен метод построения асимптотических разложений для основных состояний уравнения Шредингера. Найденные асимптотические разложения являются решениями в квадратурах соответствующей собственные В задачи на значения. отличие от квазиклассического приближения ВКБ найденные решения пригодны для основных состояний и позволяют найти логарифмическую производную волновой функции во всей области ее определения. Для некоторых простейших потенциалов найденные асимптотические разложения сходятся к точным решениям.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, логарифмическая производная, основное состояние, асимптотическое разложение

Sergey Georgievich Pozdnyakov, Ildar Vagizovich Valiev Asymptotical expansions for ground states of Schrodinger equation

The method of calculation of asymptotical expansions for ground state of Schrodinger equation in case of smooth potentials is proposed. These asymptotical expansions are solutions of the corresponding eigenvalue tasks in quadratures. Unlike quasiclassical approach of WKB the proposed solutions are applicable for the ground states and allow to find a logarithmic derivative of wave function in a whole area of its definition. For some simplest potentials the calculated asymptotical expansions converge to exact solution.

Key words: Schrodinger equation, logarithmic derivative, ground state, asymptotical expansion

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 19-01-00435.

1. Введение

Асимптотические методы широко применялись и применяются во многих физических, химических современных математических, других И естественнонаучных исследованиях. Ссылки на огромное количество статей, обзоров и монографий, посвященных асимптотическим методам, легко могут быть найдены в интернете. Естественно, не была обойдена вниманием квантовая механика. Практически во всех учебниках квантовой механики присутствует квазиклассическое приближение [1] (метод ВКБ), разработанное еще в 1920-х годах (см., например, [2]). Впоследствии квазиклассическое приближение широко применялось в квантовомеханических расчетах. Само оно было достаточно хорошо исследовано, и на его основе были разработаны многие схожие методы (см., например, [3]).

Однако в случае связанных состояний в стационарном уравнении Шредингера метод ВКБ обладает двумя недостатками: он хорошо применим только для состояний с большим значением главного квантового числа и не является самодостаточным, поскольку значение энергии состояния не может быть получено непосредственно в рамках этого приближения.

Формально первый недостаток преодолевается при помощи специальной процедуры, которая сшивает квазиклассические решения уравнения Шредингера внутри и вне классически допустимой области [1]. После такой сшивки значение энергии может быть найдено из условия затухания решений под барьером. Однако для "преодоления" классических точек поворота приходится использовать функции Эйри. В результате решение теряет аналитический (в смысле записи) вид и более всего напоминает некую численную процедуру, при этом не самую удобную и оптимальную. Второй недостаток устраняется с помощью использования дополнительного условия квантования – правила Бора-Зоммерфельда (см., например, [2]).

В 1980-х годах был разработан другой подход, который в основном применялся для вычислений радиальной компоненты волновой функции в сферически симметричных потенциалах – "1/n-разложение" (см., например, [4]). В рамках 1/n-разложения удалось достаточно точно воспроизвести энергии основного и первого возбужденного состояний, а также приближенно вычислить нормированные волновые функции внутри и вне классически допустимой области. При этом внутри классически допустимой области использовалось осцилляторное представление, которое определяло энергии и волновые функции состояний, а вне использовались функции метода ВКБ при уже найденной энергии. Отметим, что не требовалось никакой специальной процедуры сшивания решений, поскольку было показано, что решения в яме и под барьером достаточно близки в некоторой области независимой переменной [4]. В той же статье [4] можно найти ряд ссылок на работы по 1/n-разложению.

Результаты расчетов методом 1/n-разложения для степенных потенциалов оказались очень близки к точным значениям, особенно для логарифмического

потенциала (см. ниже). Удовлетворительного объяснения этому факту не было найдено, учитывая что в случае логарифмического потенциала эффективный потенциал достаточно далек от осцилляторного. Попытка дать объяснение такой близости результатов позволила сформулировать излагаемый подход.

Первоначально результаты настоящей работы были опубликованы в препринте [5]. За время, прошедшее после этой публикации, результаты были несколько переосмыслены, улучшены обозначения и стиль изложения. Следует отметить, что все теоретические подходы, изложенные ниже, уже были известны к моменту опубликования работы [5]. По ряду причин результаты, касающиеся расширения области применимости и увеличения точности результатов, в препринт [5] не были включены.

2. Одномерный случай

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шредингера:

$$-\frac{1}{2}\psi^{\prime\prime}(x) + \omega^2 V(x)\psi(x) = E\psi(x), \qquad (1)$$

здесь $\psi(x)$ – волновая функция, V(x) – потенциал, E – энергия. Используется обычная система величин, в которой $\hbar = m = 1$ (m – масса частицы).

Для простоты и удобства изложения "сила потенциала" задается с помощью действительного параметра $\omega > 0$. Считая, что потенциал V(x) удовлетворяет некоторым условиям, которые будут сформулированы ниже, будем искать наинизшее (основное) связанное состояние для уравнения (1).

Прежде всего напомним условия, которым в этом случае должна удовлетворять волновая функция.

А) $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ должны быть непрерывны при $-\infty < x < +\infty$;

B) $\psi(x)$ должна быть нормируемой, т.е. $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < +\infty$.

Хорошо известно, что линейное однородное уравнение второго порядка (1) с помощью логарифмической производной волновой функции (ЛП) $\phi(x) = \psi'(x)/\psi(x)$ преобразуется в нелинейное уравнение Риккати первого порядка (см., например [6]):

$$\phi'(x) + \phi^2(x) = 2\omega^2 V(x) - 2E.$$
 (2)

Далее ЛП удобно представить следующим образом: $\phi(x) = \omega \phi(x)$. После этого уравнение (2) принимает вид:

$$\frac{1}{\omega}\varphi'(x) + \varphi^2(x) = 2V(x) - 2\epsilon.$$
(3)

В уравнении (3) величина E/ω^2 обозначена ϵ . Такое переобозначение может быть выполнено без каких-либо ограничений, т.к. величина E является искомой и должна быть определена в процессе решения. Здесь же заметим, что условие **A**) для $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ просто требует непрерывности ЛП.

Получить простое представление решения задач (1)÷(3) в случае произвольного потенциала V(x) едва ли возможно. Наложим на потенциал четыре ограничения:

- С) будем рассматривать только потенциалы V(x), являющиеся аналитическими (голоморфными) функциями в некоторой области комплексной плоскости, содержащей всю действительную ось; естественно, на действительной оси значения V(x) действительны;
- **D**) в некоторой точке действительной оси x_0 потенциал имеет глобальный минимум, естественно $V'(x_0) = 0$;
- **E**) в точке x_0 вторая производная потенциала положительна: $V''(x_0) > 0;$
- **F**) кроме этого, считается, что $\lim_{x \to +\infty} V(x) > V(x_0)$ и $\lim_{x \to -\infty} V(x) > V(x_0)$.

Нетрудно видеть, что ограничениям **C**)÷**F**) удовлетворяет большинство одномерных потенциалов, рассматриваемых в учебниках квантовой механики.

Сама форма уравнения (3) наводит на мысль о возможности представить решение в случае $\omega \gg 1$ в виде разложений по обратным степеням параметра ω :

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \varphi_1(x)/\omega + \varphi_2(x)/\omega^2 + \cdots$$

$$\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_1/\omega + \epsilon_2/\omega^2 + \cdots$$
(4)

Уравнение для $\varphi_0(x)$ имеет очень простой вид:

$$\varphi_0^2(x) = 2V(x) - 2\epsilon_0. \tag{5}$$

Его решение, непрерывное на всей действительной оси, есть:

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} +\sqrt{2V(x) - 2V(x_0)}, & x < x_0, \\ -\sqrt{2V(x) - 2V(x_0)}, & x > x_0, \end{cases}$$
(6)

при этом $\epsilon_0 = V(x_0)$. Во избежание недоразумений отметим, что в формулах (6) под квадратным корнем понимается неотрицательная ветвь. Нетрудно видеть, что в точке $x_0 \ \varphi_0(x)$ линейно обращается в ноль:

$$\varphi_0(x) = (x_0 - x)\sqrt{V''(x_0)} + o(x - x_0), \quad x \to x_0.$$
⁽⁷⁾

Кроме этого, при выполнении условий С) ÷ F) $\varphi_0(x)$, так же как и V(x), будет аналитической (Коши–Риман) в некоторой области комплексной плоскости (возможно, отличной от области аналитичности потенциала), содержащей всю действительную ось.

Уравнение для следующего члена разложения $\varphi_1(x)$ также очень простое:

$$\varphi_1(x) = -\left[\varphi_0'(x) + 2\epsilon_1\right] / [2\varphi_0(x)]. \tag{8}$$

Если выбрать $\epsilon_1 = -\varphi'_0(x_0)/2$, то $\varphi_1(x)$ не имеет особенности в точке x_0 . При этом ее аналитические свойства будут подобны аналитическим свойствам $\varphi_0(x)$. Последующие члены первого из разложений (4) могут быть получены аналогично $\varphi_1(x)$. При этом одновременно будут найдены и члены второго разложения (4) для энергии. Выражение для *k*-го члена первого разложения (4) будет иметь вид:

$$\varphi_k = -[\varphi'_{k-1}(x) + P(x) + 2\epsilon_k] / [2\varphi_0(x)], \tag{9}$$

здесь

$$P(x) = \varphi_1 \varphi_{k-1} + \varphi_2 \varphi_{k-2} + \dots + \varphi_{k-2} \varphi_2 + \varphi_{k-1} \varphi_1$$

Очевидно, что всегда можно выбрать величину ϵ_k так, чтобы числитель в правой части (9) обращался в ноль в точке x_0 . Например, для k=2 $P = \varphi_1^2$ и

$$\varphi_2(x) = -[\varphi_1'(x) + \varphi_1^2(x) + 2\epsilon_2]/[2\varphi_0(x)],$$

$$\epsilon_2 = -[\varphi_1'(x_0) + \varphi_1^2(x_0)]/2.$$
(10)

Аналитические свойства всех $\varphi_k(x)$, найденных указанным способом, будут подобны аналитическим свойствам $\varphi_0(x)$ и $\varphi_1(x)$: каждая такая функция будет аналитична в некоторой области комплексной плоскости, содержащей всю действительную ось. Из этого следует, что для любой конечной суммы разложения (4) для ЛП соответствующие волновая функция $\psi(x)$ и ее производная $\psi'(x)$ будут непрерывны на всей действительной оси. Т.е. условие **А)** для $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ будет выполнено. Далее заметим, что для потенциалов, выражающихся через элементарные функции, все члены разложений (4) также выражаются через элементарные функции и могут быть вычислены аналитически (в смысле записи). Возможно при этом, что нахождение глобального минимума потенциала потребует решения трансцендентного уравнения.

Теперь кратко исследуем нормируемость полученного разложения для ЛП, т.е. выполнение условия **B**) для соответствующей волновой функции. Если ограничиться только нулевым членом разложения $\varphi_0(x)$, то нормируемость следует из условия **F**). Действительно, рассмотрим для определенности случай $x \to +\infty$. В этом случае найдется пара чисел a и $\varepsilon > 0$, таких, что при всех x > a будет выполнено условие $\varphi_0(x) < -\varepsilon$. Тогда $\int_a^x \varphi_0(y) dy < \varepsilon(x - a)$ и волновая функция будет спадать при $x \to +\infty$ не медленнее, чем *const* · exp($-\varepsilon x$). Аналогичным образом волновая функция будет спадать и при $x \to -\infty$. Экспоненциального спадания волновой функции при $x \to \pm\infty$ достаточно для выполнения условия **B**).

Если рассматривать разложения (4) как асимптотические, т.е. $\omega \to \infty$, то для нормируемости волновой функции, соответствующей сумме конечного числа членов (4), достаточно при $x \to \pm \infty$ ограниченности отношений $\varphi_k(x)/\varphi_0(x)$, $k = 1,2, \cdots$. Для широкого круга потенциалов эти условия, как правило, выполняются. Так как в большинстве интересных случаев $\varphi_k(x)$ могут быть найдены в аналитическом виде (запись), то вопрос о нормируемости может быть решен непосредственно в каждом конкретном случае.

На этом алгоритм, описывающий вычисление членов разложений (4), заканчивается. Следует отметить некоторое сходство этих разложений с формулами "классического" метода ВКБ. Действительно, формула (6) подобна главному члену разложения ВКБ для ЛП. Отличие состоит в том, что в (6) значение энергии задается явно, а в методе ВКБ требуется применение дополнительного правила квантования: правила Бора–Зоммерфельда. Другое отличие состоит в том, что формула (6) определена на всей действительной оси, в то время как в методе ВКБ возникает дополнительная проблема, связанная с переходом из классически допустимой области в подбарьерные.

Далее следует сделать некоторые замечания, касающиеся ограничений на форму потенциала: С)÷F). Из анализа формул (6), (8)÷(10) следует, что для того, чтобы вычислить некоторое количество членов разложений (4), чтобы потенциал V(x) был непрерывен и необходимо только, имел соответствующее количество непрерывных производных на всей действительной оси. В таком случае все необходимые величины ϵ_k и функции $\varphi_k(x)$, а вместе ними частичная сумма для ЛП могут быть вычислены с помощью соответствующих формул. Однако в этом случае связь между потенциалом V(x) и вычисленной приближенной ЛП неоднозначна. Нетрудно видеть, что величины ϵ_k определяются "поведением" потенциала в окрестности вблизи точки минимума. Вследствие этого существуют потенциалы, которые совпадают в точке минимума и имеют в ней несколько совпадающих производных. При этом такие потенциалы будут отличаться друг от друга на всей действительной прямой или какой-либо ее части. Естественно, разложения ЛП для таких потенциалов будут различными.

Следует также заметить, что неоднозначность возникает и в случае потенциалов, непрерывно дифференцируемых на всей действительной оси бесконечное число раз. Соответствующий пример приведен в следующем разделе. В случае ограничения C) разложения (4) однозначно определяются потенциалом, что следует из свойств аналитических функций и аналитических продолжений. Кроме этого, хорошо известно из теории дифференциальных уравнений, что в этом случае решения исходного уравнения (1) будут аналитическими функциями в области аналитичности потенциала. Из этого факта следует, что при выполнении условий C)÷F) ЛП, соответствующая точной волновой функции основного состояния, также будет аналитической функцией в некоторой области, содержащей всю действительную ось.

Ограничение **D**) необходимо, чтобы исключить достаточно сложные случаи, когда потенциал "состоит" из нескольких "ям" одинаковой или близкой глубины. В этом случае не всегда удается "правильным" образом определить даже нулевое приближение $\varphi_0(x)$, не говоря уже о вычислении следующих членов разложений (4).

Ограничение **E**) необходимо для того, чтобы можно было вычислить высшие члены разложения (4) $\varphi_k(x)$ для $k = 1, 2, \cdots$. Формально в случае глобального минимума в точке x_0 и $V''(x_0) = 0$ можно непрерывнодифференцируемым образом определить $\varphi_0(x)$, однако вычисление следующих членов разложений становится невозможным.

Ограничение **F**) исключает из рассмотрения квазистационарные состояния. Теория Г. Гамова, описывающая эти состояния, использует комплексные значения энергии, и поэтому такой случай требует специального рассмотрения.

Таким образом, при ограничениях C)÷F) в общем случае (возможно, при не слишком малых конечных значениях ω) разложения (4) дают приближенные решения уравнений (2) и (3), которые можно рассматривать как последовательные приближения или как ряды теории возмущений по параметру $1/\omega$. Кроме этого, вычисленные разложения можно рассматривать как приближенное решение задачи на собственное значение (энергия основного состояния) для исходного уравнения (1) в квадратурах.

В некоторых случаях разложения (4) дают точные решения. Еще раз заметим, что для потенциалов, содержащих только элементарные функции, все члены разложений (4) также выражаются через элементарные функции и могут быть вычислены аналитически (в смысле записи).

В конце этого раздела заметим, что разложения, аналогичные (4)–(10), могут быть также получены для случая бесконечно растянутого потенциала: $V(\alpha x), 0 < \alpha \ll 1$.

3. Примеры для одномерных потенциалов

В общем случае при конечных значениях ω частичные суммы (4) можно рассматривать как приближенные решения поставленной задачи. Наиболее интересный случай – это случай, когда одно или оба из разложений (4) сходятся. При этом следует учитывать различие между сходимостью числового ряда для энергии и функционального ряда для ЛП. Вопрос о сходимости разложений (4) достаточно сложен учитывая нелинейность уравнения (3). Даже если оба разложения сходятся и при этом разложение для ЛП сходится на всей действительной оси, совсем неочевидно, что в этом случае разложения (4) сходятся именно к решению уравнения (3). Возможно, что, учитывая аналитические свойства потенциала (условие C)), такое доказательство сходимости может быть получено. Вполне вероятно, что для этого потребуются какие-либо дополнительные ограничения на форму потенциала.

С точки зрения физических применений исследование сходимости не слишком важно. В случае "простых" потенциалов разложения (4) сходятся и дают точные решения. Что можно проверить с помощью непосредственной подстановки, учитывая возможность аналитических вычислений (запись), упомянутую ранее.

В качестве иллюстрации сходящихся решений рассмотрим примеры для некоторых потенциалов из широко известного учебника квантовой механики [2].

1) Осциллятор $V(x) = x^2/2$. Оба разложения (4) содержат конечное число слагаемых:

отсюда

$$\phi(x) = -\omega x$$
, $E = \omega/2$, $\psi(x) \sim \exp(-\omega x^2/2)$.

 $\varphi_0(x) = -x, \ \epsilon_0 = 0, \ \epsilon_1 = 1/2,$

Заметим, что точное решение получается при любых $\omega > 0$.

2) Потенциал Морза $V(x) = e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}$. Потенциал несимметричен, поэтому решение существует не для всех величин ω . На этом примере удобно продемонстрировать действие условия нормировки **B**). Как и в случае осциллятора, оба разложения (4) содержат конечное число членов:

$$\begin{split} \varphi_0(x) &= \sqrt{2}(e^{-\alpha x} - 1), \ \varphi_1 = \alpha/2, \ \epsilon_0 = -1, \ \epsilon_1 = \alpha/\sqrt{2}, \ \epsilon_2 = -\alpha^2/8, \\ \phi(x) &= \sqrt{2}\omega(e^{-\alpha x} - 1) + \alpha/2, \ E = -(\omega - \alpha/\sqrt{8})^2, \\ \psi(x) &\sim \exp\left(-\sqrt{2}\omega e^{-\alpha x}/\alpha - \sqrt{2}\omega x + \alpha x/2\right). \end{split}$$

Нормируемость при $x \to -\infty$ обеспечивается слагаемым, содержащим $e^{-\alpha x}$ в аргументе экспоненты. При $x \to +\infty$ для выполнения условия нормируемости необходимо чтобы сумма двух других слагаемых была отрицательной. Отсюда следует: $\omega > \alpha/\sqrt{8}$, что совпадает с условием существования дискретного уровня, приведенного в учебнике [2].

3) Потенциал $V(x) = -1/\cosh^2(x)$. Данный потенциал симметричен, поэтому в этом случае при любом значении $\omega > 0$ существует дискретный уровень. Этот пример демонстрирует, что в общем случае разложения (4) расходятся. Однако они сходятся начиная с некоторого значения ω . В общем случае разложения можно использовать как приближенное решение. В результате несложных вычислений получаем:

$$\phi(x) = -\sqrt{2} \tanh(x) \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{4\omega} + \frac{1}{16\omega^2} - \frac{1}{512\omega^4} + \frac{1}{8192\omega^6} - \frac{5}{524288\omega^8} + \cdots \right),$$

$$E = -1 + \frac{1}{\sqrt{2}\omega} \left(1 - \frac{1}{2\sqrt{2}\omega} + \frac{1}{16\omega^2} - \frac{1}{512\omega^4} + \frac{1}{8192\omega^6} - \frac{5}{524288\omega^8} + \cdots \right).$$

В этом случае в разложении (4) для $\phi(x)$ все члены либо
пропорциональны $\tanh(x)$ либо равны нулю. Естественно, используя
подстановку *const* · $\tanh(x)$, можно найти решение уравнений (2) или (3)

непосредственно. Однако можно просуммировать ряды в формулах для $\phi(x)$ и *E*. Используя тождество

$$\sqrt{1 + \frac{1}{8\omega^2}} = 1 + \frac{1}{16\omega^2} - \frac{1}{512\omega^4} + \frac{1}{8192\omega^6} - \frac{5}{524288\omega^8} + \cdots,$$

которое справедливо при $\omega^2 > 1/8$, после простых вычислений получаем:

$$\phi(x) = \left(1 - \sqrt{1 + 8\omega^2}\right) \tanh(x)/2,$$

$$E = \left(\sqrt{1 + 8\omega^2} - 4\omega^2 - 1\right)/4,$$

$$\psi(x) \sim [\cosh(x)]^{\frac{1 - \sqrt{1 + 8\omega^2}}{2}}.$$

Три последние формулы дают точное решение при любых $\omega > 0$.

4) В качестве примера, когда разложения (4) при любых ω являются расходящимися, рассмотрим потенциал $V(x) = -1/\cosh(x)$. Применяя формулы (6), (8)÷(10), находим:

$$\epsilon_0 = -1$$
, $\epsilon_1 = 1/2$, $\epsilon_2 = -5/32$, $\epsilon_3 = 23/512$, $\epsilon_4 = -135/8192$,

$$\begin{aligned} \epsilon_5 &= \frac{4507}{524288} , \epsilon_6 = -\frac{51645}{8388608} , \epsilon_7 = \frac{1563263}{268435456} , \epsilon_8 = -\frac{29497695}{4294967296} \cdots, \\ \varphi_0(x) &= -2\sinh(x/2)/\sqrt{\cosh(x)}, \\ \varphi_1(x) &= \frac{\cosh(x/2) - \cosh^{3/2}(x)}{4\sinh(x/2)\cosh(x)}. \end{aligned}$$

Сложность и громоздкость выражений для $\varphi_k(x)$ быстро нарастают с увеличением номера, поэтому формулы для $\varphi_k(x)$ при $k \ge 2$ не приводятся. В настоящем случае для вычислений элементов разложений (4) использовалась система символьных вычислений "МАХІМА" [6]. Полностью выполнить вычисления с помощью этой системы автору не удалось. Вычисления членов разложения для ЛП, начиная с k = 5, давали заметную ошибку при малых значениях аргумента. Для исправления ситуации были использованы вычисления с помощью разложения соответствующих выражений в ряды Тэйлора. Возможно, что не все возможности символьной системы были использованы, учитывая небольшой опыт автора.

Далее рассмотрим для этого потенциала различие между конечными суммами разложений (4) и точным решением уравнения Шредингера,



Рис. 1. Относительное различие между точной ЛП и приближенными ЛП, вычисленными с помощью разложения (4) для потенциала $V = -1/\cosh(x)$. Подробное описание представленных величин приведено ниже в тексте

найденным численно при значении $\omega = 1$. В случае числовых асимптотических рядов, как правило, суммирование обрывают на минимальном по модулю слагаемом. В данном случае таким слагаемым является $\epsilon_7 \approx 0.0058$. Соответствующее значение энергии равно $E_7 = \sum_{k=0}^{k=7} \epsilon_k = -0.619544$. При этом точное значение энергии основного состояния равно $E_{acc} = -0.622551$, относительная разница равна ≈ 0.0048 .

На рис. 1 изображены графики относительных разниц между несколькими частичными суммами разложения (4) для ЛП и точными значениями, полученными численно:

 $D_N(x) = \left|\sum_{k=0}^{k=N} \varphi_k(x) / \phi_{acc}(x) - 1\right|$, здесь $\phi_{acc}(x)$ – точные значения ЛП, полученные численно. На графиках хорошо видно, что минимальные отклонения соответствуют величинам $D_5(x)$ или $D_6(x)$, а отклонения для $D_4(x)$ и $D_7(x)$ заметно больше. Можно констатировать, что обычному правилу выбора количества слагаемых в частичных суммах (4) с использованием только разложения для энергии может соответствовать неоптимальное приближение для ЛП. Такая ситуация вполне ожидаема, поскольку речь идет не об одном асимптотическом разложении, двух взаимосвязанных числовом a 0 разложениях, одно из которых функциональное. Более того, если выбирать длину частичной суммы исходя из разложения для ЛП, то может возникнуть проблема неоднозначности определения разницы между точным И приближенным решением.

В данном случае этот выбор можно сделать достаточно уверенно. Из графика следует, что минимальная разница для ЛП при $x \ge 0.85$ достигается для $D_6(x)$. При меньших значениях x, где минимальная разница соответствует $D_5(x)$, отличие между $D_5(x)$ и $D_6(x)$ не слишком велико. Тем более, что минимальное относительное различие в энергии также соответствует $E_6 = -0.625368$.

Теперь вернемся к сходимости разложений (4) и важности условия C). Рассмотрим потенциал $V(x) = \exp(-1/x^2) - 1/\cosh^2(x)$. Нетрудно видеть, что в этом случае разложение (4) для энергии сходится (см. пример **3**)). При этом, например, при $\omega = 1$ значение E = -1/2, точно также как и в примере **3**). Естественно, это значение отличается от точного $E_{acc} = -0.472246$ (получено численно). Нетрудно видеть, что подобная ситуация возникает из-за того, что нарушается ограничение C). Заметим, что при этом потенциал бесконечное число раз непрерывно дифференцируем на всей действительной оси. Однако и в этом случае при больших величинах параметра ω сумма нескольких первых членов разложения для ЛП может быть с хорошей точностью использована в качестве приближенного решения.

В первоначальной публикации [5] были описаны результаты для других одномерных потенциалов, для которых также точные аналитические (в смысле записи) решения не существуют. Изучались сходимость и точность

аппроксимации. При этом было отмечено, что в случае, когда характерные размеры задачи: ширина и глубина потенциала, а также величина $V''(x_0)$ порядка единицы, суммы нескольких первых членов разложений (4) вполне могут быть использованы в качестве приближенных решений и для полу-количественных оценок.

4. Сферически симметричный случай, степенные потенциалы

Подход, описанный выше, можно применить для поиска основных состояний в трехмерных сферически симметричных потенциалах. Рассмотрим уравнение для радиальной части волновой функции в сферически симметричном потенциале GV(r):

$$R''(r) - [l(l+1)/r^2 + 2GV(r) - 2E]R(r) = 0,$$

здесь $R(r) = r\psi(r)$ – приведенная радиальная компонента волновой функции, l – орбитальный момент, G – "сила" потенциала, E – энергия. Для радиальной функции R(r) должны выполняться те же условия непрерывности и нормируемости **A**) и **B**), но теперь на полупрямой $0 < r < \infty$. Кроме этого, будем рассматривать только потенциалы расходящиеся при $r \to 0$ слабее, чем центробежный член:

$$\lim_{r\to 0} r^2 \cdot V(r) = 0.$$

Условие **C**) для потенциала V(r) должно выполняться также на полупрямой. А для "эффективного" потенциала: $V_{eff}(r) = l(l+1)/(2r^2) + V(r)$ должны выполняться условия **D**) и **E**) хотя бы при l > 0.

Условно потенциалы V(r) можно разделить на две группы: потенциалы, у которых при любом G > 0 и фиксированном l есть хотя бы один уровень, и потенциалы, у которых уровень появляется, только когда G превышает некоторое критическое значение G^{cr} . К последним относятся так называемые короткодействующие потенциалы (см. ниже).

5) В качестве первого примера рассмотрим потенциалы из первого семейства.

В нескольких работах по 1/n-разложению рассматривались степенные потенциалы вида $V(r) = G \cdot r^M$, где M – целое, $M \ge -1$, при M = 0 $V(r) = G \cdot \ln(r)$. Нетрудно показать, что с помощью несложной линейной замены независимой переменной величину G можно привести к единице. В результате для этих потенциалов уравнение для R(r) приобретает вид:

$$R''(r) - [l(l+1)/r^2 + 2r^M/M - 2E]R(r) = 0.$$
(11)

Сразу заметим, что из простейшего анализа следует выполнение условия **F**) для эффективного потенциала

 $V_{eff}(r) = l(l+1)/(2r^2) + r^M/M$ при l > 0. Для логарифмической производной $\phi(r) = R'(r)/R(r)$ получаем:

$$\phi'(r) + \phi^2(r) = \frac{n^2}{r^2} \left(1 - \frac{1}{n} \right) + \frac{2r^M}{M} - 2E,$$
(12)

здесь n = l + 1. Нетрудно видеть, что **величина** n в формуле (12) играет роль, аналогичную роли **величины** ω в формуле (2). Чтобы сохранить связь с 1/n-разложением, везде далее будет использоваться не величина ω , а величина n. С помощью несложной замены $r = n^{2/(M+2)} \cdot x$ и $\phi(r) = n^{M/(M+2)} \cdot \phi(x)$ приводим (12) к виду подобному (3):

$$\frac{1}{n}\varphi'(x) + \varphi^2(x) = \frac{1}{x^2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) + \frac{2x^M}{M} - 2\epsilon,$$
(13)

где $E = \epsilon \cdot n^{2M/(M+2)}$ при $M \neq 0$ и $E = \epsilon + \ln(n)$ при M = 0. Для $n \to \infty$ решение (13) может быть представлено в виде разложений по степеням 1/n аналогично формулам (4):

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \varphi_1(x)/n + \varphi_2(x)/n^2 + \cdots$$

$$\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_1/n + \epsilon_2/n^2 + \cdots$$
(14)

Выражения для $\varphi_0(x)$ и ϵ_0 даются формулами, аналогичными (6):

$$V_{eff}(x) = \frac{1}{2x^2} + \frac{x^M}{M}, \qquad V'_{eff}(x_0) = 0, \qquad \epsilon_0 = V_{eff}(x_0),$$

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} +\sqrt{2V_{eff}(x) - 2\epsilon_0}, & x < x_0, \\ -\sqrt{2V_{eff}(x) - 2\epsilon_0}, & x > x_0. \end{cases}$$
(15)

В точке x_0 находится минимум потенциала $V_{eff}(x)$ при l > 0. Нетрудно видеть, что для этого семейства потенциалов $x_0 = 1$, а $\epsilon_0 = 1/2 + 1/M$ при $M \neq 0$ и $\epsilon_0 = 1/2$ при M = 0. Формулы для $\varphi_1(x)$ и ϵ_1 аналогичны выражениям (7) с минимальными изменениями:

$$\varphi_1(x) = -\frac{1}{2\varphi_0(x)} \Big[\varphi_0'(x) + \frac{1}{x^2} + 2\epsilon_1 \Big], \quad \epsilon_1 = -\frac{1}{2} [\varphi_0'(x_0) + 1].$$

Выражения для $\varphi_k(x)$ и ϵ_k при $k \ge 2$ совпадают с описанными ранее.

Прежде всего отметим, что разложения (14) дают правильную асимптотику для $\phi(r)$ и R(r) при $r \to 0$ при всех значениях орбитального момента, включая и l = 0. Правильную асимптотику дает уже $\varphi_0(x)$, а остальные слагаемые в первой формуле (14) ситуацию не изменяют. Правильная асимптотика $\phi(r)$ при $r \to 0$ и ограниченность отношений $\varphi_k(x)/\varphi_0(x)$ при $x \to \infty$ позволяют сделать вывод о нормируемости волновой функции, соответствующей разложению (14) в случае степенных потенциалов.

ранее опубликованных работах B ПО 1/n – разложению использовались выражения, сходные с формулами (14) (см., например [4]). В этих работах оперировали с линейным уравнением Шредингера и аппроксимацию волновой функции использовали с помощью собственных функций осциллятора. Из-за этого возможность получения разложения для ЛП $\phi(r)$ на всей полупрямой $0 < r < \infty$ осталась незамеченной.

Так же как и в предыдущем разделе для осцилляторного потенциала (M = 2), разложения (14) дают точные решения при всех значениях орбитального момента l. В этом случае отличные от нуля члены разложений (14) есть:

$$\varphi_0(x) = 1/x - x$$
, $\epsilon_0 = 1$, $\epsilon_1 = 1/2$.

Отсюда получаем:

$$\phi(r) = (l+1)/r - r, \qquad E = l+3/2, \ R(r) \sim r^{l+1} \exp(-r^2/2).$$

Точные решения также получаются для кулоновского потенциала (M = -1) при всех значениях орбитального момента *l*. Ненулевые члены разложений (14) равны:

$$\varphi_0(x) = 1/x - 1, \ \epsilon_0 = -1/2, \ E = -1/[2(l+1)^2],$$

 $\phi(r) = (l+1)/r - 1/(l+1), \ R(r) \sim r^{l+1} \exp[-r/(l+1)].$

Отметим, что для обоих этих потенциалов точные решения получаются и в случае l = 0, когда никакого минимума при r > 0 у эффективного потенциала $V_{eff}(r) = l(l+1)/(2r^2) + V(r)$ вообще нет. Это свойство разложений (15) неслучайно. Причины его возникновения будут изложены ниже.

16

При других значениях M разложения (14) являются асимптотическими и результаты для энергий основных состояний являются приближенными. Энергии основных состояний для 5 небольших величин M и для минимального ненулевого значения l = 1 (n = 2) приведены в таблице 1.

Таблица 1

М	0	1	3	4	5
<i>E</i> (14)	1.294568	2.667829	2.632410	2.821099	3.020808
Eacc	1.294568	2.667829	2.632414	2.820988	3.020045

Во второй строке таблицы представлены значения энергии, полученные с помощью разложений (14). Каждая из этих величин равна некоторой частичной сумме второго из разложений (14), наиболее близкой к точному значению. В третьей строке таблицы представлены значения энергии основных состояний для уравнения (11), полученные численно. Заметим, что для логарифмического и линейного потенциалов различие между точным решением и разложением (14) крайне мало. Далее с ростом степени M относительная разница возрастает, но остается достаточно малой. Так, для M = 5 она всего лишь ≈ 0.00025 . Здесь еще следует отметить, что с помощью системы аналитических вычислений удается получить величины ϵ_k только для $k \leq 5$. Величины с большими номерами были найдены численно с помощью операций с коэффициентами соответствующих степенных рядов.

5. Короткодействующие потенциалы, возникновение уровня

Разложение, подобное разложению (14), может быть также получено и в случае короткодействующих потенциалов. Под короткодействующим потенциалом здесь понимается потенциал, удовлетворяющий двум условиям. Первое: уровень отсчета энергии выбран так, что потенциал на бесконечности обнуляется. Второе: потенциал спадает на бесконечности быстрее, чем центробежный член.

$$\lim_{r\to\infty}r^2\cdot V(r)=0.$$

Как известно, в таких потенциалах не всегда есть связанное состояние. Уровень возникает только тогда, когда величина "силы потенциала" достигает некоторого критического значения $-G^{cr}$. При этом энергия уровня равна E = 0 и задача на собственное значение сводится к нахождению величины G^{cr} . В этом случае уравнение Шредингера выглядит следующим образом:

$$R''(r) - [l(l+1)/r^2 + 2 G^{cr} \cdot V(r)]R(r) = 0.$$

Уравнение для ЛП приобретает вид:

$$\phi'(r) + \phi^2(r) = \frac{n^2}{r^2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) + 2G^{cr} \cdot V(r),$$

здесь n = l + 1. Вводя $\varphi(r) = \phi(r)/n$, это уравнение нетрудно преобразовать к виду, подобному (13):

$$\frac{1}{n}\varphi'(r) + \varphi^2(r) = \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) + 2\gamma \cdot V(r),$$
(16)

где вместо G^{cr} введена новая неизвестная переменная $\gamma = G^{cr}/n^2$. Так же как и ранее, решение (16) ищется в виде разложения по степеням 1/n:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \varphi_1(r)/n + \varphi_2(r)/n^2 + \cdots$$

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_1/n + \gamma_2/n^2 + \cdots$$
 (17)

Аналогично формулам (16) получаем:

$$\varphi_{0}(r) = \begin{cases} +\sqrt{1/r^{2} - V(r_{0})} = 0, & \gamma_{0} = -\frac{1}{[2r_{0}^{2} \cdot V(r_{0})]}, \\ +\sqrt{1/r^{2} - V(r)/[r_{0}^{2}V(r_{0})]}, & r < r_{0}, \\ -\sqrt{1/r^{2} - V(r)/[r_{0}^{2}V(r_{0})]}, & r > r_{0}, \end{cases}$$
(18)

здесь r_0 есть точка минимума эффективного потенциала $V_{eff}(r) = 1/r^2 + 2\gamma_0 V(r)$, а первое из уравнений (18) означает, что этот минимум равен нулю: $V_{eff}(r_0) = 0$. Так же как в предыдущих случаях, находятся выражения для $\varphi_1(r)$ и γ_1 :

$$\varphi_1(r) = -\frac{1}{2\varphi_0(r)} \Big[\frac{1}{r^2} + \varphi_0'(r) - 2\gamma_1 V(r) \Big], \ \gamma_1 = \frac{1}{2V(r_0)} \Big[\frac{1}{r_0^2} + \varphi_0'(r_0) \Big].$$
(19)

Выражения для последующих членов разложений (17) могут быть получены аналогично и здесь не приводятся. Отметим также, что, как и разложения (14), разложения (17) имеют правильную асимптотику для $\varphi(r)$ и $\phi(r)$ не только

при $r \to 0$, но и при $r \to \infty$ для $l \ge 1$. Правильную асимптотику дает сумма двух первых членов (17), последующие слагаемые ситуацию не изменяют.

Рассмотрим примеры применимости разложений (17) для трех короткодействующих потенциалов: потенциала Юкавы: $V(r) = -\exp(-r)/r$, экспоненциального потенциала: $V(r) = -\exp(-r)$ и потенциала гауссовского вида: $V(r) = -\exp(-r^2)$. В этих случаях разложения (17) будут асимптотическими. Результаты расчетов для этих потенциалов в случае l = 1 приведены в таблице 2.

Таблица 2

-V(r)	r_0	γ_0	γ_1	γ_2	G ^{cr}	G_{acc}^{cr}
e^{-r}/r	1	e/2	$e(1/\sqrt{2}-1)/2$	$e(43/72-1/\sqrt{2})/4$	4.540815	4.540984
$\exp(-r)$	2	<i>e</i> ² /8	0	$-5e^2/288$	3.523650	3.524531
$exp(-r^2)$	1	<i>e</i> /2	$e(\sqrt{2}-1)/2$	$e(2/9-\sqrt{2}/4)$	6.049793	6.049654

В таблице приведены следующие величины: значение r_0 , три первые значения γ_k , в предпоследней колонке приведены значения G^{cr} , вычисленные с помощью разложения (17), последняя колонка содержит точные значения G^{cr}_{acc} , найденные с помощью численного расчета. В таблице литерой "e" обозначена величина $e = \exp(1)$.

Величина l = 1 соответствует минимальному значению n = 2, при котором формулы (16) \div (19) применимы "легально". Естественно, при l > 1точность вычисления величины G^{cr} и приближения для соответствующей ЛП будет выше. Нетрудно видеть, что в случае l = 0 разложения (17) также применимы, но разница между величинами G^{cr} и G_{acc}^{cr} заметно больше и может составлять несколько процентов. Меньшая точность разложений (17) в этом случае связана не только с большим параметром разложения (1 вместо 1/2), но и с тем, что соответствующая волновая функция не может быть нормирована, а поведение ЛП при $r \to \infty$ определяется конкретным видом короткодействующего потенциала, а не центробежным членом.

6. Короткодействующие потенциалы, конечные значения энергии

Естественно, что подход, примененный в предыдущем разделе, может быть применен для короткодействующих потенциалов и в случае конечных значений энергии основного состояния: E < 0. При этом должно быть выполнено условие: отношение $G/G^{cr} > 1$ не должно быть слишком близко к единице. В этом случае уравнение для ЛП приобретает вид:

$$\phi'(r) + \phi^2(r) = \frac{n^2}{r^2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) + 2G \cdot V(r) - 2E$$

Заменой неизвестной $\varphi(r) = \phi(r)/n$ оно преобразуется к виду:

$$\frac{1}{n}\varphi'(r) + \varphi^2(r) = \frac{1}{r^2}\left(1 - \frac{1}{n}\right) + 2g \cdot V(r) - 2\epsilon,$$

здесь $g = G/n^2$ и $\epsilon = E/n^2$. Решение, как и ранее, ищется в виде разложения по степеням 1/n:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \varphi_1(r)/n + \varphi_2(r)/n^2 + \cdots$$

$$\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_1/n + \epsilon_2/n^2 \cdots$$
(20)

Выражения для первых членов разложений (20) есть:

$$\varphi_{0}(r) = \begin{cases} +\sqrt{1/r^{2} + 2gV(r) - 2\epsilon_{0}}, & r < r_{0}, \\ -\sqrt{1/r^{2} + 2gV(r) - 2\epsilon_{0}}, & r > r_{0}, \\ \epsilon_{0} = 1/(2r_{0}^{2}) + gV(r_{0}). \end{cases}$$
(21)

Минимум эффективного потенциала $V_{eff}(r) = 1/(2r^2) + gV(r)$ достигается в точке r_0 , которая есть решение уравнения $gr_0^3V'(r_0) = 1$ и находится численно. Выражения для φ_k и ϵ_k при $k \ge 1$ подобны аналогичным выражениям, полученным в предыдущих разделах. В частности:

$$\varphi_1(r) = -\frac{1}{2\varphi_0(r)} \Big[\frac{1}{r^2} + \varphi_0'(r) - 2\epsilon_1 \Big], \qquad \epsilon_1 = -\frac{1}{2} \Big[\frac{1}{r_0^2} + \varphi_0'(r_0) \Big]. \tag{22}$$

Чтобы проиллюстрировать применимость разложений (20) для всех трех потенциалов из предыдущего раздела, были выполнены вычисления при l = 1 и $G/G^{cr} > 1$. На *рисунке 2* приведены графики относительных разниц между точными и приближенными значениями энергий: $\Delta = |E_{(20)}/E_{ACC} - 1|$, где величина $E_{(20)}$ есть наилучшее приближенное значение энергии, найденное с помощью разложения (20), E_{ACC} – величина точного значения энергии, найденное с помощью разложения (20), E_{ACC} – величина точного значения энергии, найденная численно. Для каждого из трех потенциалов вычисления были выполнены для дискретного набора величин G/G^{cr} (см. таблицу 2) с шагом, равным 0.001. Для нахождения величины $E_{(20)}$ приближенные значения энергии вычислялись для нескольких частичных сумм разложения (20), затем из них выбиралось значение с минимальным отклонением. Вычисление приближенных значений энергии производилось с помощью соответствующих рядов по степеням $r - r_0$. Естественно, при вычислениях вместо рядов

использовались полиномы достаточно высокой степени. Коэффициенты этих полиномов находились численно в соответствии с формулами (20)÷(22).

Как и следовало ожидать, с увеличением отношения G/G^{cr} отклонение оптимального приближенного значения (20) от точного в целом уменьшается. Однако, как следует из графиков на рисунке, это уменьшение не является монотонным. Такая немонтонность связана с характером приближения частичных сумм разложений (20) к точному решению вызвана тем, что при некоторых использованных значениях G/G^{cr} различие между точным и приближенным значениями энергии может оказаться достаточно малым.



Puc. 2. Относительные отличия между точными и приближенными значениями энергии основного состояния для потенциалов из **раздела 5**. Подробное описание представленных величин даны в тексте выше рисунка

Достаточно сложный характер относительного отличия приближенного значения энергии от точной величины вызван тем, что приближенное решение задачи состоит из двух асимптотических разложений, одно из которых не является числовым, а есть разложение для функции ЛП на во всей допустимой области.

7. Улучшение точности разложений

В разделе 4 было отмечено, что разложения (15) достаточно хорошо работают и в случае нулевого орбитального момента l = 0 (n = 1), когда центробежный член в потенциале вообще отсутствует. При этом эффективный потенциал вообще не имеет минимума при x > 0. Такое поведение разложений (15) связано с их асимптотическим характером.

Привести строгое доказательство этого утверждения достаточно затруднительно. Проще рассмотреть пример очень давно и очень хорошо известного асимптотического разложения, которое даст полезную подсказку и позволит заметно улучшить "качество" разложений (14), (18) и (20).

С этой целью рассмотрим формулу Стирлинга (Муавра–Стирлинга) для представления факториала [7] при $n \gg 1$:

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \left\{ 1 + \frac{1}{12n} + \frac{1}{288n^2} - \frac{139}{51840n^3} - \frac{571}{2488320n^4} + \cdots \right\}$$

Поскольку $n! = \Gamma(n+1)$ ($\Gamma(x)$ – гамма функция Эйлера), то эту формулу можно переписать в следующем виде:

$$\begin{split} \Gamma(x) &\approx \Gamma_1(x) = \sqrt{2\pi(x-1)} \left(\frac{x-1}{e}\right)^{x-1} \left\{ 1 + \frac{1}{12(x-1)} + \frac{1}{288(x-1)^2} - \frac{139}{51840(x-1)^3} - \frac{571}{2488320(x-1)^4} \right\}. \end{split}$$

Кроме этого, для формулы Стирлинга можно найти похожее выражение [8]:

$$\Gamma(x) \approx \Gamma_2(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{x} \left(\frac{x}{e}\right)^x \left\{1 + \frac{1}{12x} + \frac{1}{288x^2} - \frac{139}{51840x^3} - \frac{571}{2488320x^4}\right\}}.$$

Нетрудно видеть, что формула для $\Gamma_2(x)$ может быть получена из формулы для $\Gamma_1(x)$ с помощью известного соотношения: $\Gamma(x) = \Gamma(x+1)/x$. Если еще раз применить эту формулу: $\Gamma(x) = \Gamma(x+1)/x = \Gamma(x+2)/[x(x+1)]$, то получается еще одно приближенное выражение для $\Gamma(x)$:

$$\Gamma(x) \approx \Gamma_3(x) = \frac{1}{x} \sqrt{\frac{2\pi}{x+1} \left(\frac{x+1}{e}\right)^{x+1}} \left\{ 1 + \frac{1}{12(x+1)} + \frac{1}{288(x+1)^2} - \frac{139}{51840(x+1)^3} - \frac{571}{2488320(x+1)^4} \right\}.$$

Функциональный вид всех трех приближенных формул достаточно близок. При этом коэффициенты поправочных многочленов в фигурных скобках во всех формулах одни и те же. Естественно, параметры разложения: 1/(x-1), 1/x и 1/(x+1) – разные.

Оценим "работоспособность" приближенных формул при малых значениях аргументов и, соответственно, не слишком малых значениях параметров разложения. Непосредственные вычисления дают: $\Gamma_2(1/2) = 0.991089 \cdot \sqrt{\pi}.$ $\Gamma_1(3/2) = 0.495545 \cdot \sqrt{\pi},$ В обоих случаях относительная ошибка менее 1%, при этом параметры разложения равны 2. $\Gamma_3(x)$ достаточно точна при всех x > 0 и даже воспроизводит полюс Формула Заметим, что модуль относительной ошибки достигает $\Gamma(x)$ при $x \to 0$. максимума как раз при $x \to +0$, (параметр разложения равен 1) сама же эта ошибка равна ≈ -0.0005 .

Можно сделать предположение, что "затягивание" пределов применимости приближенных формул для $\Gamma(x)$ в область малых аргументов связана с возможностью уменьшать величину параметра разложения.

Проверить справедливость такого предположения в случае разложений (14), (18) и (20) чрезвычайно просто. Достаточно вместо n = l + 1 положить, например, n = l + 2. При этом в случае степенных потенциалов (**раздел 4**) уравнение (12) приобретает вид:

$$\phi'(r) + \phi^2(r) = \frac{n^2}{r^2} \left(1 - \frac{3}{n} + \frac{2}{n^2} \right) + \frac{2r^M}{M} - 2E,$$
(23)

а вместо уравнения (13) получаем:

$$\frac{1}{n}\varphi'(x) + \varphi^2(x) = \frac{1}{x^2} \left(1 - \frac{3}{n} + \frac{2}{n^2} \right) + \frac{2x^M}{M} - 2\epsilon,$$
(24)

величина $x_0 = 1$ и выражения (14) и (15) остаются неизменными. Для величин $\varphi_1(x)$ и ϵ_1 получаем:

$$\varphi_1(x) = -\frac{1}{2\varphi_0(x)} \Big[\varphi_0'(x) + \frac{3}{x^2} + 2\epsilon_1 \Big], \quad \epsilon_1 = -\frac{1}{2} [\varphi_0'(x_0) + 3],$$

а для $\varphi_2(x)$ и ϵ_2 выражения также изменяются:

$$\varphi_2(x) = -\frac{1}{2\varphi_0(x)} \Big[\varphi_1'(x) + \varphi_1^2(x) - \frac{2}{x^2} + 2\epsilon_2 \Big], \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) + \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_1 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_1 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1^2(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{2} [\varphi_1'(x_0) - \varphi_1'(x_0)] + 1, \\ \epsilon_2 = -\frac{1}{$$

выражения для $\varphi_k(x)$ и ϵ_k при k > 2 не изменяются.

В случае осциллятора (M = 2) теперь ненулевые члены разложений есть:

$$\varphi_0(x) = 1/x - x, \ \varphi_1(x) = -1/x, \ \epsilon_0 = 1, \ \epsilon_1 = -1/2.$$

Нетрудно проверить, что новые разложения для n = l + 2 дают тот же результат, что и ранее.

В кулоновском случае (M = -1) ситуация несколько другая. Теперь оба разложения и для ЛП и для энергии содержат бесконечное число членов.

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= -1, \ \epsilon_1 = -1, \epsilon_2 = -3/2, \epsilon_3 = -2, \epsilon_4 = -5/2, \ \epsilon_5 = -3, \ \epsilon_6 = -7/2, \ \cdots \\ \varphi_0(x) &= 1/x - 1, \ \varphi_1(x) = -1/x - 1, \ \varphi_k(x) = -1, \ k \geq 2. \end{aligned}$$

При этом разложение для ЛП становится суммой простой аналитической функции и числового рядом. Оба разложения для ЛП и энергии легко суммируются аналитически. Естественно, конечный результат также дает точное решение.

Чтобы проиллюстрировать увеличение точности разложений при замене n = l + 1 на n = l + 2 (уравнения (24)) для других значений M (тех же самых, что и в **разделе 4**), вычислим энергии основных состояний для орбитального момента l = 0 с помощью разложения для уравнения (24) и сравним с аналогичными величинами для уравнения (13). Результаты расчетов сведены в таблицу 3.

Таблица 3

М	0	1	3	4	5
<i>E</i> (13)	0.697752	1.855615	1.466059	1.507751	1.594340
<i>E</i> (24)	0.697759	1.855757	1.466979	1.507897	1.573764
E _{acc}	0.697759	1.855757	1.466977	1.507901	1.573645

Во второй строке таблицы приведены значения энергии связанных состояний, вычисленные при n = l + 1 (уравнение (13)). В третьей строке – те же величины, вычисленные при n = l + 2 (уравнение (24)). В обеих этих строках приведены наилучшие приближенные величины, соответствующие некоторым конечным суммам соответствующих разложений. В четвертой строке приведены точные величины, полученные численно. Нетрудно видеть, что

согласие между точными и приближенными значениями энергии для E(24) значительно улучшается. При этом отличия приближенных значений от точных становятся примерно того же порядка, что и в Таблице 1, или даже меньше.

Такое же улучшение точности можно получить и при вычислении "силы" потенциала в момент возникновения уровня. Рассмотрим вычисления для примеров из **раздела 5** в наиболее "неблагоприятном" случае: l = 0. При этом уравнение (16) приобретает вид (n = l + 2 = 2):

$$\frac{1}{n}\varphi'(r) + \varphi^2(r) = \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{3}{n} + \frac{2}{n^2} \right) + 2\gamma \cdot V(r).$$
⁽²⁵⁾

Выражения (17) и (18) не изменяются, а для следующих членов разложений получаем:

$$\begin{split} \varphi_1(r) &= -\frac{1}{2\varphi_0(r)} \Big[\frac{3}{r^2} + \varphi_0'(r) - 2\gamma_1 V(r) \Big], \qquad \gamma_1 = \frac{1}{2V(r_0)} \left[\frac{3}{r_0^2} + \varphi_0'(r_0) \right], \\ \varphi_2(r) &= -\frac{1}{2\varphi_0(r)} \Big[\varphi_1'(r) + \varphi_1^2(r) - \frac{2}{r^2} - 2\gamma_2 V(r) \Big], \\ \gamma_2 &= \frac{1}{2V(r_0)} \left[\varphi_1'(r_0) + \varphi_1^2(r_0) - \frac{2}{r_0^2} \right]. \end{split}$$

Формулы для всех остальных $\varphi_k(r)$ и γ_k при $k \ge 2$ те же, что и ранее.

Результаты вычислений приведены в таблице 4. Вторая колонка содержит результаты, полученные для уравнения (16), третья колонка – результаты для уравнения (25), последняя колонка содержит точные величины, полученные численно.

Таблица 4

-V(r)	$G^{cr}(16)$	$G^{cr}(25)$	G_{acc}^{cr}
e^{-r}/r	0.846617	0.839494	0.839904
$\exp(-r)$	0.720518	0.724848	0.722898
$exp(-r^2)$	1.246992	1.376896	1.342002

В данном случае улучшение точности приближений также присутствует, но оно несколько меньше, чем для степенных потенциалов. Причина этого, как уже было отмечено ранее, связана с тем, что в случае l = 0 волновые функции не могут быть нормированы и их поведение при $r \to \infty$ определяется видом конкретного потенциала.

Подобное улучшение точности может быть получено и для основных состояний с конечной энергией в тех же короткодействующих потенциалах. Ситуация мало чем отличается от основного состояния в момент возникновения уровня и в этой публикации рассматриваться не будет.

Улучшения точности можно добиться и в одномерном случае. Рецепт очень прост: нужно в уравнении (2) величину ω^2 заменить подходящим выражением, чтобы уменьшить параметр разложения, например, $\omega^2 = \tilde{\omega}^2 - \tilde{\omega}$. Рассмотрим **пример 4**) из **раздела 3** при $\omega = 1$. В этом случае $\tilde{\omega} = (\sqrt{5} + 1)/2 \approx 1.618034$ есть отношение золотого сечения. Уравнение (3) при такой замене приобретает вид:

$$\frac{1}{\widetilde{\omega}}\varphi'(x) + \varphi^2(x) = -2 \cdot \left(1 - \frac{1}{\widetilde{\omega}}\right) \cdot \frac{1}{\cosh(x)} - 2\epsilon.$$

Естественно, теперь параметр разложения в формулах (4) будет $1/\tilde{\omega}$, а все формулы, за исключением формулы (8), не изменяются. При этом модификация формулы (8) для $\varphi_1(x)$ столь проста, что нет необходимости ее выписывать отдельно. Наилучшее приближение для энергии основного состояния равно $E_{11} = -0.622487$, и относительное отклонение от точного значения более чем в 40 раз меньше, чем для наилучшего приближения в разделе 3.

Нетрудно видеть, что при фиксированном значении ω для улучшения точности можно использовать выражения достаточно общего вида, например:

$$\omega^2 = \widetilde{\omega}^2 + a_1 \cdot \widetilde{\omega} + a_0 + a_{-1}/\widetilde{\omega} + a_{-2}/\widetilde{\omega}^2 + \cdots$$

Естественно, выбор величины $\tilde{\omega}$ и коэффициентов a_k должен обеспечивать выполнение этого равенства. Более того, очевидно, что похожие замены допустимы и для всех трехмерных примеров, рассмотренных ранее. Вполне возможно, что в некоторых случаях, с помощью такой замены параметра разложения можно получить приближение очень высокой точности.

8. Заключение

Предлагаемые асимптотические разложения достаточно близки к хорошо известному квазиклассическому приближению (метод ВКБ). Однако за счет описанных выше ограничений на потенциалы и существенного использования аналитических свойств этих потенциалов для основного состояния уравнения Шредингера удается получить единое разложение для ЛП во всей области существования волновой функции. При этом энергия основного связанного состояния определяется непосредственно в процессе вычисления разложения и не требует привлечения дополнительных физических принципов (сравни правило квантования Бора–Зоммерфельда в методе ВКБ). Кроме этого, для аналитических (в смысле записи) потенциалов каждый член предлагаемых разложений может быть найден в аналитической же форме с помощью простейших операций: извлечения квадратного корня, дифференцирования и вычисления пределов (например, с помощью правила Лопиталя). Возможность существования таких разложений даже при всех использованных ограничениях, по мнению автора, не является достаточно очевидной.

Нетрудно также заметить связь предлагаемых разложений с методом, использованным при построении 1/*n*-разложений, где была использована аппроксимация волновой функции с помощью волновой функции осциллятора. В случае 1/*n*-разложений представление волновой функции с помощью осцилляторных функций, так же как и в методе ВКБ, не позволяет найти эту волновую функцию "единообразно" во всей области определения. Кроме этого, описанный выше способ увеличения точности разложений в случае использования 1/*n*-разложений также может столкнуться с некоторыми трудностями.

Целью настоящей публикации было показать, что предлагаемый метод построения асимптотических разложений достаточно универсален и может быть применен в различных случаях. При этом разложения для энергии и ЛП вычисляются с помощью достаточно простого алгоритма в единственном виде. В публикации совсем не рассматривался случай радиальной волновой функции для двумерного аксиально симметричного потенциала. Двумерная ситуация мало отличается от сферически симметричного случая и, возможно, будет рассмотрена в последующих публикациях. Кроме этого, не была рассмотрена применимость настоящего подхода для связанных состояний с большей энергией, чем основное состояние. Можно сразу декларировать, что настоящий подход применим для первого возбужденного состояния. Однако в общем случае асимптотические разложения в такой ситуации будут заметно сложнее, чем для основного состояния и представление ЛП и энергии может быть выбрано в неединственном виде. Возможно, что разложения для первого возбужденного состояния также будут опубликованы позднее.

Следует отметить простоту и единственность вида разложений в случае основных состояний. По мнению авторов, решения примеров из **раздела 3** с помощью настоящего подхода намного проще, чем способ решения тех же примеров в учебнике [2]. Не требуется искать необходимую замену переменных и решение находится весьма просто. Учитывая этот факт, можно сделать предположение, что предлагаемый метод мог бы иметь некоторое методическое значение при преподавании основ теории обыкновенных дифференциальных уравнений и основ квантовой механики.

9. Библиографический список

1. Квазиклассическое приближение, URL:

https://en.wikipedia.org/wiki/WKB_approximation

2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.

3. Маслов В.П., Федорюк М.В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976.

4. Мур В.Д., Поздняков С.Г., Попов В.С. 1/п–разложение и вычисление волновых функций // Доклады АН СССР т. 303, № 5, стр. 1102-1107, 1988.

5. Поздняков С.Г. Аналитическое асимптотическое разложение для решений уравнения Шредингера // Препринт МИФИ № 001-2002, Москва, 2002.

6. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: "Наука", Главная редакция физикоматематической литературы, 1966.

7. Янке Е. и Эмде Ф. Таблицы функций с формулами и кривыми. М.-Л.:

```
Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1949.
```

8. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / под ред. М. Абрамовица и И. Стиган . М.: "Наука", Главная редакция физико-математической литературы, 1979.

Оглавление

1. Введение	
2. Одномерный случай	4
3. Примеры для одномерных потенциалов	9
4. Сферически симметричный случай, степенные потенциалы	13
5. Короткодействующие потенциалы, возникновение уровня	16
6. Короткодействующие потенциалы, конечные значения энергии	
7. Улучшение точности разложений	
8. Заключение	
9. Библиографический список	