Новый способ решения уравнения Шредингера

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Аннотация

Решение в виде гипергеометрической функции является конечным произведением экспоненты и полинома от безразмерного радиуса, который разбивается на отдельные множители. Взяв логарифм от этой функции и продифференцировав по радиусу получим конечную сумму вычетов с множителем единица и с определяемым полюсом плюс постоянное слагаемое. Решать такое нелинейное дифференциальное уравнение относительно производной от логарифма волновой функции проще, чем считать гипергеометрический ряд. При этом решение ищется в виде $\exp[-i(Et/\hbar - \int_0^r k(u)du)]f(\theta)/r$, относительно новой переменной $k(r)$.

Уравнение Шредингера при рассеянии элементарных частиц на произвольном потенциале надо описывать в комплексном пространстве с комплексной энергией. При этом получается новый вид решения уравнения Шредингера

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi$$

Подставим решение

$$\psi(t,r,\theta) = \exp[-i(Et/\hbar - \int_0^r k(u)du)]f(\theta)/r \qquad (1)$$

в дифференциальное уравнение, получим

$$E\psi = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr})\psi + U\psi + \frac{\hbar^2}{2mr^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\}.$$

Переменные разделились, представим волновую функцию в зависимости от радиуса и угла, получим

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr}) + U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}$$
$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\} = \lambda f(\theta), \lambda = l(l+1).$$

Для решения задачи рассеяния надо знать решение задачи движения в кулоновском потенциале.

Переменные разделились, представим волновую функцию в зависимости от радиуса и угла, получим

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr}) + U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}$$
$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\} = \lambda f(\theta), \lambda = l(l+1).$$

Если взять волновую функцию в виде

$$\psi(t,r,\theta) = \exp[i\int_0^r k(u,t)du] f(\theta),$$

то получим дифференциальное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial \ln\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr} - \frac{2ik}{r}) + U + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}.$$

Продифференцируем это уравнение по радиусу, получим

$$\frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r\frac{\partial V_r}{\partial r} - i\frac{\hbar}{2m}(\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2V_r}{r^2}) + \frac{\partial[U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]}{m\partial r} = 0;$$
$$V_r = \frac{\hbar k}{m} = -i\frac{\hbar}{m}\frac{\partial \ln\psi}{\partial r}$$

Получаем уравнение Навье-Стокса с кинематической вязкостью $i\frac{\hbar}{2m}$ и давлением $p/\rho = [U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]/m$. Можно совершить и обратный переход, от уравнения Навье-Стокса к уравнению (2), которое можно проинтегрировать.

Проверим формулу (1), подставив в уравнение волновую функцию основного состояния атома водорода. Задача сводится к уравнению

$2\exp(-r) = \exp[i\int k(u)du]/r, ik(r) = -1 + 1/r$. Подставляем в приведенную к безразмерному виду формулу (2), получим $2\varepsilon = -1 + 2/r - 1/r^2 + 1/r^2 - 2/r = -1$, т.е. получаем энергию основного состояния атома водорода.

Уравнение Шредингера сводится к уравнению

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 2\varepsilon = k^2 - i\frac{dk}{dr} + 2u(r); u(r) = \frac{2mU(r)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \ . \quad (2)$$

В случае произвольного собственного значения имеем для водородоподобного атома радиальная часть волновой функции равна $R_{nl} = \exp(-r/n) r^l L_{nl}(r)$ см. [1]

$$\begin{aligned} ik(r) &= \frac{d}{dr}[-r/n + (l+1)\ln r + \ln L_{nl}(r)] = \\ &= \frac{-1}{n_r + l + 1} + \frac{l+1}{r} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{r - a_k} \end{aligned} \quad . \qquad (3)$$

Можно получить решение (2), подставляя в (2) решение (3) и находя значение $n-1$ константы a_k и определить собственное значение энергии ε, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях радиуса. Но это возможно только в случае потенциала Кулона. В случае потенциала $u(r) = -\frac{2}{r} + \frac{b}{r^2}$ решение ищем в виде (1).

Где величина n_r радиальное квантовое число.

$$ik(r) = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{\sqrt{1/4 + b} + 1/2}{r} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r - a_k} . \qquad (4)$$

При условии $n_r = 0$ для основного состояния водородоподобного атома подставляем значение волнового числа в уравнение (2) с потенциалом $u(r) = -\frac{1}{r} + \frac{b}{r^2}$ получаем собственное значение энергии $\varepsilon_{0b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4 + b} + 1/2)^2}$.

$$ik(r) = -\frac{1}{\sqrt{1/4 + b} + 1/2} + \frac{\sqrt{1/4 + b} + 1/2}{r} .$$

При этом волновая функция равна

$$\psi(r)=\exp(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2})r^{\sqrt{1/4+b}-1/2}.$$

При произвольном n в уравнение (2) надо подставлять значение (4) и находить значение собственной энергии и коэффициентов $a_k, k=1,...,n_r$.

$$\psi(r)=\exp(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r})r^{\sqrt{1/4+b}-1/2}L_{n_r b}(r)$$

При условии $n_r>0$ полином $L_{n_r b}(r)=\prod_{k=1}^{n_r}(r-a_k)$ в волновой функции имеет более сложный вид, зависящий от коэффициента $a_k(b)$. Величина собственной энергии равна $\varepsilon_{n_r b}=-\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r)^2}$

В случае $n_r=1$ получаем значение энергии $\varepsilon_{1b}=-\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+3/2)^2}$.

Волновая функция при этих значениях параметра равна

$$\psi(r)=\exp(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+3/2})r^{\sqrt{1/4+b}-1/2}[r-(\sqrt{1/4+b}+1/2)(\sqrt{1/4+b}+3/2)].$$

При условии $b=0$ получаем правильное значение волновой функции

$$\psi(r)=\exp(-\frac{r}{2})(r-2)\sim\exp(-\frac{r}{2})(1-r/2).$$

В случае если решение является вырожденной гипергеометрической волновой функцией можно реализовать предлагаемую идею.

Литература

1. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.А. Квантовая механика. Нерелятивистская теория т.III, М.: Наука, 1989, 768стр.