Использование произвольной волновой функции

для определения потенциала и решения уравнения квантовой механики

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Получены решения уравнений квантовой механики для ограниченной группы потенциалов. В данной статье вычислены для произвольной волновой функции комплексные значения потенциалов. Для полученных потенциалов с помощью полученного решения можно решить задачу квантовой механики. Сходимость метода соответствует наличию близких значений собственной энергии.

Уравнение Шредингера в атомных единицах имеет вид

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\Delta\psi + U\psi \qquad (1)$$

Будем искать решение в виде $\psi = \exp[iS(x,y,z) - iEt]$. Подставим данную функцию в уравнение (1), получим

$$E = -i\Delta S + (\frac{\partial S}{\partial x})^2 + (\frac{\partial S}{\partial y})^2 + (\frac{\partial S}{\partial z})^2 + U(x,y,z) \qquad (2)$$

В случае $U(x,y,z) = U(x) + U(y) + U(z)$ возможно разделение переменных и получение из (2) трех уравнений, каждое из которых зависит от одной переменной.

$$\begin{aligned} E - E_y &= -i\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + (\frac{\partial S}{\partial x})^2 + U(x) \\ E_y - E_z &= -i\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + (\frac{\partial S}{\partial y})^2 + U(y). \\ E_z &= -i\frac{\partial^2 S}{\partial z^2} + (\frac{\partial S}{\partial z})^2 + U(z) \end{aligned} \qquad (3)$$

Задавая действие в виде $S(x,y,z) = S_x(x) + S_y(y) + S_z(z)$, где используются произвольные функции одной переменной. Подставляем функцию действия в (3) , получим

$$U_x(x) = E - E_y + i\frac{\partial^2 S_x(x)}{\partial x^2} - [\frac{\partial S_x(x)}{\partial x}]^2$$
$$U_y(y) = E_y - E_z + i\frac{\partial^2 S_y(y)}{\partial y^2} - [\frac{\partial S_y(y)}{\partial y}]^2 . \qquad (4)$$
$$U_z(z) = E_z + i\frac{\partial^2 S_z(z)}{\partial z^2} - [\frac{\partial S_z(z)}{\partial z}]^2$$

Суммируя равенства (4), получим

$$U(x,y,z) = E + i\frac{\partial^2 S_x(x)}{\partial x^2} - [\frac{\partial S_x(x)}{\partial x}]^2 + i\frac{\partial^2 S_y(y)}{\partial y^2} - [\frac{\partial S_y(y)}{\partial y}]^2 + i\frac{\partial^2 S_z(z)}{\partial z^2} - [\frac{\partial S_z(z)}{\partial z}]^2 . \quad (5)$$

В равенстве (5) потенциальная энергия определена с точность до константы. Но нам известна только одна волновая функция. Зная волновую функцию для каждой переменной можно определить неизвестные константы энергии из уравнения

$$E = \int \psi^* E(x)\psi dx / \int \psi^* \psi dx = \int \psi^* [-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)]\psi dx / \int \psi^* \psi dx .$$

Причем определится добавка к постоянному уровню энергии, который известен из значения потенциальной энергии.

Как же определить остальные волновые функции. Определим волновую функцию из первого уравнения (3). Решение будем искать в виде $S(x) = S_x(x) + \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \varphi_n(x)$. Подставляем данную функцию в первое уравнение (3), умножаем на величину $\varphi_m(x)$ и интегрируем по пространству, получаем уравнение

$\dot{x}$

Чтобы существовало не нулевое решение линейного уравнения, определитель $|A_{mn}(\alpha_1,...,\alpha_N)|=0$ этой системы уравнений должен равняться нулю. Тогда коэффициенты $\alpha_n$ определятся с точностью до множителя. Этот множитель определится из равенства нулю определителя. В результате получится, по крайней мере, $N$ совокупностей значений коэффициентов $\alpha_n$, которые определят волновую функцию. Можно будет вычислить энергию $N$ ветвей решения. Надо увеличивать количество членов ряда решения до тех пор, пока не появится сгущение энергии, которое соответствует переходу из свободного в связанное состояние. Потенциалы должны быть выбраны из условия нулевого значения на бесконечности. Данный алгоритм является обобщением алгоритма [1] на произвольные волновые функции. В [1] система уравнений (3) упрошена

$$E - E_y = -\frac{\partial p_x}{\partial x} - p_x^2 + U(x)$$

$$E_y - E_z = -\frac{\partial p_y}{\partial y} - p_y^2 + U(y)$$

$$E_z = -\frac{\partial p_z}{\partial y} - p_z^2 + U(z)$$

$$ik_x = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial \ln\psi}{\partial x} = p_z, ik_y = \frac{\partial S}{\partial y} = \frac{\partial \ln\psi}{\partial y} = p_y, ik_z = \frac{\partial S}{\partial z} = p_x \cdot \qquad (6)$$

Это уравнение в случае $U(z)$ полинома $2N$ степени содержит $2N+1$ уравнения, так как образуется полином $2N$ степени. Функция $\alpha_n(x)$ является полиномом степени $N$ содержит $\mathrm{N}+1$ неизвестных коэффициентов. Плюс один неизвестных коэффициента $E-E_z$. Из равенства количества неизвестных количеству уравнений имеем $N=1$. Задача имеет не единственное решение, так как необходимо решать квадратное уравнение. При другом радиальном числе прибавится степень уравнения и на столько же прибавится количество неизвестных коэффициентов $\beta_k$. Среди коэффициентов потенциала $U(x_m)$ степени $2N$ могут быть $p \le N-1$

неизвестных коэффициента, остальные коэффициенты надо задавать. Тогда степень полинома равна $N = p+1$.

Эта система уравнений допускает решение в случае, если потенциал равен полиному второй степени $ik_x = p_x = \sqrt{-(E-E_y)} - \alpha_m(x) + \sum_{m=1}^{n_r} \frac{1}{x-\beta_n}$ (7)

Подставляя решение (7) в уравнение (6) получим значения коэффициентов решения (7). Но получится решение (7) только в случае уравнения (6) при потенциале, заданном в виде полинома. Но зато имеем явную формулу для волновой функции, и определится собственное значение энергии состояния.

Аналогично можно получить решение в криволинейных координатах.

Данное решение можно применять для произвольной волновой функции, определяя потенциал. Задавая произвольную волновую функцию можно определить значение потенциала

$$U(x,y,z) = E_0 - \Delta \ln\psi + (\frac{\partial \ln\psi}{\partial x})^2 + (\frac{\partial \ln\psi}{\partial y})^2 + (\frac{\partial \ln\psi}{\partial z})^2$$
$$S = -i\ln\psi$$

Далее для этой волновой функции и потенциала, можно определить конечное число волновых функций и их собственное значение энергии с помощью метода, аналогичного одномерному случаю.

Что можно сказать об сходимости счетного количества решения. Собственная энергия для существования дискретных уровней энергии должна быть отрицательна. Тогда константа $E_0$ должна удовлетворять условию (7) и потенциальная энергия должна быть отрицательна. Тогда условия существования дискретного значения энергии выполнено, и ряд $\sum_{n=1}^{N} \alpha_n\varphi_n(x)$ может быть сходящимся с существованием дискретных уровней энергии.

$$U - E_0 < \int \psi^* [E(x) - E_0] \psi d^3 x / \int \psi^* \psi d^3 x =$$

$$= \int \psi^* [-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \Delta \ln \psi + (\frac{\partial \ln \psi}{\partial x})^2 + (\frac{\partial \ln \psi}{\partial y})^2 + (\frac{\partial \ln \psi}{\partial z})^2 ] \psi d^3 x / \int \psi^* \psi d^3 x < -E_0 \quad (7)$$

Тогда собственная энергия будет отрицательная, и имеются связанные дискретные составляющие.

Литература


1. Якубовский Е.Г. Первые интегралы уравнений Навье-Стокса в градиентном представлении скорости. «Энциклопедический фонд России», 2017. 11 стр. http://russika.ru/userfiles/390_1509945860.pdf