doi: https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.02.010
УДК 519.624.2

В.Л. Макаров, академік НАН України

Інститут математики НАН України, Київ
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

Точні розв'язки спектральних задач для оператора Шрьодінгера на $(-\infty, \infty)$ з поліноміальним потенціалом, одержані FD-методом

Для знаходження точних розв'язків одновимірних спектральних задач для оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом вперше запропоновано функціонально-дискретний метод, що належить до чисельно-аналітичних методів і дає можливість, з одного боку, знаходити точні розв'язки розглядуваних задач (як результати граничних переходів), а з іншого боку, коли це неможливо, одержувати розв'язок із будь-якою наперед заданою точністю. Результати, зокрема, можуть бути використані для знаходження основних і збуджених енергетичних станів енергії ангармонічних осциляторів та осциляторів із подвійною потенціальною ямою.

Ключові слова: *спектральні задачі, власні значення, оператор Шрьодінгера, експоненціально збіжний метод.*

Знаходження точних розв'язків одновимірних спектральних задач для оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом було предметом розгляду багатьох робіт [1—6]. У цих роботах автори застосовували аналітичний підхід: заміна змінних, симетрійний аналіз тощо. У даній роботі для знаходження точних розв'язків вперше запропоновано функціонально-дискретний метод, який належить до чисельно-аналітичних методів. Він дає можливість, з одного боку, знаходити точні розв'язки розглядуваних задач (як результати граничних переходів), а з іншого боку, коли це неможливо, одержувати розв'язок із будь-якою наперед заданою точністю. Результати, зокрема, можуть бути використані для знаходження основних і збуджених енергетичних станів енергії ангармонічних осциляторів та осциляторів із подвійною потенціальною ямою.

Розглядається задача

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - 2x\frac{du(x)}{dx} + (\lambda - \varphi(x))u(x) = 0, \quad x \in (-\infty, \infty),$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} u^2(x)\,dx < \infty, \tag{1}$$

що полягає в знаходженні власних значень λ_n і відповідних їм власних функцій $u_n(x)$, $n=0,1,2,\ldots$, де потенціал $\varphi(x)$ є поліномом. Припускаємо, що нумерація власних значень вибрана таким чином, що

$$\lambda_0<\lambda_1<\ldots<\lambda_n<\ldots$$

Інтерес дослідників до побудови точних розв'язків та ефективних методів знаходження наближених розв'язків цієї задачі не послаблюється до сьогодні (див., наприклад, [1—6]). Варто зазначити, що у всіх роботах, які стосуються точних розв'язків, автори не звернули увагу на тісний зв'язок диференціального рівняння (1) з рівнянням Heun'а.

Теоретичні дослідження цього рівняння вже давно інтенсивно проводяться (див. [7]). Їх результати впроваджені у систему комп'ютерної алгебри Maple, у довідково-допоміжних матеріалах якої містяться умови, за яких функції Heun'а перетворюються на поліноми. Але у всіх згаданих авторів відсутнє теоретичне обґрунтування застосованих наближених методів, що зумовлено необмеженим проміжком інтегрування та необмеженістю потенціалу на ньому. У даній роботі пропонується новий підхід до розв'язування задачі (1) зі строгим його обґрунтуванням, який, в окремих випадках, дає можливість отримати точні аналітичні розв'язки.

Застосуємо до задачі (1) найпростіший варіант FD-методу із $\overline{\varphi}(x)\equiv 0$ [8, 9]. Він полягає у розв'язуванні рекурентної послідовності задач

$$\begin{gathered}\frac{d^2u_n^{(0)}(x)}{dx^2}-2x\frac{d\,u_n^{(0)}(x)}{dx}+\lambda_n^{(0)}u_n^{(0)}(x)=0,\quad x\in(-\infty,\infty),\\ \lambda_n^{(0)}=2n,\quad u_n^{(0)}(x)=H_n(x),\end{gathered}\tag{2}$$

$$\frac{d^2u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2}-2x\frac{d\,u_n^{(j+1)}(x)}{dx}+\lambda_n^{(0)}u_n^{(j+1)}(x)=$$

$$=-\sum_{p=0}^{j}\lambda_n^{(j-p+1)}u_n^{(p)}(x)+\varphi(x)u_n^{(j)}(x)\equiv F_n^{(j+1)}(x),$$

$$x\in(-\infty,\infty),\quad \int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}u_n^{(j+1)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx=0,\quad j=0,1,\ldots,\tag{3}$$

$$\lambda_n^{(j+1)}=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}\varphi(x)u_n^{(j)}(x)u_n^{(0)}(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}[u_n^{(0)}(x)]^2\,dx},\quad j=0,1,\ldots\tag{4}$$

Тут (2) — базова задача, $H_n(x)$ — поліноми Ерміта [10, 11]. За допомогою розв'язків задач (2)—(4) будуємо наближення до власних значень і власних функцій m-го рангу

$$\overset{m}{u}_n(x)=\sum_{j=0}^{m}u_n^{(j)}(x),\quad \overset{m}{\lambda}_n=\sum_{j=0}^{m}\lambda_n^{(j)}.$$

Традиційний підхід доведення збіжності FD-методу (див. [8, 9]) у розглядуваному випадку застосувати неможливо, тому використаємо інший. З метою спрощення продемонструємо його для конкретного випадку $n=0,\ \varphi(x)=x^2$. Неважко показати, що розв'язок $(j+1)$-го рівняння з (3) має вигляд

$$u_0^{(j+1)}(x)=\sum_{p=1}^{j+1} a_p^{(j+1)} H_{2p}(x), \tag{5}$$

де коефіцієнти мають бути визначені. Підставимо (5) у диференціальне рівняння (3) і прирівняємо коефіцієнти з однаковими степенями в поліномах Ерміта. Тоді одержимо систему співвідношень

$$\lambda_0^{(j+1)}=2a_1^{(j)}+\frac{1}{2}\delta_{0,j}=\frac{(-1)^j(2j-1)!}{2^{2j-1}(j-1)!\,(j+1)!}+\frac{1}{2}\delta_{0,j}, \tag{6}$$

$$-4p\,a_p^{(j+1)}=-\frac{1}{2}a_p^{(j)}-2\sum_{s=p}^{j-1}a_1^{(j-s)}\,a_p^{(s)}+\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}a_{p-1}^{(j)}+(4p+1)a_p^{(j)}+4(p+1)(2p+1)\,a_{p+1}^{(j)}\right],$$

$$p=1,2,\ldots,j+1,\quad j=0,1,\ldots,\quad a_p^{(j)}=0,\quad p>j \tag{7}$$

Процедура розв'язування алгебраїчної рекурентної системи (7) є алгоритмічною реалізацією FD-методу, що використовує тільки елементарні арифметичні операції над символами. На відміну від роботи [12], система (6) не тільки відіграє важливу роль для побудови алгоритму, але й має ключове значення для доведення збіжності методу. Не розглядаючи окремо розв'язок рекурентної системи рівнянь (7), одразу сформулюємо більш загальний результат.

Теорема. *Нехай* $\varphi(x)=x^2$. *Тоді FD-метод для задачі* (1) *є експоненціально збіжним, і граничний перехід визначає точний розв'язок цієї задачі*

$$\lambda_{2n}=(4n+1)\sqrt{2}-1,$$

$$u_{2n}(x)=\frac{(-1)^n}{(2n)!}H_{2n}(2^{1/4}x)\exp(-1/2\,x^2(\sqrt{2}-1)),$$

$$\lambda_{2n+1}=(4n+3)\sqrt{2}-1,$$

$$u_{2n+1}(x)=\frac{(-1)^n}{(2n+1)!\,2^{5/4}}H_{2n+1}(2^{1/4}x)\exp(-1/2\,x^2(\sqrt{2}-1)),\quad n=0,1,\ldots \tag{8}$$

Ця теорема є уточненням відповідного результату з [1] і посиленням результатів автора з [13]. Доведення здійснюється з використанням системи комп'ютерної алгебри Maple. Спочатку знайдемо, який вигляд будуть мати формули (7). Використовуючи співвідношення

$$u_{2n}^{(j)}(x)=\sum_{p=-\min(j,n),\ p\neq 0}^{j} a_{2n+2p}^{(j)}H_{2n+2p}(x),$$

отримаємо

$$\lambda_{2n}^{(j+1)}=\frac{1}{4}a_{2n-2}^{(j)}+2\,(n+1)(2n+1)a_{2n+2}^{(j)},$$

$$-4pa_{2n+2p}^{(j+1)} = -\sum_{s=|p|}^{j} \lambda_{2n}^{(j+1-s)} a_{2n+2p}^{(s)} + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2} a_{2n+2p-2}^{(j)} + (4n+4p+1) a_{2n+2p}^{(j)} + \right.$$

$$\left. + 4(n+p+1)(2n+2p+1) a_{2n+2p+2}^{(j)}\right], \quad p = 1, 2, \ldots, j+1, \quad j = 0, 1, \ldots,$$

$$a_{2n+2p}^{(j)} = 0, \quad p > j, \quad p = \overline{-\min(j+1, n), j+1}, \quad j = 0, 1, \ldots$$

За допомогою математичної індукції можна довести, що

$$\lambda_{2n}^{(j+1)} = (4n+1)\lambda_0^{(j+1)}. \tag{9}$$

Знайти аналітичне зображення всіх коефіцієнтів $a_{2n,k}^{(j)}$ для будь-якого k досить складно, тому доведення формул (8) здійснюємо у такий спосіб. Спочатку, застосовуючи (9) та (6), знаходимо

$$\lambda_{2n} = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_{2n}^{(j)} = 4n + (4n+1)/(1+\sqrt{2}).$$

Потім підставляємо значення λ_{2n} у (1) і розв'язуємо його за допомогою Maple для різних фіксованих n та відповідних умов

$$u_{2n}(0) = 0, \quad \frac{du_{2n}(0)}{dx} = 0.$$

Аналізуючи одержані результати, знаходимо формули для $u_{2n}(x)$ у (8).

Аналогічно доводимо формулу для $u_{2n+1}(x)$ у (8).

Зауваження 1. Враховуючи характер залежності $\lambda_n^{(0)} = 2n$ від n та обґрунтування FD-методу, робимо висновок, що при його застосуванні до задачі (1) він втрачає свою чудову властивість: чим більший порядковий номер шуканого власного значення, тим вища швидкість збіжності методу [8, 9]. Тому, щоб досягти збіжності методу, коли він є розбіжним, або досягти прискорення його швидкості збіжності, треба застосовувати загальну схему FD-методу.

Зауваження 2. Для випадку, коли потенціал у рівнянні (1) є сумою полінома і автономної нелінійності (типу Gross–Pitaevskii), так само, як у лінійному випадку, можна будувати символьний алгоритм FD-методу, який використовує тільки арифметичні операції.

Зауваження 3. За допомогою запропонованого автором методу можна довести, що всі точні власні значення для випадку

$$\varphi(x) = b_1 x$$

визначаються формулою

$$\lambda_n = 4n - \frac{b_1^2}{4}, \quad n = 0, 1, \ldots,$$

а відповідні точні власні функції можуть бути виражені через поліноми Лагерра [11]

$$u_n(x) = \exp(-x/2) \frac{L_n^{1/2}\left(\left(x + \frac{b_1}{2}\right)^2\right)}{L_n^{1/2}\left(\left(\frac{b_1}{2}\right)^2\right)}.$$

Природним чином виникає запитання, чи не можна було б одразу розглянути загальний випадок $\varphi(x) = b_1 x + b_2 x^2$, з якого, як наслідки, випливали б попередні два випадки. Виявляється, що неможна. Тому цей загальний випадок розглядаємо окремо. Використовуючи набутий на попередніх часткових випадках досвід, вже без використання FD-методу, тільки за допомогою системи комп'ютерної алгебри Maple знаходимо аналітичний розв'язок

$$\lambda_n = (2n+1)\sqrt{b_2} - \frac{b_1^2}{4b_2},$$

$$u_{2n}(x) = \exp\left(\frac{-x(b_1 + b_2 x^2)}{2\sqrt{b_2}}\right) \frac{L_n^{-1/2}\left(\dfrac{(b_1 + 2b_2 x)^2}{4 b_2^{3/2}}\right)}{L_n^{-1/2}\left(\dfrac{b_1^2}{4 b_2^{3/2}}\right)},$$

$$u_{2n+1}(x) = \exp\left(\frac{-x(b_1 + b_2 x^2)}{2\sqrt{b_2}}\right) \frac{b_1 + 2b_2 x}{2 b_2^{3/4}} \frac{L_n^{1/2}\left(\dfrac{(b_1 + 2b_2 x)^2}{4 b_2^{3/2}}\right)}{L_n^{1/2}\left(\dfrac{b_1^2}{4 b_2^{3/2}}\right)}.$$

Із вигляду формул (10) робимо висновок, що з них, як наслідок, не може бути одержано випадок, коли потенціал $\varphi(x) = b_1 x$, про що зазначалося вище.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Magyari E. Exact quantum-mechanical solutions for anharmonic oscillators. *Phys. Lett. A*. 1981. **81**, Iss. 2—3. P. 116—118.
2. Banerjee K. General anharmonic oscillators. *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1978. No. 364. P. 263—275.
3. Chaudhuri R.N., Mondal M. Improved Hill determinant method: General approach to the quantum anharmonic oscillators. *Phys. Rev. A*. 1991. **43**. P. 32—41.
4. Adhikari R., Dutt R., Varshni Y.P. Exact solutions for polynomial potentials using supersymmetry inspired factorization method. *Phys. Lett. A*. 1989. **141**, Iss. 1—2. P. 1—8.
5. Kao Y.-M., Jiang T.-F. Adomian's decomposition method for eigenvalue problems. *Phys. Rev. E*. 2005. **71**, No 3. 036702, 7 p.
6. Roy A.K., Gupta N., Deb B.M. Time-dependent quantum-mechanical calculation of ground and excited states of anharmonic and double-well oscillators. *Phys. Rev. A*. 2001. **65**, No 1. 012109, 7 p.
7. Heun's Differential Equations. A. Ronveaux (Ed.). New York: Oxford Univ. Press, 1995. 384 p.
8. Макаров В. Л. О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма—Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами. *Докл. АН СССР*. 1991. **320**, № 1. С. 34—39.
9. Макаров В.Л. FD-метод — експоненціальна швидкість збіжності. *Журн. обчисл. та прикл. матем*. 1997. № 82. С. 69—74.
10. NIST Handbook of Mathematical Functions F. W. J. Olver, D.W. Lozier, R.F. Boisvert, C.W. Clare. (Eds.) New York: Cambridge Univ. Press, 2010. URL: http://dlmf.nist.gov.
11. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, Т. 2. Москва: Наука, 1974. 296 с.
12. Макаров В.Л., Романюк Н.М. Нові властивості FD-методу при його застосуванні до задач Штурма–Ліувілля. *Допов. Нац. акад. наук Укр*. 2014. № 2. С. 26–31. doi: https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.02.026
13. Макаров В.Л. FD-метод у спектральних задачах для оператора Шрьодінгера з поліноміальним потенціалом на (−∞, ∞). *Допов. Нац. акад. наук Укр*. 2015. № 11. С. 5—11. doi: https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.11.005

Надійшло до редакції 06.09.2016

REFERENCES

1. Magyari, E. (1981). Phys. Lett. A, 81, Iss. 2—3, pp. 116—118.
2. Banerjee, K. (1978). Proc. R. Soc. Lond. A, No 364, pp. 263—275.
3. Chaudhuri, R. N., Mondal, M. (1991). Phys. Rev. A, 43, pp. 32—41.
4. Adhikari, R., Dutt, R., Varshni, Y. P. (1989). Phys. Lett. A, 141, Iss. 1—2, pp. 1—8.
5. Kao, Y.-M., Jiang, T.-F. (2005). Phys. Rev. E, 71, 036702, 7 p.
6. Roy, A. K., Gupta, N., Deb, B. M. (2001). Phys. Rev. A, 65, No 1, 012109, 7 p.
7. Heun's. Differential Equations (1995). A., Ronveaux (Ed.). New York: Oxford University Press.
8. Makarov, V. L. (1991). Dokl. AN SSSR, 320, No 1, pp. 34—39 (in Russian).
9. Makarov, V. L. (1997). J. Comp. and Appl. Math., No 82, pp. 69—74 (in Ukrainian).
10. NIST Handbook of Mathematical Functions (2010). F. W. J., Olver, D. W., Lozier, R. F., Boisvert, C. W., Clare (Eds.). New York: Cambridge Univ. Press, http://dlmf.nist.gov.
11. Bateman, H., Erdëlyi, A. (1974). Higder transcendental functions, Vol. 2. Moscow: Nauka (in Russian).
12. Makarov, V. L., Romanyuk, N. M. (2014). Dopov. Nac. akad. nauk Ukr., No 2, pp. 26—31 (in Ukrainian). https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.02.026
13. Makarov, V. L. (2015). Dopov. Nac. akad. nauk Ukr., No 11, pp. 5—11 (in Ukrainian). https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.11.005

Received 06.09.2016

В.Л. Макаров

Институт математики НАН Украины, Киев
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ШРЁДИНГЕРА НА $(-\infty, \infty)$ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ, ПОЛУЧЕННЫЕ FD-МЕТОДОМ

Для нахождения точных решений одномерных спектральных задач для оператора Шрёдингера с полиномиальным потенциалом впервые применен функционально-дискретный метод, который принадлежит к численно-аналитическим методам и позволяет, с одной стороны, находить точные решения рассматриваемых задач (как результаты граничных переходов), а с другой стороны, когда это невозможно, получать решение с любой наперед заданной точностью. Результаты, в частности, могут быть использованы для нахождения основных и возбужденных энергетических состояний энергии ангармонических осцилляторов и осцилляторов с двойной потенциальной ямой.

Ключевые слова: *спектральные задачи, собственные значения, оператор Шрёдингера, экспоненциально сходящийся метод.*

V.L. Makarov

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev
E-mail: makarov@imath.kiev.ua

EXACT SOLUTIONS OF SPECTRAL PROBLEMS FOR THE SCHRÖDINGER OPERATOR ON $(-\infty, \infty)$ WITH POLYNOMIAL POTENTIAL OBTAINED VIA THE FD-METHOD

The functionally-discrete method is applied for the first time to derive exact solutions of one-dimensional spectral problems for the Schrödinger operator with polynomial potential. This numerical-analytical method is capable of obtaining the solution in a closed form (as a result of the limit transition) or approximating the solution to any predescribed accuracy, when the close-form solution is impossible. The results, in particular, can be used to find the ground and excited energy states of anharmonic oscillators and oscillators with the double-well potential.

Keywords: *spectral problem, exact eigenvalues, Schrödinger operator, exponentially convergent method.*