

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Направление подготовки: 03.03.02 Физика

Профиль: Физика квантовых систем и квантовые технологии

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
УНИФИКАЦИЯ И РАСШИРЕНИЕ МЕТОДА
ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТОЧНЫХ И УСЛОВНО -
ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Обучающийся 4 курса группы 06-111

Е.Д.Роганов

(Роганов Е.Д.)

Руководитель

к.ф.-м.н., доцент

А.Хамзин

(Хамзин А.А.)

Заведующий кафедрой теоретической физики

д.ф.-м.н., профессор

Ю.Н.Прошин

(Прошин Ю.Н.)

Казань - 2025

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Направление подготовки: 03.03.02 Физика

Профиль: Физика квантовых систем и квантовые технологии

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
УНИФИКАЦИЯ И РАСШИРЕНИЕ МЕТОДА
ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТОЧНЫХ И УСЛОВНО -
ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Обучающийся 4 курса группы 06-111 _____ (Роганов Е.Д.)

Руководитель
к.ф.-м.н., доцент _____ (Хамзин А.А.)

Заведующий кафедрой теоретической физики
д.ф.-м.н., профессор _____ (Прошин Ю.Н.)

Казань - 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Глава 1. Метод факторизации и суперсимметричная квантовая механика	6
1.1 Основные положения и базовые соотношения	6
1.2 Инвариантность формы	11
1.3 Унификация метода факторизации.....	12
Глава 2. Применение унифицированного метода факторизации к точно решаемым моделям	17
2.1 Факторизация типа А	17
2.2 Факторизация типа Б	20
Глава 3. Применение унифицированного метода факторизации к условно точно-решаемым моделям	25
3.1 Собственные значения и условия ограничения	25
3.2 Обобщение унифицированного метода факторизации на случай потенциала в виде полинома Лорана	27
Глава 4. Термодинамика точно решаемых моделей	32
4.1 Расчет общих выражений для термодинамических величин точно решаемых моделей	32
4.2 Температурные зависимости внутренней энергии и теплоемкости некоторых точно решаемых моделей	35
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	39

ВВЕДЕНИЕ

Одной из фундаментальных задач квантовой механики является получение точных решений уравнения Шрёдингера, так как они содержат исчерпывающую информацию о физических свойствах исследуемых квантовых систем. Несмотря на длительную историю развития этой области, число известных потенциалов, допускающих точное аналитическое решение, остаётся весьма ограниченным. Это стимулирует поиск новых методов и подходов, позволяющих расширить класс решаемых задач.

На сегодняшний день разработан ряд методов, предназначенных для аналитического решения уравнения Шрёдингера. Среди них можно выделить метод прямого интегрирования, метод факторизации [1-3], суперсимметричную квантовую механику (ССКМ) [4-7], метод Венцеля–Крамерса–Бриллюэна (СВКБ) [8], функционально-аналитический метод Никифорова–Уварова [9], метод квазилинеаризации [10], теоретико-групповой подход [11], различные правила точного квантования [12-16], а также новейшие модификации этих подходов [17]. Каждый из этих методов обладает своими преимуществами, но наибольшую универсальность и гибкость демонстрируют метод факторизации и суперсимметричная квантовая механика.

В последние годы внимание исследователей все чаще сосредоточено на изучении квази-точно решаемых (КТР) и условно точно решаемых (УТР) потенциалов. Для квази-точно решаемых потенциалов возможно точное вычисление лишь конечного числа собственных значений гамильтониана, в то время как для условно точно решаемых потенциалов точность решения достигается при выполнении определённых условий на параметры потенциала. Решение таких задач часто требует использования полиномиальных анзатцев, канонических преобразований и суперсимметричных методов, а в некоторых случаях — сведения уравнения Шрёдингера к уравнению Хойна и дальнейшего численного анализа.



Рисунок 1. Применимость и классификация точно решаемых моделей

Работа посвящена освоению нового алгоритма применения метода факторизации к задаче вычисления спектра квантовых систем с точно и условно точно решаемыми потенциалами. Данный алгоритм направлен на унификацию и расширение возможностей метода факторизации и демонстрирует свою эффективность при построении аналитических решений решаемых моделей. Ключевая идея заключается в использовании единственной потенциал-образующей функции в виде полинома Лорана, что позволяет существенно упростить процедуру расчета собственных значений, параметров суперпотенциала и условий на параметры потенциала в случае УТР-задач.

Особое внимание в работе уделено тому, что структура энергетического спектра определяется исключительно дифференциальным уравнением, которому удовлетворяет потенциал-образующая функция. Такой подход обеспечивает более глубокое понимание внутренней симметрии системы и открывает возможности для построения новых классов аналитически решаемых потенциалов.

Таким образом, цель данной работы состоит в развитии вычислительной базы метода факторизации и суперсимметричной квантовой механики, а также в расширении их приложений к анализу спектральных задач нетривиальных потенциалов в рамках уравнения Шрёдингера.

Задачи, которые были поставлены в этой работе, чтобы достичь выше сформулированной цели:

- Ознакомление с методом факторизации и суперсимметричной квантовой механикой;
- Освоение нового, унифицированного, алгоритма применения метода факторизации Шредингера-Инфилда-Хулла к спектральной задаче уравнения Шредингера для точно и условно-точно разрешимых потенциалов;
- Вычисление собственных значений гамильтониана с известными точно решаемыми потенциалами в рамках унифицированного алгоритма;
- Вычисление условий ограничения на параметры потенциала и спектра гамильтониана с условно-точно разрешимыми потенциалами в рамках унифицированного алгоритма;
- Вычисление термодинамических величин точно решаемых моделей.

Глава 1. Метод факторизации и суперсимметричная квантовая механика

1.1 Основные положения и базовые соотношения

Запишем гамильтониан одномерной задачи в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \Phi\left(\frac{x}{a}\right), \quad (1)$$

где $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \Phi\left(\frac{x}{a}\right)$ — потенциал, a — характерный масштаб длины, m — масса частицы. Для удобства расчётов представим гамильтониан (1) в безразмерной форме:

$$h = \frac{2ma^2}{\hbar^2} \mathcal{H} = -\frac{d^2}{du^2} + \Phi(u), \quad (2)$$

где $u = x/a$ — безразмерная координата. В трёхмерном случае решение уравнения Шрёдингера для радиальной части волновой функции также сводится к одномерной задаче с эффективным потенциалом: $\Phi_{\text{эфф}}(u) = \Phi(u) + \frac{l(l+1)}{u^2}$, где u — безразмерная радиальная координата, $l = 0, 1, 2, \dots$ — азимутальное квантовое число.

Основная цель метода факторизации — нахождение двух операторов:

$$a^+ = -\frac{d}{du} + \varphi_0(u), \quad a = \frac{d}{du} + \varphi_0(u), \quad (3)$$

называемых лестничными операторами. С их помощью гамильтониан (2) представляется в виде:

$$h = a^+ a + \varepsilon_0, \quad (4)$$

Функция $\varphi_0(u)$, называемая суперпотенциалом, удовлетворяет уравнению Риккати:

$$\begin{aligned} (a^+ a + \varepsilon_0)\psi &= \left(-\frac{d}{du} + \varphi_0\right) \left(\frac{d}{du} + \varphi_0\right) \psi + \varepsilon_0 \psi \\ &= \left(-\frac{d}{du} + \varphi_0\right) \left(\frac{d\psi}{du} + \varphi_0 \psi\right) + \varepsilon_0 \psi, \end{aligned}$$

$$= \varphi_0^2 \psi + \varphi_0 \frac{d\psi}{du} - \frac{d\varphi_0}{du} \psi - \varphi_0 \frac{d\psi}{du} - \frac{d^2\psi}{du^2} + \varepsilon_0 \psi = (-\varphi_0' + \varphi_0^2) \psi - \frac{d^2\psi}{du^2}, \quad (5)$$

$$(-\varphi_0' + \varphi_0^2) \psi - \frac{d^2\psi}{du^2} = h\psi = \left(-\frac{d^2}{du^2} + \Phi(u) \right) \psi \Rightarrow$$

$$-\varphi_0'(u) + \varphi_0^2(u) + \varepsilon_0 = \Phi(u). \quad (6)$$

Волновая функция основного состояния $\psi_0(u)$ определяется из уравнения:

$$\psi_0(u) = A \exp \left(- \int \varphi_0(u) du \right). \quad (7)$$

где A — константа нормировки. В рамках суперсимметричной квантовой механики гамильтониану h (4) ставится в соответствие гамильтониан-партнер:

$$\tilde{h} = -\frac{d^2}{du^2} + \tilde{\Phi}(u) = aa^+ + \varepsilon_0, \quad (8)$$

причём партнёрские потенциалы $\Phi(u)$ и $\tilde{\Phi}(u)$ связаны соотношением:

$$\tilde{\Phi}(u) = \Phi(u) + 2\varphi_0'(u). \quad (9)$$

Определим два гамильтониана партнера следующими соотношениями

$$h_1 = h - \varepsilon_0 = a^+ a, h_2 = \tilde{h} - \varepsilon_0 = aa^+. \quad (10)$$

Запишем для них уравнения Шредингера

$$h_1 \psi_n^{(1)} = \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(1)}, h_2 \psi_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(2)} \psi_n^{(2)}. \quad (11)$$

Используя эти уравнения, получим следующие уравнения

$$\begin{aligned} h_1 a^+ \psi_n^{(2)} &= a^+ a a^+ \psi_n^{(2)} = a^+ h_2 \psi_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(2)} a^+ \psi_n^{(2)}, \\ h_2 a \psi_n^{(1)} &= a a^+ a \psi_n^{(1)} = a h_1 \psi_n^{(1)} = \varepsilon_n^{(1)} a \psi_n^{(1)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Из уравнений (9)-(11) следует, что собственные значения и собственные функции гамильтонианов h_1 и h_2 связаны соотношениями

$$\varepsilon_n^{(2)} = \varepsilon_{n+1}^{(1)},$$

$$\Psi_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n+1}^{(1)}}} a \Psi_n^{(1)}, \Psi_{n+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{n1}^{(2)}}} a^+ \Psi_n^{(2)}. \quad (13)$$

На рисунке 2 представлены схематично уровни энергии гамильтонианов партнеров $h_{1,2}$, а также показано, как, зная собственные функции гамильтониана h_1 , определить собственные функции гамильтониана h_2 , используя лестничные операторы.

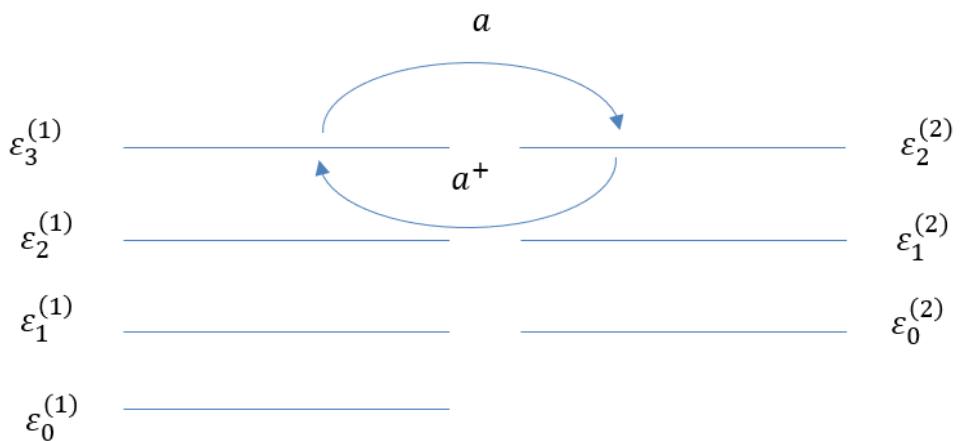


Рисунок 2. Схема уровней энергии гамильтонианов партнеров $h_{1,2}$.

Зная волновую функцию основного состояния, соответствующую гамильтониану h_1 , можно найти суперпотенциал φ_0 . Полученные операторы a^+ и a из уравнения (3) можно использовать для факторизации гамильтониана h_1 . Также известно, что волновая функция основного состояния парного гамильтониана h_2 определяется из первого возбужденного состояния h_1 через применение оператора a . Это позволяет провести повторную факторизацию второго гамильтониана с использованием φ_0 . Партнёр этой факторизации — новый гамильтониан h_3 . Каждый следующий гамильтониан будет иметь на одно связанное состояние меньше, и этот процесс можно продолжать, пока не исчерпаются все связанные состояния. Таким образом, если задача с потенциалом для h_1 является точно решаемой, можно получить собственные значения и функции для всей иерархии гамильтонианов, созданной последовательной факторизацией. И наоборот, если известны волновые функции основного со-

стояния всех гамильтонианов в иерархии, можно восстановить решение исходной задачи. Теперь конкретизируем.

Если энергия основного состояния гамильтониана h_1 равна нулю, он может быть представлен в виде произведения двух линейных дифференциальных операторов. Очевидно, если основное состояние имеет энергию ε_0 и собственную функцию $\Psi_n^{(1)}$, то с учётом уравнения (2), гамильтониан можно записать в виде:

$$h_1 = a_1^+ a_1 + \varepsilon_0^{(1)} = -\frac{d}{du} + \Phi_1(u), \quad (14)$$

где

$$a_1 = \frac{d}{du} + \varphi_1(u), \quad a_1^+ = -\frac{d}{du} + \varphi_1(u), \quad \Phi_1(u) = -\frac{d \ln(\Psi_0^{(1)})}{du}, \quad (15)$$

Тогда гамильтониан партнер задается формулой

$$h_2 = a_1 a_1^+ + \varepsilon_0^{(1)} = -\frac{d^2}{du^2} + \Phi_2(u), \quad (16)$$

где

$$\Phi_2(u) = \varphi_1^2 + \varphi_1' + \varepsilon_0^{(1)} = \Phi_1(u) + 2\varphi_1' = \Phi_1(u) - 2 \frac{d^2}{du^2} \ln(\Psi_0^{(1)}), \quad (17)$$

Введем обозначение $\varepsilon_n^{(m)}$, n обозначает энергетический уровень, а (m) относится к m -му гамильтониану h_m . Собственные значения энергии и собственные функции двух гамильтонианов h_1 и h_2 связаны формулой

$$\varepsilon_{n+1}^{(1)} = \varepsilon_n^{(2)}, \quad \Psi_n^{(2)} = \left(\varepsilon_2^{(1)} - \varepsilon_1^{(1)} \right)^{-1/2} a \Psi_1^{(2)}, \quad (18)$$

Теперь начнем с h_2 , энергия основного состояния которого равна $\varepsilon_0^{(2)} = \varepsilon_1^{(1)}$. Можно аналогичным образом создать третий гамильтониан h_3 в качестве гамильтониана партнера h_2 , поскольку мы можем записать h_2 в виде:

$$h_2 = a_1 a_1^+ + \varepsilon_0^{(1)} = a_2^+ a_2 + \varepsilon_1^{(1)}, \quad (19)$$

где

$$a_2 = \frac{d}{du} + \varphi_2(u), a_2^+ = -\frac{d}{du} + \varphi_1(u), \Phi_2(u) = -\frac{d \ln(\psi_0^{(2)})}{du}, \quad (20)$$

Продолжая тем же образом, получаем

$$h_3 = a_2 a_2^+ + \varepsilon_1^{(1)} = -\frac{d^2}{du^2} + \Phi_3(u), \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_3(u) &= \varphi_2^2 + \varphi_2' + \varepsilon_1^{(1)} = \Phi_2(u) - 2 \frac{d^2}{du^2} \ln(\psi_0^{(2)}) \\ &= \Phi_1(u) - 2 \frac{d^2}{du^2} \ln(\psi_0^{(1)} \psi_0^{(2)}), \end{aligned} \quad (22)$$

Кроме того

$$\begin{aligned} \varepsilon_n^{(3)} &= \varepsilon_{n+1}^{(2)} = \varepsilon_{n+2}^{(1)} \\ \psi_n^{(3)} &= \left(\varepsilon_{n+1}^{(2)} - \varepsilon_0^{(2)} \right)^{-1/2} a_2 \psi_{n+1}^{(2)} = \\ &\quad \left(\varepsilon_{n+1}^{(1)} - \varepsilon_1^{(1)} \right)^{-1/2} \left(\varepsilon_{n+1}^{(1)} - \varepsilon_0^{(1)} \right)^{-1/2} a_2 a_1 \psi_{n+2}^{(1)}, \end{aligned} \quad (23)$$

таким образом, ясно, что если исходный гамильтониан h_0 имеет p (≥ 1) связанных состояний с собственными значениями $\varepsilon_n^{(1)}$ и собственными функциями $\psi_n^{(1)}$ $0 \leq n \leq (p-1)$, тогда всегда можно выстроить иерархию $(p-1)$ гамильтонианов h_2, \dots, h_p такую, что m -й член иерархии гамильтонианов (h_m) имеет тот же спектр собственных значений, что и h_1 , за исключением того, что первые $(m-1)$ собственные значения h_1 отсутствуют в h_m . В частности, мы всегда можем записать ($m = 1, 2, \dots, p$) :

$$h_m = a_m^+ a_m + \varepsilon_{m-1} = -\frac{d^2}{du^2} + \Phi_m(u), \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} a_m &= \frac{d}{du} + \Phi_m(u), \Phi_m(u) = -\frac{d \ln(\psi_0^{(m)})}{du}, \\ \varepsilon_n^{(m)} &= \varepsilon_{n+1}^{(m-1)} = \dots = \varepsilon_{n+m-1}^{(1)}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\Psi_n^{(m)} = \left(\varepsilon_{m+n-1}^{(1)} - \varepsilon_{m-2}^{(1)} \right)^{-1/2} \cdots \left(\varepsilon_{m+n-1}^{(1)} - \varepsilon_0^{(1)} \right)^{-1/2} a_{m-1} \cdots a_1 \Psi_{n+m-1}^{(1)},$$

$$\Phi_m(u) = \Phi_1(u) - 2 \frac{d^2}{du^2} \ln \left(\Psi_0^{(1)} \cdots \Psi_0^{(m-1)} \right). \quad (26)$$

Метод факторизации порождает иерархию гамильтонианов $h_n = -\frac{d^2}{du^2} + \Phi_n(u)$ ($n = 0, 1, 2, \dots, h_0 = h$), которые факторизуются и удовлетворяют условию [2,4]:

$$h_{n+1} = a_{n+1}^+ a_{n+1} + \varepsilon_{n+1} = a_n a_n^+ + \varepsilon_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (27)$$

где:

$$a_n^\pm = \mp \frac{d}{du} + \varphi_n(u). \quad (28)$$

Подстановка (28) в (27) даёт рекуррентное уравнение:

$$-(\varphi'_{n+1} + \varphi'_n) + \varphi_{n+1}^2 - \varphi_n^2 + \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (29)$$

1.2 Инвариантность формы

Если потенциал $\Phi(u)$ зависит от набора параметров $\mathbf{w} = \{w_0, w_1, \dots\}$, то, согласно концепции форм-инвариантности Генденштейна [29], партнёрский потенциал $\tilde{\Phi}(u)$ имеет схожую координатную зависимость, но с другим набором параметров. Предполагая связь между партнёрскими потенциалами [29]:

$$\tilde{\Phi}(u, \mathbf{w}) = \Phi(u, g(\mathbf{w})) + R(g(\mathbf{w})), \quad (30)$$

где g — преобразование вектора параметров \mathbf{w} , а $R(g(\mathbf{w}))$ не зависит от u , полный энергетический спектр может быть найден аналитически. Пусть $\Psi_0(u, \mathbf{w})$ — волновая функция основного состояния гамильтониана $h(\mathbf{w})$ с собственным значением $\varepsilon_0 = L(\mathbf{w})$, и $a\Psi_0(u, \mathbf{w}) = 0$. Тогда энергии и волновые функции возбуждённых состояний определяются как [33]:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + \sum_{k=1}^n R(g^k(\mathbf{w})), \quad (31)$$

$$\Psi_n = a^+(w) \cdots a^+(g^{n-1}(w)) \Psi_0(u, g^n(w)), \quad (32)$$

где:

$$R(g^k(w)) = L(g^k(w)) - L(g^{k-1}(w)) > 0, \quad g^k(w) = \underbrace{g(g(\cdots g(w)))}_{k \text{ раз}}. \quad (33)$$

Основная сложность применения суперсимметричной квантовой механики заключается в отсутствии универсального метода построения функции преобразования g для параметров потенциала и соответствующего суперпотенциала. Как правило, для точно решаемых потенциалов функция g имеет вид: $g(w) = w \pm \kappa$ или $g(w) = qw$, где κ и q — константы.

1.3 Унификация метода факторизации

Анализ известных точно решаемых потенциалов (см. таблицы 1, 2) показывает, что их можно представить в унифицированной форме:

$$\Phi(u) = w_{-2}f^{-2}(u) + w_{-1}f^{-1}(u) + w_0 + w_1f(u) + w_2f^2(u), \quad (34)$$

где $f(u)$ — потенциал-образующая функция, удовлетворяющая уравнению:

$$f'(u) = \kappa_0 + \kappa_1f(u) + \kappa_2f^2(u). \quad (35)$$

Суперпотенциал основного состояния $\varphi_0(u)$ записывается в виде:

$$\varphi_0 = \alpha_0f + \beta_0 + \gamma_0f^{-1}, \quad (36)$$

$\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ — константы

а для возбуждённых состояний предлагается анзац:

$$\varphi_n = \alpha_nf + \beta_n + \gamma_nf^{-1}, \quad n \geq 1. \quad (37)$$

Подстановка (36) и (37) в уравнения (6) и (29) позволяет вычислить параметры суперпотенциалов и условия на коэффициенты потенциала.

Потенциал	$\Phi(u)$
Одномерный гармонический осциллятор $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$	u^2
Потенциал Морзе $V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2ma^2} \left(e^{-\frac{2x}{a}} - 2e^{-\frac{x}{a}} \right)$	$\lambda^2(e^{-2u} - 2e^{-u})$
Потенциал Хюльтена $V(x) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\lambda}{e^{\frac{x}{a}} - 1}$	$-\frac{\lambda}{e^u - 1}$
Потенциал Розена-Морзе $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)}{\sin^2(x/a)} - 2b \cot(x/a) \right)$	$\frac{\mu(\mu-1)}{\sin^2 u} - 2b \cot(u)$
Потенциал Эккарта $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2(x/a)} - 2b \coth(x/a) \right)$	$\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2 u} - 2b \coth(u)$
Потенциал Пёшля-Теллера (I) $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)}{\sin^2(x/a)} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2(x/a)} \right)$	$\frac{\mu(\mu-1)}{\sin^2 u} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 u}$
Потенциал Пёшля-Теллера (II) $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2(x/a)} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2(x/a)} \right)$	$\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2 u} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2 u}$
Потенциал Пёшля-Теллера (III) $V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\lambda - \mu \cosh(x/a)}{\sinh^2(x/a)}$	$\frac{\lambda - \mu \cosh(u)}{\sinh^2(u)}$
Потенциал Денга-Фана $V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda}{2ma^2} \left(1 - \frac{b}{e^{\frac{x}{a}} - 1} \right)^2$	$\lambda \left(1 - \frac{b}{e^u - 1} \right)^2$
Гиперболический молекулярный потенциал $V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda}{2ma^2} (1 - b \coth(x/a))^2$	$\lambda(1 - b \coth(u))^2$

<p>Трехмерный гармонический осциллятор</p> $V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$	$u^2 + \frac{l(l+1)}{u^2}$
<p>Водородоподобный потенциал</p> $V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Zme^2}$	$\frac{l(l+1)}{u^2} - \frac{2}{u}$
<p>Потенциал Мэннинга-Розена</p> $V(r) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)e^{-\frac{2r}{a}}}{(1-e^{-\frac{r}{a}})^2} - \frac{be^{-\frac{r}{a}}}{1-e^{-\frac{r}{a}}} + \frac{a^2 l(l+1)}{r^2} \right) \approx$ $\approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)e^{-\frac{2r}{a}}}{(1-e^{-\frac{r}{a}})^2} - \frac{be^{-\frac{r}{a}}}{1-e^{-\frac{r}{a}}} + \frac{l(l+1)e^{-\frac{r}{a}}}{(1-e^{-\frac{r}{a}})^2} \right)$	$\frac{\mu(\mu-1) + l(l+1)}{(e^u - 1)^2} - \frac{(b - l(l+1))}{e^u - 1}$
<p>Модифицированный потенциал Юкавы</p> $V(r) = -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \approx$ $\approx -\frac{\hbar^2 \lambda}{2ma^2} \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{1-e^{-\frac{r}{a}}} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{l(l+1)e^{-\frac{r}{a}}}{(1-e^{-\frac{r}{a}})^2}$	$-\frac{l(l+1)}{(e^u - 1)^2} - \frac{l(l+1) + \lambda}{e^u - 1}$

Таблица 1. Примеры потенциалов, для которых известны точные решения

Потенциал	$f(u)$	κ_0	κ_1	κ_2	w_{-2}	w_{-1}	w_0	w_1	w_2
Одномерный гармонический осциллятор	u	1	0	0	0	0	0	0	1
Потенциал Морзе	e^{-u}	0	-1	0	0	0	0	$-2\lambda^2$	λ^2
Потенциал Хюльтена	$-\frac{1}{e^u - 1}$	0	-1	1	0	0	0	λ	0
Потенциал Розена-Морзе	$ctg u$	-1	0	-1	0	0	$\mu(\mu-1)$	$-2b$	$\mu(\mu-1)$
Потенциал Эккарта	$\coth u$	1	0	-1	0	0	$-\mu(\mu-1)$	$-2b$	$\mu(\mu-1)$
Потенциал Пёшля-Теллера (I)	$\tg u$	1	0	1	$\mu(\mu-1)$	0	$\mu(\mu-1) + \lambda(\lambda-1)$	0	$\lambda(\lambda-1)$
Потенциал Пёшля-Теллера (II)	$\tanh u$	1	0	-1	$\mu(\mu-1)$	0	$-\mu(\mu-1) - \lambda(\lambda-1)$	0	$\lambda(\lambda-1)$
Потенциал Пёшля-Теллера (III)	$\tanh\left(\frac{u}{2}\right)$	1/2	0	-1/2	$\frac{\lambda-\mu}{4}$	0	-1/2	0	$\frac{\lambda+\mu}{4}$
Потенциал Денга-Фана	$-\frac{1}{e^u - 1}$	0	-1	1	0	0	λ	$2\lambda b$	λb^2
Гиперболический молекулярный потенциал	$\coth u$	1	0	-1	0	0	λ	$-2\lambda b$	λb^2
Трехмерный гармонический осциллятор	u	1	0	0	$l(l+1)$	0	0	0	1
Водородоподобный потенциал	$\frac{1}{u}$	0	0	-1	0	0	0	-2	$l(l+1)$
Потенциал Мэннинга-Розена	$-\frac{1}{e^u - 1}$	0	-1	1	0	0	0	$b - l(l+1)$	$\mu(\mu-1) + l(l+1)$
Модифицированный потенциал Юкавы	$-\frac{1}{e^u - 1}$	0	-1	1	0	0	0	$\lambda - l(l+1)$	$l(l+1)$

Таблица 2. Значения коэффициентов w_i ($i=-2,-1,0,1,2$) и κ_i ($i=0,1,2$) для потенциалов из таблицы 1

Учитывая уравнения (34), (35) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях функции $f(u)$, можно получить следующую систему разностных уравнений для определения коэффициентов $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ и собственных значений ε_n :

$$\begin{aligned}
 n &= 0 \\
 f^2: & -\alpha_0 \kappa_1 + \alpha_0^2 = w_2, \\
 f: & -\alpha_0 \kappa_1 + 2\alpha_0 \beta_0 = w_1 \\
 f^{-1}: & \gamma_0 \kappa_1 + 2\beta_0 \gamma_0 = w_{-1}, \\
 f^{-2}: & \gamma_0 \kappa_0 + \gamma_0^2 = w_{-2}, \\
 f^0: & \varepsilon_0 = w_0 + \alpha_0 \kappa_0 - \beta_0^2 - \gamma_0(\kappa_2 + 2\alpha_0). \\
 n &\geq 1 \\
 f^2: & -(\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_1 + \alpha_{n+1}^2 - \alpha_n^2 = 0, \\
 f: & -(\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_1 + 2(\alpha_{n+1} \beta_{n+1} - \alpha_n \beta_n) = 0, \\
 f^{-1}: & (\gamma_{n+1} + \gamma_n) \kappa_1 + 2(\beta_{n+1} \gamma_{n+1} - \beta_n \gamma_n) = 0, \\
 f^{-2}: & (\gamma_{n+1} + \gamma_n) \kappa_0 + \gamma_{n+1}^2 - \gamma_n^2 = 0, \\
 \varepsilon_{n+1}: & \varepsilon_n + (\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_0 - (\beta_{n+1}^2 - \beta_n^2) - (\gamma_{n+1} + \gamma_n) \kappa_2 \\
 &\quad - 2(\alpha_{n+1} \gamma_{n+1} - \alpha_n \gamma_n).
 \end{aligned} \tag{38}$$

Из систем (38)-(39) видно, что число уравнений превышает число неизвестных параметров $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$. В общем случае это накладывает дополнительные условия на коэффициенты потенциала. Однако для точно решаемых потенциалов (примеры приведены в Таблице 1) избыточные уравнения отсутствуют.

Глава 2. Применение унифицированного метода факторизации к точно решаемым моделям

2.1 Факторизация типа А

Исходя из того, какие коэффициенты будут равными нулю, потенциалы можно разделить на два класса, факторизуемых разными способами. Для первого класса значения параметров равны:

$$w_{-2} = 0, w_{-1} = 0, \gamma_n = 0 \ (n = 0, 1, 2, \dots).$$

При этих условиях система уравнений (38), (39) упрощается:

$$n = 0:$$

$$\begin{aligned} -\alpha_0 \kappa_2 + \alpha_0^2 &= w_2, \\ -\alpha_0 \kappa_1 + 2\alpha_0 \beta_0 &= w_1, \\ \varepsilon_0 &= w_0 + \alpha_0 \kappa_0 - \beta_0^2. \end{aligned} \tag{40}$$

$$n \geq 1:$$

$$\begin{aligned} -(\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_2 + \alpha_{n+1}^2 - \alpha_n^2 &= 0, \\ -(\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_1 + 2(\alpha_{n+1} \beta_{n+1} - \alpha_n \beta_n) &= 0, \\ \varepsilon_{n+1} &= \varepsilon_n + (\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_0 - (\beta_{n+1}^2 - \beta_n^2). \end{aligned} \tag{41}$$

Решение системы (40) позволяет определить коэффициенты α_0, β_0 и энергию основного состояния ε_0 . Для возбуждённых состояний ($n \geq 1$) рекуррентные соотношения (41) дают последовательность параметров α_n, β_n и энергий ε_n .

$$\alpha_0^\pm = \frac{\kappa_2}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_2^2}{4} + w_2}, \quad \alpha_n = \alpha_0 + \kappa_2 n,$$

$$\beta_n = \begin{cases} \frac{\kappa_1 \left(n + \frac{\alpha_0}{\kappa_2} \right)}{2} + \frac{1}{2\kappa_2} \left(w_1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} w_2 \right) (n + \alpha_0/\kappa_2)^{-1}, & \kappa_2 \neq 0, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{w_1}{\alpha_0} + \kappa_1 \right) + \kappa_1 n, & \kappa_2 = 0, \end{cases}$$

$$\varepsilon_n = \begin{cases} \left(w_0 - \frac{\kappa_1}{2\kappa_2} w_1 + \frac{\kappa_1^2 - 2\kappa_0\kappa_2}{2\kappa_2^2} w_2 \right) + \\ \left(\kappa_0\kappa_2 - \frac{\kappa_1^2}{4} \right) \left(n + \frac{\alpha_0}{\kappa_2} \right)^2 - \frac{(w_1 - \kappa_1 w_2/\kappa_2)^2}{4\kappa_2^2} \left(n + \frac{\alpha_0}{\kappa_2} \right)^{-2}, & \kappa_2 \neq 0, \\ w_0 + \alpha_0\kappa_0(2n + 1) - \left(\kappa_1 n + \frac{1}{2} \left(\frac{w_1}{\alpha_0} + \kappa_1 \right) \right)^2, & \kappa_2 = 0. \end{cases} \quad (42)$$

Таким образом, предложенный алгоритм унифицирует расчёт спектра для широкого класса потенциалов, сводя задачу к решению систем линейных уравнений. Это значительно упрощает анализ условий разрешимости и построение точных решений.

В качестве примера проведем вычисления для потенциала Хюльтена:

$$\Phi(u) = -\frac{\lambda}{e^u - 1}, f(u) = -\frac{1}{e^u - 1}, \quad (43)$$

Запишем выражение суперпотенциала

$$\varphi_n = \alpha_n \frac{1}{e^u - 1} + \beta_n, \quad (44)$$

Найдем производную суперпотенциала для возбужденных состояний

$$\varphi'_n = -\alpha_n \frac{e^u}{(e^u - 1)^2} = \alpha_n (-f(u) - f(u)^2), \quad (45)$$

Возведем суперпотенциал в квадрат

$$\varphi_n^2 = \alpha_n^2 f(u)^2 + \beta_n^2 + 2\alpha_n\beta_n f(u). \quad (46)$$

Подставим полученные выражения в уравнение Рикатти (6) для основного состояния

$$n = 0:$$

$$\alpha_0 f(u) + \alpha_0 f(u)^2 + \alpha_0^2 f(u)^2 + \beta_0^2 + 2\alpha_0 \beta_0 f(u) + \varepsilon_0 = -\lambda. \quad (47)$$

Составим систему уравнений, приравняв коэффициенты при одинаковых степенях $f(u)$

$$\begin{aligned} f^2: \alpha_0 + \alpha_0^2 &= 0, \\ f^1: \alpha_0 + 2\alpha_0 \beta_0 + \lambda &= 0, \\ f^0: \beta_0^2 + \varepsilon_0 &= 0. \end{aligned} \quad (48)$$

Решаем полученную систему и получаем

$$\begin{aligned} \alpha_0(\alpha_0 + 1) &= 0, \\ \alpha_0 = 0; \alpha_0 &= -1, \\ -1 - 2\beta_0 + \lambda &= 0, \\ \beta_0 &= \frac{1}{2}(\lambda - 1), \\ \varepsilon_0 &= -\frac{1}{4}(\lambda - 1)^2. \end{aligned} \quad (49)$$

Подставим полученные выше выражения (44-46) в уравнение для возбужденных состояний (29)

$$\begin{aligned} -(\alpha_n(-f - f^2) + \alpha_{n+1}(-f - f^2)) + \alpha_{n+1}^2 f^2 + \\ + \beta_{n+1}^2 + 2\alpha_{n+1}\beta_{n+1}f - \alpha_n^2 f^2 - \beta_n^2 - 2\alpha_n\beta_n f + \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n &= 0. \end{aligned} \quad (50)$$

Снова, приравниваем коэффициенты при равных степенях функции $f(u)$

$$\begin{aligned} f^2: \alpha_n + \alpha_{n+1} + \alpha_{n+1}^2 - \alpha_n^2 &= 0, \\ f^1: \alpha_n + \alpha_{n+1} + 2\alpha_{n+1}\beta_{n+1} - 2\alpha_n\beta_n &= 0, \\ f^0: \beta_{n+1}^2 - \beta_n^2 + \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n &= 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Решаем полученную систему (51)

$$(\alpha_n + \alpha_{n+1}) + (\alpha_{n+1} + \alpha_n)(\alpha_{n+1} - \alpha_n) = 0, \quad (52)$$

$$(\alpha_n + \alpha_{n+1})(-1 + \alpha_{n+1} - \alpha_n) = 0, \quad (53)$$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + 1, \quad (54)$$

решая разностное уравнение, получим

$$\alpha_n = -(n + 1), \quad (55)$$

$$\begin{aligned} (\alpha_n + \alpha_{n+1}) + 2\alpha_{n+1}\beta_{n+1} - 2\alpha_n\beta_n &= 0, \\ \alpha_n + \alpha_{n+1} &= -(2n + 3), \end{aligned} \quad (56)$$

используя замену $\delta_n = \alpha_n \beta_n$

$$\begin{aligned}\alpha_{n+1} \beta_{n+1} &= \alpha_n \beta_n + \left(n + \frac{3}{2}\right), \\ \delta_{n+1} &= \delta_n + n + \frac{3}{2},\end{aligned}\tag{57}$$

$$\delta_n^0 = 0, \quad \delta'_n = An^2 + Bn + C, \tag{58}$$

$$\begin{aligned}A(n+1)^2 + B(n+1) + C &= An^2 + Bn + C + n + \frac{3}{2}, \\ A(2n+1) + B &= n + \frac{3}{2},\end{aligned}\tag{59}$$

$$n: 2A = 1; n^0: A + B = \frac{3}{2}, \tag{60}$$

$$A = \frac{1}{2}; B = 1, \tag{61}$$

$$\begin{aligned}\delta_n &= C + \frac{n^2}{2} + n, \\ \delta_0 &= \alpha_0 \beta_0 = \frac{1-\lambda}{2},\end{aligned}\tag{62}$$

$$\begin{aligned}\delta_n &= \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} + \frac{n^2}{2} + n = \alpha_n \beta_n, \\ \delta_n &= \frac{(n+1)^2}{2} - \frac{\lambda}{2},\end{aligned}\tag{63}$$

$$\beta_n = -\frac{(n+1)}{2} + \frac{\lambda}{2(n+1)}, \tag{64}$$

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \beta_n^2 - \beta_{n+1}^2, \tag{65}$$

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{4} \left(n + 1 - \frac{\lambda}{n+1} \right)^2. \tag{66}$$

2.2 Факторизация типа Б

Для второго класса значения параметров равны:

$$w_1 = 0, \quad w_{-1} = 0, \quad \kappa_1 = 0, \quad \beta_n = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Это приводит к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned}
& n = 0: \\
& -\alpha_0 \kappa_2 + \alpha_0^2 = w_2, \\
& \gamma_0 \kappa_0 + \gamma_0^2 = w_{-2}, \\
& \varepsilon_0 = w_0 + \alpha_0 \kappa_0 - \gamma_0 (\kappa_2 + 2\alpha_0),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& n \geq 1: \\
& -(\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_2 + \alpha_{n+1}^2 - \alpha_n^2 = 0, \\
& (\gamma_{n+1} + \gamma_n) \kappa_0 + \gamma_{n+1}^2 - \gamma_n^2 = 0, \\
& \varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + (\alpha_{n+1} + \alpha_n) \kappa_0 - (\gamma_{n+1} + \gamma_n) \kappa_2 - 2(\alpha_{n+1} \gamma_{n+1} - \alpha_n \gamma_n).
\end{aligned} \tag{67}$$

Решение системы уравнений (53) имеет вид:

$$\begin{aligned}
& \alpha_0^\pm = \frac{\kappa_2}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_2^2}{4} + w_2}, \quad \alpha_n = \alpha_0 + \kappa_2 n, \\
& \gamma_0 = -\frac{\kappa_0}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_0^2}{4} + w_{-2}}, \quad \gamma_n = \gamma_0 - \kappa_0 n, \\
& \varepsilon_n = \begin{cases} \left(w_0 - \frac{\kappa_0}{\kappa_2} w_2 - \frac{\kappa_2}{\kappa_0} w_{-2} \right) + 4\kappa_0 \kappa_2 \left(n + \frac{\alpha_0 \kappa_0 - \gamma_0 \kappa_2}{2\kappa_0 \kappa_2} \right)^2, & \kappa_2 \neq 0, \\ w_0 - 2\alpha_0 \gamma_0 + \alpha_0 \kappa_0 (4n + 1), & \kappa_2 = 0. \end{cases}
\end{aligned} \tag{68}$$

Рассчитаем энергетический спектр потенциала Пёшля-Теллера (I), используя общее решение (53)

$$\Phi(u) = \frac{\mu(\mu - 1)}{\sin^2 u} + \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cos^2 u} \tag{69}$$

$$\begin{aligned}
& \kappa_0 = 1; \kappa_1 = 0; \kappa_2 = 1 \\
& w_{-2} = \mu(\mu - 1); w_{-1} = 0; w_0 = \mu(\mu - 1) + \lambda(\lambda - 1); w_1 = 0; w_2 = \lambda(\lambda - 1)
\end{aligned} \tag{70}$$

Подставим коэффициенты (56) и получим

$$\varphi_n = (n + \lambda) \operatorname{tg}(u) - \frac{\mu + n}{\operatorname{tg}(u)} \tag{71}$$

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_n = (\mu(\mu - 1) + \lambda(\lambda - 1) - \lambda(\lambda - 1) - \mu(\mu - 1)) + 4 \left(n + \frac{\lambda + \mu}{2} \right)^2 \\
& \varepsilon_n = 4 \left(n + \frac{\mu + \lambda}{2} \right)^2 = (2n + \lambda + \mu)^2
\end{aligned} \tag{72}$$

В таблице 3 представлены результаты вычислений по формулам (40)-(42) и (67)-(68) суперпотенциала $\varphi_n(u)$ и спектра энергии для потенциалов, представленных в таблице 1, соответствующих двум типам факторизации. Из таблицы 3 видно, что собственные значения, рассчитанные с помощью приведенной схемы, воспроизводят известные результаты.

Тип А ($\kappa_2=0$)		
Потенциал	$\varphi_n(u)$	ε_n
Одномерный гармонический осциллятор	u	$2n+1$
Потенциал Морзе	$-\lambda e^{-u} - \left(n + \frac{1}{2} - \lambda\right)$	$-\left(\lambda - \frac{1}{2} - n\right)^2,$ $n = 0, 1, \dots, \left[\lambda - \frac{1}{2}\right]$
Тип А ($\kappa_2 \neq 0$)		
Потенциал Хюльтена	$-\frac{n+1}{e^u - 1} + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{n+1} - (n+1) \right)$	$-\frac{1}{4} \left(\frac{\lambda}{n+1} - (n+1) \right)^2$
Потенциал Розена-Морзе	$-(n+\mu) \cot u + \frac{b}{n+\mu}$	$(n+\mu)^2 - \frac{b^2}{(n+\mu)^2}$
Потенциал Эккарта	$-(n+\mu) \coth u + \frac{b}{n+\mu}$	$-(n+\mu)^2 - \frac{b^2}{(n+\mu)^2}$
Потенциал Денга-Фана	$-\frac{n+\alpha_0}{e^u - 1} - \frac{1}{2} \left(n + \alpha_0 - \frac{b(b+2)\lambda}{n+\alpha_0} \right),$ $\alpha_0 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda b^2}$	$\lambda - \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda b(b+2)}{n+\alpha_0} - (n+\alpha_0) \right)^2$
Гиперболический молекулярный потенциал	$-(n+\alpha_0) \coth u + \frac{b\lambda}{n+\alpha_0},$ $\alpha_0 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda b^2}$	$\lambda(1+b^2) - (n+\alpha_0)^2 - \frac{b^2\lambda^2}{(n+\alpha_0)^2}$

Водородоподобный потенциал	$-\frac{n+l+1}{u} + \frac{1}{n+l+1}$	$-\frac{1}{(n+l+1)^2}$
Потенциал Мэннинга-Розена	$-\frac{n+\alpha_0}{e^u-1} - \frac{1}{2} \left(n+\alpha_0 - \frac{b+\mu(\mu-1)}{n+\alpha_0} \right),$ $\alpha_0 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \mu(\mu-1) + l(l+1)}$	$-\frac{1}{4} \left(n+\alpha_0 - \frac{b+\mu(\mu-1)}{(n+\alpha_0)} \right)^2$
Модифицированный потенциал Юка-вы	$-\frac{n+l+1}{e^u-1} - \frac{1}{2} \left(n+l+1 - \frac{\lambda}{n+l+1} \right)$	$-\frac{1}{4} \left((n+l+1) - \frac{\lambda}{(n+l+1)} \right)^2$
Тип В ($\kappa_2=0$)		
Трехмерный гармонический осциллятор	$u - \frac{n+l+1}{u}$	$4n+2l+3$
Тип В ($\kappa_2 \neq 0$)		
Потенциал Пёшля-Теллера (I)	$(n+\lambda) \tan u - \frac{n+\mu}{\tan u}$	$(2n+\mu+\lambda)^2$
Потенциал Пёшля-Теллера (II)	$-(n+1-\lambda) \tanh u - \frac{n+1-\mu}{\tanh u}$	$-(\mu+\lambda-2-2n)^2,$ $n = 0, 1, \dots, \left[\frac{\mu+\lambda}{2} - 1 \right]$
Потенциал Пёшля-Теллера (III)	$-\frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda + \mu} \right) \tanh \left(\frac{u}{2} \right) +$ $-\frac{1}{2} \frac{n + \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda - \mu}}{\tanh \left(\frac{u}{2} \right)}$	$-\frac{1}{4} (n_0 - 1 - 2n)^2,$ $n_0 = \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda + \mu}$ $+ \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda - \mu},$ $n = 0, 1, 2, \dots, \left[\frac{n_0 - 1}{2} \right]$

Таблица 3. Результаты расчётов суперпотенциалов $\varphi_n(u)$ и энергетического спектра для потенциалов, представленных в Таблице 1.

Таким образом, приведенная ниже схема вычисления суперпотенциалов и собственных значений гамильтониана позволяет унифицировать и алгоритмизировать метод факторизации. На рисунке 3 показана блок-схема алгоритма применения метода факторизации для расчета энергетического спектра в соответствии с предложенной схемой расчета.

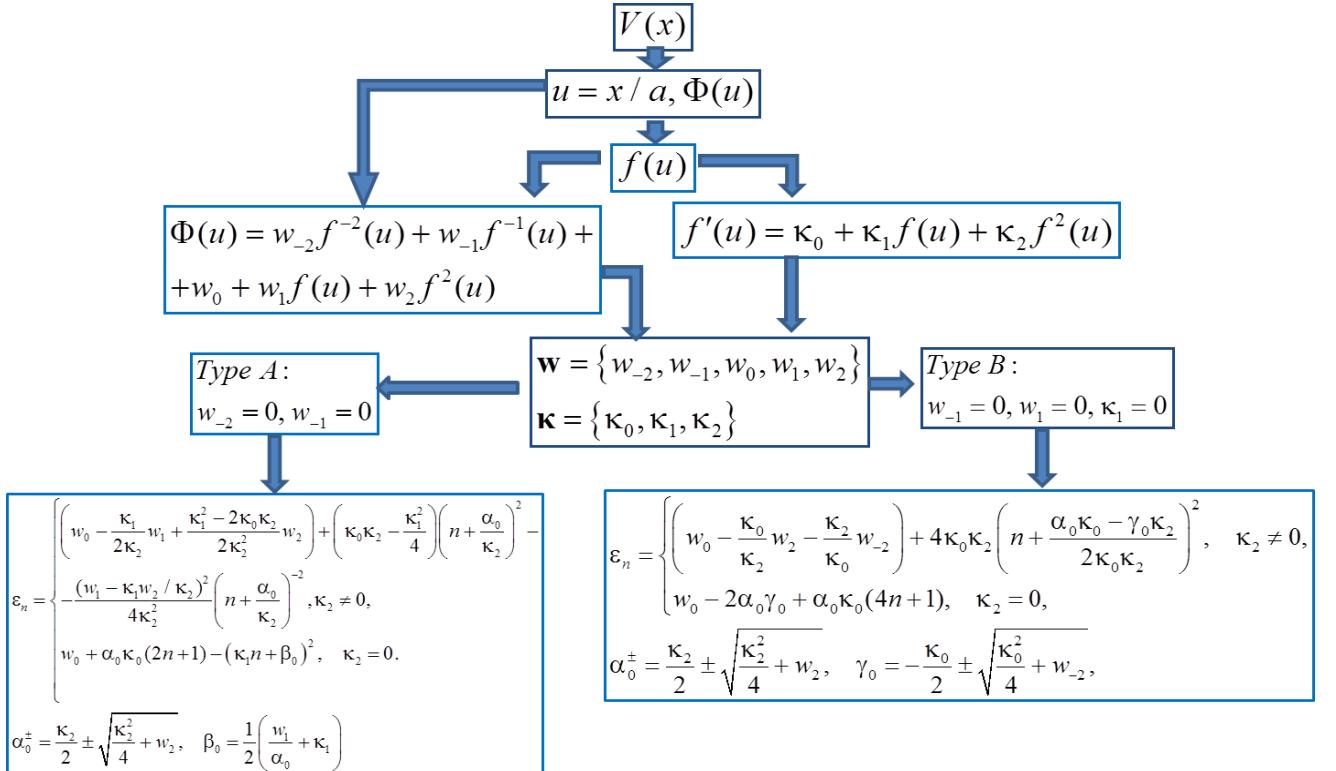


Рисунок 3. Блок-схема алгоритма расчета энергетического спектра точно разрешимого потенциала с использованием унифицированного метода факторизации

Глава 3. Применение унифицированного метода факторизации к условно точно-решаемым моделям

В предыдущем разделе мы представили унифицированную схему для вычисления энергетического спектра с использованием метода факторизации для точно решаемых потенциалов. В этом разделе мы обобщаем предложенный алгоритм метода факторизации для вычисления энергетического спектра гамильтонианов с условно точно решаемыми потенциалами.

3.1 Собственные значения и условия ограничения

Простейший случай для условно точно решаемого потенциала возникает в потенциале (34), когда $w_{\pm 1}, \kappa_1 \neq 0$. В этом случае в системе уравнений (38)-(39) есть одно избыточное уравнение, которое накладывает условие на параметры потенциала. Первое и четвертое уравнения в системах (38) и (39) независимо определяют коэффициенты α_n и γ_n :

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \alpha_0 + \kappa_2 n, \quad \gamma_n = \gamma_0 - \kappa_0 n, \\ \alpha_0^\pm &= \frac{\kappa_2}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_2^2}{4} + w_2}, \quad \gamma_0 = -\frac{\kappa_0}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_0^2}{4} + w_{-2}}. \end{aligned} \quad (73)$$

Второе и третье уравнения дают два различных выражения для коэффициентов β_n

$$\beta_n = \begin{cases} \frac{\kappa_1(n + \alpha_0/\kappa_2)}{2} + \frac{1}{2\kappa_2} \left(w_1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_2} w_2 \right) (n + \alpha_0/\kappa_2)^{-1}, & \kappa_2 \neq 0, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{w_1}{\alpha_0} + \kappa_1 \right) + \kappa_1 n, & \kappa_2 = 0 \end{cases} \quad (74)$$

$$\beta_n = \begin{cases} -\frac{\kappa_1(n - \gamma_0/\kappa_0)}{2} - \frac{1}{2\kappa_0} \left(w_{-1} - \frac{\kappa_1}{\kappa_0} w_{-2} \right) (n - \gamma_0/\kappa_0)^{-1}, & \kappa_0 \neq 0, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{w_{-1}}{\gamma_0} - \kappa_1 \right) - \kappa_1 n, & \kappa_0 = 0 \end{cases} \quad (75)$$

Приравнивая правые части уравнений (74) и (75) и выбирая коэффициент w_1 как зависимый параметр, мы получаем следующее ограничивающее условие:

$$w_1 = \begin{cases} \frac{\kappa_1}{\kappa_2} w_2 + (\kappa_2 n + \alpha_0) \left\{ \kappa_1 \left(\frac{\gamma_0}{\kappa_0} - \frac{\alpha_0}{\kappa_2} - 2n \right) - \frac{w_{-1} - w_{-2}\kappa_1/\kappa_0}{(\kappa_0 n - \gamma_0)} \right\}, & \kappa_{0,2} \neq 0, \\ \alpha_0 \kappa_1 \left(\frac{\gamma_0}{\kappa_0} - 3n - 1 \right) - \frac{w_{-1} - w_{-2}\kappa_1/\kappa_0}{(\kappa_0 n - \gamma_0)}, & \kappa_2 = 0, \kappa_0 \neq 0, \\ \frac{\kappa_1}{\kappa_2} w_2 + (\kappa_2 n + \alpha_0) \left\{ \frac{w_{-1}}{\gamma_0} - \kappa_1 \left(3n + 1 + \frac{\alpha_0}{\kappa_2} \right) \right\}, & \kappa_2 \neq 0, \kappa_0 = 0, \\ \alpha_0 \left(\frac{w_{-1}}{\gamma_0} - 2\kappa_1(2n + 1) \right), & \kappa_{0,2} = 0. \end{cases} \quad (76)$$

Энергетический спектр определяется из последнего уравнения системы уравнений (41) и равен:

$$\varepsilon_n = \begin{cases} \varepsilon_0 + \frac{(w_{-1} - w_{-2}\kappa_1/\kappa_0)^2}{4\gamma_0^2} + \left(4\alpha_0 \kappa_0 + \frac{\gamma_0 \kappa_1^2}{2\kappa_0} - 4\gamma_0 \kappa_2 \right) n - \\ \frac{1}{4} (\kappa_1^2 - 16\kappa_0 \kappa_2) n^2 - \frac{(w_{-1} - w_{-2}\kappa_1/\kappa_0)^2}{4(\kappa_0 n - \gamma_0)^2}, & \kappa_0 \neq 0, \\ \varepsilon_0 + \left(2\kappa_0 \alpha_0 - \kappa_1^2 - \frac{\kappa_1 w_{-1}}{\gamma_0} - 2\gamma_0 \kappa_2 \right) n - (\kappa_1^2 - \kappa_0 \kappa_2) n^2, & \kappa_0 = 0. \end{cases} \quad (77)$$

В качестве демонстрации, для предложенной выше схемы для вычисления спектра условно точно-решаемого потенциала, рассмотрим смешанный потенциал Кулона и гармонического осциллятора в трех измерениях:

$$\Phi(u) = u^2 + \lambda u - \frac{\mu}{u} + \frac{l(l+1)}{u^2} \quad (78)$$

Для этого потенциала, согласно описанному выше алгоритму, мы имеем:

$$\begin{aligned} f(u) &= u, & \kappa_0 &= 1, & \kappa_1 &= 0, & \kappa_2 &= 0, & w_{-2} &= l(l+1), & w_{-1} &= -\mu, \\ w_0 &= 0, & w_1 &= \lambda, & w_2 &= 1 \end{aligned} \quad (79)$$

Тогда, согласно формулам, представленным выше, мы получаем:

$$\alpha_n = 1, \quad \gamma_n = -(n + l + 1), \quad \beta_n = \frac{\mu}{2(n + l + 1)},$$

$$\varepsilon_n = 4n + 2l + 3 - \frac{\mu^2}{4(n + l + 1)^2}, \quad (80)$$

условие ограничения: $\lambda = \frac{\mu}{n + l + 1}$

Результаты для спектра и ограничивающего условия на параметр α совпадают с результатами [32], полученными методом суперсимметричной квантовой механики и подтвержденными численным решением уравнения Шрёдингера. Этот результат указывает на согласованность предложенного алгоритма для применения метода факторизации к условно точно решаемым потенциалам.

3.2 Обобщение унифицированного метода факторизации на случай потенциала в виде полинома Лорана

Представленная унифицированная схема метода факторизации позволяет нам рассматривать более сложные потенциалы, например, представленные в виде полинома типа Лорана:

$$\Phi(u) = \sum_{k=-2N}^{2N} w_k f^k(u) \quad (81)$$

где $f(u)$ является простейшей потенциальной производящей функцией, которая удовлетворяет уравнению (34). Для потенциала (81) анзац для суперпотенциала имеет вид:

$$\varphi_n(u) = \sum_{k=-N}^N \alpha_{nk} f^k(u) \quad (82)$$

Применяя представленный выше алгоритм, мы получаем следующую систему уравнений для определения коэффициентов суперпотенциала и энергетического спектра:

$$n = 0:$$

$$-(k + 1)\kappa_0 \alpha_{0,k+1} (1 - \delta_{k,N} - \delta_{k,N+1}) - k\kappa_1 \alpha_{0,k} (1 - \delta_{k,-N-1} - \delta_{k,N+1}) -$$

$$-(k-1)\kappa_2\alpha_{0,k-1}(1-\delta_{k,-N-1}-\delta_{k,-N})+\sum_{m=-\min(N,N-k)}^{\min(N,N+k)}\alpha_{0m}\alpha_{0,k-m}=w_k,$$

$$|k| \leq N+1, \quad k \neq 0,$$

$$\sum_{m=-\min(N,N-k)}^{\min(N,N+k)}\alpha_{0m}\alpha_{0,k-m}=w_k, \quad |k| > N+1,$$

$$\varepsilon_0 = w_0 + \kappa_0\alpha_{0,1} - \kappa_2\alpha_{0,-1} - \sum_{m=-N}^N \alpha_{0,m}\alpha_{0,-m}, \quad (83a)$$

$$n \geq 1: \quad (83b)$$

$$\begin{aligned} & -(k+1)\kappa_0(\alpha_{n,k+1} + \alpha_{n+1,k+1})(1-\delta_{k,N} - \delta_{k,N+1}) - k\kappa_1(\alpha_{n,k} + \alpha_{n+1,k})(1 \\ & - \delta_{k,-N-1} - \delta_{k,N+1}) - (k-1)\kappa_2(\alpha_{n,k-1} + \alpha_{n+1,k-1})(1-\delta_{k,-N-1} \\ & - \delta_{k,-N}) + \sum_{m=-\min(N,N-k)}^{\min(N,k+N)} (\alpha_{n+1,m}\alpha_{n+1,k-m} - \alpha_{n,m}\alpha_{n,k-m}) = 0, \end{aligned}$$

$$|k| \leq N+1, \quad k \neq 0,$$

$$\sum_{m=-\min(N,N-k)}^{\min(N,k+N)} (\alpha_{n+1,m}\alpha_{n+1,k-m} - \alpha_{n,m}\alpha_{n,k-m}) = 0, \quad |k| > N+1,$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} = & \varepsilon_n + \kappa_0(\alpha_{n,1} + \alpha_{n+1,1}) - \kappa_2(\alpha_{n,-1} + \alpha_{n+1,-1}) - \sum_{m=-N}^N (\alpha_{n+1,m}\alpha_{n+1,-m} \\ & - \alpha_{n,m}\alpha_{n,-m}). \end{aligned}$$

Система уравнений для коэффициентов суперпотенциала основного состояния (69а) в общем случае не имеет точного аналитического решения. Однако система уравнений для возбужденных состояний частично допускает точное аналитическое решение.

$$\alpha_{n,-1} = \alpha_{0,-1} - N\kappa_0 n, \quad \alpha_{n,1} = \alpha_{0,1} + N\kappa_2 n,$$

$$\alpha_{n,0} = \begin{cases} \frac{(N+2)\kappa_0\alpha_{0,2}}{N\kappa_2} + \frac{\kappa_1}{2N\kappa_2}(N\kappa_2n + \alpha_{0,1}) + \\ \frac{\alpha_{0,1}(N\kappa_2\alpha_{0,0} - \kappa_1\alpha_{0,1}/2 - (N+2)\kappa_0\alpha_{0,2})}{N\kappa_2(N\kappa_2n + \alpha_{0,1})} & \kappa_2 \neq 0, \\ \alpha_{0,0} + \left(\kappa_1 + \frac{(N+2)\kappa_0\alpha_{0,2}}{\alpha_{0,1}}\right)n, & \kappa_2 = 0, \\ \alpha_{n,m} = \alpha_{0,m}, & |m| > 1. \end{cases} \quad (84)$$

С учетом (84) уравнение для энергий возбужденных состояний принимает вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \kappa_0(\alpha_{n,1} + \alpha_{n+1,1}) - \kappa_2(\alpha_{n,-1} + \alpha_{n+1,-1}) - (\alpha_{n+1,0}^2 - \alpha_{n,0}^2) - \\ - 2(\alpha_{n+1,-1}\alpha_{n+1,1} - \alpha_{n,-1}\alpha_{n,1}). \end{aligned} \quad (85)$$

Это уравнение, после подстановки решений (84), допускает решение

$$\begin{aligned} \varepsilon_n = \varepsilon_0 + \left(\kappa_0 \left(\frac{N(\kappa_0 + \kappa_2)}{2} + (2N+1)\alpha_{0,1} + \alpha_{0,-1} \right) - 2(N+1)\kappa_2\alpha_{0,-1} \right) n + \\ + N\kappa_0 \left(-\frac{\kappa_0}{2} + \kappa_2 \left(2N + \frac{3}{2} \right) \right) n^2 + \alpha_{0,0}^2 - \alpha_{n,0}^2. \end{aligned} \quad (86)$$

Как следует из уравнения (86), спектр совпадает по форме со спектром (63). Это означает, что форма спектра инвариантна к порядку полинома Лорана, написанного относительно функции $f(u)$, и, по-видимому, определяется только дифференциальным уравнением, которому эта функция удовлетворяет.

Рассмотрим в качестве демонстрации сингулярный ангармонический потенциал вида:

$$\Phi(u) = u^2 + \frac{l(l+1)}{u^2} + \frac{\lambda}{u^4} + \frac{\mu}{u^6} \quad (87)$$

Точное решение этого потенциала в рамках метода анзаца для волновой функции было рассмотрено в [34, 35, 36] и в рамках суперсимметричной квантовой механики с анзацем для суперпотенциала в [30]. Для этого потенциала мы имеем:

$$f(u) = u, \quad \kappa_0 = 1, \quad \kappa_1 = 0, \quad \kappa_2 = 0, \quad N = 3, \quad w_{-6} = \mu, \quad w_{-4} = \lambda, \quad w_{-2} = l(l+1),$$

$$w_2 = 1, w_{-5} = w_{-3} = w_{-1} = w_0 = w_1 = w_3 = w_4 = w_5 = w_6 = 0, \quad (88)$$

Вставляя (88) в систему уравнений (83а), мы получаем для основного состояния систему:

$$\begin{aligned}
& n = 0: \\
& k = -6: \quad \alpha_{0,-3}^2 = \mu, \\
& k = -5: \quad 2\alpha_{0,-3}\alpha_{0,-2} = 0, \\
& k = -4: \quad 3\alpha_{0,-3} + \alpha_{0,-2}^2 + 2\alpha_{0,-3}\alpha_{0,-1} = \lambda, \\
& k = -3: \quad 2\alpha_{0,-2} + 2\alpha_{0,-2}\alpha_{0,-1} + 2\alpha_{0,-3}\alpha_{0,0} = 0, \\
& k = -2: \quad \alpha_{0,-1} + \alpha_{0,-1}^2 + 2\alpha_{0,-2}\alpha_{0,0} + 2\alpha_{0,-3}\alpha_{0,1} = l(l+1), \\
& k = -1: \quad 2\alpha_{0,-1}\alpha_{0,0} + 2\alpha_{0,-2}\alpha_{0,1} + 2\alpha_{0,-3}\alpha_{0,2} = 0, \\
& k = 1: \quad 2\alpha_{0,0}\alpha_{0,1} - 2\alpha_{0,-2} + 2\alpha_{0,-1}\alpha_{0,2} + 2\alpha_{0,-2}\alpha_{0,3} = 0, \\
& k = 2: \quad \alpha_{0,1}^2 + 2\alpha_{0,0}\alpha_{0,2} - 3\alpha_{0,3} + 2\alpha_{0,-1}\alpha_{0,3} = 1, \\
& k = 3: \quad 2\alpha_{0,1}\alpha_{0,2} + 2\alpha_{0,0}\alpha_{0,3} = 0, \\
& k = 4: \quad \alpha_{0,2}^2 + 2\alpha_{0,1}\alpha_{0,3} = 0, \\
& k = 5: \quad 2\alpha_{0,2}\alpha_{0,3} = 0, \\
& k = 6: \quad \alpha_{0,3}^2 = 0, \\
& \varepsilon_0 = \alpha_{01} - \sum_{m=-3}^3 \alpha_{0,m}\alpha_{0,-m}.
\end{aligned} \tag{89}$$

Решение полученной системы уравнений (89) имеет вид:

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,-3} &= -\sqrt{\mu}, \quad \alpha_{0,-2} = 0, \quad \alpha_{0,-1} = -\left(\frac{3}{2} + \frac{\lambda}{2\sqrt{\mu}}\right), \quad \alpha_{0,0} = 0, \quad \alpha_{0,1} = 1, \quad \alpha_{0,2} = 0, \\
\alpha_{0,3} &= 0, \quad \varepsilon_0 = \frac{\lambda}{\sqrt{\mu}} + 4,
\end{aligned} \tag{90}$$

условие ограничения: $(2\sqrt{\mu} + \lambda)^2 = 4\mu l(l+1) + \mu(1 + 8\sqrt{\mu})$.

Как следует из (90), соответствующий суперпотенциал основного состояния для потенциала (84) имеет вид:

$$\varphi_0(u) = -\frac{\sqrt{\mu}}{u^3} - \frac{3 + \frac{\lambda}{\sqrt{\mu}}}{2u} + u \tag{91}$$

Для возбужденных состояний мы выбираем суперпотенциал в виде следующего анзака:

$$\varphi_n(u) = \frac{\alpha_{n,-3}}{u^3} + \frac{\alpha_{n,-1}}{u} + \alpha_{n,1}u \tag{92}$$

Подставим (92), (88) в систему уравнений (83б) и, в результате, для выбранного потенциала получим следующую систему уравнений для определения параметров суперпотенциала и энергии возбужденных состояний:

$$\begin{aligned}
 k &= -6: \alpha_{n+1,-3}^2 - \alpha_{n,-3}^2 = 0, \\
 k &= -4: 3(\alpha_{n+1,-3} + \alpha_{n,-3}) + 2(\alpha_{n+1,-3}\alpha_{n+1,-1} - \alpha_{n,-3}\alpha_{n,-1}) = 0, \\
 k &= -2: \alpha_{n+1,-1}^2 - \alpha_{n,-1}^2 + \alpha_{n+1,-1} + \alpha_{n,-1} + 2(\alpha_{n+1,-3}\alpha_{n+1,1} - \alpha_{n,-3}\alpha_{n,1}) = 0, \\
 k &= 2: \alpha_{n+1,1}^2 - \alpha_{n,1}^2 = 0, \\
 k &= 0: \varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \alpha_{n+1,1} + \alpha_{n,1} - 2(\alpha_{n+1,1}\alpha_{n+1,-1} - \alpha_{n,1}\alpha_{n,-1}).
 \end{aligned} \tag{93}$$

Решением системы (93) имеет вид:

$$\begin{aligned}
 \alpha_{n,1} &= 1, \quad \alpha_{n,-3} = -\sqrt{\mu}, \quad \alpha_{n,-1} = -\left(\frac{3}{2} + \frac{\lambda}{2\sqrt{\mu}}\right) - 3n, \\
 \varepsilon_n &= \varepsilon_0 + 8n = 4(2n + 1) + \frac{\lambda}{\sqrt{\mu}}, \\
 \text{условие ограничения: } & (2\sqrt{\mu} + \lambda)^2 + 8n(3\mu(n + 1) + \lambda\sqrt{\mu}) \\
 &= 4\mu l(l + 1) + \mu(1 + 8\sqrt{\mu})
 \end{aligned} \tag{94}$$

В работе [30], используя анзатц суперпотенциала и метод суперсимметричной квантовой механики, были получены решения только для основного и первого возбужденных состояний. В рамках предложенной выше схемы мы получили решения для произвольного состояния, воспроизводящие частные случаи, найденные в [30]. Таким образом, на примере сингулярного ангармонического потенциала была продемонстрирована непротиворечивость предложенного алгоритма для потенциалов, имеющих вид многочлена типа Лорана произвольного порядка.

Глава 4. Термодинамика точно решаемых моделей

4.1 Расчет общих выражений для термодинамических величин точно решаемых моделей

Используя результаты предыдущих глав, можно получить общую форму энергетического спектра точно решаемых моделей

$$E_n = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left\{ A - B(n + q_1)^2 - \frac{C}{(n + q_2)^2} \right\}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, n_m, \quad (95)$$

где параметры α , A , B , C , $q_{1,2}$ и n_m не зависят от n и являются функциями параметров потенциала и, возможно, орбитального квантового числа. Параметр n_m может стремиться к бесконечности. Общая форма спектра, конечно, как упоминалось выше, записывается только для случая, когда потенциал-генерирующие функции удовлетворяют дифференциальному уравнению. Существование точного спектра в замкнутой форме позволяет точно изучать термодинамические свойства систем, которые описываются модельными потенциалами, допускающими точное рассмотрение.

Отправной точкой для изучения термодинамики системы является вычисление статистической суммы. Подставляя выражение в уравнение, мы получаем следующее выражение для статистической суммы.

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{n_m} e^{-\beta E_n}, \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (96)$$

Здесь температура T измеряется в энергетических единицах. Подставляя выражение (95) в уравнение (96), мы получаем следующее выражение для статистической суммы

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{n_m} \exp \left(-\frac{\beta \hbar^2 \alpha^2}{2m} \left\{ A - B(n + q_1)^2 - \frac{C}{(n + q_2)^2} \right\} \right) \quad (97)$$

Заменяя суммирование интегрированием, мы получаем

$$Z(\beta) \approx \int_0^{n_m} \exp \left(-\frac{\beta \hbar^2 \alpha^2}{2m} \left\{ A - B(n+q_1)^2 - \frac{C}{(n+q_2)^2} \right\} \right) dn \quad (98)$$

В замкнутой форме интеграл может быть вычислен только в специальном случае $q_1 = q_2 = q$,

$$Z(\beta) = e^{-\beta \xi_1} \frac{\sqrt{\pi}}{4 \xi_2 \sqrt{\beta}} \{ D_{n_m+q}^+(\beta) + D_{n_m+q}^-(\beta) - D_q^+(\beta) - D_q^-(\beta) \}$$

$$D_n^\pm(\beta) = e^{\pm 2\beta \xi_2 \xi_3} \operatorname{erf} \left[\left(\xi_2 n \pm \frac{\xi_3}{n} \right) \sqrt{\beta} \right] \quad (99)$$

$$\xi_1 = \frac{A \hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \xi_2 = \frac{\hbar \alpha \sqrt{-B}}{\sqrt{2m}}, \quad \xi_3 = \frac{\hbar \alpha \sqrt{-C}}{\sqrt{2m}}$$

где $\operatorname{erf}[z]$ - функция ошибок.

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt \quad (100)$$

Для облегчения дальнейших вычислений предполагаем, что $n_m \gg q$; тогда, учитывая асимптотическое поведение функции ошибок для больших значений аргумента, $\operatorname{erf}(z) \approx 1 - \frac{\exp(-z^2)}{z \sqrt{\pi}}$, упрощаем выражение для статистической суммы.

$$Z(\beta) = e^{-\beta \xi_1} \frac{\sqrt{\pi}}{4 \xi_2 \sqrt{\beta}} \left\{ -\frac{e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta}}{\sqrt{\pi \beta} \xi_2 n_m} + e^{2\beta \xi_2 \xi_3} \operatorname{erfc} \left[\left(\xi_2 q + \frac{\xi_3}{q} \right) \sqrt{\beta} \right] \right. \\ \left. + e^{-2\beta \xi_2 \xi_3} \operatorname{erfc} \left[\left(\xi_2 q - \frac{\xi_3}{q} \right) \sqrt{\beta} \right] \right\} \quad (101)$$

Здесь $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$. Используя статистическую сумму, можно определить термодинамические функции, такие как средняя энергия $U(\beta)$ и теплоемкость $C(\beta)$.

$$U(\beta) = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta) = \xi_1 - \frac{1}{2\beta} + \frac{\frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(\xi_2 n_m + \frac{1}{2\beta \xi_2 n_m} \right) e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta} - \frac{2\xi_2 q}{\sqrt{\pi\beta}} e^{-(\xi_2^2 q^2 + \xi_3^2 q^{-2})\beta} + 2\xi_2 \xi_3 Q_-(\beta)}{-\frac{e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta}}{\sqrt{\pi\beta \xi_2 n_m}} + Q^+(\beta)}, \quad (102)$$

$$Q^\pm(\beta) = e^{2\beta \xi_2 \xi_3} \text{Erfc}[(\xi_2 q + \xi_3 q)\sqrt{\beta}] \pm e^{-2\beta \xi_2 \xi_3} \text{Erfc}[(\xi_2 q - \xi_3 q)\sqrt{\beta}]$$

$$C(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} U(\beta) = -\frac{k_B}{2} + \frac{k_B \beta^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\beta}} \left(\xi_2 n_m + \frac{1}{2\beta \xi_2 n_m} \right) e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta} - \frac{2\xi_2 q}{\sqrt{\pi\beta}} e^{-(\xi_2^2 q^2 + \xi_3^2 q^{-2})\beta} + 2\xi_2 \xi_3 Q_-(\beta) \right)}{\left(-\frac{e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta}}{\sqrt{\pi\beta \xi_2 n_m}} + Q^+(\beta) \right)^2} - k_B \beta^2 \frac{-\frac{1}{\sqrt{\pi\beta^3}} \left(\xi_2 n_m + \frac{3}{4\beta \xi_2 n_m} + \beta (\xi_2 n_m)^3 \right) e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta} + 2\xi_2 \xi_3 \left(\frac{2\xi_2 q}{\sqrt{\pi\beta}} e^{-(\xi_2^2 q^2 + \xi_3^2 q^{-2})\beta} + 2\xi_2 \xi_3 Q_-(\beta) \right)}{-\frac{e^{-\xi_2^2 n_m^2 \beta}}{\sqrt{\pi\beta \xi_2 n_m}} + Q^+(\beta)} \quad (103)$$

Таким образом, возможность определения точного спектра модельных систем позволяет описывать их термодинамические свойства с хорошей точностью.

Потенциал	ξ_1	ξ_2	ξ_3
Потенциал Морзе	0	$i \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2m}}$	0
Потенциал Хюльтена	$\frac{\lambda \hbar^2 \alpha^2}{4m}$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$	$i \frac{\lambda \hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$
Потенциал Розена-Морзе	$\frac{\lambda \hbar^2 \alpha^2}{4m}$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$	$i \frac{\lambda \hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$
Потенциал Эккарта	0	$i \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2m}}$	$i \frac{\hbar\alpha b}{\sqrt{2m}}$
Потенциал Денга-Фана	$\frac{\lambda \hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda + \frac{1}{2} \lambda b(b+2))$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}} (\lambda b(b+2))$
Гиперболиче- сский молеку-	$\frac{\lambda \hbar^2 \alpha^2}{2m} \lambda(b^2 + 1)$	$i \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2m}}$	$i \frac{\lambda b \hbar\alpha}{\sqrt{2m}}$

лярный по- тенциал			
Водородопо- добный по- тенциал	0	0	$i \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2m}}$
Потенциал Мэннинга- Розена	$\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}(b + \mu(\mu - 1))$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}(b + \mu(\mu - 1))$
Модифициро- ванный по- тенциал Юка- вы	$\frac{\lambda\hbar^2\alpha^2}{4m}$	$i \frac{\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$	$i \frac{\lambda\hbar\alpha}{2\sqrt{2m}}$

Таблица 4. Значения $\xi_i (i = 1, 2, 3)$ точно решаемых потенциалов

4.2 Температурные зависимости внутренней энергии и теплоемкости некоторых точно решаемых моделей

В качестве примеров мы рассмотрим такие потенциалы как модифицированный потенциал Юкавы, Морзе и Эккарта.

Потенциал Юкавы в трех измерениях приводим к виду

$$V(r) = -\frac{\hbar^2 Z}{2ma} \frac{e^{-r/a}}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{Ze^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{l(l+1)e^{-r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} \quad (104)$$

Спектр потенциала Юкавы (104) имеет вид

$$E_{nl} = -\frac{E_0}{4} \left((n + l + 1) - \frac{Z}{(n + l + 1)} \right)^2, \quad (105)$$

где $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Для данного спектра $n_m = [\sqrt{Z} - l - 1]$. На рисунке 4 приведены температурные зависимости внутренней энергии и теплоемкости для различных значений параметра Z .

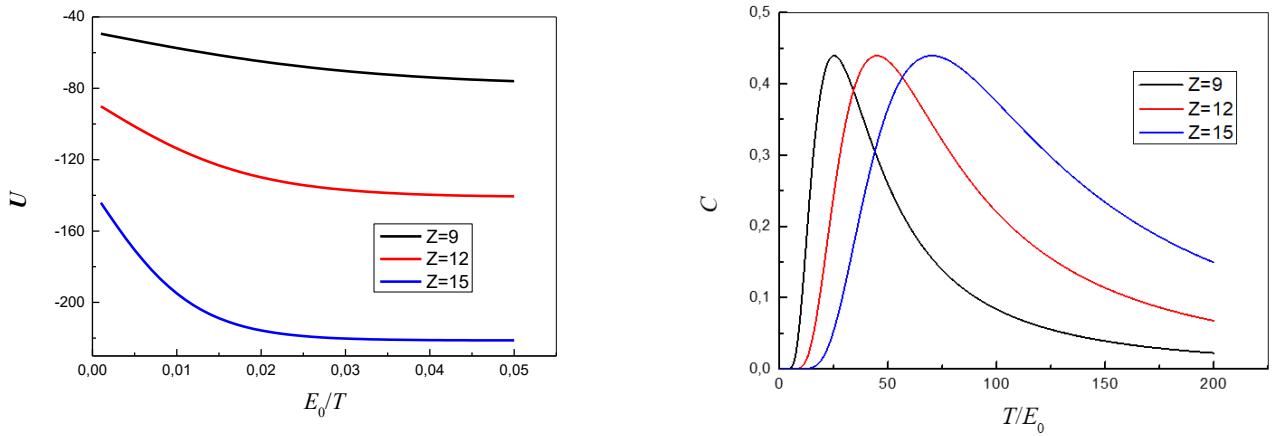


Рисунок 4. Температурные зависимости внутренней энергии U и теплоемкости C для потенциала Юкавы при различных значениях параметра Z .

Потенциал Эккарта

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\mu(\mu-1)}{\sinh^2(x/a)} - 2b \coth(x/a) \right), \quad (106)$$

Спектр потенциала Эккарта (106) имеет вид

$$E_n = E_0 \left(-(n + \mu)^2 - \frac{b^2}{(n + \mu)^2} \right), \quad n_m = \sqrt{b} - \mu, \quad (107)$$

Где $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Для данного спектра $n_m = \sqrt{b} - \mu$.

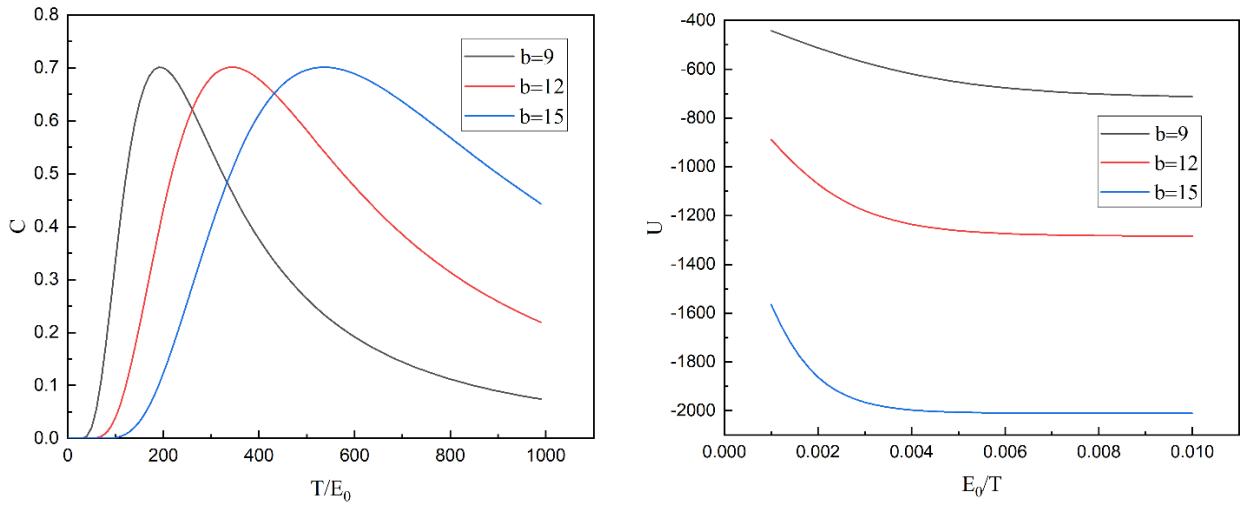


Рисунок 5. Температурные зависимости внутренней энергии U и теплоемкости C для потенциала Эккарта при различных значениях параметра b и $\mu = 0$.

Потенциал Морзе

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2ma^2} (e^{-2x/a} - 2e^{-x/a}), \quad (108)$$

Спектр потенциала Морзе (108) имеет вид

$$E_n = -\left(\lambda - \frac{1}{2} - n\right)^2, \quad (109)$$

где $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Для данного спектра $n_m = \lambda - \frac{1}{2}$.

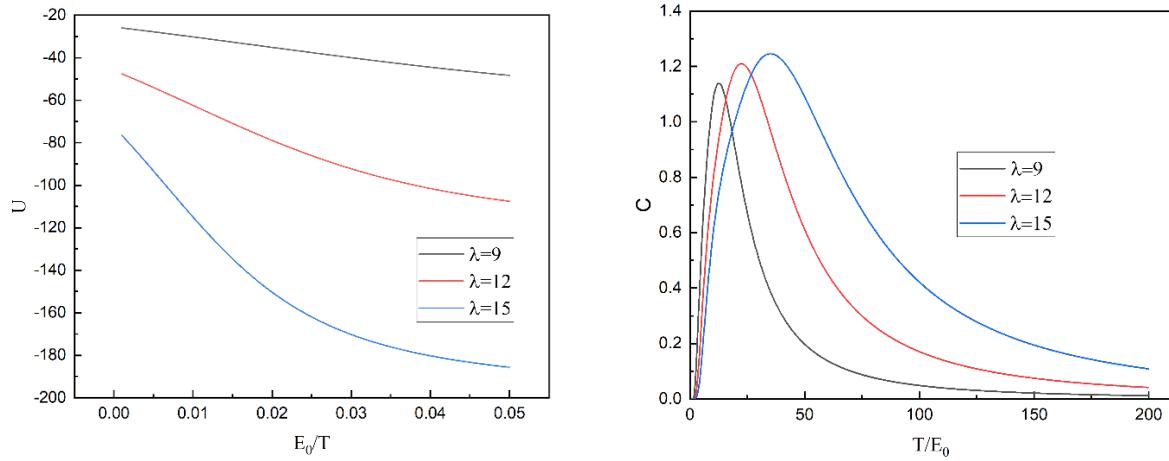


Рисунок 6. Температурные зависимости внутренней энергии U и теплоемкости C для потенциала Морзе при различных значениях параметра λ .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная выпускная квалификационная работа была посвящена освоению и применению нового унифицированного алгоритма метода факторизации получения точных и условно точных решений уравнения Шредингера. Основные результаты и выводы можно представить следующим образом :

1. Освоен новый алгоритм применения метода факторизации Шредингера-Инфилда-Хулла к задаче вычисления спектра точно и условно точно разрешимых потенциалов. Новый алгоритм позволяет унифицировать и расширить возможности метода факторизации для построения точно решаемых потенциалов;
2. В рамках унифицированного подхода вычислены собственные значения точно решаемых потенциалов, построенных с помощью одной функции в виде многочлена типа Лорана. Показано, что унифицированный алгоритм эффективно воспроизводит известные точные решения;
3. Используя общее выражение для спектра точно-решаемых моделей, рассчитаны общие выражения для их термодинамических величин.
4. Показано, что форма спектра определяется только дифференциальным уравнением, которому удовлетворяет производящая функция потенциала и имеет для точно-решаемых моделей достаточно общий вид.
5. Алгоритм позволяет существенно упростить схему расчета спектра, параметров суперпотенциала, а также условия ограничения на параметры потенциала в случае условно точно решаемых потенциалов;

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schrödinger, E. A method of determining quantum-mechanical eigen-values and eigenfunctions / E. Schrödinger // Proc. Roy. Irish Acad. A. – 1940. – Vol. 46. – P. 9–16.
2. Infeld, L. The factorization method / L. Infeld, T.E. Hull // Rev. Mod. Phys. – 1951. – Vol. 23. – P. 21–68.
3. Dong, S.H. Factorization Method in Quantum Mechanics / S.H. Dong. – Amsterdam : Springer, 2007. – 264 p.
4. Cooper, F., Supersymmetry and quantum mechanics / F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme // Phys. Rep. – 1995. – Vol. 251. – P. 267–385.
5. Ramos, A. Symmetries in Quantum Mechanics and Quantum Optics / A. Ramos, J.F. Cariñena // In: Symmetries in Quantum Mechanics and Quantum Optics / Eds. A. Ballesteros et al. – Burgos : Universidad de Burgos, 1999. – P. 259–269.
6. Cooper, F., Supersymmetry in Quantum Mechanics / F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme. – Singapore : World Scientific, 2001. – 210 p.
7. Bagchi, B. Supersymmetry in Quantum and Classical Mechanics / B. Bagchi. – Boca Raton : Chapman & Hall/CRC, 2001. – 304 p.
8. Comtet, A., Exactness of semiclassical bound state energies for supersymmetric quantum mechanics / A. Comtet, A. Bandrauk, D. Campbell // Phys. Lett. B. – 1985. – Vol. 150. – P. 159–162.
9. Nikiforov, A.F., Special Functions of Mathematical Physics / A.F. Nikiforov, V.B. Uvarov. – Basel : Birkhäuser Verlag, 1988. – 440 p.
- 10.1. Kalaba, R. On a class of nonlinear differential equations / R. Kalaba // Journal of Mathematics and Mechanics. – 1959. – Vol. 8. – P. 519.

- 10.2. Bellman, R.E., Quasilinearization and Nonlinear Boundary-Value Problems / R.E. Bellman, R.E. Kalaba. – New York : Elsevier, 1965. – 234 p.
11. Dong, S.H., Group theory approach to the Dirac equation with a Coulomb plus scalar potential in D+1 dimensions / S.H. Dong, G.H. Sun, D. Popov // J. Math. Phys. – 2003. – Vol. 44, No. 10. – P. 4467–4479.
12. Ma, Z.Q., Quantum correction in exact quantization rules / Z.Q. Ma, B.W. Xu // Europhys. Lett. – 2005. – Vol. 69. – P. 685–691.
13. Ma, Z.Q., Exact quantization rule and the invariant / Z.Q. Ma, B.W. Xu // Acta Phys. Sin. – 2006. – Vol. 55. – P. 1571.
14. Ou, Y.C., Formally exact quantization condition for nonrelativistic quantum systems / Y.C. Ou, Z.Q. Cao, Q.S. Shen // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 121. – P. 8175.
15. Qiang, W.C., Proper quantization rule / W.C. Qiang, S.H. Dong // EPL. – 2010. – Vol. 89. – P. 10003.
16. Serrano, F.A., Qiang–Dong proper quantization rule and its applications to exactly solvable quantum systems / F.A. Serrano, X.Y. Gu, S.H. Dong // J. Math. Phys. – 2010. – Vol. 51. – P. 082103.
17. Kumar, P.R., A new quantization rule to the bound state problem in non-relativistic quantum mechanics / P.R. Kumar, S.H. Dong // Phys. Lett. A. – 2021. – Vol. 417. – P. 127700.
18. Turbiner, A.V., Spectral singularities and quasi-exactly solvable quantal problem / A.V. Turbiner, A.G. Ushveridze // Phys. Lett. A. – 1987. – Vol. 126. – P. 181–184.
19. Turbiner, A.V. Quasi-exactly-solvable problems and $sl(2)$ algebra / A.V. Turbiner // Commun. Math. Phys. – 1988. – Vol. 118. – P. 467–474.

20. González-López, A., Normalizability of one-dimensional quasi-exactly solvable Schrödinger operators / A. González-López, N. Kamran, P. Oliver // *Commun. Math. Phys.* – 1993. – Vol. 153. – P. 117–146.
21. Ushveridze, A.G. Quasi-exactly solvable models in quantum mechanics / A.G. Ushveridze. – Bristol : Institute of Physics Publishing, 1994. – 310 p.
22. de Souza Dutra, A. Conditionally exactly soluble class of quantum potentials / A. de Souza Dutra // *Phys. Rev. A*. – 1993. – Vol. 47. – P. R2435–R2438.
23. Dutt, R., New class of conditionally exactly solvable potentials in quantum mechanics / R. Dutt, A. Khare, Y.P. Varshni // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1995. – Vol. 28. – P. L107–L111.
24. Junker, G., Conditionally exactly solvable problems and non-linear algebras / G. Junker, P. Roy // *Phys. Lett. A*. – 1997. – Vol. 232. – P. 155–162.
25. Gangopadhyaya, A., Methods for generating quasi-exactly solvable potentials / A. Gangopadhyaya, A. Khare, U.P. Sukhatme // *Phys. Lett. A*. – 1995. – Vol. 208. – P. 261–266.
26. Exact solutions of the 1D Schrödinger equation with the Mathieu potential / G.H. Sun, C.Y. Chen, H. Taud, et al. // *Phys. Lett. A*. – 2020. – Vol. 384, No. 19. – P. 126480.
27. Exact solutions of the angular Teukolsky equation for particular cases / C.Y. Chen, Y. You, X.H. Wang, et al. // *Results in Physics*. – 2021. – Vol. 24. – P. 104115.
28. Exact solution of rigid planar rotor in external electric field / C.Y. Chen, F.L. Lu, G.H. Sun, et al. // *Results in Physics*. – 2022. – Vol. 34. – P. 105330.
29. Gendenshteyn, L.E. Derivation of exact spectra of the Schrödinger equation by means of supersymmetry / L.E. Gendenshteyn // *JETP Lett.* – 1983. – Vol. 38. – P. 356–359.

30. Chakrabarti, B., Existence of conditional shape invariance symmetry for singular power potential $V(r) = a r^2 + b r^{-4} + c r^{-6}$ / B. Chakrabarti, T.K. Das // J. Phys. A: Math. Gen. – 2002. – Vol. 35. – P. 4701–4712.
31. Chakrabarti, B. Energy eigenvalues of a quantum anharmonic oscillator from supersymmetry / B. Chakrabarti // J. Phys. A: Math. Theor. – 2008. – Vol. 41. – P. 405301.
32. Bera, S., Application of conditional shape invariance symmetry to obtain the eigen-spectrum of the mixed potential $V(r) = a r + b r^2 + c / r + l(l+1) / r^2$ / S. Bera, B. Chakrabarti, T.K. Das // Phys. Lett. A. – 2017. – Vol. 381. – P. 16–23.
33. Cariñena, J.F., Riccati equation, factorization method and shape invariance / J.F. Cariñena, A. Ramos // Rev. Math. Phys. – 2000. – Vol. 12. – P. 1279–1304.
34. Znojil, M. Singular anharmonicities and the analytic continued fractions. II / M. Znojil // J. Math. Phys. – 1990. – Vol. 31. – P. 108–117.
35. Kaushal, R.S. Quantum mechanics of noncentral harmonic and anharmonic potentials / R.S. Kaushal // Ann. Phys. – 1991. – Vol. 206. – P. 90–109.
36. Agboola, D., Unified derivation of exact solutions for a class of quasi-exactly solvable models / D. Agboola, Y.Z. Zhang // J. Math. Phys. – 2012. – Vol. 53. – P. 042101.
37. Nigmatullin, R.R., Unified algorithm of factorization method for derivation of exact solutions from Schrödinger equation with potentials constructed from a set of functions / R.R. Nigmatullin, A.A. Khamzin // Mathematics. – 2023. – Vol. 11, No. 18. – P. 14–16. – DOI: 10.3390/math11183822.
38. Nigmatullin, R.R., Unification and extension of the factorization method for constructing exactly and conditionally-exactly solvable potentials. The case of a single potential generating function / R.R. Nigmatullin, A.A. Khamzin,

D. Baleanu // Results in Physics. – 2022. – Vol. 41. – P. 105945. – DOI:
10.1016/j.rinp.2022.105945.