ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 15, № 4 (2011) 4001(6 с.)
JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 15, No. 4 (2011) 4001(6 p.)

$\hbar$-РОЗКЛАД ДЛЯ РІВНЯННЯ ШРЕДИНҐЕРА З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТ

Д. О. Куліков[1], В. М. Шаповал[2]
[1]*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара, кафедра теоретичної фізики, пр. Гагаріна, 72, Дніпропетровськ, 49010, Україна,*
[2]*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАНУ, вул. Метрологічна, 14-б, Київ, 03680, Україна*
(Отримано 18 жовтня 2010 р.; в остаточному вигляді — 14 листопада 2011 р.)

Представлено рекурентну техніку отримування асимптотичних розкладів для власних значень енерґії зв'язаних станів радіального рівняння Шрединґера з масою, залежною від координат. Як приклад її застосування розраховано власні значення енерґії для кулонівського потенціалу за наявності залежної від координат маси та виведено нерівності, що реґулюють зміщення енерґетичних рівнів відносно їх положення за сталої маси.
Ключові слова: координатно залежна маса, зв'язані стани, спектр енерґій, $\hbar$-розклад.

PACS number(s): 03.65.−w, 03.65.Ge, 03.65.Sq

ВСТУП

Концепція ефективної маси, введена більш ніж 50 років тому для опису руху електронів у кристалічних ґратках [1], тепер має значно ширшу сферу застосування. Її використовують у ядерній фізиці [2], у теорії квантових рідин [3], при моделюванні металевих кластерів [4] та напівпровідникових наноструктур: квантових ям, дротів і точок [5]. Намагання врахувати просторову неоднорідність, властиву багатошаровим наноструктурам, привело дослідників до розгляду змінної ефективної маси, залежної від координат [6–8].

Для розрахунку спектрів зв'язаних станів систем з масою, залежною від координат, були запропоновані ітераційні [9, 10], варіаційні [11, 12] та пертурбативні [13] схеми розв'язування рівняння Шрединґера, які, однак, дозволяють отримувати розв'язок тільки в чисельному вигляді. Існують також методи знаходження точних розв'язків рівняння Шрединґера зі змінною масою [14–16], застосовні до таких потенціалів, як кулонівський, осциляторний, потенціал Морзе. Зважаючи на те, що наявність розв'язку в аналітичному вигляді значно спрощує дослідження структури енерґетичних рівнів, актуальною є розробка аналітичних методів наближеного розв'язування задачі про зв'язані стани для рівняння Шрединґера з масою, залежною від координат.

Для рівняння Шрединґера зі сферичною симетрією та сталою масою ефективним аналітичним методом є $1/N$-розклад. Під цією назвою розуміють групу споріднених підходів [17–21], які виходять із розгляду класичного руху частинки, що є на дні потенціальної ями, утвореної ефективним потенціалом радіального рівняння Шрединґера, з подальшим урахуванням квантових поправок. Наявні варіанти цього методу відрізняються вибором формального параметра розкладу: перехід до класичної границі здійснюють, спрямовуючи до нуля або величину, обернену до вимірності простору, або обернене головне квантове число, або сталу Планка. Останній варіант, так званий $\hbar$-розклад [20], здається найбільш природним і до того ж дає змогу звести обчислення до простої рекурентної процедури.

Метою цієї статті є поширити метод $\hbar$-розкладу на рівняння Шрединґера з масою, залежною від координат. Розроблену процедуру знаходження власних значень енерґії зв'язаних станів застосовано до визначення впливу введення змінної маси на спектр у полі кулонівського потенціалу.

I. МЕТОД $\hbar$-РОЗКЛАДУ

Гамільтоніан частинки із залежною від координат масою має вигляд [22]

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\mathbf{r}),$$
$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{4}\Big[m(\mathbf{r})^{\alpha}\boldsymbol{\nabla} m(\mathbf{r})^{\beta}\boldsymbol{\nabla} m(\mathbf{r})^{\gamma} + m(\mathbf{r})^{\gamma}\boldsymbol{\nabla} m(\mathbf{r})^{\beta}\boldsymbol{\nabla} m(\mathbf{r})^{\alpha}\Big], \qquad (1)$$

де $m(\mathbf{r})$ — змінна маса, $V(\mathbf{r})$ — потенціал взаємодії, α, β, γ — параметри впорядкування, для яких повинно виконуватися співвідношення $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

Розгляньмо сферично-симетричний випадок, у якому стаціонарне рівняння Шрединґера з гамільтоніаном (1) зводиться до радіального рівняння

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{m'(r)}{m(r)}\left(\frac{1}{r} - \frac{d}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m(r)}{\hbar^2}(U(r) - E)\right\}\psi(r) = 0, \qquad (2)$$

$$U(r) = V(r) - \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{\alpha+\gamma}{2}\left(\frac{m''(r)}{m^2(r)} + \frac{2m'(r)}{m^2(r)r}\right) - (\alpha\gamma+\alpha+\gamma)\frac{m'^2(r)}{m^3(r)}\right],$$

де l — орбітальне квантове число, а штрих позначає похідну за r.

Вважаючи $V(r)$ і $m(r)$ аналітичними функціями такого вигляду, що рівняння (2) описує зв'язані стани, поставимо задачу про знаходження відповідного дискретного спектра енергій. З цією метою узагальнимо техніку $\hbar$-розкладу [20] на випадок залежної від координат маси.

Перейдімо від (2) до рівняння Ріккаті для логарифмічної похідної хвильової функції. Зробивши підстановку $\psi(r) = \chi(r)\sqrt{m(r)}$, щоб позбутися доданка з $d\psi(r)/dr$, а потім — підстановку $C(r) = \hbar\chi'(r)/\chi(r)$, одержимо

$$\begin{aligned} &\hbar C'(r) + C^2(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \\ &+\left(\frac{3}{4}+\alpha\gamma+\alpha+\gamma\right)\hbar^2 Q^2(r) \\ &-\frac{\hbar^2}{r}Q(r) - \frac{1+\alpha+\gamma}{2}\hbar^2 P(r) + 2m(r)(V(r)-E), \end{aligned} \tag{3}$$

де введені позначення $Q(r) = m'(r)/m(r)$, $P(r) = (m''(r) + 2m'(r)/r)/m(r)$.

Розв'язок рівняння Ріккаті шукаємо у вигляді асимптотичних розкладів за степенями сталої Планка $\hbar$

$$C(r) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k(r)\hbar^k, \qquad E = \sum_{k=0}^{\infty} E_k\hbar^k. \tag{4}$$

Ураховуючи неоднозначність граничного переходу до класичної механіки, який здійснюють формально як перехід до границі $\hbar \to 0$, подамо внесок орбітального моменту в такому записі:

$$\hbar^2 l(l+1) = \Lambda^2 + \hbar A\Lambda + \hbar^2 B, \tag{5}$$

що дозволяє розглядати різні модифікації методу залежно від значень параметрів A і B [20]. Конкретний їх вибір відповідає фіксації нульового наближення. Тому на практиці A і B обирають за відомого явного вигляду функцій $V(r)$ і $m(r)$ у такий спосіб, щоб у розкладі для енергій (4) внески вищих порядків за $\hbar$ були якомога меншими. Зазначимо, що ще істотнішого пришвидшення збіжності ряду можна досягти за допомогою техніки ренормування, переписавши у вигляді $\hbar$-розкладу функцію $V(r)$ або $m(r)$ й підібравши належно значення його коефіцієнтів. Однак розгляд таких узагальнень методу виходить за межі цієї статті.

Підставивши розклади (4) в рівняння Ріккаті (3) та зібравши коефіцієнти при однакових степенях $\hbar$, одержимо систему рівнянь

$$\begin{aligned} &C_0^2 = 2m(r)(V(r)-E_0) + \frac{\Lambda^2}{r^2}, \\ &C_0' + 2C_0C_1 = -2m(r)E_1 + \gamma_1\left(\frac{r_0}{r}\right)^2, \\ &C_1' + 2C_0C_2 + C_1^2 = -2m(r)E_2 + \gamma_2\left(\frac{r_0}{r}\right)^2 + F(r), \\ &\cdots \\ &C_{k-1}' + \sum_{i=0}^{k} C_iC_{k-i} = -2m(r)E_k + \gamma_k\left(\frac{r_0}{r}\right)^2,\ k>2. \end{aligned} \tag{6}$$

Тут $\gamma_1 = A\Lambda/r_0^2$, $\gamma_2 = B/r_0^2$, $\gamma_3 = \gamma_4 = \ldots = 0$,

$$\begin{aligned} F(r) = &\left(\frac{3}{4}+\alpha\gamma+\alpha+\gamma\right)Q^2(r) - \frac{1}{r}Q(r) \\ &- \frac{1+\alpha+\gamma}{2}P(r). \end{aligned} \tag{7}$$

Для врахування вузлів хвильової функції радіально збуджених станів використаємо умови квантування Цваана–Данхема [23, 24], які виражають відомий з теорії функцій комплексної змінної принцип аргументу. Для дискретного спектра власних значень розв'язки рівняння (2) є дійсними на дійсній осі й мають на ній скінченне число простих нулів, що дорівнює радіальному квантовому числу n_r. Тоді інтегрування логарифмічної похідної $C(r)$ по замкненому контуру, який охоплює лише вказані нулі, дає

$$\frac{1}{2\pi i}\oint C(r)dr = n_r\hbar, \quad n_r = 0,1,2,\ldots. \tag{8}$$

Ці правила квантування треба ще доповнити правилами переходу до класичної границі, які визначатимуть поведінку радіального та орбітального квантових чисел при граничному переході $\hbar \to 0$. Оберемо їх так:

$$n_r = \text{const}, \quad l \to \infty, \quad \hbar n_r \to 0, \quad \hbar l = \text{const}. \tag{9}$$

Фізично це означає, що в граничному випадку класичної механіки частинка перебуває в точці мінімуму ефективного потенціалу $V(r) + \Lambda^2/(2m(r)r^2)$, тобто рухається стабільною коловою орбітою радіуса r_0, який є розв'язком рівняння

$$m(r_0)r_0^3 V'(r_0) = \Lambda^2\left(1 + \frac{m'(r_0)r_0}{2m(r_0)}\right). \tag{10}$$

При цьому енергія в нульовому наближенні дорівнює

$$E_0 = V(r_0) + \frac{\Lambda^2}{2m(r_0)r_0^2}, \tag{11}$$

а правила квантування набувають вигляду

$$\frac{1}{2\pi i}\oint C_k(r)dr = n_r\delta_{k,1}. \tag{12}$$

Застосування таких правил квантування дає змогу побудувати алґебричну рекурентну схему для обчислення поправок $\hbar$-розкладу для енерґій, уникаючи використання громіздких формул, що описують вищі порядки стандартної теорії збурень Релея–Шредінґера.

II. РЕКУРЕНТНА СХЕМА ОБЧИСЛЕННЯ ЕНЕРҐІЙ

Щоб отримати розв'язок системи рівнянь (6), розкладемо функції $V(r)$, $m(r)$, $F(r)$, $P(r)$, $Q(r)$ у ряди Тейлора за степенями нової змінної $x = (r - r_0)/r_0$ — відхилення від мінімуму ефективного потенціалу:

$$V(r) = \sum_{i=0}^{\infty} V_i x^i, \quad m(r) = \sum_{i=0}^{\infty} m_i x^i, \quad F(r) = \sum_{i=0}^{\infty} F_i x^i,$$
$$P(r) = \sum_{i=0}^{\infty} P_i x^i, \quad Q(r) = \sum_{i=0}^{\infty} Q_i x^i, \tag{13}$$

де $V_i = r_0^i V^{(i)}(r_0)/i!$, $m_i = r_0^i m^{(i)}(r_0)/i!$, а F_i, P_i та Q_i виражаються через V_i, m_i.

Розгляньмо перше рівняння з (6), яке визначає функцію $C_0(r)$. Подавши її квадрат у вигляді

$$C_0^2(r) = \omega^2 x^2 (1 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots), \tag{14}$$

де

$$\omega = \sqrt{2(m_0 V_2 + m_1 V_1) + \frac{2 m_0 V_1}{2m_0 + m_1}(3m_0 - m_2)},$$
$$a_i = \frac{2}{\omega^2}\Bigg(\sum_{j=0}^{i+1} m_j V_{i-j+2} + \frac{m_0^2 V_1}{2m_0 + m_1}\left((i+3)(-1)^i - \frac{m_{i+2}}{m_0} \right) \Bigg), \tag{15}$$

знаходимо коефіцієнти розкладу функції $C_0(x)$ у ряд Тейлора

$$C_0(x) = -\omega x \sqrt{1 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots} = x \sum_{i=0}^{\infty} C_i^0 x^i, \tag{16}$$

$$C_0^0 = -\omega, \quad C_i^0 = \frac{1}{2\omega}\Big(\sum_{j=1}^{i-1} C_j^0 C_{i-j}^0 - \omega^2 a_i\Big). \tag{17}$$

Знак “$-$” у (16) обрано, щоб задовольнити граничні умови: $C_0(r) > 0$ при $r < r_0$, $C_0(r) < 0$ при $r > r_0$, які випливають з умови квадратичної інтеґровності хвильової функції.

Функція $C_0(x)$ має простий нуль у точці $x = 0$. Тоді, аналізуючи систему рівнянь (6), доходимо висновку, що функція $C_k(x)$ має в цій точці полюс, порядок якого дорівнює $(2k-1)$, а отже може бути розкладена в її околі в ряд Лорана

$$C_k(x) = x^{1-2k} \sum_{i=0}^{\infty} C_i^k x^i. \tag{18}$$

Застосовуючи теорему про лишки, виразимо умови квантування (12) через коефіцієнти C_i^k

$$C_{2k-2}^k = \frac{n_r}{r_0}\delta_{1,k}. \tag{19}$$

Підставляючи отримані розклади в (6) і збираючи коефіцієнти при однакових степенях x, одержимо рекурентні формули для обчислення решти коефіцієнтів C_i^k, а також поправок до власних значень енерґії E_k

$$C_i^k = \frac{1}{2C_0^0}\Bigg[\Theta(2-2k+i)\Bigg(\gamma_k(-1)^i(3-2k+i) + F_{i-2}\delta_{k,2} - \frac{m_{i+2-2k}}{m_0}\Bigg(\gamma_k - \frac{1}{r_0}C_{2k-2}^{k-1} - \sum_{j=0}^{k}\sum_{p=0}^{2k-2} C_p^j C_{2k-2-p}^{k-j}\Bigg)\Bigg) - \frac{3-2k+i}{r_0}C_i^{k-1} - \sum_{j=1}^{k-1}\sum_{p=0}^{i} C_p^j C_{i-p}^{k-j} - 2\sum_{p=1}^{i} C_p^0 C_{i-p}^k\Bigg], \quad i \neq 2k-2, \tag{20}$$

$$E_k = \frac{1}{2m_0}\left(\gamma_k + F_0\delta_{k,2} - \frac{1}{r_0}C_{2k-2}^{k-1} - \sum_{j=0}^{k}\sum_{p=0}^{2k-2} C_p^j C_{2k-2-p}^{k-j}\right), \tag{21}$$

де $\Theta(k)$ — сходинкова функція ($\Theta(k) = 1$ для $k \geq 0$).

Виведені формули повністю розв'язують проблему знаходження спектра енерґій рівняння Шредінґера з масою, залежною від координат.

Як приклад розрахуємо власні значення енерґії в полі кулонівського притягання $V(r) = -q/r$ за наявності змінної маси

$$m(r) = \frac{m_c}{(1 + ar)^{\lambda}}, \tag{22}$$

де сталі q, m_c та a вважаємо додатними. Параметри Λ, A, B оберемо у вигляді

$$\Lambda = \hbar(n_r + l + 1), \quad A = -2n_r - 1, \quad B = n_r^2 + n_r, \quad (23)$$

який за сталої маси забезпечує відтворення формули Бальмера для енерґій уже в нульовому наближенні E_0 методу $\hbar$-розкладу. Параметри впорядкування покладемо рівними $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$, що відповідає формі кінетичної частини ефективного гамільтоніана, виведеного для кристалів зі слабкою просторовою неоднорідністю [6, 25].

Розраховані при різних значеннях λ часткові суми $\hbar$-розкладів для енерґій $E^{(k)} = E_0 + E_1\hbar + \ldots + E_k\hbar^k$ наведені в таблиці 1 разом з точними значеннями енерґій E_{num}, отриманими за допомогою чисельного інтегрування. Обчислення проведено для станів з $n_r = 0$, $l = 2$ та $n_r = 1$, $l = 1$ при $q = 10$, $a = 0.1$ у системі одиниць, де $\hbar = 2m_c = 1$.

k	$(n_r = 0,\, l = 2)$				$(n_r = 1,\, l = 1)$			
	$\lambda = 2$	$\lambda = 3$	$\lambda = -2$	$\lambda = -3$	$\lambda = 2$	$\lambda = 3$	$\lambda = -2$	$\lambda = -3$
	$\lvert E^{(k)} \rvert$							
0	1.77778	1.18817	3.64395	4.04566	1.77778	1.18817	3.64395	4.04566
1	1.94444	1.45345	3.50153	3.83753	2.27778	1.98401	3.21669	3.42127
2	1.83333	1.25876	3.58047	3.94991	2.07556	1.66974	3.39891	3.69143
3	1.83000	1.24978	3.57934	3.94732	2.05556	1.61180	3.39064	3.67228
4	1.83111	1.25190	3.58015	3.94898	2.06000	1.62647	3.39352	3.67887
5	1.83111	1.25184	3.58014	3.94896	2.06000	1.62478	3.39330	3.67837
	$\lvert E_{\text{num}} \rvert$							
	1.83111	1.25183	3.58014	3.94897	2.06000	1.62510	3.39329	3.67834

Таблиця 1. Модулі часткових сум $E^{(k)}$ поправок до енерґій у кулонівському полі за наявності змінної маси (22).

Зауважимо, що в окремому випадку $\lambda = 2$ задача має точний розв'язок [15] і техніка $\hbar$-розкладу дозволяє його відтворити. Справді, в цьому випадку маємо $E_5 = E_6 = \ldots = 0$, а $E^{(4)}$, як це видно з таблиці 1, збігається з точним значенням енерґії.

III. ПОРЯДОК РОЗТАШУВАННЯ ЕНЕРҐЕТИЧНИХ РІВНІВ

Застосуємо одержані рекурентні формули (21) до визначення порядку розташування енерґетичних рівнів у кулонівському полі за наявності залежної від координат маси.

Передусім зауважимо, що для обраних значень параметрів упорядкування $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$ існує нерівність, що визначає, у який бік зміщені енерґетичні рівні щодо випадку сталої маси. А саме, якщо $m(r)$ і m_c — змінна та стала маси, то для відповідних власних значень енерґії $E(n_r, l)$ та $E_c(n_r, l)$ маємо

$$E(n_r, l) \gtreqless E_c(n_r, l), \text{ якщо } \forall r \in [0, \infty)\ m(r) \lesseqgtr m_c, \quad (24)$$

за умови, що зв'язані стани з такими значеннями квантових чисел існують.

Нерівність (24) справедлива не тільки для кулонівського, але й для будь-якого іншого потенціалу притягання, бо вона є безпосереднім наслідком варіаційного визначення дискретного спектра обмеженого знизу гамільтоніана [26]. Ця нерівність, зокрема, пояснює передбачуване у праці [27] збільшення енерґій зв'язку домішкових зв'язаних станів у квантових точках при введені залежної від координат маси.

Для отримання подальших нерівностей зафіксуємо вигляд змінної маси (22) й розглянемо нульову та першу поправки $\hbar$-розкладу, внесок яких в енерґію є визначальним. За формулами (11) і (21) одержуємо

$$E_0 = -\frac{q}{r_0} + \frac{\Lambda^2}{2m_c r_0^2}(1 + ar_0)^\lambda,$$
$$E_1 = \frac{(2n_r + 1)(1 + ar_0)^\lambda(\omega r_0 - \Lambda)}{2m_c r_0^2}, \quad (25)$$

де

$$\omega = \sqrt{\frac{m_c q(1 + ar_0)^{-\lambda - 1}[a^2 r_0^2(2 - \lambda)(1 - \lambda) + 2ar_0(2 - \lambda) + 2]}{r_0(2 + (2 - \lambda)ar_0)}}. \quad (26)$$

Суму цих двох поправок зручно подати так:

$$E_0 + \hbar E_1 = E_B + \frac{m_c q^2}{2s^2\Lambda^2}\left[t^\lambda - 1 + (s - 1)^2 + \frac{\hbar(2n_r + 1)(\omega r_0/\Lambda - 1)}{\Lambda} t^\lambda\right]. \quad (27)$$

Тут $E_{\rm B} = -m_{\rm c}q^2/2\hbar^2(n_r+l+1)^2$ — енерґія за сталої маси, $t = 1+ar_0$, $s = t^\lambda - \frac{\lambda}{2}(t^\lambda - t^{\lambda-1})$.

Визначимо на основі виразу (27) взаємне розташування енерґетичних рівнів, що відповідають одному й тому самому значенню головного квантового числа $n = n_r+l+1$ та за сталої маси є виродженими. Величини Λ, r_0, ω, t, s, які містяться у (27), залежать від n, але не від n_r та l окремо, і тому не можуть забезпечувати зняття виродження. Але його забезпечує останній доданок у квадратних дужках завдяки множнику $(2n_r+1)$. Знак цього доданка збігається зі знаком величини $(\omega r_0/\Lambda - 1)$, для якої знаходимо

$$\begin{aligned}\frac{\omega r_0}{\Lambda} - 1 &= \frac{\omega^2 r_0^2/\Lambda^2 - 1}{\omega r_0/\Lambda + 1} \\ &= -\frac{\lambda a r_0\,[2+(3-\lambda)ar_0]}{2(\omega r_0/\Lambda+1)(1+ar_0)^2}.\end{aligned} \tag{28}$$

Вочевидь, при $\lambda < 0$ маємо $(\omega r_0/\Lambda - 1) > 0$ і, як наслідок, рівень із квантовими числами (n_r, l) буде розташований вище за рівень $(n_r-1, l+1)$.

Доведемо тепер, що при $\lambda > 0$ взаємне розташування рівнів буде протилежним, тобто $E(n_r,l) < E(n_r-1,l+1)$. Як це видно з (28), достатньо показати, що $2+(3-\lambda)ar_0 > 0$ при $\lambda > 0$. Рівняння (10) для знаходження r_0, яке можна записати у вигляді

$$r_0 = \frac{\Lambda^2}{m_{\rm c}q}\left[t^\lambda - \frac{\lambda}{2}(t^\lambda - t^{\lambda-1})\right] = \frac{\Lambda^2}{m_{\rm c}q}s, \tag{29}$$

має додатний корінь лише за умови $s > 0$, звідки випливає $ar_0 = t-1 < 2/(\lambda-2)$ при $\lambda > 0$. Відтак маємо $2+(3-\lambda)ar_0 > ar_0 > 0$, що й треба було довести.

Отже, введення залежної від координат маси $m(r) = m_{\rm c}/(1+ar)^\lambda$ приводить до зняття "випадкового" виродження у спектрі енерґій, причому

$$E(n_r,l) \lesseqgtr E(n_r-1,l+1) \qquad \lambda \gtrless 0. \tag{30}$$

Зазначимо, що в разі $\lambda < 0$ такий порядок розташування рівнів збігається з характерним для спектрів мюонних атомів, а також спектра згладженого кулонівського потенціалу [28].

Далі розгляньмо відстані за шкалою енерґій між рівнями з однаковими значеннями $n = n_r+l+1$ й оцінімо величину відношення

$$R = \frac{E(n_r-1,l+1) - E(n_r,l)}{E(n_r,l) - E(n_r+1,l-1)}. \tag{31}$$

Використаймо наближений вираз для енергії з урахуванням перших трьох поправок $E = E_0 + E_1\hbar + E_2\hbar^2$. Для E_2 за рекурентними формулами (21) одержуємо

$$\begin{aligned}E_2 = {}&\frac{t^{\lambda-2}}{16 m_{\rm c}\omega^2 r_0^4}(n_r^2+n_r)\Bigg[-8\Lambda^2(ar_0(\lambda-2)-2)^2 \\ &-8\Lambda\omega r_0\Bigg(6(1+a_1) - 3a^2r_0^2(\lambda-2)(1+\lambda+a_1) + ar_0\Big(12(1+a_1) - \lambda(3a_1-4)\Big)\Bigg) \\ &-\omega^2 r_0^2\Bigg(a^2r_0^2(16\lambda^2 + 15a_1^2 + 8\lambda(3a_1+1) - 12a_2 - 8) + 2ar_0(15a_1^2 + 12\lambda a_1 - 12a_2 - 8) + 15a_1^2 - 12a_2 - 8\Bigg)\Bigg] \\ &+ f(n) \equiv \frac{t^{\lambda-2}}{16 m_{\rm c}\omega^2 r_0^4}(n_r^2+n_r)g + f(n),\end{aligned} \tag{32}$$

де $f(n)$ — функція, залежна лише від n, але не від l та n_r окремо. Конкретний її вигляд для нас не важливий, тому що ми розглядаємо рівні з однаковим n.

Комбінуючи вирази (27) і (32), знаходимо шукане відношення

$$R = \frac{1+(2n_r-1)b_1/b_2}{1+(2n_r+1)b_1/b_2}, \tag{33}$$

де

$$b_1 = \frac{t^{\lambda-2}\hbar^2 g}{16 m_{\rm c}\omega^2 r_0^4}, \tag{34}$$

$$b_2 = \left[\frac{m_{\rm c}q^2 t^\lambda \hbar}{\Lambda^3 s^2}\left(\frac{\omega r_0}{\Lambda} - 1\right) + \frac{t^{\lambda-2}\hbar^2 g}{16 m_{\rm c}\omega^2 r_0^4}\right]. \tag{35}$$

Вочевидь, $R < 1$ при $b_1/b_2 > 0$, $R > 1$ при $b_1/b_2 < 0$. Аналітично знак b_1/b_2 вдається встановити у разі, коли координатно-залежна маса змінюється повільно. Вважаючи параметр a малим і здійснюючи розклади в ряди Тейлора за його степенями, одержимо $b_1/b_2 = \hbar/(\hbar - 2\Lambda) + O(a)$. Тоді з (23) випливає, що $b_1/b_2 < 0$.

Отже, маємо нерівність

$$\frac{E(n_r-1,l+1) - E(n_r,l)}{E(n_r,l) - E(n_r+1,l-1)} > 1, \tag{36}$$

виконання якої підтверджують чисельні розрахунки, проведені при різних, не обов'язково малих значеннях a та λ. Ця нерівність означає, що зміщення за шкалою енерґій, зумовлене введенням змінної маси, є більшим для рівнів з більшим орбітальним квантовим числом.

Слід додати, що в літературі відомий аналіз особливостей спектру рівняння Дірака з кулонівським потенціалом та залежною від координат масою [29, 30]. Як він засвідчує, релятивістські чинники, зокрема пов'язана зі змінною масою додаткова спін-орбітальна взаємодія, також впливають на порядок розташування енерґетичних рівнів.

ВИСНОВКИ

У цій статті розроблено техніку наближеного обчислення власних значень енерґії радіального рівняння Шредінґера з масою, залежною від координат. Заснована на розкладах за степенями сталої Планка з наступним розглядом системи в околі мінімуму ефективного потенціалу, ця техніка дає змогу обчислювати поправки до енерґій, власне кажучи, довільного порядку як в аналітичному, так і в чисельному вигляді.

Як приклад досліджено спектр кулонівського потенціалу за наявності змінної маси $m(r) = m_{\rm c}/(1 + ar)^{\lambda}$ й виведено нерівності, що регламентують порядок розташування енерґетичних рівнів такої системи. Зокрема нерівності (30) і (36) визначають, як відбувається зняття "випадкового" виродження, властивого кулонівській задачі зі сталою масою.

Одержані за розробленою технікою вирази для енерґій також можна застосувати до вивчення залежності енерґетичних спектрів наносистем сферичної симетрії від їх радіуса, що є актуальною проблемою сучасної нанофізики.

[1] J. C. Slater, Phys. Rev. **76**, 1592 (1949); H. M. James, Phys. Rev. **76**, 1611 (1949); J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
[2] B. D. Serot, J. D. Walecka, Adv. Nucl. Phys. **16**, 1 (1986).
[3] F. Arias de Saavedra, J. Boronat, A. Polls, A. Fabrocini, Phys. Rev. B **50**, 4248 (1994).
[4] A. Puente, L. Serra, M. Casas, Z. Phys. D **31**, 283 (1995).
[5] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Editions de Physique, Les Ulis, 1988).
[6] K. Young, Phys. Rev. B **39**, 13434 (1989).
[7] G. L. Herling, M. L. Rustgi, J. Appl. Phys. **71**, 796 (1992).
[8] E. Borovitskaya, M. S. Shur, Solid-State Electronics **44**, 1609 (2000).
[9] Y. Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee, S. M. Sze, Solid State Commun. **120**, 79 (2001).
[10] H. Voss, J. Comput. Phys. **217**, 824 (2006).
[11] E. A. Muljarov, E. A. Zhukov, V. S. Dneprovskii, Y. Masumoto, Phys. Rev. B **62**, 7420 (2000).
[12] М. В. Ткач, О. М. Маханець, А. М. Грищук, Журн. фіз. досл. **11**, 220 (2007).
[13] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Makhanets, M. Dovganiuk, J. Phys. Stud. **13**, 4706 (2009).
[14] A. D. Alhaidari, Phys. Rev. A **66**, 042116 (2002).
[15] C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 4267 (2004).
[16] B. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 2929 (2005).
[17] L. Mlodinow, M. Shatz, J. Math. Phys. **25**, 943 (1984).
[18] T. Imbo, A. Pagnamenta, U. Sukhatme, Phys. Rev. D **29**, 1669 (1984).
[19] В. М. Вайнберг, В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сергеев, А. В. Щеблыкин, Теор. мат. физ. **74**, 399 (1988).
[20] С. С. Степанов, Р. С. Тутик, Теор. мат. физ. **90**, 208 (1992).
[21] I. O. Vakarchuk, J. Phys. Stud. **6**, 46 (2002).
[22] O. von Roos, Phys. Rev. B. **27**, 7547 (1983).
[23] A. Zwaan, *Intensitäten in Ca-Funkenspectrum*: Thesis (Utrecht, 1929).
[24] J. L. Dunham, Phys. Rev. **41**, 713 (1932).
[25] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
[26] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики. Т. 4* (Мир, Москва, 1982).
[27] A. John Peter, K. Navaneethakrishnan, Physica E **40**, 2747 (2008).
[28] R. L. Hall, N. Saad, K. D. Sen, H. Ciftci, Phys. Rev. A **80**, 032507 (2009).
[29] I. O. Vakarchuk, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 4727 (2005).
[30] I. O. Vakarchuk, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 7567 (2005).

$\hbar$-EXPANSION FOR THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH A POSITION-DEPENDENT MASS

D. A. Kulikov[1], V. M. Shapoval[2]

[1] *Theoretical Physics Department, Oles Honchar Dnipropetrovsk National University, 72 Gagarin Avenue, Dnipropetrovsk, 49010, Ukraine, kulikov@dsu.dp.ua,*

[2] *Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, 14-b Metrolohichna St., Kiev, 03680, Ukraine, shapoval@bitp.kiev.ua*

A recursion technique of obtaining the asymptotical expansions for the bound-state energy eigenvalues of the radial Schrödinger equation with a position-dependent mass is presented. As an example of the application we calculate the energy eigenvalues for the Coulomb potential in the presence of position-dependent mass and we derive the inequalities regulating the shifts of the energy levels from their constant-mass positions.