

**Якубовский Евгений Георгиевич**

инженер

ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский горный университет»

г. Санкт-Петербург

## НОВЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

*Аннотация:* в статье представлены новые решения уравнения Шредингера.

*Ключевые слова:* уравнение Шредингера, квантовая механика.

Разработан новый метод решения уравнения Шредингера для каждого электрона по отдельности. Это возможно сделать в новом методе решения уравнения Шредингера.

При этом решение ищется в виде  $\psi(t, r, \theta) = \exp[-i(Et/\hbar - \int_0^r k(u)du)]f(\theta)/r$ , относительно новой переменной  $k(r)$ .

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

Уравнение Шредингера имеет вид

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

Подставим решение

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

в дифференциальное уравнение, получим

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

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - i \frac{dk}{dr}) + U(r) + \frac{\lambda \hbar^2}{2mr^2}$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \sin \theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \right\} = \lambda f(\theta), \lambda = l(l+1)$$

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

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k^2 - i \frac{dk}{dr} \right) + U(r) + \frac{\lambda \hbar^2}{2mr^2}$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \sin \theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \right\} = \lambda f(\theta), \lambda = l(l+1)$$

Если взять волновую функцию в виде

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

то получим дифференциальное уравнение

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

Продифференцируем это уравнение по радиусу, получим

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

$$V_r = \frac{\hbar k}{m} = -i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \ln \psi}{\partial r}$$

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

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

Уравнение Шредингера сводится к уравнению

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 2\varepsilon = k^2 - i \frac{dk}{dr} + u(r); u(r) = \frac{2mU(r)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} = -\frac{2}{r}; l = 0. \quad (2)$$

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

$$ik(r) = \frac{d}{dr}[-r/n + (l+1) \ln r + \ln L_{nl}(r)] =$$

$$= \frac{-1}{n_r + l + 1} + \frac{l+1}{r} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r - a_{kr}} + \sum_{k=1}^{n_i} \frac{1}{|r - \beta_{ki}|^{0.5}}. \quad (3)$$

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

Где величина  $n_r$  радиальное квантовое число, где величина  $\beta_{ki}$  комплексная, а величина  $a_{kr}$  действительная

$$ik(r) = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{\sqrt{\frac{1}{4} + b + \frac{1}{2}}}{r} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r - a_{kr}} + \sum_{k=1}^{n_i} \frac{1}{|r - \beta_{ki}|^{0.5}}. \quad (4)$$

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

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

При этом волновая функция равна

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

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

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

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

В случае  $n_r = 1$  получаем путем вычислений значение энергии  $\varepsilon_{1b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4 + b} + 3/2)^2}$ . Волновая функция при этих значениях параметра равна

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

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

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

Существует формула для энергии многоэлектронного атома относительно декартовых координат для случая отсутствия затухания см [2] в случае дифференциального уравнения  $\frac{dx_l}{cdt} = \sqrt{\prod_{k=1}^N (1 - \frac{x_l}{a_{kl}}) (1 - \frac{x_l^*}{a_{kl}^*})}$ , но она для радиальной зависимости не применима. В случае действительного смещения координаты имеем см [2].

$$E_N = \hbar_{eff} c \sum_{k=1}^N \frac{\prod_{n=1}^N (1 - \frac{x_l}{a_{nl}})}{a_{kl} (1 - \frac{x_l}{a_{kl}})} = \hbar_{eff} c \sum_{k=1}^N \frac{1}{a_{kl}} \prod_{\substack{n=1 \\ k \neq n}}^N (1 - a_{kl}/a_{nl})$$

Волновая функция для этого дифференциального уравнения равна

$$\psi_{lN}(x_l) = \sqrt{\prod_{k=1}^N (1 - \frac{x_l}{a_{kl}}) (1 - \frac{x_l^*}{a_{kl}^*})}$$

Где величина  $a_{kl}$  действительная или комплексная произвольная.

Решение ищется при потенциале  $u(r_1, \dots, r_Z) = \sum_{k=1}^Z [-\frac{1}{r_k} + \sum_{n=1}^{n_r} \frac{l_{nk_r}(l_{nk_r}+1)}{r_k^2} + \sum_{n=1}^{n_i} \frac{l_{nk_i}(l_{nk_i}+1)}{r_k^2}]$ ;  $l_{nk_r} = \sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} - \frac{3}{2} + \lambda_{nk_r}}$ ;  $l_{nk_i} = \sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} - \frac{3}{2} + \lambda_{nk_i}}$ . Данное

значение потенциала сильно упрощает задачу нахождения действительного решения, так как есть непосредственная зависимость от радиуса. Для вычисления

энергии многоэлектронного атома надо задавать квантовые числа  $b_{nk_r}, \lambda_{nk_r}, b_{nk_i}, \lambda_{nk_i}, k = 1, \dots, Z; k_r = 1, \dots, n_r; k_i = 1, \dots, n_i$ .

В случае  $n_r = 1$  получаем путем вычислений при  $n_r = 1$

значение энергии  $\varepsilon_{1b} = -\frac{1}{2\text{Re}(\sqrt{\frac{1}{4}+b+\frac{1}{2}+\lambda})^2}$ . Волновая функция при этих значе-

ниях параметра равна

$$\psi(r) = \prod_{k=1}^Z \exp\left(-\frac{r_k}{\text{Re}(\sqrt{\frac{1}{4}+b_k+\frac{1}{2}+\lambda_k})}\right) \prod_{n=1}^{n_r} r_k^{\sqrt{\frac{1}{4}+b_{nk}}\frac{3}{2}+\lambda_{nk}} [r_k - (\sqrt{\frac{1}{4}+b_{nk}} - \frac{1}{2} + \lambda_{nk}) \cdot (\sqrt{\frac{1}{4}+b_{nk}} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk})].$$

При условии  $b = 0$  получаем правильное значение волновой функции. Рассмотрим формулы для атома водорода.

$$R_{n_l}(r) = \exp\left(-\frac{r}{n_r+l+1}\right) r^l \prod_{k=1}^{n_r} [r - (l+k) \cdot (l+k+1)]$$

$$R_{20}(r) = \exp\left(-\frac{r}{2}\right)(r-2) \sim \exp\left(-\frac{r}{2}\right)(1-r/2); n_r = 1; l = 0; \lambda_{n_1} = 1$$

$$R_{21}(r) = \exp\left(-\frac{r}{2}\right)r; b_n = l(l+1); n_r = 0; \lambda_{n_1} = 1; l = 1$$

$$R_{30}(r) = \exp\left(-\frac{r}{3}\right)\left(1 - \frac{2}{3}r - \frac{2}{27}r^2\right) = \exp\left(-\frac{r}{3}\right)\left(1 - \frac{r(1+1/\sqrt{3})}{3}\right)\left(1 - \frac{r(1-1/\sqrt{3})}{3}\right) \\ = \exp\left(-\frac{r}{n}\right)\left[1 - \frac{(1+\frac{1}{\sqrt{n}})r}{n}\right] \cdot \left[1 - \frac{(1-\frac{1}{\sqrt{n}})r}{n}\right];$$

$$R_{n0}(r) = \exp\left(-\frac{r}{n}\right) \prod_{k=0}^{n_r-1} \left[1 - \frac{r \left[1 + \frac{n_r \sqrt{n_r-1}}{\sqrt{n_r+1}} \exp\left(2i\pi \cdot \frac{k}{n_r}\right)\right]}{n_r+1}\right]; n_r \geq 1$$

В результате получена волновая функция  $R_{n0}(r)$

$$R_{31}(r) = \exp\left(-\frac{r}{3}\right)r(r-6) \sim \exp\left(-\frac{r}{3}\right)r(1-r/6);$$

$$b_3 = l(l+1); l = 1; n_r = 1; \lambda_{31} = 1$$

$$R_{32}(r) = \exp\left(-\frac{r}{3}\right)r^2; b_3 = l(l+1); l = 2; n_r = 0; \lambda_{32} = 1.$$

При фиксированном  $n$  кроме одного получается решение для одного электрона.

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

Выводы

Получена волновая функция для каждого электрона в атоме. Кроме того, получен общий вид волновой функции, который можно использовать для нахождения полной энергии атома. Общая волновая функция имеет вид.

Формула для атома водорода.

$$R_{nl}(r) = \exp\left(-\frac{r}{n_r + l + 1}\right) r^l \prod_{k=1}^{n_r} [r - (l + k) \cdot (l + k + 1)]$$

$$R_{n0}(r) = \exp\left(-\frac{r}{n}\right) \prod_{k=0}^{n_r-1} \left[ 1 - \frac{r \left[ 1 + \frac{n_r \sqrt{n_r-1}}{\sqrt{n_r+1}} \exp\left(2i\pi \cdot \frac{k}{n_r}\right) \right]}{n_r + 1} \right] =$$

$$= A \cdot \exp\left(-\frac{r}{n}\right) \prod_{k=0}^{n_r-1} \left[ r - \frac{n_r + 1}{1 + \frac{n_r \sqrt{n_r-1}}{\sqrt{n_r+1}} \exp\left(2i\pi \cdot \frac{k}{n_r}\right)} \right]; n_r \geq 1; \varepsilon_n = -\frac{1}{2n^2}$$

Формула для многоэлектронного атома в случае комплексных смещений см [2].

$$\psi_{Zn_r n_i k_r k_i l_r l_i}(r) = \prod_{k=1}^Z \exp\left(-\sum_{n=1}^{n_r} \frac{r_k}{\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_r}}}\right) \cdot \prod_{n=1}^{n_r} r_k^{\left(\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} - \frac{1}{2}}\right)/n_r} \cdot$$

$$\prod_{n=1}^{n_i} \frac{r_k}{\left|\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_i}}\right|} \cdot \prod_{n=1}^{n_r} r_k^{\left(\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} - \frac{1}{2}}\right)/n_r} \cdot$$

$$\cdot \left[ r_k^{-\left(\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} - \frac{1}{2} + \lambda_{nk_r}}\right)} \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_r}}\right) \right] \cdot$$

$$\cdot \prod_{n=1}^{n_i} r_k^{\left|\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} - \frac{1}{2}}\right|/n_i} \cdot$$

$$\cdot \left| r_k \cdot \left( \sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} - \frac{1}{2} + \lambda_{nk_i}} \right) \cdot \left( \sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_i}} \right) \right|$$

$$\psi_{Zn_r n_i n_0}(r) = \prod_{k=1}^Z \exp\left(-\frac{r_k}{n_r + 1}\right) \cdot$$

$$\cdot \prod_{n=0}^{n_r-1} \left[ 1 - \frac{r_k \left[ 1 + \frac{n_r \sqrt{n_r-1}}{n_r \sqrt{n_r+1}} \exp\left(2i\pi \cdot \frac{n}{n_r}\right) \right]}{n_r + 1} \right]'; n_r \geq 1$$

Где величина  $n_i$  количество комплексных смещений радиуса. При полной энергии, определяемой по формуле

$$\varepsilon_{nb} = - \left[ \sum_{k_r=1}^Z \sum_{n=1}^{n_r} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_r} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_r}}} + \sum_{k_i=1}^Z \sum_{n=1}^{n_i} \frac{1}{\left| \sqrt{\frac{1}{4} + b_{nk_i} + \frac{1}{2} + \lambda_{nk_i}} \right|} \right]^2 / 2$$

Для вычисления энергии многоэлектронного атома надо задавать квантовые числа  $b_{nk_r}, \lambda_{nk_r}, b_{nk_i}, \lambda_{nk_i}, k_r = 1, \dots, Z; k_i = 1, \dots, Z$ . Но проблемы на этом не кончаются, необходимо создать алгоритм определения квантовых чисел. Например,

величины  $\lambda_{nk_r} = k_r; \lambda_{nk_i} = k_i; b_{nk_r} = l_{effr}(l_{effr} + 1); b_{nk_i} = l_{effi}(l_{effi} + 1)$ .

Задавать надо целые числа  $n_r, n_i$  и не целые числа  $k_r, k_i, l_{k_r}, l_{k_i}$  возможно зависящие от спина с зависимостью  $l_k = n + l_{k_r}; l_{effr} =$

$$\sqrt{l_k(l_k + 1) + 1/4 + \frac{(-1)^{l_k+n+1}}{137.036 l_k^{1.05}} \frac{s_{1k}(s_{1k}+1)+s_{2k}(s_{2k}+1)}{0.138 \cdot [1+l_k(0.4-(l_k-1)1.275]}} - 0.5 \text{ при условии } s_{1k} =$$

$$\frac{1}{2}; s_{2k} = -\frac{1}{2}; S_k = 0 \quad \text{и} \quad \text{значение} \quad l_k = n + l_{k_r}; l_{eff} =$$

$$\sqrt{l_k(l_k + 1) + \frac{1}{4} - \frac{1}{137.036 l_k^{1.05}} \frac{s_{1k}(s_{1k}+1)+s_{2k}(s_{2k}+1)}{0.433 \cdot \left[ 1+l_k \left( 2 - \frac{4l_k^2}{5} \right) \right]}} - 0.5 \text{ при условии } s_{1k} = \frac{1}{2}; s_{2k} =$$

$\frac{1}{2}; S_k = 1$  см [3]. Кроме того, аналогичные формулы для комплексного смещения радиуса. Поправки на спин вычислены для атома гелия и водородоподобного атома, но распространены как приближенные на произвольный атом.

### ***Список литературы***

1. Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Т. 3. – М.: Наука, 1989. – 768 с.
2. Якубовский Е.Г. Квантовая механика, ОТО, уравнения Навье-Стокса и их связь, как нелинейных уравнений в частных производных: монография / Е.Г. Якубовский. – Тамбов: Юконф, 2024. – 102 с. – EDN GPVOEA
3. Якубовский Е.Г. Расчет возбужденных состояний атома гелия / Е.Г. Якубовский [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://disk.yandex.ru/i/kvu6nlFRPxVbrw> (дата обращения: 22.07.2024).