Univerzita Karlova v Praze

Matematicko-fyzikální fakulta

DISERTAČNÍ PRÁCE

Vladimír Tichý

Analytická řešení dvojrozměrné Schrödingerovy rovnice

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí disertační práce:	prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc.
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Teoretická fyzika, astronomie a astrofyzika

Praha 2012

Děkuji svojemu školiteli, panu prof. RNDr. Lubomíru Skálovi DrSc. za obětavou pomoc s touto prací.

Prohlašuji, že jsem tuto disertační práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne ..... Podpis autora

Název práce: Analytická řešení dvojrozměrné Schrödingerovy rovnice

Autor: Mgr. Vladimír Tichý

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky MFF UK

Vedoucí disertační práce: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Katedra chemické fyziky a optiky MFF UK

Abstrakt: Dizertační práce se zabývá hledáním metody pro analytické řešení dvojrozměrné Schrödingerovy rovnice v případech, kdy ji není možné řešit separací souřadnic. Výsledky jsou aplikovány na Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru kvartického polynomu, tvaru sextického polynomu a tvaru kvartického Morseho potenciálu. V těchto případech byly nalezeny analytické formule pro vlnové funkce základního stavu a příslušnou hodnotu energie. Pro specifickou třídu potenciálů typu kvartického polynomu se podařilo najít i analytickou formuli pro vlnovou funkci jednoho excitovaného stavu a odpovídající energii.

Klíčová slova: Schrödingerova rovnice, analytická řešení, algebraické metody

Title: Analytical Solutions of Two-Dimensional Schrödinger Equation

Author: Mgr. Vladimír Tichý

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: prof. RNDr. Lubomír Skála DrSc., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: The goal of the dissertation is to find new method of solving two-dimensional Schrödinger equation in such cases, when the separation of the variables is not applicable. The results are applied to the two-dimensional Schrödinger equation with the potentials of the form of the quartic polynomial, of the sextic polynomial and of the quartic Morse potential. For these cases, the analytical formulae for the ground state wave functions and the corresponding energies have been found. For the specific class of the potentials of the form of the quartic polynomial, analytical formula for one of the excited states and for the corresponding energy have been found.

Keywords: Schrödinger equation, analytical solutions, algebraic methods

Obsah

Úvod **2**

1 Úvod **3**

2 Řešení dvojrozměrných problémů s polynomiálním potenciálem **6**
2.1 Výchozí úvahy 6
2.2 Potenciál tvaru dvojrozměrného kvartického polynomu 7
2.2.1 Klasifikace řešení 9
2.2.2 Základní stav ve třídě aI 9
2.2.3 Excitované stavy ve třídě aI 10
2.2.4 Základní stav ve třídě bI 11
2.2.5 Základní stav ve třídě cII 12
2.2.6 Základní stav ve třídě dII 13
2.2.7 $\mathcal{PT}$-symetrické řešení 15
2.3 Potenciál tvaru dvojrozměrného sextického polynomu 17

3 Řešení obecných dvojrozměrných problémů **20**
3.1 Výchozí úvahy 20
3.2 Dvojrozměrný kvartický Morseho potenciál 22

4 Závěr **25**

Seznam použité literatury **27**

Seznam tabulek **30**

Seznam použitých zkratek a symbolů **31**

Přílohy **33**

Předmluva

V podstatě jedinou rozšířenou metodou, jak najít analytické vzorce (t.j. vzorce vyjádřené pomocí konečného počtu operací s elementárními funkcemi) pro vlnové funkce řešící dvojrozměrnou Schrödingerovu rovnici a odpovídající energie je metoda separace proměnných. Tato metoda umožňuje ve specifických případech rozdělit dvojrozměrnou Schrödingerovu rovnici na dvě jednorozměrné. Obvykle je při tom využita skutečnost, že problém má určitou symetrii. Metod řešení jednorozměrných Schrödingerových rovnic je pak k dispozici velmi široká škála.

Přirozeně se nabízí otázka, zda existují takové typy dvojrozměrných kvantověmechanických problémů, které nelze řešit separací proměnných, je však možno je analyticky vyřešit jinou metodou. Cílem práce bylo takové problémy najít a najít vhodnou metodu, jak je analyticky vyřešit. Výchozí metodou při tom byla metoda rozvoje do funkčních polynomů pro jednorozměrné problémy.

Metodu rozvoje do funkčních polynomů se nám podařilo zobecnit i na dvojrozměrné problémy. Při tom jsme našli obecné analytické formule pro vlnové funkce základního stavu a odpovídající energii pro Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru polynomu čtvrtého řádu (kvartického polynomu) a pro specifickou třídu potenciálů tvaru polynomu šestého řádu. Pro specifickou třídu potenciálů tvaru kvartických polynomů se podařilo najít i formule pro jeden excitovaný stav a odpovídající energii. Dále byla nalezena analytická formule pro vlnovou funkci a odpovídající energii jednoho z rozptylových stavů pro jednu třídu $\mathcal{PT}$-symetrických kvartických potenciálů. Nalezli jsme též analytický vztah pro vlnovou funkci základního stavu a odpovídající energii pro kvartický Morseho potenciál.

Přehled problematiky a použitá metoda rozvoje do funkčních polynomů jsou podány v kapitole 1. V dalších kapitolách jsou pak uvedeny nové výsledky. Metoda rozvoje do funkčních polynomů pro dvojrozměrné problémy s potenciálem polynomiálního typu včetně $\mathcal{PT}$-symetrického problému je prezentována v kapitole 2. Další zobecnění metody rozvoje do funkčních polynomů, kdy je analyzováno její užití pro jiné dvojrozměrné potenciály než polynomiálního typu je uvedeno v kapitole 3.

1. Úvod

Hovoříme-li o řešení (bezčasové) Schrödingerovy rovnice, ať už jde o jednorozměrnou

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.1}$$

nebo dvoj- respektive třírozměrnou

$$-\Delta\psi(x,y) + V(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y), \tag{1.2}$$

kde

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \text{respektive} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{1.3}$$

máme na mysli dvě úlohy:

1. Nalezení vlastních čísel Hamiltonova operátoru, t.j. nalezení hodnot E, pro něž existuje ψ, které řeší rovnici (1.1), respektive (1.2).

2. Nalezení příslušných vlastních funkcí ψ

Pokud v této práci hovoříme o analytickém řešení, máme tím na mysli vyřešení obou úloh a to ve tvaru explicitních vztahů, kde jsou elementární funkce kombinovány konečným počtem operací $+, -, \cdot, /$ a skládáním. Nehledáme tedy řešení ve tvaru speciálních funkcí nebo nekonečných řad.

Některé základní problémy kvantové mechaniky lze vyřešit elementárními matematickými metodami, tyto úlohy jsou dobře známy z učebnic základů kvantové mechaniky, například [4, 11]. Těmito problémy jsou zejména volná částice, pravoúhlá potenciálová jáma nebo bariéra a harmonický oscilátor. Dále je možno řešit řadu vícerozměrných problémů, pokud je možno provést separaci vícerozměrné Schrödingerovy rovnice na jednorozměrné. Za základní problémy zde lze považovat vícerozměrné oscilátory, kdy je možno provést separaci souřadnic díky eliptické (ve speciálním případě kruhové) symetrii a vodíkový atom, kde lze díky sférické symetrii řešit samostatně radiální a úhlovou část.

V této práci se zabýváme zejména potenciály, které mají tvar polynomu čtvrtého řádu, v jednorozměrném případě to je (tzv. kvartický potenciál)

$$V(x) = V_4x^4 + V_3x^3 + V_2x^2 + V_1x. \tag{1.4}$$

Tento potenciál v sobě zahrnuje dva významné problémy: anharmonický oscilátor a dvojitou jámu. Oba modely mají významné uplatnění v chemické fyzice a dalších oblastech. Schrödingerova rovnice s potenciálem (1.4) v obecném případě analyticky řešitelná není. Problém je studován v mnoha publikacích, například [1, 3, 12, 15, 17, 18, 28, 29, 30], Ukázalo se, že pokud jsou splněny určité podmínky pro potenciálové koeficienty V_1 až V_4, pak analytická řešení existují.

Obecnější úlohou je řešení Schrödingerovy rovnice s polynomiálním potenciálem vyššího řádu nebo s potenciálem tvaru (konečné) mocninné řady, kde jsou zahrnuty i záporné exponenty (viz například [1, 10, 13, 31, 34]).

Dalším významným typem potenciálu, který má vztah k této práci, je Morseho potenciál. Ten má v jednorozměrném případě tvar

$$V(r) = D\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]^2 \tag{1.5}$$

a patří mezi analyticky řešitelné problémy. Tento potenciál je studován například v publikacích [8, 14, 19, 21, 31].

Metoda rozvoje do funkčních polynomů byla formulována pro jednorozměrné problémy[9, 22, 23]. Předmětem této práce je zobecnění této metody na dvojrozměrné úlohy a vyřešení konkrétních problémů. V práci nepředpokládáme žádnou symetrii problému a v obecném případě není možné provést separaci souřadnic.

Metoda rozvoje do funkčních polynomů vychází z pozorování, že většinu potenciálů, pro které lze najít analytická řešení (vlnové funkce i energie) příslušné Schrödingerovy rovnice, lze zapsat ve tvaru

$$V(x) = \sum_m V_m f^m(x). \tag{1.6}$$

Funkce $f(x)$ je reálná funkce splňující podmínku

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \sum_m f_m f^m(x), \tag{1.7}$$

kde f_m jsou reálné koeficienty. Sumy v rovnicích (1.6)-(1.7) jsou konečné. U základních problémů se v rovnici (1.6) předpokládá sumace od indexu 1 do kladného sudého indexu, tedy

$$V(x) = \sum_{m=1}^{2M} V_m f^m(x), \tag{1.8}$$

kde M je přirozené číslo. V obecném případě je však možno do sumy v rovnici (1.6) zahrnout i záporné indexy.

Vlnová funkce n-tého excitovaného stavu $\psi_n(x)$ je hledána ve tvaru

$$\psi_n(x) = \sum_{m=0}^{n} a_m \psi_m(x), \tag{1.9}$$

kde

$$\psi_m(x) = f^m(x) h(x). \tag{1.10}$$

přičemž pro funkci $h(x)$ byla nalezena rovnice

$$h(x) = \exp\left(- \int \sum_m h_m f^m(x) dx \right). \tag{1.11}$$

Pro konkrétní studované problémy pak byl nalezen vztah mezi koeficienty V_m v potenciálu (1.6) a koeficienty h_m v rovnici (1.11). Rovněž byly pro konkrétní problémy nalezeny rovnice pro koeficienty a_m v rovnici (1.9), pro jednotlivé stavy se tyto koeficienty liší.

Například potenciál tvaru (1.4) dostaneme tak, že v rovnici (1.8) položíme $f(x) = x$ a $M = 2$. Aby měl potenciál vázané stavy, předpokládáme že $V_4 > 0$. Jak již bylo řečeno, v obecném případě Schrödingerova rovnice s potenciálem tvaru (1.4) analytická řešení nemá. Nicméně jedním z možných problémů, pro které lze metodou rozvoje do funkčních polynomů obdržet řešení je potenciál tvaru

$$V_n = -2(n+1)|x| + x^4. \tag{1.12}$$

Řešením příslušné Schrödingerovy rovnice jsou vlnové funkce [23]

$$\begin{aligned}
\psi_0 &= e^{-|x|^3/3}, && (1.13)\\
\psi_1 &= xe^{-|x|^3/3}, && (1.14)\\
\psi_3 &= (-1+|x|^3)e^{-|x|^3/3}, && (1.15)\\
\psi_4 &= x(-2+|x|^3)e^{-|x|^3/3}, && (1.16)\\
&\dots && (1.17)
\end{aligned}$$

Poznamenejme, že absolutní hodnoty v rovnicích pro vlnové funkce ošetřují jejich asymptotické chování tak, aby byly kvadraticky integrabilní na intervalu $(-\infty, \infty)$. Aby šlo stále o řešení Schrödingerovy rovnice s potenciálem (1.12), byla absolutní hodnota doplněna i sem. V tomto příkladě stejně jako v ostatních není možné analyticky vyjádřit celé spektrum a vlnové funkce, ale pouze některé nižší stavy. Navíc jednotlivé stavy neodpovídají stejnému potenciálu.

Položíme-li v rovnici (1.8) $f(x) = 1 - \exp(-x)$ a $M = 1$, dostaneme

$$V(x) = V_1\left[1 - \exp(-x)\right] + V_2\left[1 - \exp(-x)\right]^2. \tag{1.18}$$

Po substituci $x = a(r - r_0)$ jde o potenciál ekvivalentní Morseho potenciálu (1.5). Řešení metodou rozvoje do funkčních polynomů jsou prezentována v [22] ve formě rekurentních rovnic ekvivalentních s výsledek získaným jinými metodami.

V článcích [9, 22] se též v jednorozměrných případech studuje rozšířená verze potenciálu (1.18). Dostaneme ho tak, že v rovnici (1.8) položíme $f(x) = 1 - \exp(-x)$ a $M = 2$.

$$V(x) = \sum_{n=1}^{4}\left[1 - \exp(-x)\right]^n \tag{1.19}$$

Tento potenciál je nazván kvartický Morseho potenciál a metodou rozvoje do funkčních polynomů je jeho řešení publikováno ve článcích [9, 22]. V této práci se budeme zabývat rozšířením tohoto potenciálu do dvou dimenzí.

2. Řešení dvojrozměrných problémů s polynomiálním potenciálem

2.1 Výchozí úvahy

Snaha o zobecnění metody rozvoje do funkčních polynomů na dvojrozměrné problémy byla hlavním předmětem této práce. Základními otázkami při tom bylo:

- Zobecnění výchozí rovnice (1.6) pro potenciál.
- Jaké jsou při tom vhodné „bázové“ funkce.
- Zobecnění tvaru rovnice (1.11) pro funkci $h(x)$.
- Zobecnění tvaru rovnic (1.9)-(1.10) pro vlnové funkce.

Pravá strana rovnice (1.6) představuje polynom funkce $f(x)$. Nejpřirozenějším způsobem, jak tuto rovnici zobecnit na dvojrozměrný případ se tedy jeví použít dvojrozměrný polynom funkce $f(x)$ a nějaké další funkce $g(y)$, tedy

$$V(x,y) = \sum_{m,n} V_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{2.1}$$

V této práci se omezíme na potenciály tvaru

$$V(x,y) = \sum_{m\geq 0}^{m+n\leq 2M} \sum_{n\geq 0} V_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{2.2}$$

Tato rovnice je analogická rovnici (1.8) pro jednorozměrné potenciály. Člen V_{00} představuje bezvýznamnou aditivní konstantu a bez újmy na obecnosti položíme $V_{00} = 0$. V této kapitole se dále omezíme na případ $f(x) = x$ a $g(y) = y$, potenciálem tedy bude dvojrozměrný polynom

$$V(x,y) = \sum_{m\geq 0}^{m+n\leq 2M} \sum_{n\geq 0} V_{mn} x^m y^n. \tag{2.3}$$

Pokud do rovnice (2.3) dosadíme $M = 1$, dostaneme již dobře prostudovaný problém dvojrozměrného harmonického oscilátoru známý i z učebnic základů kvantové mechaniky, například [4, 11].

Proto jsme se jako výchozí problém rozhodli pro potenciál ve tvaru polynomu čtvrtého řádu (kvartický polynom), který dostaneme, pokud do rovnice (2.3) dosadíme $M = 2$.

2.2 Potenciál tvaru dvojrozměrného kvartického polynomu

V této kapitole se tedy budeme zabývat potenciálem tvaru (2.2), kde $M = 2$

$$\begin{aligned} V(x,y) &= {W_{40}}^2 x^4 + {W_{04}}^2 y^4 + V_{31}x^3y + V_{13}xy^3 + V_{22}x^2y^2 \\ &\quad + V_{30}x^3 + V_{03}y^3 + V_{21}x^2y + V_{12}xy^2 \\ &\quad + V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + V_{11}xy + V_{10}x + V_{01}y. \end{aligned} \tag{2.4}$$

V této rovnici jsme označili $W_{40} = \pm\sqrt{V_{40}}$ a $W_{04} = \pm\sqrt{V_{04}}$. Výhodnost tohoto označení se ukáže později.

V jednorozměrných případech [9, 22, 23] byla funkce h řešící Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru (2.2) hledána ve tvaru

$$h(x,y) = \sum_{i=0}^{M+1} \exp(-d_i x^i). \tag{2.5}$$

Tato funkce současně reprezentuje vlnovou funkci základního stavu.

Na základě analogie s jednorozměrným případem budeme funkci h hledat ve tvaru

$$h(x,y) = \sum_{i\geq 0\, j\geq 0}^{i+j\leq M+1} \exp(-d_{ij}x^i y^j), \tag{2.6}$$

tedy

$$h(x,y) = \exp(-d_{30}x^3 - d_{03}y^3 - d_{21}x^2y - d_{12}xy^2 - d_{20}x^2 - d_{02}y^2 - d_{11}xy - d_{10}x - d_{01}y). \tag{2.7}$$

Koeficienty d_{ij} reprezentují hledané neznámé. Je zřejmé, že horní mez v sumě v rovnici (2.6) je určena správně. Dosadíme-li rovnice (2.4) a (2.7) do Schrödingerovy rovnice

$$-\Delta h(x,y) + V(x,y)h(x,y) = E_0 h(x,y), \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \tag{2.8}$$

dostáváme stejný řád členů na levé a pravé straně.

Po dosazení rovnic (2.4) a (2.7) do Schrödingerovy rovnice (2.8) dostaneme porovnáním koeficientů u jednotlivých členů rovnici pro energii základního stavu

$$E_0 = -{d_{10}}^2 - {d_{01}}^2 + 2d_{02} + 2d_{20} \tag{2.9}$$

a soustavu 14 rovnic pro 9 neznámých koeficientů d_{ij}

$$
\begin{aligned}
{W_{40}}^2 &= 9{d_{30}}^2 + {d_{21}}^2, && (2.10)\\
{W_{04}}^2 &= 9{d_{03}}^2 + {d_{12}}^2, && (2.11)\\
V_{31} &= 12d_{30}d_{21} + 4d_{21}d_{12}, && (2.12)\\
V_{13} &= 12d_{03}d_{12} + 4d_{12}d_{21}, && (2.13)\\
V_{22} &= 6d_{30}d_{12} + 4{d_{12}}^2 + 4{d_{21}}^2 + 6d_{21}d_{03}, && (2.14)\\
V_{30} &= 12d_{20}d_{30} + 2d_{11}d_{21}, && (2.15)\\
V_{03} &= 12d_{02}d_{03} + 2d_{11}d_{12}, && (2.16)\\
V_{21} &= 4d_{21}d_{02} + 8d_{20}d_{21} + 6d_{30}d_{11} + 4d_{11}d_{12}, && (2.17)\\
V_{12} &= 4d_{12}d_{20} + 8d_{02}d_{12} + 6d_{03}d_{11} + 4d_{11}d_{21}, && (2.18)\\
V_{20} &= 2d_{01}d_{21} + {d_{11}}^2 + 4{d_{20}}^2 + 6d_{10}d_{30}, && (2.19)\\
V_{02} &= 2d_{10}d_{12} + {d_{11}}^2 + 4{d_{02}}^2 + 6d_{01}d_{03}, && (2.20)\\
V_{11} &= 4d_{01}d_{12} + 4d_{11}d_{02} + 4d_{20}d_{11} + 4d_{10}d_{21}, && (2.21)\\
V_{10} &= 4d_{10}d_{20} - 6d_{30} + 2d_{01}d_{11} - 2d_{12}, && (2.22)\\
V_{01} &= 4d_{01}d_{02} - 6d_{03} + 2d_{10}d_{11} - 2d_{21}. && (2.23)
\end{aligned}
$$

Je zřejmé, že tato soustava obecně nebude řešitelná a že bude nutno nalézt podmínky pro koeficienty V_{ij} takové, aby soustava měla řešení. Tato situace je obdobná jednorozměrnému případu, i v jedné dimenzi má Schrödingerova rovnice s potenciálem tvaru kvartického polynomu řešení pouze při splnění dalších podmínek pro potenciál. Dále poznamenejme, že přímý postup řešení dosazovací metodou vede k algebraické rovnici šestého stupně a tedy čistě algebraickými metodami obecně k řešení nevede. Problém lze však podstatně zjednodušit předpokladem $V_{31} = 0$. Tím problému neubíráme na obecnosti, neboť pro potenciál tvaru (2.4) vždy existuje rotace, která ho transformuje do tvaru, kdy $V_{31} = 0$, což jsme dokázali v [26].

Problémem je, že vlnová funkce tvaru (2.7) nemůže být nikdy kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y). Problém můžeme řešit tak, že řešíme Schrdingerovu rovnici na zvoleném kvadrantu, obvykle $x \geq 0$, $y \geq 0$.

Jiná možnost je analogická k tomu, jak byl tento problém řešen v jednorozměrných případech v publikacích [9, 22, 23]. Vlnovou funkci modifikujeme do tvaru

$$
\begin{aligned}
\psi_0(x, y) = \exp(&-d_{30}|x|^3 - d_{03}|y|^3 - d_{21}x^2|y| - d_{12}|x|y^2\\
&- d_{20}x^2 - d_{02}y^2 - d_{11}|xy| - d_{10}|x| - d_{01}|y|).
\end{aligned} \tag{2.24}
$$

Pokud jsou vyřešeny rovnice (2.10)-(2.23), pak tato vlnová funkce řeší Schrödingerovu rovnici s potenciálem

$$
\begin{aligned}
V(x, y) = {}& {W_{40}}^2x^4 + {W_{04}}^2y^4\\
&+ V_{31}|x|^3y + V_{13}x|y|^3 + V_{22}x^2y^2\\
&+ V_{30}|x|^3 + V_{03}|y|^3 + V_{21}x^2|y| + V_{12}|x|y^2\\
&+ V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + V_{11}|xy| + V_{10}|x| + V_{01}|y|.
\end{aligned} \tag{2.25}
$$

Nevýhodou tohoto přístupu je, že vlnová funkce (2.24) nemá spojité parciální derivace na souřadných osách. Pro řešení problému kvartického potenciálu jsme

ale bohužel nenalezli jiný vhodnější přístup. Poznamenejme však, že u polynomiálního potenciálu šestého řádu obtíže s normovatelností vlnové funkce nenastávají a bylo zde nalezeno řešení, které má spojité derivace a je kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y).

2.2.1 Klasifikace řešení

Postup řešení soustavy rovnic (2.10)-(2.23) závisí na tom, zda koeficienty V_{13}, d_{12} a d_{21} jsou nulové či nikoliv. Na základě toho dostáváme 8 tříd řešení, které jsme označili aI, bI, cI, dI, aII, bII, cII, dII. Toto označení je shrnuto v tabulce 2.1, podrobnosti jsme publikovali v článku [26].

	$d_{12} = 0$, $d_{21} = 0$,	$d_{12} = 0$, $d_{21} \neq 0$	$d_{12} \neq 0$, $d_{21} = 0$	$d_{12} \neq 0$, $d_{21} \neq 0$
$V_{13} = 0$, $V_{31} = 0$	aI	bI	cI	dI
$V_{13} \neq 0$, $V_{31} = 0$	aII	bII	cII	dII

Tabulka 2.1: Označení řešení

Ve článcích [25, 26] lze též pro jednotlivé případy nalézt postup řešení, zde pouze shrneme výsledky. Nejprve poznamenejme, že jsme ukázali, že:

- Ve třídách aII a bII neexistuje řešení vůbec.
- Ve třídě dI neexistuje kvadraticky integrabilní řešení. V této třídě jsme však nalezli $\mathcal{PT}$-symetrické řešení, což bude ukázáno v kapitole 2.2.7.
- Třídy bI a cI jsou ekvivalentní, protože jednu z druhé je možno dostat záměnami $d_{ij} \leftrightarrow d_{ji}$, $W_{ij} \leftrightarrow W_{ji}$ and $V_{ij} \leftrightarrow V_{ji}$

Stačí tedy analyzovat třídy aI, cI, cII a dII.

2.2.2 Základní stav ve třídě aI

V tomto případě předpokládáme $V_{13} = V_{31} = d_{21} = d_{12} = 0$. Postup řešení byl publikován ve článcích [24, 25], zde uvedeme pouze výsledek. Zavedeme parametr

$$\alpha := \frac{V_{21}}{W_{40}} = \frac{V_{12}}{W_{04}}. \tag{2.26}$$

Výsledná rovnice pro potenciál má tvar

$$\begin{aligned} V_0(x,y) &= {W_{40}}^2 x^4 + {W_{04}}^2 y^4 + V_{30}|x|^3 + V_{03}|y|^3 + W_{40}\alpha x^2|y| + W_{04}\alpha|x|y^2 \\ &+ V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + \frac{\alpha}{2}\left(\frac{V_{30}}{W_{40}} + \frac{V_{03}}{W_{04}}\right)|xy| \\ &+ \left(\frac{4{W_{04}}^2 V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^3}\alpha + \frac{4{W_{40}}^2 V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^4}V_{30} - 2W_{40}\right)|x| \\ &+ \left(\frac{4{W_{40}}^2 V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}\alpha + \frac{4{W_{04}}^2 V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^4}V_{03} - 2W_{04}\right)|y|, \end{aligned} \tag{2.27}$$

kde W_{40}, W_{04} jsou libovolná kladná reálná čísla a V_{30}, V_{03}, V_{20}, V_{02}, α jsou libovolná reálná čísla. Vlnová funkce základního stavu pro potenciál (2.27) má tvar

$$\begin{aligned}\psi_0(x,y) = \exp\Bigg(&-\frac{W_{40}}{3}|x|^3 - \frac{W_{04}}{3}|y|^3 - \frac{V_{30}}{4W_{40}}x^2 - \frac{V_{03}}{4W_{04}}y^2 - \frac{\alpha}{2}|xy| \\ &-\frac{4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}|x| - \frac{4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^3}|y|\Bigg).\end{aligned} \tag{2.28}$$

Odpovídající energie je rovna

$$\begin{aligned}E_0 =& \frac{V_{30}}{2W_{40}} + \frac{V_{03}}{2W_{04}} - \frac{\left(4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2\right)^2}{64{W_{40}}^6} \\ &- \frac{\left(4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2\right)^2}{64{W_{04}}^6}.\end{aligned} \tag{2.29}$$

Vlnová funkce (2.28) je kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y), neboť předpokládáme $W_{40} > 0$ a $W_{04} > 0$.

2.2.3 Excitované stavy ve třídě aI

Analogicky k rovnicím (1.9), (1.10) pro jednorozměrné případy jsme se pokusili najít excitovaný stav ve tvaru

$$\psi(x,y) = p(x,y)h(x,y), \tag{2.30}$$

kde

$$p(x,y) = \sum_{m\geq 0\, n\geq 0}^{m+n\leq N} a_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{2.31}$$

Protože předpokládáme $f(x) = x$, $g(y) = y$, přepíšeme (2.31) jako

$$p(x,y) = \sum_{m\geq 0\, n\geq 0}^{m+n\leq N} a_{mn} x^m y^n, \tag{2.32}$$

Koeficienty a_{mn} musíme určit a $h(x,y) = \psi_0(x,y)$ je daná rovnicí (2.28).

Řešení se podařilo najít jen pro $N = 1$ a postup byl publikován ve článku [25]. Zde uvedeme jen výsledné rovnice. Potenciál má v tomto případě tvar

$$\begin{aligned}V_1(x,y) =& {W_{40}}^2x^4 + {W_{04}}^2y^4 + V_{30}|x|^3 + V_{03}|y|^3 + W_{40}\alpha x^2|y| + W_{04}\alpha|x|y^2 \\ &+ V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + \frac{\alpha}{2}\left(\frac{V_{30}}{W_{40}} + \frac{V_{03}}{W_{04}}\right)|xy| \\ &+ \left(\frac{4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^3}\alpha + \frac{4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^4}V_{30} - 4W_{40}\right)|x| \\ &+ \left(\frac{4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}\alpha + \frac{4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^4}V_{03} - 4W_{04}\right)|y|,\end{aligned} \tag{2.33}$$

přičemž navíc musí být splněna podmínka

$$V_{20} - V_{02} = \frac{{W_{04}}^2\alpha^2 + 3{V_{30}}^2 - 2W_{04}V_{30}\alpha}{8{W_{40}}^2} - \frac{{W_{40}}^2\alpha^2 + 3{V_{03}}^2 - 2W_{40}V_{03}\alpha}{8{W_{04}}^2}. \quad (2.34)$$

Vlnovou funkci a příslušnou energii určíme z rovnic

$$\begin{aligned}
\psi_1(x,y) &= \left(W_{40}x - W_{04}y + \frac{W_{40}\alpha - V_{03}}{4W_{04}} - \frac{W_{04}\alpha - V_{30}}{4W_{40}}\right) \quad (2.35)\\
&\times \exp\left(-\frac{W_{40}}{3}|x|^3 - \frac{W_{04}}{3}|y|^3 - \frac{V_{30}}{4W_{40}}x^2 - \frac{V_{03}}{4W_{04}}y^2 - \frac{\alpha}{2}|xy|\right.\\
&\left.-\frac{4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}|x| - \frac{4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2}{8{W_{04}}^3}|y|\right),\\
E_1 &= \frac{V_{30}}{W_{40}} + \frac{V_{03}}{W_{04}} - \frac{\alpha}{2}\left(\frac{W_{40}}{W_{04}} + \frac{W_{04}}{W_{40}}\right) \quad (2.36)\\
&-\frac{\left(4{W_{40}}^2V_{20} - {W_{40}}^2\alpha^2 - {V_{30}}^2\right)^2}{64{W_{40}}^6} - \frac{\left(4{W_{04}}^2V_{02} - {W_{04}}^2\alpha^2 - {V_{03}}^2\right)^2}{64{W_{04}}^6}.
\end{aligned}$$

Vlnová funkce (2.35) je kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y).

2.2.4 Základní stav ve třídě bI

Zde předpokládáme $V_{13} = V_{31} = d_{21} = 0$, $d_{12} \neq 0$. Postup řešení byl publikován ve článku [26]. Zde pouze uvedeme výsledky.

Výsledný potenciál má v tomto případě tvar

$$\begin{aligned}
V(x,y) &= {W_{40}}^2x^4 + {W_{04}}^2y^4 + 2(W_{40}W_{04} + 2{W_{04}}^2)x^2y^2\\
&+ V_{30}|x|^3 + V_{03}|y|^3 + V_{03}\left(\frac{W_{40}}{W_{04}} + 2\right)x^2|y| + V_{12}|x|y^2\\
&+ V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + V_{11}|xy|\\
&+\left(\frac{V_{30}V_{20}}{2{W_{40}}^2} - \frac{{V_{30}}^3}{8{W_{40}}^4} - \frac{V_{30}{V_{03}}^2}{8{W_{40}}^2{W_{04}}^2} - \frac{{V_{03}}^2V_{12}}{16{W_{04}}^4}\right.\\
&\left.+\frac{V_{03}V_{11}}{4{W_{04}}^2} - \frac{V_{30}{V_{03}}^2}{16W_{40}{W_{04}}^3} - 2W_{04} - 2W_{40}\right)|x|\\
&+\left(\frac{4V_{03}V_{20} - V_{11}V_{30}}{8W_{40}W_{04}} - \frac{{V_{30}}^2V_{03}}{8{W_{40}}^3W_{04}} - \frac{{V_{03}}^3}{8W_{40}{W_{04}}^3}\right.\\
&\left.+\frac{V_{12}V_{11}}{8{W_{04}}^2} + \frac{{V_{30}}^2V_{03}}{32{W_{40}}^2{W_{04}}^2} - \frac{V_{03}{V_{12}}^2}{32{W_{04}}^4}\right)|y|.
\end{aligned} \quad (2.37)$$

Přitom koeficienty musí být navíc voleny tak, aby byla splněna podmínka

$$\begin{aligned}
&16W_{40}V_{02} - 16W_{04}V_{20}\\
&\quad = \frac{W_{40}\left(4{V_{03}}^2 + {V_{12}}^2\right)}{{W_{04}}^2} - \frac{4W_{04}{V_{30}}^2}{{W_{40}}^2} + \frac{{V_{30}}^2}{W_{40}} - \frac{2V_{30}V_{12} + 4{V_{03}}^2}{W_{04}}. \quad (2.38)
\end{aligned}$$

Vlnová funkce základního stavu má tvar

$$\begin{aligned}\psi_0(x,y) = \exp\Bigg[& -\frac{W_{40}}{3}|x|^3 - W_{04}|x|y^2 - \frac{V_{30}}{4W_{40}}x^2 \\ & -\left(\frac{V_{12}}{8W_{04}} - \frac{V_{30}}{8W_{40}}\right)y^2 - \frac{V_{03}}{2W_{04}}|xy| \\ & +\left(\frac{{V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3} + \frac{{V_{03}}^2}{8W_{40}{W_{04}}^2} - \frac{V_{20}}{2W_{40}}\right)|x| \\ & +\left(\frac{V_{30}V_{03}}{16W_{40}{W_{04}}^2} + \frac{V_{03}V_{12}}{16{W_{04}}^3} - \frac{V_{11}}{4W_{04}}\right)|y|\Bigg].\end{aligned} \tag{2.39}$$

Vidíme, že vlnová funkce (2.39) je při vhodné volbě koeficientů kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y). Postačující podmínkou je například $W_{40} > 0$, $W_{04} > 0$ a současně $\frac{V_{12}}{W_{04}} - \frac{V_{30}}{W_{40}} > 0$.

Odpovídající energie je rovna

$$\begin{aligned}E_0 &= \frac{V_{12}}{4W_{04}} + \frac{V_{30}}{4W_{40}} - \left(\frac{{V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3} + \frac{{V_{03}}^2}{8W_{40}{W_{04}}^2} - \frac{V_{20}}{2W_{40}}\right)^2 \\ &\quad - \left(\frac{V_{30}V_{03}}{16W_{40}{W_{04}}^2} + \frac{V_{03}V_{12}}{16{W_{04}}^3} - \frac{V_{11}}{4W_{04}}\right)^2.\end{aligned} \tag{2.40}$$

2.2.5 Základní stav ve třídě cII

Zde předpokládáme $V_{31} = 0$, $V_{13} \neq 0$, $d_{21} = 0$, $d_{12} \neq 0$. Postup řešení byl publikován ve článku [26]. Zde pouze uvedeme výsledky.

Potenciál má tvar

$$\begin{aligned}V_0(x,y) &= {W_{40}}^2x^4 + {W_{04}}^2y^4 + V_{13}|x||y|^3 + \frac{V_{13}}{36\alpha^2}(6W_{40}\alpha + V_{13})x^2y^2 \\ &+ V_{30}|x|^3 + V_{03}|y|^3 + V_{21}x^2|y| + \left(\frac{V_{13}V_{30}}{12W_{40}\alpha} + \frac{2V_{13}\gamma}{3\alpha} + 6\alpha\beta\right)|x|y^2 \\ &+ V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + V_{11}|xy| + V_{10}|x| + V_{01}|y|,\end{aligned} \tag{2.41}$$

přičemž koeficienty V_{11}, V_{10}, V_{10} musí být vypočteny z rovnic

$$\begin{aligned}V_{11} &= \frac{{V_{13}}^2{V_{30}}^2}{864{W_{40}}^3\alpha^3} + \frac{V_{13}}{18\alpha^2}\left(V_{02} - 4\gamma^2 - \beta^2\right) \\ &\quad + \frac{{V_{13}}^2}{216W_{40}\alpha^3}\left(\beta^2 - V_{20}\right) + \frac{V_{30}\beta}{W_{40}} + 4\beta\gamma,\end{aligned} \tag{2.42}$$

$$\begin{aligned}V_{10} &= \left(\frac{V_{30}}{2{W_{40}}^2} - \frac{V_{13}\beta}{36W_{40}\alpha^2}\right)\left(V_{20} - \beta^2\right) + \frac{V_{13}{V_{30}}^2\beta}{144{W_{40}}^3\alpha^2} \\ &\quad + \frac{2V_{02}\beta - 8\beta\gamma^2 - V_{13} - 2\beta^3}{6\alpha} - \frac{{V_{30}}^3}{8{W_{40}}^4} - 2W_{40},\end{aligned} \tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}V_{01} &= \left(\frac{\beta}{W_{40}} - \frac{V_{13}\gamma}{18W_{40}\alpha^2}\right)\left(V_{20} - \beta^2\right) + \frac{V_{13}{V_{30}}^2\gamma}{72{W_{40}}^3\alpha^2} \\ &\quad + \frac{\gamma}{3\alpha}\left(2V_{02} - 2\beta^2 - 8\gamma^2\right) - \frac{{V_{30}}^2\beta}{4{W_{40}}^3} - 6\alpha,\end{aligned} \tag{2.44}$$

kde

$$\alpha = \frac{1}{6}\sqrt{2{W_{04}}^2 \pm \sqrt{4{W_{04}}^4 - {V_{13}}^2}}, \tag{2.45}$$

$$\beta = \frac{3V_{21}\alpha}{6W_{40}\alpha + V_{13}}, \tag{2.46}$$

$$\gamma = \frac{6V_{03}\alpha - V_{13}\beta}{72\alpha^2}. \tag{2.47}$$

Vlnová funkce základního stavu má tvar

$$\begin{aligned}\psi_0(x,y) = \exp\Bigg\{ &-\frac{W_{40}}{3}|x|^3 - \alpha|y|^3 \\ &- \frac{V_{13}}{12\alpha}|x|y^2 - \frac{V_{30}}{4W_{40}}x^2 - \gamma y^2 - \beta|xy| \\ &+ \left(\frac{V_{20}-\beta^2}{2W_{40}} - \frac{{V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}\right)|x| \\ &+ \Bigg[\frac{V_{13}}{288{W_{40}}^3\alpha^2}\left(4{W_{40}}^2\beta^2 + {V_{30}}^2 - 4{W_{40}}^2V_{20}\right) \\ &+ \frac{V_{02}-\beta^2-4\gamma^2}{6\alpha}\Bigg]|y|\Bigg\}\end{aligned} \tag{2.48}$$

a odpovídající energie je rovna

$$\begin{aligned}E_0 = &\frac{V_{30}}{2W_{40}} + 2\gamma - \left(\frac{V_{20}-\beta^2}{2W_{40}} - \frac{{V_{30}}^2}{8{W_{40}}^3}\right)^2 \\ &- \left[\frac{V_{13}}{288{W_{40}}^3\alpha^2}\left(4{W_{40}}^2\beta^2 + {V_{30}}^2 - 4{W_{40}}^2V_{20}\right) + \frac{V_{02}-\beta^2-4\gamma^2}{6\alpha}\right]^2.\end{aligned} \tag{2.49}$$

2.2.6 Základní stav ve třídě dII

Zde předpokládáme $V_{31} = 0$, $V_{13} \neq 0$, $d_{21} \neq 0$, $d_{12} \neq 0$. Diskuse problému byla publikována ve článku [26]. Analýza byla složitější a výsledkem nejsou konkrétní rovnice pro potenciál, vlnovou funkci základního stavu a odpovídající energii, ale algoritmus, jak je možné dostat konkrétní řešení.

Koeficienty W_{04}, W_{40} je možno zvolit libovolně. Aby vlnová funkce byla kvadraticky integrabilní, je nutno zvolit V_{13}, aby byla splněny podmínky

$${V_{13}}^2 < 16\,{W_{40}}^2\,{W_{04}}^2, \tag{2.50}$$

$$V_{13} < 0. \tag{2.51}$$

Dále vypočteme parametr

$$\alpha = \frac{{V_{13}}^2}{16({W_{40}}^2 + {W_{04}}^2) + 8\sqrt{16{W_{40}}^2{W_{04}}^2 - {V_{13}}^2}} \tag{2.52}$$

a následně

$$V_{22} = \frac{48{W_{40}}^2\alpha - 16{W_{04}}^2\alpha + {V_{13}}^2}{16\alpha}. \tag{2.53}$$

Nyní je možné vypočíst koeficienty

$$d_{03} = \frac{1}{3}\sqrt{{W_{04}}^2 - \alpha}, \tag{2.54}$$

$$d_{30} = \frac{1}{3}\sqrt{\alpha}, \tag{2.55}$$

$$d_{21} = \sqrt{{W_{40}}^2 - \alpha}, \tag{2.56}$$

$$d_{12} = -\sqrt{\alpha}. \tag{2.57}$$

Koeficienty V_{30}, V_{03}, V_{12}, V_{20}, V_{02} je možno zvolit libovolně a následně vypočíst

$$d_{20} = \frac{V_{30}}{12d_{30}} + \frac{d_{21}}{36d_{30}}\frac{(V_{30}+V_{12})d_{03}+2V_{03}d_{30}}{2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2}, \tag{2.58}$$

$$d_{02} = \frac{V_{03}}{12d_{03}} - \frac{d_{30}}{12d_{03}}\frac{(V_{30}+V_{12})d_{03}+2V_{03}d_{30}}{2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2}, \tag{2.59}$$

$$d_{11} = \frac{-1}{6}\frac{(V_{30}+V_{12})d_{03}+2V_{03}d_{30}}{2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2}. \tag{2.60}$$

Zbývající koeficienty pro vlnovou funkci určíme z rovnic

$$d_{10} = \frac{d_{03}(3V_{20} - 12{d_{20}}^2 - 3{d_{11}}^2) - d_{21}(V_{02} - 4{d_{02}}^2 - {d_{11}}^2)}{6d_{30}(d_{21}+3d_{03})}, \tag{2.61}$$

$$d_{01} = \frac{V_{20}+V_{02} - 4{d_{20}}^2 - 4{d_{02}}^2 - 2{d_{11}}^2}{2(d_{21}+3d_{03})}. \tag{2.62}$$

Zbývající koeficienty potenciálu určíme z rovnic

$$\begin{aligned} V_{21} = {} & \frac{d_{30}\left[3V_{30}(d_{03}+d_{21}) + V_{12}(3d_{03}-d_{21})\right]}{3(2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2)} \\ & - \frac{2d_{21}d_{03}(2V_{30}d_{21} + 3V_{30}d_{03} - V_{12}d_{21})}{9d_{30}(2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2)} \\ & + \frac{V_{03}(18{d_{30}}^2 + {d_{21}}^2 - 3d_{21}d_{03})}{9(2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2)}. \end{aligned} \tag{2.63}$$

$$\begin{aligned} V_{11} = {} & 4d_{11}\left(d_{20}+d_{02}\right) \\ & + \frac{2{d_{21}}^2}{3d_{30}(3d_{03}+d_{21})}\left(-V_{02} + 4{d_{02}}^2 + {d_{11}}^2\right) \\ & + \frac{2d_{21}d_{03}}{d_{30}(3d_{03}+d_{21})}\left(V_{20} - 4{d_{20}}^2 - {d_{11}}^2\right) \\ & + \frac{6d_{30}}{3d_{03}+d_{21}}\left(-V_{02} - V_{20} + 4{d_{02}}^2 + 4{d_{20}}^2 + 2{d_{11}}^2\right), \end{aligned} \tag{2.64}$$

$$\begin{aligned} V_{10} = {} & \frac{d_{11}}{3d_{03}+d_{21}}\left(V_{20} + V_{02} - 4{d_{20}}^2 - 4{d_{02}}^2 - 2{d_{11}}^2\right) \\ & + \frac{2d_{20}d_{03}}{d_{30}(3d_{03}+d_{21})}\left(V_{20} - 4{d_{20}}^2 - {d_{11}}^2\right) \\ & - \frac{2d_{20}d_{21}}{3d_{30}(3d_{03}+d_{21})}\left(V_{02} - 4{d_{02}}^2 - {d_{11}}^2\right), \end{aligned} \tag{2.65}$$

$$
\begin{aligned}
V_{01} = & -2(3d_{03} + d_{21}) \\
& + \frac{2d_{02}}{3d_{03} + d_{21}} \left(V_{20} + V_{02} - 4{d_{20}}^2 - 4{d_{02}}^2 - 2{d_{11}}^2\right) \\
& + \frac{d_{03}d_{11}}{d_{30}(3d_{03} + d_{21})} \left(V_{20} - 4{d_{20}}^2 - {d_{11}}^2\right) \\
& - \frac{d_{21}d_{11}}{3d_{30}(3d_{03} + d_{21})} \left(V_{02} - 4{d_{02}}^2 - {d_{11}}^2\right).
\end{aligned} \tag{2.66}
$$

V rovnicích předpokládáme, že $2{d_{30}}^2 - d_{21}d_{03} - {d_{03}}^2 \neq 0$.

Poznamenejme, že pokud by platilo $d_{21} = -3d_{03}$, potom by $V_{13} = 0$ a řešení patří do třídy dI a určíme ho podle rovnic v předchozí sekci.

Potenciál pak dostaneme dosazením koeficientů do rovnice (2.25), vlnovou funkci základního stavu z rovnice (2.24) a příslušnou energii z rovnice (2.9).

Hlavním smyslem bylo ukázat, že i v této třídě existují kvadraticky integrabilní řešení a že je tedy možno klasifikaci řešení považovat za uzavřenou.

2.2.7 $\mathcal{PT}$-symetrické řešení

Jedním z předmětů zájmu současné teoretické fyziky je $\mathcal{PT}$-symetrická kvantová mechanika [5, 32, 33, 6, 7, 16].

Schrödingerova rovnice má stejně jako v předchozích případech tvar

$$
-\Delta\psi(x,y) + V(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y), \tag{2.67}
$$

kde

$$
\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \tag{2.68}
$$

Potenciál je v tomto případě komplexní. Podmínku $\mathcal{PT}$-symetrie splňuje potenciál tvaru

$$
\begin{aligned}
V(x,y) \;=\; & V_{40}x^4 + V_{04}y^4 + V_{31}x^3y + V_{13}xy^3 + V_{22}x^2y^2 \\
& + \mathrm{i}V_{30}x^3 + \mathrm{i}V_{03}y^3 + \mathrm{i}V_{21}x^2y + \mathrm{i}V_{12}xy^2 \\
& + V_{20}x^2 + V_{02}y^2 + V_{11}xy + \mathrm{i}V_{10}x + \mathrm{i}V_{01}y,
\end{aligned} \tag{2.69}
$$

kde V_{ij} jsou reálné konstanty. Předpokládáme, že $V_{40} > 0$ a $V_{04} > 0$.

Vlnovou funkci hledáme ve tvaru

$$
\begin{aligned}
& \psi(x,y) \\
& = \exp\left(-c_{30}x^3 - c_{03}y^3 - c_{21}x^2y - c_{12}xy^2 - c_{20}x^2 - c_{02}y^2 - c_{11}xy - c_{10}x - c_{01}y\right),
\end{aligned} \tag{2.70}
$$

kde c_{ij} jsou neznámé koeficienty.

Dosadíme-li rovnice (2.69)-(2.70) do (2.67) a porovnáme-li členy stejného řádu, dostaneme rovnici pro energii

$$
E = -{c_{10}}^2 - {c_{01}}^2 + 2c_{02} + 2c_{20} \tag{2.71}
$$

a soustavu algebraických rovnic pro koeficienty c_{ij}

$$
\begin{aligned}
V_{40} &= 9{c_{30}}^2 + {c_{21}}^2, && (2.72)\\
V_{04} &= 9{c_{03}}^2 + {c_{12}}^2, && (2.73)\\
V_{31} &= 12c_{30}c_{21} + 4c_{21}c_{12}, && (2.74)\\
V_{13} &= 12c_{03}c_{12} + 4c_{12}c_{21}, && (2.75)\\
V_{22} &= 6c_{30}c_{12} + 4{c_{12}}^2 + 4{c_{21}}^2 + 6c_{21}c_{03}, && (2.76)\\
\mathrm{i}V_{30} &= 12c_{20}c_{30} + 2c_{11}c_{21}, && (2.77)\\
\mathrm{i}V_{03} &= 12c_{02}c_{03} + 2c_{11}c_{12}, && (2.78)\\
\mathrm{i}V_{21} &= 4c_{21}c_{02} + 8c_{20}c_{21} + 6c_{30}c_{11} + 4c_{11}c_{12}, && (2.79)\\
\mathrm{i}V_{12} &= 4c_{12}c_{20} + 8c_{02}c_{12} + 6c_{03}c_{11} + 4c_{11}c_{21}, && (2.80)\\
V_{20} &= 2c_{01}c_{21} + {c_{11}}^2 + 4{c_{20}}^2 + 6c_{10}c_{30}, && (2.81)\\
V_{02} &= 2c_{10}c_{12} + {c_{11}}^2 + 4{c_{02}}^2 + 6c_{01}c_{03}, && (2.82)\\
V_{11} &= 4c_{01}c_{12} + 4c_{11}c_{02} + 4c_{20}c_{11} + 4c_{10}c_{21}, && (2.83)\\
\mathrm{i}V_{10} &= 4c_{10}c_{20} - 6c_{30} + 2c_{01}c_{11} - 2c_{12}, && (2.84)\\
\mathrm{i}V_{01} &= 4c_{01}c_{02} - 6c_{03} + 2c_{10}c_{11} - 2c_{21}. && (2.85)
\end{aligned}
$$

Postup řešení byl publikován v článku [27]. Zde pouze stručně uvedeme výsledky. Výsledné rovnice je výhodné vyjádřit pomocí koeficientů

$$
\begin{aligned}
V_4 &:= V_{40} = V_{04} = \frac{V_{22}}{2} && (2.86)\\
V_a &:= V_{30}V_{10} - V_{03}V_{01}, && (2.87)\\
V_b &:= V_{30}V_{01} + V_{03}V_{10}, && (2.88)
\end{aligned}
$$

přičemž rovnice (2.86) vyjadřuje též jednu z podmínek řešitelnosti soustavy rovnic (2.72)-(2.85). Potenciál, pro který je při libovolné volbě reálných koeficientů V_4, V_{30}, V_{03}, V_a a V_b soustava rovnic (2.72)-(2.85) řešitelná pak lze vyjádřit jako

$$
\begin{aligned}
V(x,y) = {} & V_4x^4 + V_4y^4 + 2V_4x^2y^2 + \mathrm{i}V_{30}x^3 + \mathrm{i}V_{03}y^3 + \mathrm{i}V_{03}x^2y + \mathrm{i}V_{30}xy^2\\
& + \left(\frac{-1}{4}\frac{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}{V_4} + \frac{2V_4V_a}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}\right)x^2\\
& + \left(\frac{-1}{4}\frac{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}{V_4} - \frac{2V_4V_a}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}\right)y^2\\
& + \frac{4V_4V_b}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}xy + \mathrm{i}\frac{V_{30}V_a + V_{03}V_b}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}x + \mathrm{i}\frac{V_{30}V_b - V_{03}V_a}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}y. \qquad (2.89)
\end{aligned}
$$

Vlnovou funkci tvaru (2.70), která řeší Schrödingerovu rovnici s potenciálem (2.89) pak lze obecně zapsat jako

$$
\psi(x,y) = \exp\left\{-\frac{\sqrt{V_4}}{3}\Big[\cos(\alpha)P_1(x,y) + \sin(\alpha)P_2(x,y)\Big]\right\}, \qquad (2.90)
$$

kde

$$
\begin{aligned}
P_1(x,y) &= x^3 - 3xy^2 + \mathrm{i}\frac{3V_{30}}{4V_4}x^2 - \mathrm{i}\frac{3V_{30}}{4V_4}y^2 - \mathrm{i}\frac{3V_{03}}{2V_4}xy \\
&\quad + \frac{3V_a}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}x - \frac{3V_b}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}y, \qquad (2.91)\\
P_2(x,y) &= y^3 - 3x^2y - \mathrm{i}\frac{3V_{03}}{4V_4}x^2 + \mathrm{i}\frac{3V_{03}}{4V_4}y^2 - \mathrm{i}\frac{3V_{30}}{2V_4}xy \\
&\quad - \frac{3V_b}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}x - \frac{3V_a}{{V_{30}}^2 + {V_{03}}^2}y. \qquad (2.92)
\end{aligned}
$$

Parametr α je libovolné reálné číslo z intervalu $[0, 2\pi)$. Poznamenejme, že tento parametr nemá význam polární souřadnice. Vlnové funkce pro různou hodnotu parametru α jsou lineárně nezávislé. Stavu (2.90) odpovídá energie

$$
E = -V_4 \frac{{V_a}^2 + {V_b}^2}{\left({V_{30}}^2 + {V_{03}}^2\right)^2} \qquad (2.93)
$$

bez ohledu na volbu parametru α. Vlnové funkce (2.90) nelze normovat na žádném z kvadrantů.

V tomto případě jsme tedy nenalezli vázaný stav, ale jeden ze spojité škály rozptylových stavů. Hledání dalších řešení ve tvaru $\psi(x,y) = \sum_{mn} a_{mn} f^m g^n h(x,y)$ nebylo úspěšné. Výsledek přesto ukazuje, že metoda rozvoje do funkčních polynomů má potenciální uplatnění i v oblasti $\mathcal{PT}$-symetrických problémů.

2.3 Potenciál tvaru dvojrozměrného sextického polynomu

V minulých sekcích jsme provedli diskusi užití metody rozvoje do funkčních polynomů na Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru kvartického polynomu, tedy s potenciálem tvaru (2.2), kde $M = 2$. Ukázali jsme, že problém hledání základního stavu vede na soustavu 14 algebraických rovnic (2.10)-(2.23) pro 9 neznámých koeficientů d_{ij} vystupujících v rovnici (2.6) pro funkci h. Provedli jsme úplnou diskusi řešitelnosti soustavy rovnic (2.10)-(2.23). Společnou nevýhodou všech řešení byl problém s asymptotickým chováním funkce h, které jsme ošetřili absolutními hodnotami. To však vedlo k tomu, že vlnová funkce nemá na souřadných osách spojité parciální derivace.

Pro sextický potenciál (potenciál tvaru polynomu šestého stupně) však potíže s asymptotickým chováním vlnových funkcí neočekáváme. V tomto případě bude v rovnici (2.2) konstanta M rovna třem a tedy vlnová funkce základního stavu daná rovnicí (2.6) se bude asymptoticky chovat jako funkce typu $\exp(-x^4 - y^4)$.

Dosadíme-li (2.2) a (2.6) do (3.3) a zvolíme-li $M = 3$, porovnáním koeficientů

dostaneme soustavu 25 rovnic pro 13 neznámých d_{ij}

$$
\begin{aligned}
V_{60} &= 16{d_{40}}^2 + {d_{31}}^2, && (2.94)\\
V_{51} &= 4d_{31}d_{22} + 24d_{40}d_{31}, && (2.95)\\
V_{42} &= 4{d_{22}}^2 + 6d_{31}d_{13} + 9{d_{31}}^2 + 16d_{40}d_{22}, && (2.96)\\
V_{33} &= 8d_{40}d_{13} + 8d_{31}d_{04} + 12d_{22}d_{13} + 12d_{31}d_{22}, && (2.97)\\
V_{24} &= 9{d_{13}}^2 + 4{d_{22}}^2 + 16d_{22}d_{04} + 6d_{31}d_{13}, && (2.98)\\
V_{15} &= 4d_{22}d_{13} + 24d_{13}d_{04}, && (2.99)\\
V_{06} &= {d_{13}}^2 + 16{d_{04}}^2, && (2.100)\\
V_{50} &= 24d_{30}d_{40} + 2d_{21}d_{31}, && (2.101)\\
V_{41} &= 18d_{30}d_{31} + 4d_{31}d_{12} + 4d_{21}d_{22} + 16d_{40}d_{21}, && (2.102)\\
V_{32} &= 6d_{21}d_{13} + 12d_{30}d_{22} + 6d_{31}d_{03} + 8d_{40}d_{12} + 12d_{21}d_{31} + 8d_{12}d_{22}, && (2.103)\\
V_{23} &= 12d_{22}d_{03} + 8d_{21}d_{04} + 12d_{12}d_{13} + 6d_{31}d_{12} + 6d_{30}d_{13} + 8d_{21}d_{22}, && (2.104)\\
V_{14} &= 4d_{12}d_{22} + 4d_{21}d_{13} + 18d_{03}d_{13} + 16d_{12}d_{04}, && (2.105)\\
V_{05} &= 2d_{12}d_{13} + 24d_{03}d_{04}, && (2.106)\\
V_{40} &= {d_{21}}^2 + 16d_{20}d_{40} + 2d_{11}d_{31} + 9{d_{30}}^2, && (2.107)\\
V_{31} &= 4d_{31}d_{02} + 4d_{11}d_{22} + 12d_{30}d_{21} + 4d_{21}d_{12} + 8d_{40}d_{11} + 12d_{20}d_{31}, && (2.108)\\
V_{22} &= 4{d_{21}}^2 + 4{d_{12}}^2 + 6d_{30}d_{12} + 8d_{02}d_{22}, && (2.109)\\
&\quad +6d_{11}d_{31} + 6d_{11}d_{13} + 6d_{21}d_{03} + 8d_{20}d_{22} && (2.110)\\
V_{13} &= 4d_{21}d_{12} + 4d_{20}d_{13} + 12d_{02}d_{13} + 12d_{12}d_{03} + 4d_{11}d_{22} + 8d_{11}d_{04}, && (2.111)\\
V_{04} &= 9{d_{03}}^2 + 2d_{11}d_{13} + 16d_{02}d_{04} + {d_{12}}^2, && (2.112)\\
V_{30} &= 8d_{10}d_{40} + 2d_{01}d_{31} + 2d_{11}d_{21} + 12d_{20}d_{30}, && (2.113)\\
V_{21} &= 6d_{30}d_{11} + 8d_{20}d_{21} + 4d_{11}d_{12} + 4d_{21}d_{02} + 6d_{10}d_{31} + 4d_{01}d_{22}, && (2.114)\\
V_{12} &= 6d_{11}d_{03} + 4d_{10}d_{22} + 6d_{01}d_{13} + 4d_{11}d_{21} + 4d_{20}d_{12} + 8d_{02}d_{12}, && (2.115)\\
V_{03} &= 12d_{02}d_{03} + 2d_{11}d_{12} + 2d_{10}d_{13} + 8d_{01}d_{04}, && (2.116)\\
V_{20} &= {d_{11}}^2 - 12d_{40} + 2d_{01}d_{21} + 6d_{10}d_{30} - 2d_{22} + 4{d_{20}}^2, && (2.117)\\
V_{11} &= 4d_{20}d_{11} + 4d_{11}d_{02} + 4d_{01}d_{12} + 4d_{10}d_{21} - 6d_{13} - 6d_{31}, && (2.118)\\
V_{02} &= 6d_{01}d_{03} - 12d_{04} + 4{d_{02}}^2 + 2d_{10}d_{12} - 2d_{22} + {d_{11}}^2, && (2.119)\\
V_{10} &= 4d_{10}d_{20} + 2d_{01}d_{11} - 2d_{12} - 6d_{30}, && (2.120)\\
V_{01} &= 4d_{01}d_{02} - 6d_{03} + 2d_{10}d_{11} - 2d_{21} && (2.121)
\end{aligned}
$$

a rovnici pro energii základního stavu

$$E_0 = -{d_{10}}^2 + 2d_{20} + 2d_{02} - {d_{01}}^2. \tag{2.122}$$

Obecná analýza této soustavy rovnic se ukázala značně složitou a nebyla provedena. Nicméně některá konkrétní řešení je možné dostat. Jedním z mnoha řešení je potenciál tvaru

$$
\begin{aligned}
V(x,y) = {} & x^6 + y^6 + V_{40}x^4 + V_{04}y^4 + 2\alpha x^3 y + 2\alpha x y^3 \\
& + V_{30}x^3 + V_{03}y^3 + \left(\frac{{V_{40}}^2}{4} + \alpha^2 - 3\right)x^2 + \left(\frac{{V_{04}}^2}{4} + \alpha^2 - 3\right)y^2 \\
& + \left(V_{40} + V_{04}\right)\alpha x y + \left(\frac{V_{40}V_{30}}{2} + V_{03}\alpha\right)x + \left(\frac{V_{04}V_{03}}{2} + V_{30}\alpha\right)y.
\end{aligned} \tag{2.123}
$$

Vlnová funkce základního stavu má pak tvar

$$\psi_0 = \exp\left(-\frac{x^4}{4} - \frac{y^4}{4} - \frac{V_{40}}{4}x^2 - \frac{V_{04}}{4}y^2 - \alpha xy - \frac{V_{30}}{2}x - \frac{V_{03}}{2}y\right). \tag{2.124}$$

Odpovídající energie je rovna

$$E_0 = \frac{V_{40}}{2} + \frac{V_{04}}{2} - \frac{{V_{30}}^2}{4} - \frac{{V_{03}}^2}{4} \tag{2.125}$$

Vlnová funkce (2.124) má hladké parciální derivace na celé rovině (x, y). Pokud platí $W_{60} > 0$ a $W_{06} > 0$, pak je zjevně tato funkce kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y), neboť jde o funkci typu $\exp(-x^6 - y^6)$.

3. Řešení obecných dvojrozměrných problémů

3.1 Výchozí úvahy

V předchozích kapitolách jsme provedli rozbor rozšíření metody rozvoje do funkčních polynomů na dvojrozměrné problémy. Omezili jsme se při tom na potenciály polynomiálního typu. V této kapitole ukážeme obecnější přístup, přičemž problém bude konkrétně vyřešen pro dvojrozměrný kvartický Morseho potenciál.

Přirozeným způsobem, jak zobecnit rovnici (1.6) pro potenciál je tvar

$$V(x,y) = \sum_{m,n} V_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{3.1}$$

Klíčovou otázkou je, jak by mělo vypadat zobecnění rovnice (1.11) pro funkci $h(x)$. Velmi obecný předpoklad je, že $h(x,y)$ bude mít tvar exponenciální funkce s nějakou neznámou funkcí $J(x,y)$ v argumentu, tedy:

$$h(x) = \exp\left[-J(x,y)\right]. \tag{3.2}$$

V jednorozměrných případech byla $h(x,y)$ též vlnovou funkcí základního stavu, tedy sama řešila Schrödingerovu rovnici. Je přirozené očekávat, že tomu tak bude i ve dvojrozměrném případe. Mělo by tedy platit

$$-\Delta h(x,y) + V(x,y)h(x,y) = E_0 h(x,y). \tag{3.3}$$

Dosadíme-li rovnici (3.2) do (3.3), po úpravách dostaneme parciální diferenciální rovnici pro $J(x,y)$

$$\left[\frac{\partial J(x,y)}{\partial x}\right]^2 + \left[\frac{\partial J(x,y)}{\partial y}\right]^2 - \frac{\partial^2 J(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 J(x,y)}{\partial y^2} = V(x,y) - E_0. \tag{3.4}$$

Předpokládejme, že potenciál má tvar

$$V(x,y) = \sum_{m\geq 0}^{m+n\leq 2M} \sum_{n\geq 0} V_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{3.5}$$

Na pravé straně rovnice (3.4) tedy máme funkci tvaru polynomu v zatím obecných funkcích $f(x)$ a $g(y)$. V tomto tvaru tedy budeme hledat i parciální derivace funkce $J(x,y)$ na levé straně, přičemž na obou stranách rovnice (3.4) musíme získat polynom stejného řádu. Získáváme rovnice

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial x} = \sum_{m\geq 0}^{m+n\leq M} \sum_{n\geq 0} c_{mn} f^m(x) g^n(y), \tag{3.6}$$

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial y} = \sum_{m\geq 0}^{m+n\leq M} \sum_{n\geq 0} d_{mn} f^m(x) g^n(y). \tag{3.7}$$

Další diskuse je pro obecné M komplikovaná. Dále se pokusíme pro konkrétní hodnoty M určit vhodné funkce $f(x)$, $g(x)$, pro tyto funkce určit podmínky řešitelnosti systému PDR (3.6)-(3.7), tento systém vyřešit a z rovnice (3.4) určit vztah mezi koeficienty V_{ij} v potenciálu a koeficienty c_{ij} a d_{ij}, které budou vystupovat ve vlnové funkci

Pro $M = 1$ má rovnice (3.5) tvar

$$V(x,y) = V_{20}f^2(x) + V_{02}g^2(y) + V_{11}f(x)g(y) + V_{10}f(x) + V_{01}g(x). \tag{3.8}$$

Systém PDR (3.6)-(3.7) má pro $M = 1$ tvar

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial x} = c_{00} + c_{10}f(x) + c_{01}g(y), \tag{3.9}$$

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial y} = d_{00} + d_{10}f(x) + d_{01}g(y). \tag{3.10}$$

Podmínku řešitelnosti soustavy PDR (3.9)-(3.10) dostaneme jednoduchým způsobem [20]. Rovnici (3.9) zderivujeme podle y, rovnici (3.10) zderivujeme podle x. Na levých stranách bude u obou rovnic člen $\frac{\partial^2 J}{\partial x \partial y}$ a porovnáním pravých stran dostaneme

$$d_{10}\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = c_{01}\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y}. \tag{3.11}$$

Rovnice (3.11) musí platit pro všechna x, y. Jedním ze způsobů, jak toho dosáhnout, je položit $c_{01} = d_{10} = 0$. Pak ale snadno nahlédneme, že řešení povede k problému, který lze řešit separací souřadnic. Jinou možností, jak zajistit platnost rovnice (3.11) pro všechna x, y, je zvolit $f(x)$ tak, aby $\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ byla konstantní a zvolit $g(y)$ tak, aby $\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y}$ byla konstantní. To pak znamená, že $f(x)$ a $g(y)$ budou lineární funkce a potenciál (3.8) bude mít tvar polynomu druhého rádu v proměnných x a y. Půjde tedy o dobře známý problém dvojrozměrného harmonického oscilátoru [4, 11], který lze řešit separací souřadnic. Vidíme tedy, že pro $M = 1$ dostáváme pouze problémy, které lze řešit separací souřadnic a tedy nezapadají do kontextu této práce.

Ukážeme však, že pro $M = 2$ nastává odlišná situace. Rovnice (3.6)-(3.7) budou mít tvar

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(x,y)}{\partial x} &= c_{00} + c_{10}f(x) + c_{01}g(y) \\ &\quad + c_{20}f^2(x) + c_{02}g^2(y) + c_{11}f(x)g(y),\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(x,y)}{\partial y} &= d_{00} + d_{10}f(x) + d_{01}g(y) \\ &\quad + d_{20}f^2(x) + d_{02}g^2(y) + d_{11}f(x)g(y).\end{aligned} \tag{3.13}$$

Podmínku řešitelnosti systému PDR (3.12)-(3.13) zjistíme stejnou metodou, jako jsme to udělali u systému (3.9)-(3.10). V tomto případě je výsledek

$$\begin{aligned}d_{10}\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + 2\,d_{20}f(x)\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + d_{11}\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}g(y) \\ = c_{01}\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y} + 2\,c_{02}g(y)\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y} + c_{11}f(x)\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y}.\end{aligned} \tag{3.14}$$

Jednou z možností, jak zajistit splnění podmínky (3.14) je volit $f(x) = x, g(y) = y$. To by odpovídalo již analyzovanému typu potenciálů tvaru polynomu čtvrtého řádu. Lze snadno nahlédnout, že rovnice (3.14) potom vede k podmínkám $c_{01} = d_{10}$, $c_{11} = 2d_{20}$, $2c_{02} = d_{11}$. Systém rovnic (3.12)-(3.13) má v tomto případě řešení

$$J = \frac{c_{20}}{3}x^3 + \frac{d_{02}}{3}y^3 + d_{20}x^2y + c_{02}xy^2 + \frac{c_{10}}{2}x^2 + \frac{d_{01}}{2}y^2 + c_{01}xy + c_{00}x + d_{00}y. \quad (3.15)$$

Aditivní integrační konstanta je vynechána, neboť ta ovlivňuje pouze normu výsledné vlnové funkce. Po dosazení rovnice (3.15) do (3.2) dostáváme rovnici tvaru (2.7) s jinak označenými koeficienty. Tento výsledek tedy oddůvodňuje rovnici (2.7), kterou jsme pro kvartické potenciály brali v úvahu jako předpoklad. Ekvivalentní výsledek dostaneme, pokud $f(x), g(y)$ budou obecné lineární funkce. Jinou možnost volby $f(x), g(y)$ ukážeme v následující sekci.

3.2 Dvojrozměrný kvartický Morseho potenciál

V předchozí sekci jsme ukázali, že jednou ze základních podmínek, aby bylo možno dvojrozměrný problém s potenciálem tvaru (3.5) pro $M = 2$ řešit metodou rozvoje do funkčních polynomů, je volit funkce $f(x)$, $g(y)$ tak, aby bylo možno splnit podmínku (3.14). Jednou z možností bylo zvolit $f(x) = x$, $g(y) = y$, což vedlo k potenciálům tvaru kvartického polynomu.

Jinou možností je zvolit $f(x) = e^{-x}$, $g(y) = e^{-y}$. Potom zjevně z rovnice (3.14) plyne, že musí platit $d_{11} = c_{11}$ a $c_{02} = c_{01} = d_{20} = d_{10} = 0$. Po dosazení těchto předpokladů do rovnic (3.12)-(3.13) dostaneme

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial x} = c_{00} + c_{10}e^{-x} + c_{20}e^{-2x} + c_{11}e^{-x-y}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial J(x,y)}{\partial y} = d_{00} + d_{01}e^{-y} + d_{02}e^{-2y} + c_{11}e^{-x-y}. \quad (3.17)$$

Systém PDR (3.16)-(3.17) lze vyřešit elementárními metodami [20]. Zintegrujeme rovnici (3.17) podle y:

$$J(x,y) = d_{00}y - d_{01}e^{-y} - \frac{d_{02}}{2}e^{-2y} - c_{11}e^{-x-y} + j(x), \quad (3.18)$$

kde $j(x)$ je zatím neznámá funkce. Dosadíme-li rovnici (3.18) do (3.16), dostáváme

$$\frac{\mathrm{d}j(x)}{\mathrm{d}x} = c_{20}e^{-2x} + c_{10}e^{-x} + c_{00} \quad (3.19)$$

a tedy

$$j(x) = -\frac{c_{20}}{2}e^{-2x} - c_{10}e^{-x} + c_{00}x. \quad (3.20)$$

Integrační konstanta je vynechána, neboť ta by měnila pouze normu výsledné vlnové funkce. Po dosazení rovnice (3.20) do (3.18) a následně do (3.2) dostáváme rovnici pro funkci $h(x,y)$

$$h(x,y) = \exp\left(\frac{c_{20}}{2}e^{-2x} + \frac{d_{02}}{2}e^{-2y} + c_{11}e^{-x-y} + c_{10}e^{-x} + d_{01}e^{-y} - c_{00}x - d_{00}y\right). \quad (3.21)$$

Dosadíme-li $f(x) = e^{-x}$, $f(y) = e^{-y}$ do rovnice (3.5) pro potenciál, přičemž $M = 2$, dostaneme

$$V(x,y) = \sum_{m\geq 0\ n\geq 0}^{m+n\leq 4} V_{mn} e^{-mx-ny} \tag{3.22}$$

Bez újmy na obecnosti položíme $V_{00} = 0$. Po dosazení rovnic (3.21)-(3.22) do (3.3) a úpravách dostaneme rovnici

$$\begin{aligned}
&{c_{20}}^2 e^{-4x} + 2\, c_{20}c_{10}e^{-3x} + ({c_{10}}^2 + 2\, c_{20}c_{00} + 2\, c_{20})e^{-2x} + (2\, c_{10}c_{00} + c_{10})e^{-x} \\
&+ {d_{02}}^2 e^{-4y} + 2\, d_{02}d_{01}e^{-3y} + ({d_{01}}^2 + 2\, d_{02}d_{00} + 2\, d_{02})e^{-2y} + (2\, d_{01}d_{00} + d_{10})e^{-y} \\
&+ 2\, {c_{11}}^2 e^{-2(x+y)} + 2c_{11}(c_{00} + d_{00} + 1)e^{-x-y} + 2\, c_{20}c_{11}e^{-3x-y} + 2\, c_{11}c_{10}e^{-2x-y} \\
&+ 2\, d_{02}c_{11}e^{-x-3y} + 2\, c_{11}d_{01}e^{-x-2y} + {c_{00}}^2 + {d_{00}}^2 \\
&\quad = \sum_{m\geq 0\ n\geq 0}^{m+n\leq 4} V_{mn} e^{-mx-ny} - E_0.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Porovnáním členů na levé a pravé stranně dostaneme soustavu algebraických rovnic

$$\begin{aligned}
{c_{20}}^2 &= V_{40}, && (3.24)\\
2\, c_{20}c_{10} &= V_{30}, && (3.25)\\
({c_{10}}^2 + 2\, c_{20}c_{00} + 2\, c_{20}) &= V_{20}, && (3.26)\\
(2\, c_{10}c_{00} + c_{10}) &= V_{10}, && (3.27)\\
{d_{02}}^2 &= V_{04}, && (3.28)\\
2\, d_{02}d_{01} &= V_{03}, && (3.29)\\
({d_{01}}^2 + 2\, d_{02}d_{00} + 2\, d_{02}) &= V_{02}, && (3.30)\\
(2\, d_{01}d_{00} + d_{10}) &= V_{01}, && (3.31)\\
2\, {c_{11}}^2 &= V_{22}, && (3.32)\\
2c_{11}(c_{00} + d_{00} + 1) &= V_{11}, && (3.33)\\
2\, c_{20}c_{11} &= V_{31}, && (3.34)\\
2\, c_{11}c_{10} &= V_{21}, && (3.35)\\
2\, d_{02}c_{11} &= V_{13}, && (3.36)\\
2\, c_{11}d_{01} &= V_{12}, && (3.37)\\
-{c_{00}}^2 - {d_{00}}^2 &= E_0. && (3.38)
\end{aligned}$$

Neznámými je v tomto případě 7 koeficientů c_{ij}, d_{ij}. Soustavu je možné vyřešit dosazovací metodou, přičemž postupně získáváme i podmínky řešitelnosti soustavy. Postup je obdobný jako v případě polynomiálních potenciálů [24, 25, 26, 27]. Výsledné rovnice jsme se rozhodli parametrizovat koeficienty $W_{40} = \pm\sqrt{V_{40}}$,

$W_{04} = \pm\sqrt{V_{40}}$, $W_{22} = \pm\sqrt{V_{22}}$, V_{30}, V_{03} a $\alpha = c_{00}, \beta = d_{00}$.

$$
\begin{aligned}
V_0(x,y) &= {W_{40}}^2 e^{-4x} + {W_{04}}^2 e^{-4y} + \sqrt{2} W_{40} W_{22} e^{-3x-y} + \sqrt{2} W_{04} W_{22} e^{-x-3y} \\
&\quad + {W_{22}}^2 e^{-2x-2y} + V_{30} e^{-3x} + V_{03} e^{-3y} + \frac{W_{22} V_{30}}{\sqrt{2} W_{40}} e^{-2x-y} + \frac{W_{22} V_{03}}{\sqrt{2} W_{04}} e^{-x-2y} \\
&\quad + \frac{8{W_{40}}^3(\alpha+1) + {V_{30}}^2}{4{W_{40}}^2} e^{-2x} + \frac{8{W_{04}}^3(\beta+1) + {V_{03}}^2}{4{W_{04}}^2} e^{-2y} \\
&\quad + \sqrt{2} W_{22}(\alpha+\beta+1) e^{-x-y} \\
&\quad + \frac{V_{30}(2\alpha+1)}{2W_{40}} e^{-x} + \frac{V_{03}(2\beta+1)}{2W_{04}} e^{-y}, \qquad (3.39) \\
\psi_0(x,y) &= \exp\left(\frac{W_{40}}{2} e^{-2x} + \frac{W_{04}}{2} e^{-2y} \right. \\
&\quad \left. + \frac{W_{22}}{\sqrt{2}} e^{-x-y} + \frac{V_{30}}{2W_{40}} e^{-x} + \frac{V_{03}}{2W_{04}} e^{-y} - \alpha x - \beta y \right), \qquad (3.40) \\
E_0 &= -\alpha^2 - \beta^2. \qquad (3.41)
\end{aligned}
$$

Potenciál (3.39) odpovídá dvojrozměrnému rozšíření potenciálu (1.19), přičemž jsou splněny vazbové podmínky plynoucí z podmínek analytické řešitelnosti problému.

Vlnová funkce (3.40) má spojité parciální derivace na celé rovině (x, y). Vidíme, že pokud $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $W_{40} < 0$, $W_{04} < 0$ a $W_{22} \leq 0$, potom je vlnová funkce (3.40) i kvadraticky integrabilní na celé rovině (x, y).

Excitované stavy jsme se pokoušeli hledat ve tvaru rovnic (2.30)-(2.31), přičemž tentokrát předpokládáme $f(x) = e^{-x}$, $g(y) = e^{-y}$, tedy

$$
\psi(x,y) = \sum_{k \geq 0}^{k+l \leq N} {}_{l \geq 0} a_{kl} e^{-kx} e^{-ly} h(x,y), \qquad (3.42)
$$

kde h je dáno rovnicí (3.21). Pro $N = 1$ mají příslušné vlnové funkce tvar $e^{-x}h(x,y)$, resp. $e^{-y}h(x,y)$. Tyto vlnové funkce řeší sice Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru (3.39), nejde však o nová řešení, ale o funkce tvaru (3.40) s jinými hodnotami koeficientů α nebo β. Pro $N \geq 2$ se funkce tvaru (3.42) řešící Schrödingerovu rovnici s potenciálem tvaru (3.39) najít nepodařilo.

4. Závěr

V práci jsme se snažili zobecnit metodu rozvoje do funkčních polynomů na dvojrozměrné problémy a najít při tom vhodné typy potenciálů, se kterými by příslušná Schrödingerova rovnice byla metodou rozvoje do funkčních polynomů analyticky řešitelná.

Analýzu jsme nejprve provedli s potenciály polynomiálního typu, tedy s nejjednodušším případem kdy $f(x) = x$ a $g(y) = y$. Problém jsme nejprve začali řešit s polynomiálním potenciálem čtvrtého řádu. Nejprve jsme analyzovali jednu třídu možných řešení [24, 25], pro kterou jsme nalezli analytické formule pro vlnovou funkci a energii základního stavu a jednoho excitovaného stavu. Později jsme provedli zcela obecnou analýzu problému dvojrozměrného kvartického potenciálu a provedli klasifikaci všech možných řešení [26]. Analogicky ke dříve publikovaným výsledkům v jednorozměrných případech jsme asymptotické chování vlnových funkcí ošetřili tak, že jsme doplnili absolutní hodnoty u souřadnic ve vlnové funkci i potenciálu. To však vede k tomu, že vlnové funkce nemají spojité derivace na souřadných osách. Nevylučujeme, že je možné najít vhodnější přístup. Dalším výsledkem v oblasti kvartických potenciálů je $\mathcal{PT}$-symetrické řešení [27], kde jsme nalezli rovnici pro vlnovou funkci a energii jednoho z rozptylových stavů.

Krátce jsme se zabývali též polynomiálním potenciálem šestého řádu. Zde se podařilo najít jedno z možných řešení pro vlnovou funkci a energii základního stavu, přičemž výsledná vlnová funkce je kvadraticky integrabilní a má spojité derivace na celé rovině (x, y).

Poté jsme provedli analýzu problematiky i pro jiné funkce, než $f(x) = x, g(y) = y$. Zde bylo klíčovým problémem najít zobecnění rovnice (1.11) pro funkci $h(x)$ na dvojrozměrné problémy. Analýza problému ukázala, že ve dvou dimenzích je úloha podstatně komplikovanější, než v jedné dimenzi. V jednorozměrných případech vedl problém hledání rovnice pro funkci $h(x)$ na obyčejnou diferenciální rovnici jejíž řešení bylo možno napsat ve tvaru integrální formule. Integrál v této rovnici lze analyticky vyřešit pro velkou třídu funkcí. Ve dvojrozměrných problémech vedl problém hledání formule pro funkci $h(x, y)$ k systému dvou parciálních diferenciálních rovnic. Už samotný požadavek, aby tento systém rovnic měl řešení, vedl k silnému omezení na volbu funkcí $f(x), g(y)$. Toto omezení splňují jednak zmíněné potenciály polynomiálního typu, dále se podařilo úlohu vyřešit s potenciály tvaru dvojrozměrného kvartického Morseho potenciálu. Zde se podařilo najít rovnici pro vlnovou funkci a energii základního stavu, přičemž výsledná vlnová funkce je kvadraticky integrabilní a má spojité derivace na celé rovině (x, y).

Otevřené zůstavají dvě otázky. Jednou z nich je nalezení dalších typů potenciálů, pro které je metoda aplikovatelná i ve dvojrozměrných případech, druhou otázkou je hledání excitovaných stavů. Excitované stavy jsme hledali v jedné třídě pro kvartické potenciály a podařilo se najít pouze jeden stav. Pro dvojrozměrný kvartický Morseho potenciál se žádný excitovaný stav najít nepodařilo. Není jisté, zda jsme ke hledání excitovaných stavů zvolili špatný přístup, nebo zda další analytická řešení pro excitované stavy vůbec neexistují.

Ve studovaných případech nelze v obecném případě dvojrozměrnou Schrödingerovu rovnici separovat na dvě jednorozměrné. Výsledkem práce je tedy nalezení

nového přístupu k řešení dvojrozměrné Schrödingerovy rovnice i nalezení některých nových řešení.

Seznam použité literatury

[1] ALY, H. H.; Methods of Solution of the Schrödinger Equations for a Class of Amharmonic and Singular Potentials, *Phys. Lett. A* 145 (1990) 299-303

[2] AMORE, P.; FERNÁNDEZ, F. M.; The Virial Theorem for Nonlinear Problems, *ArXiv:* 0904.3858v2 [math-ph] 6 May 2009

[3] AUBERSON, G.; PEYRANÈRE, M. C.; Quantum Anharmonic Oscillator in the Heisenberg Picture and Multiple Scale Techniques., *Phys. Rev. A* 65 (2001) art. no. 032120

[4] BES, D. R.; Quantum mechanics: a modern and concise introductory course, Berlin : Springer, 2004, 204 stran

[5] CANNATA, F.; JUNKER, G.; TROST, J.; Schrodinger operators with complex potential but real spectrum, *Phys. Lett. A* 246 (1998) 219-226

[6] DELABAERE, E.; PHAM F.; Eigenvalues of complex Hamiltonians with PT-symmetry I, *Phys. Lett. A* 250 (1998) 25-28

[7] DELABAERE, E.; PHAM F.; Eigenvalues of complex Hamiltonians with PT-symmetry II, *Phys. Lett. A* 250 (1998) 29-32

[8] DONG, SHI-HAI; LEMUS, R.; FRANK, A.; Ladder operators for the Morse potential, *Int. J. Quant. Chem.* 86 (2001) 433-439

[9] DVOŘÁK, J.; SKÁLA, L.; Analytical Solutions of the Schrödinger Equation-Ground State Energies and Wave Functions, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 63 (1998) 1161-1176

[10] FERNÁNDEZ, F. M.; New Approach to Bounded Quantum-Mechanical Models, *ArXiv:* 0805.3152v1 [math-ph] 21 May 2008

[11] GRIFFITHS, D. J.; Introduction to quantum mechanics, Upper Saddle River: Pearson, 2005, 468 stran

[12] HIOE, F. T.; MacMILLEN, Don; MONTROLL, E. W.; Quantum Theory of Anharmonic Oscillators: Energy Levels of a Single and a Pair of Coupled Oscillators with Quartic Coupling, *Physics Repports (sect. C of Phys. Lett.)* 43 (1978) 305-335

[13] IKHDAIR, S. M.; SEVER R.; Polynomial Solutions of the Mie-Type Potential in the D-Dimensional Schrödinger Equation, *Journal of Molecular Structure THEOCHEM* 855 (2008) 13-17

[14] KAY, K. G.; Exact Wave Functions from Classical Orbits. II. The Coulomb, Morse, Rosen-Morse and Eckart systems, *Phys. Rev. A* 65 (2002) art. no. 032101

[15] KWEK, L. C.; LIU, YONG; OH, C. H.; WANG, XIANG-BIN; Analytic Expression for Exact-Ground-State Energy Based on an Operator Method For a Class of Anharmonic Potentials, *Phys. Rev. A* 62 (2000) art. no. 052107

[16] LÉVAI, G.; Solvable $\mathcal{PT}$-Symmetric Potentials in Higher Dimensions, *J. Phys. A* 40 (2007) F273-F280

[17] LEACH, P. G. L.; Exact Solutions of the Schrödinger Equation for a Class of Anharmonic Oscillators, *Physica* 17D (1985) 331-338, North-Holland, Amsterdam

[18] MAGYARI, E.; Exact Quantum-Mechanical Solutions for Anharmonic Oscillators, *Phys. Lett.* 81A (1981) 116-118

[19] MORSE, P. M.; Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels, *Phys. Rev.* 34 (1929) 57-64

[20] PETROVSKIJ, I. G.; Parciální diferenciální rovnice, 1. vyd. Praha: Přírodovědecké vydavatelství, 1952, 274 stran

[21] SHORE, B. W.; Comparison of matrix methods applied to the radial Schrödinger eigenvalue equation: The Morse potential, *J. Chem. Phys.* 59 (1973) 6450-6463

[22] SKÁLA, L.; ČÍŽEK, J.; DVOŘÁK, J.; ŠPIRKO, V.; Method for Calculating Analytical Solutions of the Schrödinger Equation-Anharmonic Oscillators and Generalized Morse Oscillators, *Phys. Rev. A* 53 (1996) 2009-2020

[23] SKÁLA, L.; DVOŘÁK, J.; Analytic Solutions of the Schrödinger Equation for the Modified Quartic Oscillator, *Int. J. Theor. Phys.* 36 (1997) 2953-2961

[24] TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic Solutions of Multi-Dimensional Schrödinger Equation, *Proceedings of "Week of Doctoral Students 2004" Part III*, June 15-June 18 2004, Prague, ed. J. Šafránková, Matfyzpress, strany 417-422, ISBN 80-86732-32-0

[25] TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic Energies and Wave Functions of Two-Dimensional Schrodinger Equation: Two-Dimensional Fourth-Order Polynomial Potential, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 73 (2008) 1327-1339

[26] TICHÝ, V.; KUBĚNA, A. A.; SKÁLA, L.; Analytic Energies and Wave Function of Two-Dimensional Schrödinger Equation: Ground State of Two-Dimensional Quartic Potential and Classification of Solutions, *Canadian Journal of Physics*, přijato k publikaci

[27] TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic wave functions and energies for two-dimensional $\mathcal{PT}$-symmetric quartic potentials, *Cent. Eur. J. Phys.* 8 (2010) 519-522

[28] TURBINER, A.V.; The Eigenvalue Spectrum in Quantum Mechanics and the Nonlinearization Procedure, *Usp. Fiz. Nauk* 144 (1984) 35-78

[29] TURBINER, A.V.; Quantum Mechanics: Problems Intermediate Between Exactly Solvable and Completely Unsolvable, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 94 (1988) 33-34

[30] TURBINER, A.V.; Anharmonic Oscillator and Double-Well Potential: Approximating Eigenfunctions. *Lett. Math. Phys.* 74 (2005) 169-180

[31] ZAKRZEWSKI, A. J.; Highly Precise Solutions of the One-Dimensional Schrödinger Equation with an Arbitrary Potential, *Computer Physics Communications* 175 (2006) 397-403

[32] ZNOJIL, M.; $\mathcal{PT}$-Symmetric Models in More Dimensions and Solvable Square-Well Versions of Their Angular Schrodinger Equations, *J. Phys. A* 36 (2003) 7825-7838

[33] ZNOJIL, M.; Solvable Simulation of a Double-Well Problem in $\mathcal{PT}$-Symmetric Quantum Mechanics, *J. Phys. A* 36 (2003) 7639-7648

[34] ZNOJIL, M.; The potential $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ and a New Method of Solving the Schrödinger Equation, *Phys. Lett. A* 158 (1991) 436-440

Seznam tabulek

2.1 Označení řešení 9

Seznam použitých zkratek a symbolů

$A := \dots$	A definujeme jako …
z^*	komplexní sdružení z
ODR	obyčejná diferenciální rovnice
PDR	parciální diferenciální rovnice

Seznam publikací

1. TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic Solutions of Multi-Dimensional Schrödinger Equation, *Proceedings of "Week of Doctoral Students 2004" Part III*, June 15-June 18 2004, Prague, ed. J. Šafránková, Matfyzpress, strany 417-422, ISBN 80-86732-32-0

2. TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic Energies and Wave Functions of Two-Dimensional Schrodinger Equation: Two-Dimensional Fourth-Order Polynomial Potential, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 73 (2008) 1327-1339

3. TICHÝ, V.; SKÁLA, L.; Analytic wave functions and energies for two-dimensional $\mathcal{PT}$-symmetric quartic potentials, *Cent. Eur. J. Phys.* 8 (2010) 519-522

4. TICHÝ, V.; KUBĚNA, A. A.; SKÁLA, L.; Analytic Energies and Wave Function of Two-Dimensional Schrödinger Equation: Ground State of Two-Dimensional Quartic Potential and Classification of Solutions, *Canadian Journal of Physics*, přijato k publikaci

Přílohy