сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

5-85-366

Р.С.Егикян, Е.П.Жидков

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

1985

Рассматривается обратная задача квантовой теории рассеяния (ОЗР) в рамках двухчастичного потенциального рассеяния для случая локального взаимодействия, зависящего только от расстояния между частицами. Стационарные состояния системы из двух бесспиновых частиц с энергией $\varepsilon = k^2$ можно описать волновой функцией, удовлетворяющей следующему трехмерному уравнению Шредингера:

$$-\Delta\Psi + V(x)\Psi = \varepsilon\Psi \quad ,$$

где $V(x)$ – потенциал взаимодействия. Разлагая решение $\Psi(x)$, принимающее значение ноль в нуле по сферическим гармоникам,

$$\Psi(x) = \sum_{\ell,m} x^{-1}\varphi_\ell(x,k)Y_{\ell,m}(\vartheta,\varphi) \quad ,$$

получаем, что радиальная волновая функция $\varphi_\ell(x,k)$ ($\ell=0,1,\dots$) является решением дифференциального уравнения

$$y'' + [k^2 - \ell(\ell+1)x^{-2} - V(x)]\, y = 0 \quad , \qquad (I)$$

$$0 < x < \infty \quad ,$$

и удовлетворяет краевому условию $\varphi_\ell(0,k) = 0$.

При достаточно быстром убывании $V(x)$ при $x\to\infty$ [$V(x) = O(x^{-1-\varepsilon})$, $\varepsilon > 0$] и вещественных k решение $\varphi_\ell(x,k)$ имеет асимптотику

$$\varphi_\ell(x,k) \approx A_\ell(k)\sin(kx + \tfrac{\pi}{2}\ell - \eta_\ell(k)) \quad , \quad x\to\infty \quad .$$

Обратной задачей квантовой теории потенциального рассеяния называется задача о восстановлении уравнения Шредингера по известным данным рассеяния – значениям предельной фазы рассеяния $\eta_\ell(k)$ при некоторых k и ℓ . Мы придерживаемся постановки, в которой фаза задана при фиксированном значении орбитального момента ℓ ($\ell = 0,1,\dots$) и всех действительных k .

Уточним формулировку задачи для случая $\ell = 0$, т.е. для краевой задачи, определяемой радиальным уравнением Шредингера

© Объединенный институт ядерных исследований Дубна, 1985.

Объединенный институт ядерных исследований БИБЛИОТЕКА

$$y'' + (k^2 - V(x))y = 0, \quad 0 \leqslant x < \infty \tag{2}$$

и краевым условием

$$\varphi(0,k) = 0 . \tag{3}$$

Потенциал $V(x)$ предполагается вещественной измеримой функцией, удовлетворяющей условию

$$\int\limits_0^\infty x \, | V(x) | \, dx < \infty . \tag{4}$$

Обозначим через $\varphi(x,k)$ решение уравнения (2), определяемое условиями

$$\varphi(x,k) : \ \varphi(0,k) = 0 , \quad \varphi'_x(0,k) = 1 . \tag{5}$$

При условии (4) спектр оператора (2),(3) непрерывен на полуоси $k^2 > 0$ и содержит конечное число отрицательных собственных чисел

$$\left\{ k_m^2 \right\}_{m=1}^{N} : \ k_m = i\varkappa_m , \ \varkappa_m > 0 .$$

Набор величин

$$S(V) = \left\{ \eta(k), 0 \leqslant k < \infty ; \ \varkappa_m ; \ c_m ; \ m = 1,\dots,N \right\} , \tag{6}$$

где

$$c_m = \left\{ \int\limits_0^\infty \varphi^2(x, i\varkappa_m) dx \right\}^{-1} \tag{7}$$

– нормирующие множители для собственных функций $\varphi(x, i\varkappa_m)$, называются данными рассеяния краевой задачи (2),(3). Эти данные служат основой для восстановления потенциала.

Существуют несколько эквивалентных между собой подходов к решению ОЗР. Из большого количества работ по этой тематике отметим обзорную статью /I/, в которой излагаются подходы к решению и приводится точная формулировка условий, при которых разрешима задача восстановления потенциала по данным рассеяния. Эти условия предполагаются выполненными в дальнейшем. Оттуда же заимствованы все утверждения, касающиеся ОЗР, используемые ниже без доказательства.

В настоящей работе используется подход к решению ОЗР, предложенный М.Г.Крейном /2/.

В § I рассматривается случай $\ell = 0$. В предположении отсутствия связанных состояний доказывается теорема, позволяющая выразить

потенциал $V(x)$ через фазу рассеяния в явном виде. Затем приводится известный результат, позволяющий свести общий случай $\ell = 0$ к тому, где нет связанных состояний. Здесь также имеет место аналитическое представление.

Материал § 2 посвящен случаю $\ell \neq 0$. На основе известного преобразования, связывающего уравнение (I) при разных ℓ и приводящего задачу к случаю $\ell = 0$, доказывается соотношение между данными рассеяния до и после преобразования. Таким образом, оказывается применим результат из § I.

Изложенное дает возможность выписать в явном виде решение ОЗР во всех рассмотренных случаях.

Основную роль в дальнейшем играет преобразование Фурье

$$\hat{f}(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(t) \, e^{itx} \, dt$$

из L_1 в C_0 и его обращение.

§ I

В качестве первого шага требуется определить по фазе рассеяния $\eta(k)$ функцию H, являющуюся ядром для основного интегрального уравнения.

Нормируем функцию $\eta(k)$ условиями $\eta(0) = 0$, $\eta(\infty) = 0$. Тогда найдется суммируемая функция $\gamma(t)$ на полуоси, такая, что

$$\eta(k) = - \int\limits_0^\infty \gamma(t) \sin kt \, dt . \tag{8}$$

Ядро $H(t)$ определяется из соотношения

$$1 + 2 \int\limits_0^\infty H(t) \cos kt \, dt = \exp\left(-2 \int\limits_0^\infty \gamma(t) \cos kt \, dt \right) . \tag{9}$$

Рассмотрим интегральное уравнение второго рода

$$\Gamma_{2x}(t) + \int\limits_0^{2x} H(t-s) \, \Gamma_{2x}(s) ds = H(t) , \tag{I0}$$

$0 \leqslant t \leqslant 2x$, где x является параметром, изменяющимся от 0 до ∞.

Искомый потенциал $V(x)$ выражается через решение (I0),

$$V(x) = 2 \frac{d}{dx} \Gamma_{2x}(2x) + 4 \Gamma_{2x}^2(2x) . \tag{II}$$

Волновая функция (5) также выражается через решение (I0),

$$\varphi(x,k) = \frac{1}{k} \, \mathrm{I_m}\left(e^{ikx} \left(1 - \int\limits_0^{2x} \Gamma_{2x}(s) \, e^{-iks} ds\right)\right) .$$

Условие разрешимости (I0) имеет вид

$$1 + \hat{H}(k) > 0 \, . \tag{I2}$$

Это условие приводится в работе[2]. В настоящей работе строится решение (I0) и тем самым с учетом (8),(9) и (II) решение ОЗР выражается в явном виде.

Докажем лемму, позволяющую проводить факторизацию функций на всей оси.

<u>Лемма</u>. Пусть функция $g(k)$, не обращающаяся в нуль ни в одной точке, представляется в виде

$$g(k) = 1 + \hat{\varphi}(k) \, , \qquad \text{где } \varphi \in L_1 \, .$$

Тогда имеет место представление

$$g(k) = g_+(k)\, g_-(k) \, , \tag{I3}$$

где $g_+(k)$ есть фурье-образ суммируемой функции, заданной на положительной полуоси, а $g_-(k)$ – на отрицательной.

<u>Доказательство</u> вытекает из цепочки равенств, основанной на теореме Винера-Леви[4].

$$g(k) = 1 + \hat{\varphi}(k) = \exp\Big(\int_{-\infty}^{\infty} \ell(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) =$$

$$= \exp\Big(\int_{0}^{\infty} \ell(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) \exp\Big(\int_{-\infty}^{0} \ell(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) =$$

$$= \Big(1 + \int_{0}^{\infty} \ell_1(t)\, e^{ikt}\, dt\Big)\Big(1 + \int_{-\infty}^{0} \ell_2(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) =$$

$$= g_+(k)\, g_-(k) \, .$$

Введем операторы P_+ и P_-, определяемые следующим образом:

$$P_+\Big(c + \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) = c + \int_{0}^{\infty} f(t)\, e^{ikt}\, dt \, ,$$

$$P_-\Big(c + \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{ikt}\, dt\Big) = c + \int_{-\infty}^{0} f(t)\, e^{ikt}\, dt \, . \tag{I4}$$

Будем решать (I0), используя метод, примененный в[3] к интегральным уравнениям на полупрямой с ядром, зависящим от разности аргументов.

На основе леммы запишем представления

$$1 + \hat{H}(k) = g_{o+}(k)\, g_{o-}(k) \, , \tag{I5}$$

$$g_{o-}(k)\, e^{-2ikx} = g_{2x-}(k)\, g_{2k-}(k) \, . \tag{I6}$$

<u>Теорема</u>. Решение (I0) Γ_{2x} имеет вид

$$\hat{\Gamma}_{2x} = g_{2x-}^{-1} P_-\big(e^{-2ikx} g_{2x+}^{-1} P_+(g_{o-}^{-1} \hat{H})\big) \, . \tag{I7}$$

<u>Доказательство</u>. Введем функцию

$$B(t) = \begin{cases} \int_0^{2x} H(t-s)\, \Gamma_{2x}(s)\, ds \, , & t \notin [0,2x] \, , \\ 0 \, , & t \in [0,2x] \, , \end{cases}$$

и положим $\Gamma_{2x}(t) = H(t) = 0$ при $t \notin [0,2x]$. Тогда (I0) запишется в виде

$$\Gamma_{2x}(t) + \int_0^{2x} H(t-s)\, \Gamma_{2x}(s)\, ds = H(t) + B(t) \, , \qquad -\infty < t < \infty \, . \tag{I8}$$

Интеграл в (I8) является сверткой двух функций, поэтому после применения преобразования Фурье[5] получим

$$\hat{\Gamma}_{2x}(k)\, (1 + \hat{H}(k)) = \hat{H}(k) + \hat{B}(k) \, . \tag{I9}$$

Используя (I5), соотношение (I9) запишем в виде

$$g_{o+}\, \hat{\Gamma}_{2x} = g_{o-}^{-1} \hat{H} + g_{o-}^{-1} \hat{B} \, . \tag{20}$$

Целью проводимых преобразований является исключение члена, зависящего от B. Применим оператор P_+ (I4) к (20). Так как член $g_{o+}\hat{\Gamma}_{2x}$ является преобразованием Фурье функции, определенной на положительной полуоси, то P_+ действует на нем тождественно.

$$g_{o+}\, \hat{\Gamma}_{2x} = P_+(g_{o-}^{-1} \hat{H}) + P_+(g_{o-}^{-1} \hat{B}) \, . \tag{21}$$

Подставив (I6) в (2I), получим

$$g_{2x-}\hat{\Gamma}_{2x} = e^{-2ikx} g_{2x+} P_+(g_{o-}^{-1}\hat{H}) + + e^{-2ikx} g_{2x+}^{-1} P_+(g_{o-}^{-1}\hat{H}) \ . \tag{22}$$

Подействуем оператором P_- на (22). Последний член исчезает, и получаем

$$g_{2x-}\hat{\Gamma}_{2x} = P_-(e^{-2ikx} g_{2x+}^{-1} P_+(g_{o-}^{-1}\hat{H})) \ . \tag{23}$$

Наличие множителя e^{-2ikx} объясняется необходимостью согласования полубесконечностью интервала $(-\infty, 2x)$ с оператором P_-. Из (23) следует требуемая формула (I7).

Таким образом, теорема дает возможность выразить потенциал $V(x)$ через фазу рассеяния в данном частном случае $\ell = 0$, и отсутствие связанных состояний.

В случае наличия связанных состояний данными рассеяния вместо одной функции $\eta(k)$ служат (6),(7). Этот случай сводится к уже рассмотренному /I/.

Для этого находим вспомогательный потенциал $V^{(0)}$ по фазе

$$\eta^{(0)}(k) = \eta(k) + 2\sum_{m=1}^{N} \operatorname{arctg}\frac{\varkappa_m}{k} \ , \quad 0 \le k < \infty$$

указанным выше образом.

Искомый потенциал определяется с помощью формулы Крама-Крейна

$$V(x) = V^{(0)}(x) - 2\frac{d^2}{dx^2}\sum_{m=1}^{N} \ln\left[1 + c_m \int_0^x \varphi^2_{(m-1)}(t, i\varkappa_m)dt\right] \ . \tag{24}$$

Функции $\varphi_{(m-1)}(s, i\varkappa_m)$, определяемые последовательно, являются собственными функциями дискретного спектра:

$$y'' - (\varkappa_m^2 + V_{m-1}(x))\, y = 0 \ ,$$

$$\varphi_{(m-1)}(0, i\varkappa_m) = 0 \ , \quad \varphi'_{(m-1)}(0, i\varkappa_m) = 1 \ .$$

Потенциал $V_{(m)}$ выражается через $\varphi_{(m-1)}$ и $V_{(m-1)}$.

$$V_{(m)}(x) = V_{(m-1)}(x) - 2\frac{d^2}{dx^2}\ln\left(1 + c_m \int_0^x \varphi^2_{(m-1)}(t, i\varkappa_m)dt\right) \ .$$

Начальный потенциал $V_{(0)}$ берется равным $V^{(0)}$. Собственные функции в области непрерывного спектра вычисляются отдельно от потенциалов по формуле

$$\varphi_{(m)}(x,k) = \varphi_{(m-1)}(x,k) - \frac{\varphi_{(m-1)}(x, i\varkappa_m)}{1 + c_m \int_0^x \varphi^2_{(m-1)}(t, i\varkappa_m)dt} \times$$

$$\int_0^x \varphi_{(m-1)}(t,k)\varphi_{(m-1)}(t, i\varkappa_m)\,dt \ .$$

§ 2

Перейдем к случаю ненулевого орбитального момента ℓ.

В уравнении Шредингера

$$-y'' + V(x)y = \lambda y \tag{25}$$

потенциал имеет представление в окрестности точки $x=0$:

$$V(x) = \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + O\left(\frac{1}{x^{2-\varepsilon}}\right) \ , \quad \varepsilon > 0 \ . \tag{26}$$

В этом случае будем говорить об особенности типа ℓ.

В окрестности точки $x=0$ существует решение

$$y(x,\lambda) = C(\lambda)\, x^{\ell+1}\left[1 + O(x^{\varepsilon})\right] \ , \tag{27}$$

единственное с точностью до постоянного множителя, которое называется регулярным.

Укажем процедуру, позволяющую привести рассматриваемую задачу к случаю $\ell = 0$ /I/.

Пусть $y_o(x)$ – частное решение уравнения (25) при $\lambda = \lambda_o$, которое не обращается в нуль в окрестности точки $x = 0$.

Проведем преобразование с помощью этого решения y_o.

$$y_1(x;\lambda) = \frac{[y(x,\lambda); y_o(x)]}{(\lambda - \lambda_o)\, y_o(x)} \ , \tag{28}$$

где $y(x,\lambda)$ – произвольное решение (25), а через $[\varphi;\psi] = \varphi'\psi - \varphi\psi'$ обозначаем определитель Вронского.

Тогда y_1 (28) будет решением (25) с потенциалом

$$V_1(x) = V(x) + \Delta V(x) ,$$

$$\Delta V(x) = -2\frac{d}{dx}\frac{y_o'(x)}{y_o(x)} = -2\frac{d^2}{dx^2}\ln y_o(x) . \qquad (29)$$

Используя регулярное решение (27), сделаем преобразование (28). Приращение потенциала в окрестности точки $x=0$ имеет вид

$$\Delta V(x) = \frac{2(\ell+1)}{x^2} + O\left(\frac{1}{x^{2-\varepsilon}}\right) ,$$

т.е. $V(x)$ имеет особенность типа $\ell + 1$.

$$y_1(x,\lambda) = \frac{C(\lambda)}{2\ell+1}\, x^{\ell+2}\left[1 + O(x^{\varepsilon})\right] .$$

Функция $\eta(k)$ не меняется при этом преобразовании.

Рассмотрим, как меняются нормировочные коэффициенты C_m . Для этого проведем вид регулярного решения, соответствующего дискретному спектру, в окрестности точки $x = 0$ (27).

Верхний индекс определяет особенность

$$f^{(0)}(x, i\varkappa_n) = C(i\varkappa_n)x\left[1+O(x^{\varepsilon})\right] ,$$

$$f^{(\ell)}(x, i\varkappa_n) = \frac{C(i\varkappa_n)}{(2\ell+1)!!}\, x^{\ell+1}\left[1 + O(x^{\varepsilon})\right] .$$

Введем функцию комплексного переменного $M(s)$ следующим образом:

$$M(s) = f(0,s) ,$$

где f есть решение уравнения Шредингера

$$-y'' + V(x)y = s^2 y$$

для комплексного s .

$$C^{(\ell)-1}(i\varkappa_n) = \frac{2i\varkappa_n^{\ell+1}(2\ell+1)!!}{M(i\varkappa_n)}\left[\lim \frac{f^{(\ell)}(x, i\varkappa_m)}{x^{\ell-1}}\right]^{-1} =$$

$$= \frac{2i\varkappa_n^{\ell+1}\, C(i\varkappa_n)}{M(i\varkappa_n)} = \varkappa_n^{\ell}\; C_n^{(0)-1} .$$

Отсюда вытекает правило преобразования

$$C_n^{(\ell)} = \frac{C_n^{(o)}}{\varkappa_n^{(\ell)}} . \qquad (30)$$

Таким образом, имея потенциал с особенностью типа ℓ , $\ell \neq 0$, можно провести преобразование, обратное (28), соответствующее количество раз и, с учетом (30), придти к случаю $\ell = 0$, рассмотренному в § I.

Коснемся вопроса численной реализации приведенных методов. Поскольку ведущим частным случаем, к которому сводятся все остальные, является тот, где $\ell = 0$ и отсутствуют связанные состояния, достаточно остановиться на нем.

Известно, что ОЗР является некорректно поставленной в смысле А.Н.Тихонова /6/. Это следует и из вида решения (I7), основанного на преобразовании Фурье, являющимся некорректной задачей.

Вопросу устойчивого суммирования интеграла Фурье посвящены работы /7,8/. Заметим, что при другом подходе к решению ОЗР уже было использовано устойчивое суммирование интеграла Фурье /9/.

Литература

I. Фаддеев Л.Д. УМН, I959,т.I4,№4,с.57.
2. Крейн М.Г. ДАН СССР, I955, т.I05, № 3, с.433.
3. Крейн М.Г. УМН, I958, т.I3, № 5, с.3.
4. Шилов Г.Е. Математический анализ. Специальный курс. М., Физматгиз, I96I.
5. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Функциональный анализ. М., Наука, I98I.
6. Денисов А.М. ЖВМ и МФ, I977, №3.
7. Жидков Е.П., Христов Е.Х. ОИЯИ, Р5-I0369, Дубна, I977.
8. Егикян Р.С., Жидков Е.П. ОИЯИ, РII-84-360, Дубна, I984.
9. Визнер Я. и др. ЭЧАЯ, I978, т.9, вып.3, с.7II.

Рукопись поступила в издательский отдел
I7 мая I985 года.