объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Д4-89-241

В.С.Мележик

НОВЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Направлено в "Journal of Computational Physics"

1989

I. Введение

Большинство известных методов решения задачи о рассеянии на структурном рассеивателе основываются на возможности представления искомой волновой функции системы $\Psi(X)$ в многомерном координатном пространстве X в виде разложения по некоторому базису, который, по-возможности, учитывал бы специфику задачи и был бы достаточно прост. Особенности такого подхода хорошо известны: необходимо вычислить матричные элементы от гамильтониана задачи в выбранном базисе, решить возникающую систему интегродифференциальных (или алгебраических) уравнений, из асимптотики ее решений выделить параметры матрицы рассеяния и исследовать их зависимость от числа базисных (или пробных) функций. Как правило, это исследование можно выполнить лишь численно.

В данной работе предлагается подход, позволяющий решить многомерную задачу рассеяния без разложения искомой волновой функции по базису в традиционном смысле и избежать решения трудоемкой задачи вычисления матричных элементов от гамильтониана. Суть подхода состоит в следующем. Для части переменных Ω из $X=\{R,\Omega\}$, характеризующих рассеиватель, вводится разностная сетка Ω_i ($i = 0, 1, \ldots, N$; расстояние между узлами характеризуется шагом сетки h); значения Ω_i рассматриваются как дискретные переменные, а переменная R (расстояние между частицей и центром масс рассеивателя) остается непрерывной. Исходное многомерное уравнение Шредингера аппроксимируется при этом системой дифференциально-разностных уравнений для вектора $\{\Psi_i(R)\}_0^N = \Psi(R,\Omega_i)$. Далее, следуя работе /1/, задача рассеяния формулируется как система нелинейных функциональных уравнений

$$F_m^{(\nu)}(z) = 0 \quad ; \quad \nu = 0,1,\ldots,S \le N \,, \quad m = 1,\ldots,5 \qquad (1.1)$$

относительно вектора $z = \{\Psi_i^{(\nu)}(R), \varepsilon, t_{\nu\nu}^h\}$, решение которой при выбранном шаге h эквивалентно нахождению волновой функции задачи рассеяния $\Psi_i^{(\nu)}(R)$ и матрицы рассеяния $\{t_{\nu\alpha}^h\}$, отвечающих заданной энергии столкновения $\mathcal{E} = \mathcal{E}^*$.

В таком подходе вопрос о точности решения многомерной задачи рассеяния сводится к вопросу, достаточно разработанному в вычислительной математике (см., например, /2,3/), о сходимости полученного в пространстве $X_h = \{R,\Omega_i\}$ решения $\{\Psi_i^{(\nu)}(R), t_{\nu\alpha}^h\}$ к решению исходной задачи

$\{\Psi^{(\nu)}(R,\Omega), t_{\nu\alpha}\}$ в $X=\{R,\Omega\}$ (вместо исследования сходимости по базису). Использованная в работе разностная аппроксимация дает сходимость не хуже $\sim h^4$ (для h меньше некоторого $\bar{h}$, определяемого спецификой задачи).

В п.2 многомерная задача рассеяния сведена к системе дифференциально-разностных уравнений для элементов матрицы реакции и волновой функции в пространстве X_h. Решение системы уравнений представлено в Приложении А в виде последовательности краевых задач для итерационных поправок к искомой волновой функции системы. В п.3 предложенный подход реализован применительно к задаче о рассеянии на несферическом рассеивателе. Численная реализация метода для потенциалов

$$V(R,\cos\theta)=\begin{cases} V_0, & R\le R_0+\gamma\cos^2\theta, \\ 0, & R>R_0+\gamma\cos^2\theta, \end{cases} \tag{1.2}$$

$$V(R,\cos\theta)=\begin{cases} \infty, & R\le R_0, \\ \dfrac{\cos\theta}{R^2}, & R>R_0 \end{cases} \tag{1.3}$$

приведена в п.4, где также демонстрируется его сходимость при $h\to 0$ ($N\to\infty$). Особенности подхода для расчета состояний дискретного спектра многомерного уравнения Шредингера рассмотрены в п.5, где решена известная задача об атоме водорода в однородном магнитном поле. В п.6 обсуждаются полученные результаты и возможные приложения метода.

2. Рассеяние на структурном рассеивателе

Рассмотрим решение уравнения Шредингера в многомерном пространстве $X=\{R,\Omega\}$

$$\{H(R,\Omega)-\mathcal{E}\}\Psi(R,\Omega)=0 \tag{2.1}$$

с гамильтонианом

$$H(R,\Omega)=-\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial R^2}+V(R,\Omega)+H_0(\Omega), \tag{2.2}$$

где $H_0(\Omega)$ – гамильтониан рассеивателя, имеющего внутреннюю структуру, собственные функции которого $\varphi_n(\Omega)$

$$\{H_0(\Omega)-\mathcal{E}_n\}\varphi_n(\Omega)=0 \tag{2.3}$$

удовлетворяют условию нормировки

$$\int\varphi_n(\Omega)\varphi_{n'}(\Omega)d\Omega=\delta_{nn'} \tag{2.4}$$

$V(R,\Omega)$ – потенциал взаимодействия частицы с рассеивателем, M – приведенная масса системы "частица-мишень".

В подпространстве Ω введем разностную сетку Ω_i ($i=0,1,\dots,N$)

$$\Psi(R,\Omega)\to\Psi(R,\Omega_i)\equiv\Psi_i(R) \tag{2.5}$$

и перейдем от уравнения в частных производных (2.1) к системе дифференциально-разностных уравнений.

Для этого обозначим совокупность квантовых чисел, характеризующих систему (2.3) в состоянии n, индексом α ($\alpha=0,1,\dots,\infty$) и представим набор значений $\varphi_\alpha(\Omega)$ собственных функций гамильтониана H_0 в узловых точках Ω_i в виде квадратной матрицы $\varphi_{i\alpha}\equiv\varphi_\alpha(\Omega_i)$ размера $(N+1)\times(N+1)$. Обозначив обратную к ней матрицу как $\varphi^{-1}_{i\alpha}$ (предполагается, что обратная матрица существует, так что $\sum_{\alpha=0}^{N}\varphi_{i\alpha}\varphi^{-1}_{\alpha j}=\delta_{ij}$), искомую волновую функцию $\Psi(R,\Omega)$ представим в виде разложения

$$\Psi(R,\Omega)=\sum_{j=0}^{N}\Big(\sum_{\alpha=0}^{N}\varphi_\alpha(\Omega)\varphi^{-1}_{\alpha j}\Big)\Psi_j(R). \tag{2.6}$$

В узловых точках Ω_i для $\Psi(R,\Omega)$, заданной в виде разложения (2.6), автоматически выполняется (2.5), а также соотношения

$$(H_0(\Omega)\Psi(R,\Omega))_i=\sum_{j=0}^{N}\Big(\sum_{\alpha=0}^{N}\mathcal{E}_\alpha\varphi_{i\alpha}\varphi^{-1}_{\alpha j}\Big)\Psi_j(R), \tag{2.7}$$

$$(V(R,\Omega)\Psi(R,\Omega))_i=\sum_{j=0}^{N}\Big(\sum_{\alpha=0}^{N}(V(R,\Omega)\varphi_\alpha(\Omega))_i\varphi^{-1}_{\alpha j}\Big)\Psi_j(R). \tag{2.8}$$

Величины $(V(R,\Omega)\varphi_\alpha(\Omega))_i$ легко вычисляются, если оператор $V(R,\Omega)$ не содержит дифференцирования и интегрирования по переменным Ω

$$(V(R,\Omega)\varphi_\alpha(\Omega))_i=V(R,\Omega_i)\varphi_{i\alpha}.$$

В противном случае, использовав разностную аппроксимацию, получаем

$$(V(R,\Omega)\varphi_\alpha(\Omega))_i=\sum_\beta A_{i\beta}(R)\varphi_{\beta\alpha},$$

где матрица $A_{i\beta}$ определяется видом используемых формул численного дифференцирования и интегрирования и свойствами базисных функций $\varphi_\alpha(\Omega)$.

Если в асимптотической области $R\to\infty$ потенциал взаимодействия имеет вид

$$V(R,\Omega)=\frac{J(J+1)}{2MR^2}+\frac{C}{R^n}, \tag{2.9}$$

где $C=const$, $n\ge 2$, то тогда волновая функция $\Psi(R,\Omega)$ при $R\to\infty$ может быть представлена в виде

$$\Psi^{(\nu)}(R,\Omega)=\sum_{\alpha=0}^{S}\Big\{j_J(k_\alpha R)\delta_{\nu\alpha}+\sqrt{\frac{k_\nu}{k_\alpha}}\,t_{\nu\alpha}\,n_J(k_\alpha R)\Big\}\varphi_\alpha(\Omega) \tag{2.10}$$
$$+\sum_{\alpha=S+1}^{\infty}\exp\{-|k_\alpha|R\}\varphi_\alpha(\Omega),$$

где $t_{\nu\alpha}(\mathcal{E})$ – матрица реакции задачи рассеяния с $S+1$ открытыми каналами ($\mathcal{E}-\mathcal{E}_\alpha>0$ при $\alpha\le S$), $k_\alpha=\sqrt{2M(\mathcal{E}-\mathcal{E}_\alpha)}$ – импульс в канале. Умножив (2.I0) на $\varphi_\alpha(\Omega)$ и проинтегрировав по Ω, получим при $R\to\infty$ $N+$ I уравнений

$$\int \Psi^{(\nu)}(R,\Omega)\,\varphi_\alpha(\Omega)\,d\Omega=\begin{cases} j_j(k_\alpha R)\delta_{\nu\alpha}+\sqrt{\frac{k_\nu}{k_\alpha}}\,t_{\nu\alpha}\,n_j(k_\alpha R), & \alpha\le s,\\ \exp\{-|k_\alpha|R\}, & \alpha>s.\end{cases} \quad (2.\text{I}1)$$

С другой стороны, воспользовавшись разложением (2.6) для $\Psi(R,\Omega)$ и свойством ортогональности функций $\varphi_\alpha(\Omega)$ (2.4), получаем

$$\int \Psi^{(\nu)}(R,\Omega)\,\varphi_\alpha(\Omega)\,d\Omega=\sum_{j=0}^{N}\varphi^{-1}_{\alpha j}\,\Psi_j(R)\,. \quad (2.\text{I}2)$$

Таким образом, многомерная задача рассеяния (2.I), (2.I0) сведена к системе $N+$ I дифференциально-разностных уравнений

$$\sum_{j=0}^{N}\left\{\delta_{\alpha j}\frac{d^2}{dR^2}+2M\left(\varepsilon\delta_{\alpha j}-V_{\alpha j}(R)\right)\right\}\Psi_j(R)=0\,, \quad (2.\text{I}3)$$

где
$$V_{\alpha j}(R)=\sum_{\beta=0}^{N}\left\{\varepsilon_\beta\,\varphi_{\alpha\beta}\,\varphi^{-1}_{\beta j}+\left(V(R,\Omega)\,\varphi_\beta(\Omega)\right)_\alpha\varphi^{-1}_{\beta j}\right\}$$

с граничными условиями

$$\sum_{j=0}^{N}\varphi^{-1}_{\alpha j}\,\Psi_j^{(\nu)}(R)\underset{R\to\infty}{=}\begin{cases} j_j(k_\alpha R)\delta_{\nu\alpha}+\sqrt{\frac{k_\nu}{k_\alpha}}\,t_{\nu\alpha}\,n_j(k_\alpha R), & \alpha\le s,\\ \exp\{-|k_\alpha|R\}, & \alpha>s.\end{cases} \quad (2.\text{I}4)$$

Эти уравнения по форме идентичны уравнениям многоканальной задачи рассеяния, и для их решения естественно использовать методы, разработанные ранее для решения этой задачи (см., например, /4,5/), развив их применительно к особенностям рассматриваемой задачи.

Здесь, следуя работе /I/, сформулируем задачу (2.I3), (2.I4) как нелинейное функциональное уравнение

$$F_m^{(\nu)}(z)=0\,,\quad z=\left\{\Psi_j^{(\nu)}(R),\,\varepsilon,\,t_{\nu\nu}\right\},$$
$$\nu=0,1,\dots,s\le N;\; j=0,1,\dots,N;\; m=1,\dots,5, \quad (2.\text{I}5)$$

решение которого является решением задачи рассеяния (2.I3), (2.I4) при заданной энергии столкновения $\varepsilon=\varepsilon^*$. Первые две компоненты оператора $F^{(\nu)}$ определяют систему уравнений (2.I3) и условие ограниченности искомой волновой функции $\Psi_\alpha(R)$ в точке $R=0$:

$$F_1^{(\nu)}(z)=\sum_{j=0}^{N}\left\{\delta_{\alpha j}\frac{d^2}{dR^2}+2M\left(\varepsilon\delta_{\alpha j}-V_{\alpha j}(R)\right)\right\}\Psi_j^{(\nu)}(R), \quad (2.\text{I}6)$$

$$F_2^{(\nu)}(z)=\Psi_\alpha^{(\nu)}(0)\,,\quad \alpha=0,1,\dots,N. \quad (2.\text{I}7)$$

Третья компонента $F_3^{(\nu)}$ определяет граничное условие в точке $R=R_m$ которое следует из асимптотических соотношений (2.I4)

$$F_3^{(\nu)}(z)=\left\{\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)\sum_{j=0}^{N}\varphi^{-1}_{\alpha j}\frac{d\Psi_j^{(\nu)}(R)}{dR}-\bar{\mathcal{D}}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)\sum_{j=0}^{N}\varphi^{-1}_{\alpha j}\Psi_j^{(\nu)}(R)\right\}_{R=R_m}, \quad (2.\text{I}8)$$

где
$$\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)=\begin{cases}\left(j_j(k_\alpha R)+t_{\nu\nu}\,n_j(k_\alpha R)\right)\delta_{\nu\alpha}+n_j(k_\alpha R)(1-\delta_{\nu\alpha}), & \alpha\le s,\\ 1, & \alpha>s.\end{cases}$$
$$\bar{\mathcal{D}}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)=\begin{cases}\frac{d}{dR}\left[\left(j_j(k_\alpha R)+t_{\nu\nu}\,n_j(k_\alpha R)\right)\delta_{\nu\alpha}+n_j(k_\alpha R)(1-\delta_{\nu\alpha})\right], & \alpha\le s,\\ -|k_\alpha|, & \alpha>s.\end{cases}$$

В таком виде задача (2.I5) представляет собой систему **N**+I обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с граничными условиями в т. $R=0$ и $R=R_m$ для определения $N+3$ неизвестных $z=\left\{\Psi_\alpha^{(\nu)}(R),\,\varepsilon,\,t_{\nu\nu}\right\}$. Для однозначной разрешимости задачи необходимо добавить еще два уравнения, в качестве которых используем условие нормировки волновой функции

$$\int_0^{R_m}dR\int d\Omega\,\Psi^2(R,\Omega)-1=0$$

и соотношение
$$\int_0^{R_m}dR\int d\Omega\,\Psi(R,\Omega)\left(H(R,\Omega)-\varepsilon^*\right)\Psi(R,\Omega)=0\,,$$

фиксирующее значение энергии столкновения $\varepsilon=\varepsilon^*$ (см. /I/). Из разложения (2.6) для $\Psi(R,\Omega)$ следуют выражения для компонентов $F_4^{(\nu)}$ и $F_5^{(\nu)}$ оператора F

$$F_4^{(\nu)}(z)=\sum_{\alpha j}g_{\alpha j}\int_0^{R_m}\Psi_\alpha^{(\nu)}(R)\,\Psi_j^{(\nu)}(R)\,dR-1\,, \quad (2.\text{I}9)$$

$$F_5^{(\nu)}(z)=\sum_{\alpha j}g_{\alpha j}\int_0^{R_m}\Psi_\alpha^{(\nu)}(R)\left\{\delta_{\alpha j}\frac{d^2}{dR^2}+2M\left(\varepsilon^*\delta_{\alpha j}-V_{\alpha j}(R)\right)\right\}\Psi_j^{(\nu)}(R)\,dR\,. \quad (2.20)$$

Здесь $g_{\alpha j}$ – весовая функция, возникающая при интегрировании по переменным Ω, которая определяется используемыми квадратурными формулами и свойствами базисных функций $\varphi_\alpha(\Omega)$.

Решив систему уравнений (2.I5)-(2.20), находим волновую функцию

$$\Psi^{(\nu)}(R,\Omega)=\sum_{j=0}^{N}\sum_{\alpha=0}^{N}\varphi_\alpha(\Omega)\,\varphi^{-1}_{\alpha j}\,\Psi_j(R)$$

многомерной задачи рассеяния (2.I), (2.I0) при $\varepsilon=\varepsilon^*$ и диагональные элементы матрицы реакции $t_{\nu\nu}(\varepsilon^*)$. Недиагональные матричные элементы $t_{\alpha\nu}$ $(\alpha\ne\nu)$ определяются по формуле

$$t_{\nu\alpha} = \frac{(j_J(k_\nu R_m) + t_{\nu\nu} n_J(k_\nu R_m))}{n_J(k_\alpha R_m)} \cdot \frac{\int \Psi^{(\nu)}(R_m,\Omega)\varphi_\alpha(\Omega)d\Omega}{\int \Psi^{(\nu)}(R_m,\Omega)\varphi_\nu(\Omega)d\Omega} = \tag{2.21}$$

$$= \frac{(j_J(k_\nu R_m) + t_{\nu\nu} n_J(k_\nu R_m))}{n_J(k_\alpha R_m)} \cdot \frac{\sum_{j=0}^{N} \varphi_{\alpha j}^{-1} \, \psi_j^{(\nu)}(R_m)}{\sum_{j=0}^{N} \varphi_{\nu j}^{-1} \, \psi_j^{(\nu)}(R_m)} .$$

Зная матрицу реакции $T(\mathcal{E}) = \{t_{\nu\alpha}\}$, по известным формулам /6/ можно определить S-матрицу задачи и соответствующее сечение рассеяния.

В Приложении А решение задачи (2.15)-(2.20) представлено в виде последовательности краевых задач для итерационных поправок к искомой волновой функции $\{\psi_\alpha^{(\nu)}(R)\}$. Интересно рассмотреть и другие возможности для решения задачи (2.15)-(2.20).

Отметим, что при разбиении (2.2) исходного гамильтониана $H(R,\Omega)$ переход от многомерной задачи рассеяния к уравнению (2.15) особенно нагляден и легко осуществим, однако в предполагаемом подходе $H_0(\Omega)$ не обязательно должен совпадать с гамильтонианом мишени, что демонстрируется в следующем разделе на примере задачи о рассеянии на несферическом рассеивателе. Такая задача, с одной стороны, уже отражает специфику многомерной задачи рассеяния, а с другой стороны, она достаточно проста, чтобы наглядно продемонстрировать особенности применения предложенного подхода.

В некоторых задачах более удобным может оказаться разбиение вида

$$H(R,\Omega) = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial R^2} + V(R,\Omega) + H_0(\Omega; R) ,$$

если собственные значения $\mathcal{E}_\alpha(R)$ и собственные функции $\varphi_\alpha(\Omega; R)$ гамильтониана $H_0(\Omega; R)$, зависящие от R как от параметра, достаточно легко вычисляются.

3. Рассеяние на несферическом рассеивателе

Применим предлагаемый подход в задаче о рассеянии частицы массы М на несферическом рассеивателе $V(\vec{R})$. Для простоты рассмотрим аксиально-симметричный случай $V(\vec{R}) \equiv V(R,\cos\theta)$, где θ - угол между z - осью и направлением рассеяния. Сформулируем задачу (2.15) для этого случая.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\partial^2}{\partial R^2}\Psi(R,x) + \frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial x}(1-x^2)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(R,x) + 2M(\mathcal{E}-V(R,x))\Psi(R,x) = 0, \tag{3.1}$$

где $R \in [0,\infty)$, $x = \cos\theta \in [-1,1]$.
Асимптотику его решений при $R \to \infty$ запишем в представлении матрицы реакции

$$\Psi^{(\nu)}(R,x) = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \{ j_\alpha(kR)\delta_{\nu\alpha} + t_{\nu\alpha} \cdot n_\alpha(kR)\} \sqrt{2\alpha+1}\, P_\alpha(x) , \tag{3.2}$$

где $P_\alpha(x)$ - полиномы Лежандра, ортогональные на отрезке (-1, 1),

$$\int_{-1}^{1} P_\alpha(x) P_{\alpha'}(x) dx = \delta_{\alpha\alpha'} \frac{2}{2\alpha+1} .$$

Задача состоит в определении матрицы $T = \{t_{\alpha\nu}\}$, через которую можно выразить амплитуду рассеяния

$$\hat{f} = 1 - i(1-iT)^{-1}(1+iT) , \tag{3.3}$$

$$f(\vec{n}_k, \vec{n}_R) = \sum_{\alpha,\nu} f_{\nu\alpha} \sqrt{(2\nu+1)(2\alpha+1)}\, P_\alpha(\theta_R) P_\nu(\theta_k) .$$

Сечение рассеяния под углом θ_k ($\vec{n}_k$ и $\vec{n}_R$ - единичные векторы, совпадающие с направлениями $\vec{k}$ и $\vec{R}$ соответственно) равно

$$\sigma(\theta_k) = 2\pi \int_{-1}^{1} |f(x,\theta_k)|^2 dx , \tag{3.4}$$

а полное сечение, усредненное по возможным ориентациям рассеивателя,

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{2} \cdot \int_{-1}^{1} \sigma(x_k)\, dx_k . \tag{3.5}$$

Легко видеть, что в случае сферической симметрии потенциала матрицы $\hat{f}$ и Т становятся диагональными.

Введем разностную сетку x_i ($i = 0, 1, \dots, N$) по переменной Х и представим решение уравнения (3.1), аналогично (2.6), в виде

$$\Psi(R,x) = \sum_{j=0}^{N} \left(\sum_{\alpha=0}^{N} P_\alpha(x) P_{\alpha j}^{-1} \right) \psi_j(R) \tag{3.6}$$

(здесь $P_{i\alpha} = P_\alpha(x_i)$),
тогда формулы (2.7), (2.8) для $(H_0\psi)_\alpha$ и $(V\psi)_\alpha$ в узловых точках x_α принимают простой вид

$$(H_0(x)\,\Psi(R,x))_\alpha = \frac{1}{2MR^2} \sum_{j=0}^{N} \left(\sum_{\ell=0}^{N} \ell(\ell+1) P_{\alpha\ell} P_{\ell j}^{-1} \right) \psi_j(R), \tag{3.7}$$

$$(V(R,x)\,\Psi(R,x))_\alpha = V(R,x_\alpha)\,\psi_\alpha(R) .$$

Использовав (3.2), (3.7) и соотношения ортогональности для полиномов Лежандра, получим систему $N+1$ уравнений вида (2.15)-(2.20) с компонентами $F_m^{(\nu)}$, определенными соотношениями

$$F_1^{(\nu)}(z) = \sum_{j=0}^{N}\left\{\delta_{\alpha j}\frac{d^2}{dR^2} + 2M\left(\varepsilon\delta_{\alpha j} - V_{\alpha j}(R)\right)\right\}\psi_j^{(\nu)}(R), \qquad (3.8)$$

где $$V_{\alpha j}(R) = \frac{1}{2MR^2}\sum_{\ell=0}^{N}\ell(\ell+1)P_{\alpha\ell}P^{-1}_{\ell j} + V(R,x_\alpha)\delta_{\alpha j},$$

$$F_2^{(\nu)}(z) = \psi_\alpha(0);\quad \alpha = 0,1,\dots,N, \qquad (3.9)$$

$$F_3^{(\nu)}(z) = \left\{\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)\sum_{j=0}^{N}P^{-1}_{\alpha j}\frac{d\psi_j^{(\nu)}(R)}{dR} - \frac{d}{dR}\left[\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R)\right]\sum_{j=0}^{N}P^{-1}_{\alpha j}\psi_j^{(\nu)}(R)\right\}_{R=R_m}, \qquad (3.10)$$

где $$\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu},R) = \left(j_\alpha(kR) + t_{\nu\nu}n_\alpha(kR)\right)\delta_{\nu\alpha} + n_\alpha(kR)(1-\delta_{\nu\alpha}),$$

$$F_4^{(\nu)}(z) = \sum_{\alpha,j}g_{\alpha j}\int_0^{R_m}\psi_\alpha^{(\nu)}(R)\,\psi_j^{(\nu)}(R)\,dR - 1. \qquad (3.11)$$

$$F_5^{(\nu)}(z) = \sum_{\alpha,j}g_{\alpha j}\int_0^{R_m}\psi_\alpha^{(\nu)}(R)\left\{\delta_{\alpha j}\frac{d^2}{dR^2} + 2M\left(\varepsilon^*\delta_{\alpha j} - V_{\alpha j}(R)\right)\right\}\psi_j^{(\nu)}(R), \qquad (3.12)$$

где $g_{\alpha j}$ – веса квадратурных формул интегрирования по переменной X (см.вывод соотношений (2.I9), (2.20)).

Недиагональные матричные элементы $t_{\nu\alpha}\ (\nu\neq\alpha)$ определяются по формуле

$$t_{\nu\alpha} = \sqrt{\frac{2\alpha+1}{2\nu+1}}\cdot\frac{\left(j_\nu(kR_m) + t_{\nu\nu}\cdot n_\nu(kR_m)\right)}{n_\alpha(kR_m)}\cdot\frac{\sum_{j=0}^{N}P^{-1}_{\alpha j}\psi_j^{(\nu)}(R_m)}{\sum_{j=0}^{N}P^{-1}_{\nu j}\psi_j^{(\nu)}(R_m)}. \qquad (3.13)$$

Поскольку правая часть формулы (3.6) представляет собой интерполяционный полином степени N по переменной X, для погрешности разложения (3.6) $\delta\psi_N = |\psi - \psi(N)|$ справедлива оценка

$$\delta\psi_N \lesssim \frac{1}{(N+1)!}\max\left|\frac{\partial^{N+1}}{\partial x^{N+1}}\psi(R,\xi)\right|\prod_{j=0}^{N}(x-x_j);\quad \xi\in[-1,1]. \qquad (3.14)$$

Тогда можно показать, что при точном решении уравнений (3.8)-(3.I3) погрешность матричных элементов $t_{\nu\alpha}$ тоже составляет величину $\sim\frac{1}{(N+1)!}$. Это обеспечивает быструю сходимость метода по N при использовании в (3.II) и (3.I2) квадратурных формул высокого порядка точности.

4. Численный пример

В качестве примера использования предложенного подхода были решены задачи о рассеянии на несферической потенциальной яме

$$V(R,x) = \begin{cases} V_0, & R\le R_0+\gamma x^2, \\ 0, & R > R_0+\gamma x^2 \end{cases} \qquad (4.1)$$

и несферическом дальнодействующем рассеивателе

$$V(R,x) = \begin{cases} \infty, & R\le R_0, \\ \frac{x}{R^2}, & R > R_0. \end{cases} \qquad (4.2)$$

Потенциал типа (4.2) используют, например, при рассмотрении рассеяния электронов полярными молекулами и возбужденными атомами водорода /I6/ ("дипольное рассеяние").

Для решения задачи (3.8)-(3.I3) использовался алгоритм /I/ (см. формулы (A.I)-(A.6) Приложения) с конечно-разностной аппроксимацией по переменной R порядка $\sim h_R^2$ /I3/. Расчет выполнен при M = I, $V_0 = -5$, $R_0 =$ I.

В таблице I представлены результаты расчета элементов t-матрицы для несферической потенциальной ямы (4.I) при γ = I, в зависимости от N (числа узловых точек по X). Приведены также величины

$$\delta_\nu(N) = \frac{t_{\nu\nu}(N) - t_{\nu\nu}(2N)}{t_{\nu\nu}(2N) - t_{\nu\nu}(4N)}, \qquad (4.3)$$

характеризующие сходимость метода по N. В последней колонке таблицы I представлены фазы рассеяния $t_{\nu\nu}$ на сферически симметричной яме (γ = 0) (в этом случае $t_{\alpha\nu} = 0$ при $\alpha\neq\nu$), которые отличаются от точных значений на величину $\sim 10^{-3} - 10^{-4}$. Расчет выполнен при h_R = 0,0I25, R_m = 5 для энергии столкновения ε = 0,005 (k =0,I).

В таблице 2 представлены результаты расчета элементов t-матрицы и величин $\delta_\nu(N)$ (4.3) для потенциала "дипольного" взаимодействия (4.2). Расчет выполнен при h_R = 0,I, R_m = 20, для энергии столкновения ε = 0,02 (k = 0,2).

В расчетах в формулах (3.II), (3.I2) использовались весовые функции формул Симпсона. Как отмечалось в п. 3, при этом сходимость метода должна быть не хуже $\sim\frac{1}{N^4}$, т.е. для $N>\bar N$, где $\bar N$ определяется спецификой задачи, должно выполняться $\delta_\nu(N)\gtrsim 16$, что демонстрируется в таблицах I и 2. Здесь мы не рассматриваем достаточно изученный вопрос о сходимости метода при $h_R\to 0$ и $R_m\to\infty$ и сходимости "ньютоновских" итераций (A.I)-(A.6), который исследовался в работах /I,II-I3/. Отметим лишь, что последние сходились до величины $\delta = \|F(z^*)\|\sim 10^6$ за 5 – 6 итераций для потенциала (4.I) и за 4 – 5

Таблица I. Т-матрица рассеяния для несферической потенциальной ямы (4.I) и величины $\delta_\nu(N)$

N	$\nu \backslash \alpha$	γ = I, $t_{\nu\alpha}$: 0	I	2	3	$\delta_\nu(2)$	γ = 0, $t_{\nu\nu}$
2	0	0,6460	I·IO^{-IO}	-0,67I4·IO^{-3}			
4		0,38I7	I·IO^{-IO}	-0,4004·IO^{-3}	I·IO^{-I4}	529	0,5699·IO^{-I}
8		0,38I2	I·IO^{-IO}	-0,3706·IO^{-2}	I·IO^{-I3}		
2	I	I·IO^{-IO}	0,II9I·IO^{-2}	I·IO^{-I3}			
4		I·IO^{-IO}	0,5I3I·IO^{-3}	I·IO^{-I2}	-0,2663·IO^{-6}	6,2	0,25·IO^{-4}
8		I·IO^{-IO}	0,4034·IO^{-3}	I·IO^{-I2}	-0,2055·IO^{-6}		
2	2	-0,I678.IO^{-2}	I·IO^{-I2}	0,I986·IO^{-5}			
4		-0,5I06·IO^{-3}	I·IO^{-I2}	0,8722·IO^{-6}	I·IO^{-I5}	4,0	0,6·IO^{-6}
8		-0,37I2·IO^{-3}	I·IO^{-I2}	0,5922·IO^{-6}	I·IO^{-I4}		
2	3						
4		I·IO^{-I4}	-0,5437·IO^{-4}	I·IO^{-I3}	-0,34·IO^{-9}		
8		I·IO^{-I3}	-0,2290·IO^{-6}	I·IO^{-I3}	-0,2I·IO^{-9}		

Таблица 2. Т-матрица рассеяния для "дипольного" рассеивателя (4.2) и величины $\delta_\nu(N)$

N	$\nu \backslash \alpha$	$t_{\nu\alpha}$: 0	I	2	3	4	$\delta_\nu(2)$
2	0	0,3847	0,59I6	-0,4902·IO^{-I}			
4		0,3095	0,5I38	-0,4583·IO^{-I}	0,6203·IO^{-2}	-0,3290·IO^{-3}	376
8		0,3093	0,5I34	-0,458I·IO^{-I}	0,6I63·IO^{-2}	-0,328I·IO^{-3}	
2	I	0,59I6	-0,4253·IO^{-3}	0,2466			
4		0,5I37	-0,I259	0,2474	-0,I584·IO^{-I}	0,7693·IO^{-3}	209
8		0,5I34	-0,I265	0,2474	-0,I575·IO^{-I}	0,7677·IO^{-3}	
2	2	-0,I226	0,6I64	-0,2522·IO^{-I}			
4		-0,4636·IO^{-I}	0,2493	0,9I8I·IO^{-2}	0,9243·IO^{-I}	-0,36I7·IO^{-2}	
8		-0,458I·IO^{-I}	0,2474	0,9I50·IO^{-2}	0,92IO·IO^{-I}	-0,36II·IO^{-2}	
2	3						
4		0,7029·IO^{-2}	-0,2356·IO^{-2}	0,9200·IO^{-I}	0,85I5·IO^{-2}	0,2I74·IO^{-I}	
8		0,6I63·IO^{-2}	-0,I575·IO^{-2}	0,92IO·IO^{-I}	0,6897·IO^{-2}	0,2I7I·IO^{-I}	
2	4						
4		-0,39I7·IO^{-2}	0,4I48·IO^{-3}	-0,I025·IO^{-2}	0,3340·IO^{-I}	0,II34·IO^{-2}	
8		-0,3278·IO^{-3}	0,7670·IO^{-3}	-0,3608·IO^{-2}	0,2I7I·IO^{-I}	0,88I6 IO^{-2}	

Элементы $t_{\nu\alpha}$ при $\nu, \alpha > 4$ имеют порядок величины $< IO^{-5}$.

итераций для потенциала (4.2). Погрешность вычислений можно контролировать также по точности выполнения соотношений $t_{\nu\alpha} = t_{\alpha\nu}$ $(\alpha \neq \nu)$ (см. таблицы I и 2, где указанные соотношения выполняются с относительной точностью $\sim 10^{-4}$ при $N = 8$).

5. Дискретный спектр многомерного уравнения Шредингера

Предложенный подход применим для решения многомерного уравнения Шредингера как в области непрерывного, так и дискретного спектра. В последнем случае задача (2.I5)-(2.20) существенно упрощается. Система уравнений $F^{(\nu)}(z) = 0$ заменяется одним уравнением $F^{(0)}(z) = 0$, где $z = \{\Psi^{(0)}(R,\Omega),\ \mathcal{E}\}$, а компоненты оператора $F^{(0)}_m$ определяются формулами (2.I6)-(2.I9) для $S = 0$ для $\mathcal{D}^{(0)}_\alpha = 1$, $\bar{\mathcal{D}}^{(0)}_\alpha = -|k_\alpha|$ (в этом случае все каналы закрыты: $\mathcal{E} - \mathcal{E}_\alpha < 0;\ \alpha = 0, 1, \ldots, N$). Для его решения, по-прежнему, применимы формулы (A.I)-(A.6) Приложения А с естественным условием $\mu^n_2 = 0$ /I/.

Для демонстрации возможностей метода применительно к уравнению Шредингера в области дискретного спектра он был использован для решения хорошо изученной задачи об атоме водорода в однородном магнитном поле. В этом случае потенциал $V(R,x)$ в формуле (3.I) равен

$$V(R,x) = -\frac{1}{R} + \frac{R^2\gamma^2}{8}(1-x^2)\ ; \qquad (5.I)$$

γ - параметр,характеризующий напряженность магнитного поля(см.,например, /I7/).

В таблице 3 вычисленные при $N = 2,\ 4,\ 8,\ 16$, $h_R = 0{,}0125$, $R_m = 10$ значения энергии связи атома водорода для некоторых параметрах магнитного поля γ сравниваются с результатами работ /I7,I8/, где достигнута точность $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$.

Здесь приведены также величины $\delta(N) = \dfrac{\mathcal{E}(N) - \mathcal{E}(2N)}{\mathcal{E}(2N) - \mathcal{E}(4N)}$, характеризующие сходимость метода по N. Отметим, что при решении уравнения Шредингера в области дискретного спектра сходимость метода в данной реализации быстрее, чем при решении задачи рассеяния и при $N > \bar{N}$ (здесь $\bar{N}$ зависит от величины напряженности поля γ) определяется лишь погрешностью разложения (3.6) $\sim \frac{1}{(N+1)!}$, поскольку в этом случае численное интегрирование выполняется лишь при вычислении нормировки волновой функции в (3.II).

6. Заключение

Предложенный в данной работе метод допускает обобщение на трехмерный и многомерный случаи. Он достаточно эффективен: наиболее тру-

Таблица 3. Энергия основного состояния атома водорода в однородном магнитном поле (в единицах $\mathcal{E}_0$ = Ry)

γ	$N = 2$	$N = 4$	$N = 8$	$N = 16$	/I7/	$\delta(2)$	$\delta(4)$
0.0	−0,999960	−0,999960	−0,999960		−0,999957*)		
0,I	−0,995028	−0,9950I3	−0,9950I3		−0,99508		
0,2	−0,980923	−0,980726	−0,980723		−0,98076	65,7	IOI,5
0,5	−0,89872I	−0,894583	−0,894380	−0,894378	−0,89447	20,4	IOI,5
I,0	−0,694082	−0,665045	−0,66236I	−0,66229I	−0,6624I (−0,66228*))	IO,8	38,3

*) Эти результаты взяты из работы /I8/.

доемкая часть известных методов решения многомерного уравнения Шредингера - вычисление матричных элементов, здесь заменена достаточно простым алгоритмом генерации матрицы коэффициентов системы дифференциально-разностных уравнений. Привлекательной стороной подхода является также его быстрая сходимость. В предлагаемом подходе априори известна погрешность используемого разложения (2.6) для искомой волновой функции. В рассмотренном примере (3.6) она составляет величину $\sim \frac{1}{(N+1)!}$, что обеспечивает быструю сходимость метода при использовании формул высокого порядка точности для численного дифференцирования и интегрирования по Ω базисных функций $\varphi_\alpha(\Omega)$ при выводе уравнений (2.8), (2.I9), (2.20).

Эти два обстоятельства, на наш взгляд, делают метод привлекательным для решения существенно многомерных уравнений Шредингера, как в области непрерывного, так и дискретного спектров. Из наиболее интересных задач такого рода можно указать: задачу о рассеянии на нежестком ротаторе, что отвечает рассеянию нейтральной частицы на двухатомной молекуле с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы, рассеяние электронов на атомах, рассеяние мезоатомов на ядрах, атом водорода в неоднородном поле и др.

Подход обобщается и на случай рассеяния структурного комплекса на структурной мишени.

Эти задачи мы предполагаем рассмотреть в последующих работах.

В заключение выражаю благодарность Л.И.Пономареву за постоянный интерес к работе и многочисленные полезные обсуждения. Выражаю также благодарность за полезные обсуждения Л.Н.Богдановой, С.И.Виницкому, В.И.Коробову, В.А.Кузьмину, В.Е.Маркушину, И.В.Пузынину и М.П.Файфману.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Следуя работе /I/, решение задачи (2.I5)-(2.20) представим в виде итерационной процедуры

$$F'_{z_n}(z_n)\Delta z_n = -F(z_n), \tag{A.I}$$

$$z_{n+1} = z_n + \tau_n \Delta z_n = \left\{ \vec{\Psi}^{(n)} + \tau_n \vec{V}^{(n)},\ \mathcal{E}_n + \tau_n \mu_1^n,\ t_{\nu\nu}^{(n)} + \tau_n \mu_2^n \right\},$$

где

$$\vec{V}^{(n)} = -\vec{\Psi}^{(n)} + \mu_1^n \vec{\vartheta}^{(n)} + \mu_2^n \vec{\omega}^{(n)},$$

$$z_0 = \{\vec{\Psi}, \mathcal{E}_0, t_{\nu\nu}^{(0)}\},\quad \vec{\Psi}^{(n)} = \{\Psi_j^{(n)}(R)\},\quad \vec{V}^{(n)} = \{V_j^{(n)}(R)\}$$

(F'_{z_n} производная Фреше оператора F в точке z_n), которая на каждом n-м шаге итерационного процесса состоит в решении краевых задач для определения итерационных поправок $\vec{\vartheta}^{(n)}$ и $\vec{\omega}^{(n)}$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2}{dR^2}\vec{\vartheta}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}_n - \hat{V})\vec{\vartheta}^{(n)} = -\vec{\Psi}^{(n)} \\ \vec{\vartheta}^{(n)}\big|_{R=0} = 0 \\ \left[\hat{\mathcal{D}}_n \hat{\varphi}^{-1}\dfrac{d}{dR}\vec{\vartheta}^{(n)} - \hat{\hat{\mathcal{D}}}_n \hat{\varphi}^{-1}\vec{\vartheta}^{(n)}\right]_{R=R_m} = -\left[\dfrac{\partial\hat{\mathcal{D}}_n}{\partial\mathcal{E}_n}\hat{\varphi}^{-1}\dfrac{d}{dR}\vec{\Psi}^{(n)} - \dfrac{\partial\hat{\hat{\mathcal{D}}}_n}{\partial\mathcal{E}_n}\hat{\varphi}^{-1}\vec{\Psi}^{(n)}\right]_{R=R_m} \end{cases} \tag{A.2}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2}{dR^2}\vec{\omega}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}_n - \hat{V})\vec{\omega}^{(n)} = 0 \\ \vec{\omega}^{(n)}\big|_{R=0} = 0 \\ \left[\hat{\mathcal{D}}_n \hat{\varphi}^{-1}\dfrac{d}{dR}\vec{\omega}^{(n)} - \hat{\hat{\mathcal{D}}}_n \hat{\varphi}^{-1}\vec{\omega}^{(n)}\right]_{R=R_m} = -\left[\dfrac{\partial\hat{\mathcal{D}}_n}{\partial t_{\nu\nu}^{(n)}}\hat{\varphi}^{-1}\dfrac{d}{dR}\vec{\Psi}^{(n)} - \dfrac{\partial\hat{\hat{\mathcal{D}}}_n}{\partial t_{\nu\nu}^{(n)}}\hat{\varphi}^{-1}\vec{\Psi}^{(n)}\right]_{R=R_m} \end{cases} \tag{A.3}$$

и системы алгебраических уравнений для определения μ_1^n и μ_2^n

$$\begin{cases} a_{11}^n \mu_1^n + a_{12}^n \mu_2^n = b_1^n, \\ a_{21}^n \mu_1^n + a_{22}^n \mu_2^n = b_2^n. \end{cases} \tag{A.4}$$

Здесь введены обозначения:

$$a_{11}^n = (\vec{\Psi}^{(n)}, \vec{\vartheta}^{(n)}),\quad a_{12}^n = (\vec{\Psi}^{(n)}, \vec{\omega}^{(n)}), \tag{A.5}$$

$$a_{21}^n = \left(\vec{\Psi}^{(n)}, \frac{d^2}{dR^2}\vec{\vartheta}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}^* - \hat{V})\vec{\vartheta}^{(n)}\right) + \left(\vec{\vartheta}^{(n)}, \frac{d^2}{dR^2}\vec{\Psi}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}^* - \hat{V})\vec{\Psi}^{(n)}\right),$$

$$a_{22}^n = \left(\vec{\Psi}^{(n)}, \frac{d^2}{dR^2}\vec{\omega}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}^* - \hat{V})\vec{\omega}^{(n)}\right) + \left(\vec{\omega}^{(n)}, \frac{d^2}{dR^2}\vec{\Psi}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}^* - \hat{V})\vec{\Psi}^{(n)}\right),$$

$$b_1^n = \frac{1}{2}\left[1 + (\vec{\Psi}^{(n)}, \vec{\Psi}^{(n)})\right],\quad b_2^n = \left(\vec{\Psi}^{(n)}, \frac{d^2}{dR^2}\vec{\Psi}^{(n)} + 2M(\mathcal{E}^* - \hat{V})\vec{\Psi}^{(n)}\right),$$

где $\hat{V} = \{V_{\alpha j}(R)\}$, $(\vec{\Psi}, \vec{\Psi}) = \sum_{\alpha j} g_{\alpha j} \int_0^{R_m} \Psi_\alpha(R)\Psi_j(R)\,dR$,

$\hat{\varphi}^{-1} = \{\varphi_{\alpha j}^{-1}\}$, $\hat{\mathcal{D}}_n = \{\mathcal{D}_\alpha^{(\nu)}(t_{\nu\nu}^{(n)}, R)\cdot\delta_{\alpha\alpha'}\}$.

В качестве начального приближения $z_0 = \{\vec{\Psi}^{(0)}, \mathcal{E}, t_{\nu\nu}^{(0)}\}$ удобно взять решение задачи (2.I3)-(2.I4) в отсутствие взаимодействия $\left(V(R,\Omega) \to \frac{J(J+1)}{2MR^2}\right)$ между рассеивателем и частицей

$$\vec{\Psi}^{(0)} = \{\Psi_j^{(0)}(R)\} = \{j_J(k_\nu R)\delta_{\nu j}\},\quad \mathcal{E} = \mathcal{E}^*,\quad t_{\nu\nu}^{(0)} = 0. \tag{A.6}$$

Формулы (A.I)-(A.5) представляют решение системы уравнений (2.I5)-(2.20) с помощью непрерывного аналога метода Ньютона /7,8/ (при $\tau_n = 1$ классический метод Ньютона-Канторовича /8,9/), сходимость которого применительно к решению задач такого типа исследована теоретически /I0/ и численно /II-I3/.

Отметим здесь, что при переходе от уравнения Шредингера (2.I) к системе (2.I3) важно сохранить свойство самосопряженности задачи, т.е., если необходимо, симметризовать матрицу потенциалов $V_{ij}(R)$. Для матриц вида (2.I3) – это стандартно решаемая задача /I4/, которую здесь не рассматриваем.

Литература

I. V.S.Melezhik. J.Comp.Phys., 65 (1986) 1.
2. С.К.Годунов, В.С.Рябенький. Разностные схемы. М.,Наука, I977.
3. Г.И.Марчук, В.В.Шайдуров. Повышение точности решений разностных схем. М., Наука, I979.
4. Thomas L.D., Alexander M.H. et al. J.Comp.Phys., 41 (1981) 407.
5. D.J.Kouri, Y.Sun, R.C.Mowrey, J.Z.H.Zhang, D.G.Truhlar, K.Hang and D.W.Schwenke. Mathematical Frontiers in Computational Chemical Physics. Springer,New York, 1988.
6. Н.Ф.Мотт, Г.Ю.Месси. Теория атомных столкновений. М.,Мир,I969; Д.Р.Тейлор. Теория рассеяния. М., Мир, I976.
7. М.К.Гавурин. Известия вузов. Математика, 5(6),I958,I8.
8. Е.П.Жидков, Г.И.Макаренко, И.В.Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, 4(I), I973,I27.
9. Л.В.Контарович, Г.П.Акилов. Функциональный анализ. М.,Наука, I977.
I0. И.В.Пузынин, Автореферат диссертации. II-I20I6, Дубна, I978.
II. L.I.Ponomarev,I.V.Puzynin and T.P.Puzynina. J.Comp.Phys.13(1973)1.
I2. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina and L.N.Somov. Annals of Phys., 110(1) (1978) 274.
I3. V.S.Melezhik, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina and L.N.Somov. J.Comp.Phys. 54 (1984) 221.
I4. Б.Парлетт. Симметричная проблема собственных значений. М.,Мир, I983.
I5. Дж.Форсайт, М.Малкольм, К.Моулер. Машинные методы математических вычислений. М., Мир, I980.
I6. П.Берк. Потенциальное рассеяние в атомной физике. М., Мир, I980.
I7. D.Cabib, E.Fabrio and G.Fiorio. Nuovo Cimento B10 (1972) 185.
I8. M.S.Koschiev, S.I.Vinitsky and F.R.Vukajlovic'. Phys.Rev., A22 (1980) 557.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 апреля I989 года.