сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-90-381

Т.Жанлав, И.В.Пузынин

О ВЫЧИСЛЕНИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОЗРАЧНОСТИ И ОТРАЖЕНИЯ В ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧЕ РАССЕЯНИЯ

1990

Как отмечено в[I], при решении широкого круга задач математической физики (в квантовой механике, в волновой сейсмике, в волновой оптике и т.д.) часто встречается классическая задача об определении коэффициентов отражения и прохождения для одномерного оператора Шредингера. Эти коэффициенты являются физическими параметрами, описывающими эффект взаимодействия частиц с потенциалом и определяются из решения краевой задачи[I]:

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x,k)+(k^2-V(x))\Psi(x,k)=0\,, \qquad k\in R\,, \tag{I}$$

$$\Psi(x,k)\longrightarrow D(k)\,e^{ikx}\,, \qquad x\to\infty\,, \tag{2}$$

$$\Psi(x,k)\longrightarrow e^{ikx}+T(k)\,e^{-ikx}\,, \qquad x\to-\infty\,, \tag{3}$$

где V – вещественнозначная, кусочно-непрерывная на R функция, достаточно быстро стремящаяся к нулю при $|x|\to\infty$, так что выполняется условие

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

Как правило, коэффициенты $D(k)$ и $T(k)$ могут быть найдены в аналитическом виде лишь для немногих конкретных функций $V(x)$ [2]. Поэтому представляет интерес разработка приближенных методов их нахождения. При стандартном подходе для того, чтобы их найти, обычно аппроксимируют потенциальный барьер прямоугольными потенциалами на каждом из подынтервалов (x_{i-1}, x_i) и сшивают полученные в каждой из областей решения уравнения Шредингера на границах x_i. Такая процедура является весьма трудоемкой для потенциалов сложного вида. В методе фазовых функций [2] строятся функции отражения и прохождения, являющиеся решениями задач Коши для нелинейного дифференциального уравнения первого порядка. А сами коэффициенты определяются как пределы соответствующих функций.

Следует также отметить, что существуют формулы для коэффициентов $D(k)$ и $T(k)$ и в них они выражаются через фундаментальные решения уравнения Шредингера[I,3]. Однако для того, чтобы определить эти фундаментальные решения (или функции Йоста), необходимо решать интегральные уравнения[4] типа Вольтерра, для которых должен сходиться метод итераций. В данной заметке предлагается прямой подход к решению задачи (I)-(3).

Трудность решения краевой задачи (I)-(3) состоит в том, что в краевых условиях (2),(3) присутствуют искомые неизвестные коэффициенты. Однако специфика асимптотик (2),(3) позволяет исключить их из краевых условий. Пусть $D(\kappa) = D_1(\kappa) + i D_2(\kappa)$. Тогда асимптотическое условие (2) принимает вид

$$\Psi_1(x,\kappa) = D_1(\kappa)\cos\kappa x - D_2(\kappa)\sin\kappa x ,$$
$$\Psi_2(x,\kappa) = D_1(\kappa)\sin\kappa x + D_2(\kappa)\cos\kappa x , \quad x\to\infty , \tag{5}$$

где Ψ_1 и Ψ_2 -действительная и мнимая части решения задачи (I)-(3). Из (5) легко получаем

$$\Psi_1'(x,\kappa) + \kappa\Psi_2(x,\kappa) = 0 ,$$
$$\Psi_2'(x,\kappa) - \kappa\Psi_1(x,\kappa) = 0 , \quad x\to\infty. \tag{6}$$

Аналогичным образом выделяя вещественную и мнимую части из асимптотики (3), найдем

$$\Psi_1(x,\kappa) = (1+T_1(\kappa))\cos\kappa x + T_2(\kappa)\sin\kappa x ,$$
$$\Psi_2(x,\kappa) = (1-T_1(\kappa))\sin\kappa x + T_2(\kappa)\cos\kappa x , \quad x\to-\infty , \tag{7}$$

где T_1 и T_2 - вещественная и мнимая части величины T . Из равенства (7) немедленно вытекает

$$\Psi_1'(x,\kappa) - \kappa\Psi_2(x,\kappa) = -2\kappa\sin\kappa x ,$$
$$\Psi_2'(x,\kappa) + \kappa\Psi_1(x,\kappa) = 2\kappa\cos\kappa x , \quad x\to-\infty . \tag{8}$$

Таким образом, мы переходим от задачи (I)-(3) к линейной краевой задаче (I),(6), (8) относительно волновой функции $\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2$. Она может быть с успехом решена одним из стандартных численных методов /5,6/.

Из соотношений (5),(7) однозначно определяются соответственно коэффициенты $D(\kappa)$ и $T(\kappa)$:

$$D_1(\kappa) = \Psi_1(x,\kappa)\cos\kappa x + \Psi_2(x,\kappa)\sin\kappa x ,$$
$$D_2(\kappa) = \Psi_2(x,\kappa)\cos\kappa x - \Psi_1(x,\kappa)\sin\kappa x , \quad x\to+\infty \tag{9}$$

и

$$T_1(\kappa) = \Psi_1(x,\kappa)\cos\kappa x - \Psi_2(x,\kappa)\sin\kappa x - \cos 2\kappa x ,$$
$$T_2(\kappa) = \Psi_1(x,\kappa)\sin\kappa x + \Psi_2(x,\kappa)\cos\kappa x - \sin 2\kappa x , \quad x\to-\infty . \tag{I0}$$

Отсюда найдем

$$D^2(\kappa) = \Psi_1^2(x,\kappa) + \Psi_2^2(x,\kappa) , \quad x\to+\infty , \tag{II}$$
$$T^2(\kappa) = (\Psi_1(x,\kappa) - \cos\kappa x)^2 + (\Psi_2(x,\kappa) - \sin\kappa x)^2, \quad x\to-\infty .$$

Таким образом, искомые коэффициенты определяются через волновую функцию $\Psi(x,\kappa)$ по формуле (II).

Из первого соотношения в (II) видно, что необходимым и достаточным условием малости коэффициента прохождения $D^2(\kappa)$ является условие $|\Psi|\to 0$ при $x\to+\infty$. Также из (II) легко показать, что достаточным (необходимым) условием малости величины $D^2(\kappa)$ ($T^2(\kappa)$) и выполнения соотношения $T^2(\kappa)\to 1$ ($D^2(\kappa)\to 1$) является условие $|\Psi|\to 0$ ($|\Psi|\to 1$) при $|x|\to\infty$. При этом выполняется соотношение

$$D^2(\kappa) + T^2(\kappa) = 1 . \tag{I2}$$

Отметим, что изложенный метод определения коэффициентов отражения и прохождения остается в силе, в случае с комплексным потенциалом $V(x) = U(x) + i W(x)$. В этом случае мы переходим к задаче

$$\Psi_1'' + (\kappa^2 - U(x))\Psi_1 + W\Psi_2 = 0$$
$$\Psi_2'' + (\kappa^2 - U(x))\Psi_2 - W\Psi_1 = 0 \tag{I3}$$

с краевыми условиями (6),(8), которая может быть решена также стандартными численными методами. С целью проверки эффективности алгоритма численно решена задача (I),(6),(8) с потенциалами $V(x) = \pm\exp(-x^2)$ методом сплайн-коллокации на равномерной сетке Δ_N : $-5 = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = 5$ с шагом h = 0,025 (см. таблицу).

κ	$V(x)$	$\exp(-x^2)$	$-\exp(-x^2)$
0,3		0,035999(0,964000)	0,4I7667(0,582333)
I.	$D^2(\kappa)(T^2(\kappa))$	0,680I88(0,3I98II)	0,986873(0,0I3I27)
3.		0,999999(0,000000)	0,999999(0,000000...)

Видно, что почти точно выполняется условие (I2), следующее из закона сохранения числа частиц при вещественном потенциале. При этом численные значения коэффициентов $D^2(k)$ и $T^2(k)$ хорошо согласуются с соответствующими значениями, полученными в методе фазовых функций /2/.

<u>Литература</u>

1. Лубенец Е.Р. ТМФ, 1989, т.79, I, с.79.
2. Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. – М.: Наука, 1988.
3. Тахтаджян Л.А., Фаддеев Л.Д. Гамильтонов подход в теории солитонов. – М.: Наука, 1986.
4. Лэм Дж. Л. Введение в теорию солитонов. – М.: Мир, 1983.
5. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978.
6. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. – М.: Наука, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 июня 1990 года.

Жанлав Т., Пузынин И.В. P11-90-381

О вычислении коэффициентов прозрачности и отражения в одномерной задаче рассеяния

Задача одномерного рассеяния при $k \in R$ сформулирована как линейная краевая задача для волновой функции, которая может быть решена одним из стандартных численных методов. Коэффициенты прозрачности и отражения выражаются через значения волновой функции.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1990

Перевод авторов

Zhanlav T., Puzynin I.V. P11-90-381

On Calculation of Transparency and Reflection Coefficients in One-Dimensional Scattering Problem

The one-dimensional scattering problem is formulated as a boundary value problem for wave function, which can be solved by one of standard numerical methods. The transparency and reflection coefficients are expressed through the value of wave function at infinity.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1990