

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-449

P11-96-449

И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж

О НЕКОТОРЫХ ПРОБЛЕМАХ
ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ЗАДАЧ
НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

1996

В настоящей работе обсуждается ряд вопросов, связанных с численным решением задач на собственные значения в импульсном пространстве. Обычно такие задачи возникают в рамках релятивистских моделей теоретической физики, численное исследование которых существенно сложнее по сравнению с нерелятивистскими моделями.

Например, в нерелятивистской потенциальной модели описание спектра тяжелых кваркониев [1] сводится к уравнению Шредингера, которое может быть выписано как в координатном, так и в импульсном представлении. При этом координатная постановка задачи является гораздо более удобной с точки зрения численного анализа.

С другой стороны, релятивистское обобщение этой модели в рамках КХД [2], необходимое для единообразного описания спектров легких и тяжелых кваркониев, приводит к релятивистским вариантам уравнения Шредингера, которые в основном рассматриваются в импульсном пространстве и не имеют координатного аналога.

В качестве эффективного потенциала межкваркового взаимодействия в релятивистских моделях КХД обычно используются те же потенциалы, что и в нерелятивистском случае. В частности, весьма популярным является сочетание растущего V_I и кулоновского V_C потенциалов:

$$V(r) = V_I(r) + V_C(r). \quad (1)$$

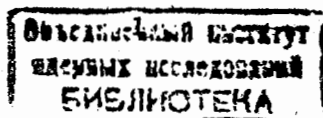
Однако для ряда потенциалов вида (1), интересных с физической точки зрения, получаемые задачи теряют смысл из-за сингулярности в ядрах интегральных уравнений. В основном это связано с поведением потенциала $V(r)$ в нуле и на бесконечности.

В литературе [3] обсуждается ряд способов так называемой "перенормировки", или модификации исходных уравнений, устраняющей расходимость интегралов. При этом нередко способ модификации связан с конкретным видом потенциала.

Другой подход, более корректный с математической точки зрения, предполагает модификацию не уравнения, а исходного потенциала на уровне координатного представления, например, путем его аппроксимации некоторыми функциями с "хорошими" свойствами. Таким образом, исходный потенциал в уравнении заменяется модифицированным

$$V(r) \rightarrow V_M(r), \quad (2)$$

свойства которого можно исследовать на примере нерелятивистского уравнения Шредингера. Численно решая это уравнение в координат-



ном представлении с потенциалами $V(r)$ и $V_M(r)$, мы можем сравнить полученные для n -го состояния ($n = 0, 1, 2, \dots$) собственные значения E_n, E_n^M и собственные функции ϕ_n, ϕ_n^M .

Модифицированный потенциал $V_M(r)$ должен быть подобран таким образом, чтобы указанные спектральные характеристики совпадали с заданной точностью ϵ для заданного конечного числа состояний N , т.е.

$$|E_n - E_n^M| < \epsilon, \quad \|\phi_n - \phi_n^M\| < \epsilon, \quad 0 \leq n \leq N. \quad (3)$$

Норма может определяться, например, как

$$\|\phi_n(r) - \phi_n^M(r)\| = \int_0^\infty (\phi_n(r) - \phi_n^M(r))^2 dr.$$

Отметим, что только при выполнении соотношений (3) Фурье-образ модифицированного потенциала может использоваться в качестве аппроксимации исходного потенциала при решении релятивистских уравнений в импульсном представлении.

Идея замены исходного потенциала некоторым приближением не является новой (см., например, [2,3]). Однако численные исследования точности аппроксимации изложенным выше способом не проводились.

Нужно также отметить, что заданный потенциал $V(r)$ можно модифицировать по-разному, и хотя для каждой из модификаций будут выполнены соотношения (3), в импульсном представлении они будут выражены через разные элементарные функции. При этом некоторые способы модификации могут оказаться более удобными для численного исследования. Поэтому целью данной работы является проведение сравнительного численного анализа точности наиболее часто используемых в литературе способов аппроксимации кулоновского и линейного потенциалов.

В первых двух разделах статьи дается математическая постановка задачи на собственные значения для уравнения Шредингера и обсуждается одно полезное свойство спектра этого уравнения для рассматриваемого класса потенциалов. В третьем и четвертом разделах представлены результаты исследования некоторых модификаций кулоновского и линейного потенциалов. Последний, пятый раздел посвящен численному решению релятивистского уравнения в рамках одной из релятивистских потенциальных моделей [4] с использованием наиболее удачной, на наш взгляд, из представленных в четвертом разделе

модификаций линейного потенциала. Полученные результаты приводятся в сравнении с расчетами других авторов. Кроме того, в этом разделе даны приближенные оценки релятивистской поправки к спектру рассматриваемого уравнения.

Для расчетов использовались разработанные на основе непрерывного аналога метода Ньютона [5] программные пакеты SLIPN4 [6] и SYSINT(SYSINTM) [7]. В указанных работах подробно описаны алгоритмы и вычислительные схемы. Как известно, точность численных результатов зависит от R_M — параметра перехода от полубесконечного интервала интегрирования $[0, \infty)$ к конечному отрезку $[0, R_M]$, а также от h — шага дискретной сетки на этом отрезке. Во всех рассматриваемых ниже случаях точность полученных результатов проверялась численно на последовательности расширяющихся интервалов $[0, R_M]$ и последовательности сгущающихся сеток с тем, чтобы выбранные параметры h и R_M обеспечивали точность, соответствующую теоретическим оценкам дискретной аппроксимации этих задач в используемых программах. Это подтверждает достоверность и точность полученных численных результатов.

1 Общая постановка задачи

Задача на собственные значения для уравнения Шредингера в координатном представлении (в системе единиц $\hbar = c = 1$) имеет следующий вид [8]:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2\mu E_{nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2\mu \hat{V}(r) \right] \phi_{nl}(r) = 0.$$

Здесь μ — приведенная масса (физический параметр модели), E_{nl} — уровни энергии системы, $n = 0, 1, 2, \dots, l = 0, 1, 2, \dots, \hat{V}(r)$ — заданный потенциал. В настоящей работе мы будем использовать кулоновский потенциал

$$\hat{V}_C(r) = \alpha/r \quad (4)$$

и растущие потенциалы вида

$$\hat{V}_I(r) = \sigma_\gamma r^\gamma, \quad \gamma > 0. \quad (5)$$

Введем безразмерные переменные

$$x = r/r_0, \quad M = \mu/\mu_0, \quad (6)$$

где r_0 — единица измерения длины, μ_0 — единица измерения энергии (далее будем полагать $r_0\mu_0 = 1$). Тогда уравнение Шредингера в координатном представлении будет иметь вид:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2M\epsilon_{nl} - \frac{l(l+1)}{x^2} - 2MV(x) \right] \phi_{nl}(x) = 0, \quad (7)$$

где $\epsilon_{nl} = E_{nl}/\mu_0$, $V(x) = \hat{V}(r_0x)/\mu_0$. Граничные условия и условие нормировки определяются как

$$\phi_{nl}(0) = 0, \quad \phi_{nl}(\infty) = 0, \quad \int_0^\infty \phi_{nl}^2(x) dx = 1. \quad (8)$$

Уравнение (7) в импульсном представлении принимает вид:

$$[Q(p) - \epsilon_{nl}] \phi_{nl}(p) + \int_0^\infty dq V_l(p, q) \phi_{nl}(q) = 0, \quad Q(p) = \frac{1}{2M} p^2 \quad (9)$$

с условием нормировки

$$\int_0^\infty \phi_{nl}^2(p) dp = 1. \quad (10)$$

Здесь

$$\phi_{nl}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dx g_l(px) \phi_{nl}(x), \quad \phi_{nl}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dp g_l(px) \phi_{nl}(p), \quad (11)$$

$$V_l(p, q) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx V(x) g_l(px) g_l(qx) = 0, \quad (12)$$

g_l — функции Риккати - Бесселя

$$g_0(\xi) = \sin \xi, \quad g_1(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi} - \cos \xi, \quad g_{l+1}(\xi) = \frac{(2l+1)g_l(\xi)}{\xi} - g_{l-1}(\xi), \quad l > 0.$$

Отметим, что целый ряд релятивистских обобщений уравнения Шредингера отличается от задачи (9) только видом функции $Q(p)$ [9].

2 Об одном свойстве спектра уравнения Шредингера с растущим и кулоновским потенциалами

Уравнение Шредингера для потенциала (5) можно записать в форме:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2M\epsilon_{nl} - \frac{l(l+1)}{x^2} - 2M\hat{\sigma}_\gamma x^\gamma \right] \phi_{nl}(x) = 0,$$

где

$$\hat{\sigma}_\gamma = \frac{\sigma_\gamma r_0^\gamma}{\mu_0}$$

— безразмерная величина. После масштабного преобразования

$$y = bx, \quad b = [2M\hat{\sigma}_\gamma]^{-\frac{1}{\gamma+2}} \quad (13)$$

получаем

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} + \lambda_{nl} - \frac{l(l+1)}{y^2} - y^\gamma \right] \phi_{nl}(y) = 0, \quad (14)$$

где $\lambda_{nl} = 2M\epsilon_{nl}/b^2$.

Замечательным свойством спектра уравнения (7) является тот факт, что отношение

$$\frac{\lambda_{nl}}{\lambda_{0l}} = \frac{\epsilon_{nl}}{\epsilon_{0l}} \quad (15)$$

не зависит от параметров задачи M и $\hat{\sigma}_\gamma$.

Поскольку кулоновский потенциал (4) может быть записан в форме (5) с $\gamma = -1$ и $\sigma_{-1} = \alpha$, сказанное выше относится и к нему.

Это свойство является особенно важным при численном исследовании спектров мезонов, поскольку при сравнении расчетных данных с результатами эксперимента необходимо знать отношения между уровнями энергии в разных состояниях. Для этого при каждом фиксированном значении параметра γ достаточно решить уравнение только один раз.

Динамика изменения собственных значений λ_{nl} задачи (14) в зависимости от γ ($l = 0, 1, 2, n = 0, 1, 2, 3$) представлена в таблице 1.

ТАБЛИЦА 1

l	n	$\gamma = 0,5$	$\gamma = 1$	$\gamma = 1,5$	$\gamma = 2$	$\gamma = 2,5$
0	0	1.833	2.338	2.708	3.000	3.242
	1	2.551	4.088	5.856	7.000	8.313
	2	3.051	5.521	8.227	11.000	13.737
	3	3.229	6.787	10.732	15.000	19.383
1	0	2.300	3.361	4.251	5.000	5.639
	1	2.854	4.884	6.966	9.000	10.938
	2	3.286	6.208	9.521	13.000	16.496
	3	3.646	7.406	11.969	17.000	22.244
2	0	2.658	4.248	5.705	7.000	8.141
	1	3.120	5.630	8.311	11.000	13.609
	2	3.502	6.869	10.796	15.000	19.286
	3	3.833	8.013	13.194	19.000	25.124

Заметим, что для комбинации потенциалов так же, как и для релятивистских обобщений уравнения Шредингера, условие (15) не выполняется. Однако и в этих случаях оно может быть полезно при выборе начального приближения для собственного значения.

3 Модификация кулоновского потенциала

Кулоновский потенциал (4) в импульсном представлении может быть записан в следующей форме:

$$V_C(p, q) = \frac{\alpha}{2\pi} \int_{-1}^{+1} dt \frac{P_l(t)}{y-t}, \quad y = \frac{p^2 + q^2}{2pq}. \quad (16)$$

Здесь P_l — полином Лежандра. Аналитическое выражение для собственных значений уравнения Шредингера при $M = 0,5$ имеет вид [8]:

$$\epsilon_{nl}^* = -\frac{\alpha^2}{(n+l+1)^2}.$$

Численное решение уравнения (9) с потенциалом (16) не представляет принципиальных трудностей, связанных с сингулярностью ядра интеграла. Однако при решении других уравнений в рамках КХД, в частности, уравнения Швингера - Дайсона [3], использование

потенциала (16) приводит к неустранимым расходимостям интегралов [2]. Поэтому здесь мы рассмотрим варианты модификации кулоновского потенциала, обеспечивающие сходимость интегралов в уравнении Швингера - Дайсона. Поскольку правильное асимптотическое поведение энергии кварка в этом уравнении [3] связано с условием

$$\lim_{r \rightarrow 0} V(r) = 0,$$

мы будем строить модифицированные потенциалы с учетом этого требования. Его выполнения легко добиться путем включения в модифицированный потенциал специальным образом выбранной константы C_M . При этом следует принимать во внимание, что в линейных спектральных задачах (таких, например, как уравнение Шредингера), так же как в нелинейном уравнении Швингера - Дайсона, сдвиг потенциала на некоторую константу приводит к сдвигу спектра на ту же самую величину.

Вариант I

$$V_C^M(x) = \alpha \frac{\exp(-\mu_1 x) - 1}{x} + C_M, \quad C_M = \alpha \mu_1. \quad (17)$$

Здесь $\mu_1 \gg 1$ — параметр, значение которого должно подбираться таким образом, чтобы для заданного числа состояний выполнялись условия (3). В импульсном представлении при $l = 0$ имеем:

$$V_C^M(p, q) = \frac{\alpha}{2} \left[\ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_1^2}{(p-q)^2 + \mu_1^2} \right| - 2 \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| \right] + C_M \delta(p-q). \quad (18)$$

Отметим, что использование аналитического выражения вместо формулы (12) в этом и следующих ниже вариантах существенно сокращает время счета.

Динамика изменения собственных значений задач (7) и (9) при изменении параметра μ_1 представлена в таблице 2 ($\alpha = -1, M = 0,5$). Везде $\epsilon_{nl} = \epsilon_{nl} - C_M$.

Здесь и далее параметры вычислительной схемы подбирались так, чтобы обеспечить совпадение результатов численного решения задач (7) и (9) с точностью 10^{-3} . Таким образом, расхождение численных результатов с аналитическим решением связано в этом и следующих вариантах не с погрешностью вычислений, а с выбором аппроксимирующего потенциала.

ТАБЛИЦА 2.

n	μ_1	$\hat{\epsilon}_{n0}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n0}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(9)$
0	5	-0.87529	-0.24962	-0.11111	-0.87603	-0.24997	-0.11111
0	10	-0.95198	-0.24907	-0.11111	-0.95192	-0.24910	-0.11111
1	5	-0.23400	-0.11098	-0.06247	-0.23490	-0.11100	-0.06247
1	10	-0.24813	-0.11111	-0.06249	-0.24809	-0.11111	-0.06247
2	5	-0.10631	-0.06238	-0.03741	-0.10629	-0.06240	-0.03742
2	10	-0.10931	-0.06247	-0.03747	-0.11057	-0.06243	-0.03742

Вариант 2.

$$V_C^M(x) = \alpha \left[\frac{\exp(-\mu_1 x) - \exp(-\mu_2 x)}{x} \right] + C_M, \quad C_M = \alpha(\mu_1 - \mu_2), \quad (19)$$

$\mu_1 \gg 1$ и $\mu_2 \ll 1$ — параметры. Импульсное представление потенциала при $l = 0$ принимает вид:

$$V_C^M(p, q) = \frac{\alpha}{2} \left[\ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_1^2}{(p-q)^2 + \mu_1^2} \right| - \ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_2^2}{(p-q)^2 + \mu_2^2} \right| \right] + C_M \delta(p-q). \quad (20)$$

Результаты расчетов при $\alpha = -1, M = 0,5$ даны в таблице 3.

ТАБЛИЦА 3

n	μ_1	μ_2	$\hat{\epsilon}_{n0}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n0}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(9)$
0	5	.01	-0.85548	-0.23012	-0.09212	-0.85513	-0.23012	-0.09212
0	10	.001	-0.94991	-0.24795	-0.10912	-0.94922	-0.24800	-0.10913
1	5	.01	-0.21462	-0.09218	-0.04436	-0.21463	-0.09213	-0.04432
1	10	.001	-0.24190	-0.10911	-0.06051	-0.24089	-0.10919	-0.06049
2	5	.01	-0.08765	-0.06237	-0.03157	-0.08769	-0.06213	-0.03150
2	10	.001	-0.10730	-0.06050	-0.03538	-0.10733	-0.06050	-0.03532

Вариант 3

$$V_C^M(x) = V_1(x) + C_M(x), \quad (21)$$

$$V_1(x) = - \begin{cases} \alpha/x_1, & 0 \leq x < x_1 \\ \alpha/x, & x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0, & x_2 < x < \infty \end{cases}$$

$$C_M(x) = \alpha/x_1, 0 \leq x \leq \infty,$$

где $x_1 < x_2$ — параметры, которые подбираются так, чтобы для заданного числа состояний обеспечить выполнение условий (3).

В таблице 4 даны результаты для этого вида потенциала при $\alpha = -1, M = 0,5$.

ТАБЛИЦА 4

n	x_1	x_2	$\hat{\epsilon}_{n0}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(7)$	$\hat{\epsilon}_{n0}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n1}(9)$	$\hat{\epsilon}_{n2}(9)$
0	.10	10	-0.98889	-0.25000	-0.11111	-0.98889	-0.25000	-0.11111
0	.01	20	-0.99999	-0.25000	-0.11111	-0.99999	-0.25000	-0.11111
1	.10	10	-0.24865	-0.11111	-0.06248	-0.24862	-0.11110	-0.06247
1	.01	20	-0.25000	-0.11111	-0.06249	-0.25000	-0.11111	-0.06249
2	.10	10	-0.11073	-0.06249	-0.03745	-0.11072	-0.06248	-0.03743
2	.01	20	-0.11111	-0.06250	-0.03749	-0.11110	-0.06250	-0.03748

Приведенные численные результаты демонстрируют зависимость решений от параметров аппроксимирующих потенциалов и позволяют оценить их применимость при решении задач в импульсном представлении с учетом требуемой точности расчетов.

Вариант 4. Рассмотрим еще одну возможность работы с кулоновским потенциалом в импульсном представлении. Потенциал (16) при $l = 0$ может быть записан в виде

$$V_C(p, q) = \frac{\alpha}{2\pi} \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right|. \quad (22)$$

Для устранения особой точки (при $p = q$) можно преобразовать уравнение (9) следующим образом:

$$\left[\frac{1}{2M} p^2 - \epsilon_{n0} \right] \phi_{n0}(x) + \alpha \int_0^{R_M} dq \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| (\phi_{n0}(q) - \phi_{n0}(p)) + \alpha \phi_{n0}(p) I_2(p) = 0, \quad (23)$$

$$I_2(p) = \int_0^{R_M} dq \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| = (R_M + p) \ln(R_M + p) - (R_M - p) \ln(R_M - p) - 2p \ln p. \quad (24)$$

Подробно численное решение уравнения Шредингера в таком подходе рассматривается в работе [10]. Аналогичный прием использовался при решении уравнений Швингера-Дайсона и Бете-Солпитера в работе [11].

4 Модификация растущих потенциалов

Обычно среди растущих потенциалов вида (5) в спектроскопии адронов применяются линейный ($\gamma = 1$) и осцилляторный ($\gamma = 2$) потенциалы.

Отметим, что использование осцилляторного потенциала, в отличие от линейного, не представляет принципиальных трудностей, связанных с постановкой задач в импульсном пространстве. Поэтому в настоящей работе, хотя формулы аппроксимирующих потенциалов приводятся в общем виде, численные результаты даны для случая $\gamma = 1$.

Приведем собственные значения уравнения Шредингера при $\gamma = 1$, $\sigma_1 = 1$, $l = 0$, $M = 0,5$, представленные в [8].

$$\epsilon_{00}^* = 2,338, \epsilon_{10}^* = 4,088, \epsilon_{20}^* = 5,521, \epsilon_{30}^* = 6,787, \epsilon_{40}^* = 7,944, \epsilon_{50}^* = 9,023.$$

Рассмотрим несколько вариантов аппроксимации для потенциала (5).

Вариант 1

$$V_\gamma^M(x) = V_{1\gamma}(x) + V_{2\gamma}(x), \quad (25)$$

$$V_{1\gamma}(x) = \sigma_\gamma \begin{cases} x^\gamma - x_M^\gamma, & 0 \leq x < x_M \\ 0, & x_M \leq x < \infty \end{cases}, \quad (26)$$

$$V_{2\gamma}(x) = \sigma_\gamma x_M^\gamma, \quad 0 \leq x < \infty, \quad (27)$$

где x_M — параметр потенциала.

Отметим, что в частном случае при $\gamma = 1$, $l = 0$ мы имеем в импульсном представлении

$$V^M(p, q) = V_1(p, q) + V_2(p, q), \quad (28)$$

$$V_1(p, q) = \frac{2\sigma_1}{\pi} \left[\frac{\sin^2(0,5(p+q)x_M)}{(p+q)^2} - \frac{\sin^2(0,5(p-q)x_M)}{(p-q)^2} \right], \quad (29)$$

$$V_2(p, q) = \sigma_1 x_M \delta(p-q). \quad (30)$$

В таблице 5 представлены собственные значения, полученные при $\gamma = 1$, $l = 0, 1, 2$, $\sigma_1 = 1$, $M = 0,5$.

Легко видеть, что для каждого набора (n, l) вычисленные собственные значения ϵ_{nl} совпадают с указанными в [8] при условии $x_M > \epsilon_{nl}$. Таким образом, правильность расчетов можно легко контролировать путем вычислений на последовательности увеличивающихся значений

параметра x_M . Отметим, что данный способ аппроксимации исходного потенциала представляется нам наиболее удобным.

ТАБЛИЦА 5

n	x_M	ϵ_{n0} (7)	ϵ_{n1} (7)	ϵ_{n2} (7)	ϵ_{n0} (9)	ϵ_{n1} (9)	ϵ_{n2} (9)
0	3.	2.31865	3.12290	3.84161	2.31862	3.12285	3.84160
0	5.	2.33808	3.36075	4.24345	2.33804	3.36072	4.24343
0	7.	2.33811	3.36125	4.24818	2.33808	3.36121	4.24815
0	10.	2.33811	3.36125	4.24818	2.33810	3.36124	4.24817
1	3.	3.15919	4.62245	3.77400	3.15913	4.62213	3.77489
1	5.	4.08088	4.82777	5.30294	4.08085	4.82776	5.30290
1	7.	4.08794	4.88435	5.62885	4.08790	4.88431	5.62883
1	10.	4.08795	4.88445	5.62971	4.08793	4.88442	5.62968
2	3.	4.81313	3.88672	4.35192	4.81309	3.88670	4.35190
2	5.	5.17286	5.37217	6.56140	5.17283	5.37215	6.56132
2	7.	5.51954	6.20067	6.83369	5.51950	6.20066	6.83366
2	10.	5.52056	6.20763	6.86896	5.52052	6.20763	6.86893
3	3.	4.23014	4.65850	5.15077	4.23009	4.65845	5.15075
3	5.	5.62870	6.06615	6.50373	5.62865	6.06613	6.50371
3	7.	6.74819	7.25408	7.64995	6.74817	7.25407	7.64994
3	10.	6.78679	8.01273	8.01276	6.78675	7.40562	8.01269

Вариант 2

$$V_\gamma^M(x) = \sigma_\gamma \left[\left(\frac{2}{\mu_1^2} \right) \frac{\exp(-\mu_1 x) - 1 + \mu_1 x}{x} \right]^\gamma. \quad (31)$$

Здесь $\mu_1 \ll 1$ — параметр.

При $\gamma = 1$, $l = 0$ импульсное представление рассматриваемого потенциала принимает вид

$$V^M(p, q) = V_1(p, q) + V_2(p, q), \quad (32)$$

$$V_1(p, q) = \frac{\sigma_1}{\mu_1^2} \left[\ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_1^2}{(p-q)^2 + \mu_1^2} \right| - 2 \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| \right], \quad (33)$$

$$V_2(p, q) = \sigma_1 \frac{2}{\mu_1} \delta(p-q). \quad (34)$$

Результаты расчетов при $\gamma = 1$, $\sigma_1 = 1$, $M = 0,5$ представлены в таблице 6.

ТАБЛИЦА 6

n	μ_1	$\epsilon_{n0}(7)$	$\epsilon_{n1}(7)$	$\epsilon_{n2}(7)$	$\epsilon_{n0}(9)$	$\epsilon_{n1}(9)$	$\epsilon_{n2}(9)$
0	0.050	2.28978	3.26822	4.10422	2.28975	3.26820	4.10413
0	0.001	2.33713	3.35938	4.24528	2.33708	3.35935	4.24525
1	0.050	3.94074	4.67991	5.36406	3.94070	4.67987	5.36402
1	0.001	4.08498	3.35938	5.62434	4.08494	3.35933	5.62431
2	0.050	5.25293	5.87421	6.46686	5.25291	5.87413	6.46683
2	0.001	5.51514	4.88032	6.86073	5.51509	4.88030	6.86067
3	0.050	6.38338	6.93001	7.45939	6.38335	6.93007	7.45934
3	0.001	6.77852	6.20086	7.99851	6.77845	6.20082	7.99848

Вариант 3

$$V_\gamma^M(x) = \sigma_\gamma \left[\frac{2}{\mu_1^2 - \mu_2^2} \frac{\exp(-\mu_1 x) - \exp(-\mu_2 x) + (\mu_1 - \mu_2)x}{x} \right]^\gamma, \quad (35)$$

$\mu_1 \ll 1$ и $\mu_2 \gg 1$ — параметры.

При $\gamma = 1, l = 0$ имеем следующее импульсное представление:

$$V^M(p, q) = V_1(p, q) + V_2(p, q), \quad (36)$$

$$V_1(p, q) = \frac{\sigma_1}{\mu_1^2 - \mu_2^2} \left[\ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_1^2}{(p-q)^2 + \mu_1^2} \right| - \ln \left| \frac{(p+q)^2 + \mu_2^2}{(p-q)^2 + \mu_2^2} \right| \right] \quad (37)$$

$$V_2(p, q) = \frac{2\sigma_1}{\mu_1 + \mu_2} \delta(p - q). \quad (38)$$

Результаты расчетов даны в таблице 7 ($\gamma = 1, \sigma_1 = 1, M = 0,5$).

ТАБЛИЦА 7

n	μ_1	μ_2	$\epsilon_{n0}(7)$	$\epsilon_{n1}(7)$	$\epsilon_{n2}(7)$	$\epsilon_{n0}(9)$	$\epsilon_{n1}(9)$	$\epsilon_{n2}(9)$
0	0.050	5	2.28887	3.26685	4.10253	2.28886	3.26682	4.10250
0	0.001	10	2.33696	3.33931	4.24216	2.33694	3.33928	4.24213
1	0.050	5	3.93885	4.66230	5.36327	3.93880	4.66227	5.36323
1	0.001	10	4.08339	3.31894	5.62378	4.08335	3.31890	5.62375
2	0.050	5	5.25137	5.86448	6.46584	5.25133	5.86445	6.46580
2	0.001	10	5.51381	4.86996	6.85990	5.51378	4.86991	6.85987
3	0.050	5	6.38244	6.92142	7.45671	6.38241	6.92137	7.45668
3	0.001	10	6.77680	6.18772	7.99355	6.77678	6.18768	7.99350

Второй и третий варианты, хотя и обсуждаются в литературе довольно часто [3,4], представляются нам менее удачными по сравнению с первым с точки зрения точности численных результатов.

Вариант 4 Рассмотрим еще один прием решения уравнений типа Шредингера с линейным потенциалом. Пользуясь тождеством

$$\frac{1}{|\bar{p} - \bar{q}|^4} = \frac{1}{6} \Delta_p \frac{1}{|\bar{p} - \bar{q}|^2}, \quad (39)$$

мы можем выразить линейный потенциал через кулоновский, для представления которого, в свою очередь, используется формула (22). Такой прием использовался нами при решении уравнений Швингера - Дайсона и Бете - Солпитера в работе [11]. Для задачи (9) в этом случае по аналогии с вариантом 4 предыдущего раздела мы получаем следующее уравнение ($l = 0$):

$$\left[\frac{1}{2Mp^2} - \epsilon_{n0} \right] \phi_{n0}(p) - \frac{\sigma_1}{\pi} [I_1'' + \phi_{n0}''(p)I_2 + \phi_{n0}'(p)I_2' + \phi_{n0}(p)I_2''] = 0, \quad (40)$$

где

$$I_1(p) = \int_0^{R_M} dq \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| (\phi_{n0}(q) - \phi_{n0}(p)),$$

$I_2(p)$ определяется по формуле (24).

Таким образом, мы получили задачу на собственные значения для нелинейного интегродифференциального уравнения. Для численного решения этой задачи использовался модифицированный пакет на основе программы SLIP1 [12]. Результаты представлены в таблице 8 ($R_M = 20, \sigma_1 = 1, M = 0,5$).

Указанное в таблице значение ρ , полученное по формуле

$$\rho = \frac{\epsilon_h - \epsilon_{h/2}}{\epsilon_{h/2} - \epsilon_{h/4}},$$

соответствует $O(h^2)$ — теоретическому порядку сходимости вычислительной схемы, реализованной в программе SLIP1.

ТАБЛИЦА 8

h	ϵ_{00}	ϵ_{10}	ϵ_{20}
0.004	2.33465	4.08698	5.50375
0.002	2.33710	4.08743	5.51731
0.001	2.33769	4.08754	5.52068
ρ	4.1	4.0	4.0

5 Численное решение одного релятивистского уравнения

Рассмотрим следующее релятивистское уравнение [4]:

$$[2\sqrt{p^2 + m^2} - (2m + E_{nl})]\phi_{nl}(p) = - \int_0^{\infty} dq V_l(p, q)\phi_{nl}(q). \quad (41)$$

Здесь $m = 2M$ — параметр модели, V_l — линейный потенциал, для представления которого используется форма (25-27). Заметим, что уравнение (41) сводится к виду (9), если вместо $Q(p)$ использовать

$$\hat{Q}(p) = 2(\sqrt{p^2 + m^2} - m).$$

В таблице 9 представлены значения $E_{n0}^{NR} = \epsilon_{n0}$ и E_{n0}^R ($n = 0, 1$) при различных значениях параметра m для релятивистской задачи (41) и для нерелятивистского уравнения Шредингера. В последнем случае расчеты проводились как в координатном, так и в импульсном представлении. При этом для координатной формы уравнения Шредингера использовался немодифицированный линейный потенциал. Параметры вычислительной схемы подбирались таким образом, чтобы обеспечить совпадение собственных значений, получаемых при решении задач (7) и (9), до третьего знака после запятой.

ТАБЛИЦА 9

m	E_{00}^{NR}	E_{00}^R	E_{10}^{NR}	E_{10}^R
0.01	10.888	3.134	18.983	4.687
0.10	5.037	2.971	8.807	4.522
0.50	2.946	2.513	5.150	3.986
1.00	2.338	2.143	4.088	3.554
2.00	1.856	1.782	3.245	3.033
3.00	1.621	1.580	3.828	2.718
5.00	1.367	1.350	2.391	2.337

Из таблицы видно, что с увеличением m значение E уменьшается, причем решения релятивистского и нерелятивистского уравнений становятся близкими. Отметим, что для $n = 1$ сближение собственных значений с ростом m происходит медленнее, чем для $n = 0$.

Нетрудно получить связь между решениями $\{E_{nl}^{NR}, \phi_{nl}^{NR}\}$ нерелятивистского уравнения (9) и решениями $\{E_{nl}^R, \phi_{nl}^R\}$ релятивистского уравнения (41).

$$E_{nl}^{NR} - E_{nl}^R = \frac{\int_0^{R_M} dp v_R(p) \phi_{nl}^{NR}(p) \phi_{nl}^R(p)}{\int_0^{R_M} dp \phi_{nl}^{NR}(p) \phi_{nl}^R(p)}, \quad (42)$$

где

$$v_R(p) = \frac{p^2}{m} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{1 + p^2/m^2 + 1}} \right], \quad v_R(p) \geq 0, \quad 0 \leq p \leq R_M.$$

Применяя теорему о среднем, при $n = 0$ соотношение (42) можно переписать в виде:

$$E_{0l}^{NR} - E_{0l}^R = v_R(\xi), \quad (43)$$

где $0 < \xi < R_M$. Отметим, что

$$\min_{[0, R_M]} v_R = v_R(0) = 0, \quad \max_{[0, R_M]} v_R = v_R(R_M).$$

Аналогично, при $n = 0$ можно получить связь собственных значений уравнения (41) для двух значений параметра m : m_1 и m_2 .

$$E_{0l}^R(m_1) - E_{0l}^R(m_2) = w_R(\xi), \quad (44)$$

где

$$w(\xi) = 2(m_1 - m_2) \left[1 - \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{\xi^2 + m_1^2} + \sqrt{\xi^2 + m_2^2}} \right].$$

Так как при больших значениях параметра m $E_{0l}^{NR}(m) \sim E_{0l}^R(m)$, равенство (44) можно переписать в виде:

$$E_{0l}^R(m_1) \sim E_{0l}^{NR}(m_2) + w_R(\xi). \quad (45)$$

При $n > 0$ равенства (43), (44) выполняются приближенно.

Соотношения (43), (44) полезны для контроля численных расчетов, а также для приближенной оценки релятивистских эффектов без решения уравнения (41).

Аналогичные оценки релятивистской поправки к спектру можно получить и для других релятивистских вариантов уравнения Шредингера.

В таблицах 10а-в представлены рассчитанные нами отношения E_{nl}/E_{0l} при $n = 1, 2, 3$ и $l = 0, 1, 2$. Для сравнения даны расчеты из работы [13]. Полученные нами результаты подтверждают сближение решений релятивистского и нерелятивистского уравнений с ростом параметра m . Кроме того, из таблиц видно, что в нерелятивистском случае в силу свойства (15) отношение E_{nl}/E_{0l} не зависит от значения m .

ТАБЛИЦА 10а. $l = 0$

M (МэВ)	n	$E_{nl}/E_{0l}(NR)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$ [13]
300	1	1.75	1.69	1.63
	2	2.36	2.22	2.11
	3	2.90	2.68	2.51
500	1	1.75	1.71	1.67
	2	2.36	2.28	2.18
	3	2.90	2.76	2.62
1500	1	1.75	1.74	1.72
	2	2.36	2.34	2.30
	3	2.90	2.87	2.80

ТАБЛИЦА 10б. $l = 1$

M (МэВ)	n	$E_{nl}/E_{0l}(NR)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$ [13]
300	1	1.45	1.40	1.43
	2	1.85	1.74	1.80
	3	2.20	2.04	2.13
500	1	1.45	1.42	1.39
	2	1.85	1.82	1.71
	3	2.20	2.14	2.00
1500	1	1.45	1.44	1.36
	2	1.85	1.83	1.67
	3	2.20	2.17	1.93

ТАБЛИЦА 10в. $l = 2$

M (МэВ)	n	$E_{nl}/E_{0l}(NR)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$	$E_{nl}/E_{0l}(R)$ [13]
300	1	1.33	1.28	1.31
	2	1.62	1.53	1.58
	3	1.89	1.75	1.82
500	1	1.33	1.30	1.27
	2	1.62	1.56	1.51
	3	1.89	1.80	1.72
1500	1	1.33	1.32	1.25
	2	1.62	1.60	1.47
	3	1.89	1.86	1.67

Заключение

В работе представлен способ численного исследования влияния аппроксимации потенциалов на точность решения задач в импульсном представлении. Проведенный численный анализ зависимости решения уравнения Шредингера от вида аппроксимирующего потенциала позволяет судить о применимости той или иной модификации с учетом требующейся точности расчетов.

В классе рассматриваемых потенциалов показана независимость отношений между собственными значениями от параметров уравнения Шредингера.

Эффективность одной из предложенных модификаций демонстрируется на примере решения конкретного релятивистского уравнения. Полученные для указанного уравнения приближенные оценки релятивистской поправки к спектру позволяют, не решая уравнение, определить влияние релятивистских эффектов на изменение спектра уравнения в зависимости от параметра модели.

Авторы искренне признательны, благодарны проф. Жидкову Е.П. за постоянное внимание к работе и полезные замечания, а также Мачавариани А.А. за предоставленные материалы для тестирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 94-01-01119).

Литература

1. А.А.Быков, И.М.Дремин, А.В.Леонидов, УФН Т.143, с.3, 1984; Chikade Habe (Yoshida) et al., Prog. Th. Phys. 77, p.917, 1987.
2. A.Le Yaouanc, L.Oliver, P.Pene and J.C.Raynal, Phys. Rev. D29, p.1233, 1984; Phys. Rev. D31, p.137, 1985; Ю.Л.Калиновский, В.Каллис, Б.Н.Куранов, В.Н.Первушин, Н.А.Сариков, ЯФ Т.49, с.1709-1717, 1989; Yu.L.Kalinovsky, W.Kallies, L.Kaschluhn, L.Münchow, V.N.Pervushin and N.A.Sarikov, Fortschr. Phys. 38, p.333, 1990; Few Body Systems 10, p.87, 1991.
3. S.L.Adler and A.C.Davis, Nucl. Phys. B244, p.469, 1984; A.Kočić, Phys. Rev. D33, p.1785, 1986; R.Alkofer and P.A.Amundsen, Nucl. Phys. B306, p.305, 1988; D.W.МсКау, Н.Ј.Мунчек and Bing-Lin Young, Phys. Rev. D37, p.195, 1988; A.Trzupek, Acta Physica Polonica B20, 2, p.93, 1989; И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, В.Н.Первушин, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Н.А.Сариков, Т.А.Стриж, Математическое Моделирование Т.6, Вып.7, с.55, 1994.
4. R.H.Thompson, Phys.Rev. D1, p.110, 1970.
5. Т.Жанлав, И.В.Пузынин, ЖВМиМФ Т.32, Вып.16, с.846, 1992.
6. И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж, Сообщение ОИЯИ P11-87-332, Дубна, 1987.
7. Е.В.Земляная, Сообщение ОИЯИ P11-94-120, Дубна, 1994.
8. Г.Бете, Е.Е.Солпитер. Квантовая механика одного и двух электронов. Физматгиз, М, 1960; А.С.Давыдов. Квантовая механика. Наука, М, 1973.
9. F.Gross, Phys.Rev. B6, p.125, 1968; F.Gross and J.Milane, Phys.Rev. D43, p.2401, 1991; F.Gross and J.Milane, Phys.Rev. D45, p.969, 1992; V.G.Kadyshevsky, Nucl.Phys. B6, p.125, 1968; J.W.Norbury, D.E.Kahana and K.N.Maung, Can J.Phys. 70, p.866, 1992.
10. Puzynin I.V., Amirkhanov I.V., Puzynina T.P., Zemlyanaya E.V, JINR Rapid Comm. 5[62]-93, p.63, 1993.
11. И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Т.А.Стриж, Математическое Моделирование Т.7, Вып.7, с.34, 1995.
12. И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, В сб: Алгоритмы и программы для решения некоторых задач физики. КФКИ-74-34, с.97, Будапешт, 1974.
13. K.N.Maung, D.E.Kahana and J.W.Norbury, Phys.Rev. D47, 3, p.1183, 1993.

Рукопись поступила в издательский отдел

4 декабря 1996 года.