ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 3741

И.В.Амирханов, В.С.Гурьянов

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ПРИБЛИЖЕННОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1968

Р4 - 3741

И.В.Амирханов, В.С.Гурьянов

ПРИБЛИЖЕННОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Введение

Уравнение Шредингера имеет аналитическое решение для небольшого числа простых потенциалов. В общем случае уравнение приходится решать численно. Волновая функция получается в виде громоздких таблиц, которыми неудобно пользоваться в многочисленных приложениях.

Здесь мы рассмотрим возможность получения приближенных волновых функций в аналитическом виде. Если некоторая функция $F(r)$ удовлетворяет условию:

$$\int |F(r)|^2 \, dr < \infty , \tag{1}$$

то эту функцию можно разложить в ряд Фурье:

$$F(r) = \sum_n A_n \Phi_n(r) , \tag{2}$$

где

$$A_n = \int F(r) \Phi_n(r) dr . \tag{3}$$

Ряд Фурье любой квадратично суммируемой функции сходится в среднем /1/. Этот ряд оказывается быстро сходящимся, если $F(r)$ и ее первые производные непрерывны.

В разделе 2 настоящей работы с использованием такого разложения получено решение в приближенно аналитическом виде для задачи рассеяния.

В разделе 3 показана возможность получения приближенно аналитических решений для системы дифференциальных уравнений.

В настоящее время в теории рассеяния трех и более частиц широко используется метод многоканальной связи. В этом формализме от уравнений в частных производных (уравнение Шредингера) переходят к системе связанных одномерных интегро-дифференциальных уравнений/2/.

В разделе 4 данной работы предложен один способ решения системы интегро-дифференциальных уравнений. Сущность этого метода состоит в том, что из системы уравнений выделяются члены, которые удовлетворяют условию (1). Далее выделенные члены разлагаем в ряд Фурье (2). Это приводит к тому, что система интегро-дифференциальных уравнений заменяется неоднородной системой дифференциальных уравнений и системой алгебраических уравнений. С вычислительной точки зрения полученные уравнения очень удобны. Этот подход оказался полезным для доказательства сходимости метода редукции. Для этого достаточно исследовать только бесконечную систему алгебраических уравнений. Подобные алгебраические уравнения хорошо изучены в функциональном анализе/3/.

1. Рассеяние

Движение двух частиц в системе их центра инерции после исключения угловых переменных описывается следующим уравнением Шредингера:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \phi_\ell(r) = V(r)\,\phi_\ell(r). \tag{4}$$

Рассмотрим случай $\ell = 0$ (случай $\ell \neq 0$ рассмотрен в приложении 1)

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) \phi_0(r) = V(r)\,\phi_0(r). \tag{5}$$

С помощью двух линейно-независимых решений $\sin kr$, e^{ikr} однородного уравнения мы можем написать решение (5) в интегральной форме[4]

$$\phi_0(r) = C_1 \sin kr + C_2 e^{ikr} - \frac{1}{k}\{ e^{ikr} \int \sin kr' -$$

$$- \sin kr \int e^{ikr'} \} V(r')\phi_0(r')dr' . \tag{6}$$

Константы C_1 и C_2 определяются из граничных условий:

$$\phi_0 \underset{r\to 0}{\to} 0$$

$$\phi_0 \underset{r\to\infty}{\to} \sin kr + \eta e^{ikr} ,$$

где

$$\eta = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \sin kr\, V(r)\, \phi_0(r)\, dr$$

амплитуда рассеяния.

Решение, удовлетворяющее этим граничным условиям, имеет следующий вид:

$$\phi_0(r) = \sin kr - \frac{1}{k}\{ e^{ikr} \int_0^r \sin kr' +$$

$$+ \sin kr \int_{r'}^\infty e^{ikr'} \} V(r')\, \phi_0(r')dr' . \tag{7}$$

Если потенциал взаимодействия $V(r)$ отличен от нуля в конечной области пространства или достаточно быстро убывает на бесконечности, то для функции $V(r)\phi_0(r)$ выполняется условие (1). Поэтому функцию $V(r)\phi_0(r)$ мы можем разложить в ряд Фурье (2)

$$V(r)\, \phi_0(r) = \sum_n B_n \Phi_n(r) . \tag{8}$$

где

$$B_n = \int V(r)\,\phi_0(r)\,\Phi_n(r)\,dr. \tag{9}$$

Подставляя разложение (8) в уравнение (7), получим:

$$\phi_0(r) = \sin kr - \frac{1}{k}\sum_n B_n \Big\{ e^{ikr}\int_0^r \sin kr' + \sin kr \int_r^\infty e^{ikr'} \Big\}\, \Phi_n(r')\,dr' = \sin kr + \sum_n B_n \chi_n\,, \tag{10}$$

где

$$\chi_n = -\frac{1}{k}\Big\{ e^{ikr}\int_0^r \sin kr' + \sin kr \int_r^\infty e^{ikr'} \Big\}\, \Phi_n(r')\,dr'. \tag{11}$$

В качестве полного набора функций $\{\Phi_n(r)\}$ мы должны брать такие функции, чтобы существовали неопределенные интегралы $\int_0^r \sin kr' \Phi_n(r')\,dr'$ и $\int_r^\infty e^{ikr'}\, \Phi_n(r')\,dr'$.

Коэффициенты B_n мы можем найти двумя способами:

1-ый способ. Решим уравнение (5) численно, полученные численные функции ϕ_0 подставим в равенство (9) и найдем B_n.

2-ой способ. Подставим решение (10) в равенство (9), получим бесконечную систему алгебраических уравнений в виде:

$$B_n + \sum_{n'} W_{nn'}\, B_{n'} = C_n \qquad n = 1,2,\ldots, \tag{12}$$

где

$$W_{nn'} = \int V(r)\,\chi_{n'}(r)\,\Phi_n(r)\,dr, \qquad C_n = \int V(r)\sin kr\,\Phi_n(r)\,dr. \tag{13}$$

Обычно бесконечную систему заменяют конечной системой и решают конечную систему. Такая замена корректна, если выполняются условия/3/

$$\sum_{nn'} |W_{nn'}|^2 < \infty$$

и

$$\sum_n |C_n|^2 < \infty\,. \tag{14}$$

При определенных ограничениях на потенциал взаимодействия, в приложении II показано, что условия (14) выполняются.

3. Система дифференциальных уравнений

Пусть имеем следующую систему уравнений

$$\Big[\frac{d^2}{dk^2} + k_n^2\Big]\chi_n(R) = \sum_{n'=1}^{a} W_{nn'}\chi_{n'}(R) \qquad n = 1,2,\ldots a. \tag{15}$$

Здесь $W_{nn'}(R)$ отличен от нуля в конечной области или затухает экспоненциально при больших R Поэтому функция $Q_n(R) = \sum_{n=1}^{a} W_{nn'}\chi_{n'}$ удовлетворяет условию (1), и справедливо следующее разложение

$$Q_n(R) = \sum_m B_m^n \Phi_m(R)\,, \tag{16}$$

где

$$B_m^n = \int Q_n(R)\Phi_m(R)dR . \qquad (17)$$

Используя это разложение, как и в предыдущем разделе мы получим приближенно аналитическое решение для системы уравнений (15).

4. Решение системы интегро-дифференциальных уравнений

Здесь мы не будем заниматься получением системы интегро-дифференциальных уравнений для описания конкретных процессов рассеяния /2/. Поэтому систему напишем в символическом виде, не конкретизируя, какой физической задаче соответствуют эти уравнения. Для простоты рассмотрим систему двух уравнений - обобщение на большее число уравнений тривиально. Пусть имеем следующую систему интегро-дифференциальных уравнений:

$$\left[\frac{d^2}{dR_1^2}+k_n^2\right]\chi_n(R_1)+\sum_{n'=1}^{\alpha} W_{nn'}\chi_{n'}(R_1)=\sum_{m=1}^{\beta}\int V_n(R_1R_2)g_m(R_2)dR_2 \qquad n=1,2,\dots\alpha$$

$$\left[\frac{d^2}{dR_2^2}+k_m^2\right]g_m(R_2)+\sum_{m'=1}^{\beta} W_{mm'}g_{m'}(R_2)=\sum_{n=1}^{\alpha}\int V_m(R_1R_2)\chi_n(R_2)dR_1 . \qquad m=1,2,\dots\beta \qquad (18)$$

Предположим, что функции

$$Q_n(R_1)=\sum_{m=1}^{\beta}\int V_n(R_1R_2)g_m(R_2)dR_2$$

и

$$Q_m(R_2)=\sum_{n=1}^{\alpha}\int V_m(R_1R_2)\chi_n(R_1)dR_1 \qquad (19)$$

удовлетворяют условию (1). Следует заметить, что в конкретных физических задачах это условие выполняется почти всегда. Поэтому их можно разложить в ряд Фурье (2):

$$Q_n(R_1)=\sum_i A_i^n\Phi_i(R_1),$$

$$Q_m(R_2)=\sum_j B_j^m\phi_j(R_2). \qquad (20)$$

Используя эти разложения, мы приходим к двум отдельным (незацепленным) системам неоднородных дифференциальных уравнений

$$\left[\frac{d^2}{dR_1^2}+k_n^2\right]\chi_n(R_1)+\sum_{n'} W_{nn'}\chi_{n'}=\sum_i A_i^n\Phi_i(R_1)$$

$$\left[\frac{d^2}{dR_2^2}+k_m^2\right]g_m(R_2)+\sum_{m'} W_{mm'}g_{m'}=\sum_j B_j^m\phi_j(R_2) \qquad (21)$$

и системе зацепленных алгебраических уравнений

$$A_i^n=\sum_j K_j^{ni}B_j^m+a_n^{i0} \qquad n=1,2,\dots\alpha,\quad i=1,2,\dots$$

$$B_j^m=\sum_i K_i^{mj}A_i^n+b_m^{j0} \qquad m=1,2,\dots\beta,\quad j=1,2,\dots \qquad (22)$$

где

$$K_j^{ni}=\sum_m\int V_n(R_1R_2)g_j^m\Phi_i(R_1)dR_1dR_2$$

$$a_n^{i0}=\sum_m\int V_n(R_1R_2)g_0^m\Phi_i(R_1)dR_1dR_2$$

$$K_{1}^{mj} = \sum_{n} \int V_{m}(R_1 R_2)\chi_{1}^{n}\,\phi_j(R_2)\,dR_1 dR_2$$

$$b_{m}^{j0} = \sum_{n} \int V_{m}(R_1 R_2)\chi_{0}^{n}\,\phi_j(R_2)\,dR_1 dR_2\,. \tag{23}$$

В заключение авторы благодарят Б.Н.Захарьева, О.Лхагву, Ю.И.Фенина, Т.Ефименко, М.А.Касимжанова за полезные дискуссии, связанные с темой данной работы.

Приложение 1.

В случае $\ell \neq 0$ приближенно аналитическое решение можно получить двумя способами:

1 способ: Перепишем уравнение (4) в виде

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right)\phi_{\ell}(r) = \left(V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\phi_{\ell}(r). \tag{П.1}$$

В этом случае вместо разложения (8) мы имеем разложение

$$\left(V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\phi_{\ell}(r) = \sum_{n} B_{n}^{\ell}\,\Phi_{n}(r). \tag{П.2}$$

2 способ: Уравнение (4) перепишем в интегральной форме/4/

$$\phi_{\ell}(r) = f_{\ell}(kr) + \eta_{\ell} h_{\ell}(kr) + K(kr), \tag{П.3}$$

где

$$\eta_{\ell} = -\frac{1}{k}\int_{0}^{\infty} f_{\ell}(rk)\,V(r)\,\phi_{\ell}(r)\,dr$$

амплитуда рассеяния и

$$K(kr) = \frac{1}{k}\left\{ f_{\ell}(kr)\int_{\infty}^{r} h_{\ell}(kr') - h_{\ell}(kr)\int_{\infty}^{r} f_{\ell}(kr') \right\} V(r')\,\phi_{\ell}(r')\,dr' \tag{П.4}$$

$$f_{\ell} = kr\,j_{\ell}(kr) = \left(\frac{1}{2}\pi kr\right)^{\frac{1}{2}} I_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)$$

$$h_{\ell} = ikr\,h_{\ell}^{(1)}\,.$$

Функция $K(kr)$ отлична от нуля в конечной области и удовлетворяет условию (1), поэтому справедливо разложение

$$K(kr) = \sum_{n} B_{n}\Phi_{n}(r). \tag{П.5}$$

Приложение II

Если потенциал отличен от нуля в конечной области (см.рис. 1), то в качестве полного набора могут служить следующие функции

$$\Phi_{n} = \sqrt{\frac{2}{b}}\,\sin\frac{n\pi}{b}r\,. \tag{П.6}$$

Тогда уравнения (10) и (13) имеют следующий вид:

$$\phi_{0}(r) = \sin kr + \frac{1}{k}\sqrt{\frac{2}{b}}\sum_{n} B_{n}\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 - k^2}\left[\frac{n\pi}{b}\cos n\pi\, e^{ikb}\sin kr - \right. \tag{П.7}$$

$$\left. - \sin\frac{n\pi}{b}r\right]$$

$$W_{nn'} = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{2}{b}}\,\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 - k^2}\left[\frac{n\pi}{b}\cos n\pi\, e^{ikb}\int \sin kr\, V \sin\frac{n\pi}{b} r\, dr -\right.$$

$$\left. - \int \sin\frac{n\pi}{b} r\, V \sin\frac{n\pi}{b} r\, dr\,\right] \qquad (\text{П.8})$$

$$B_{n'} = \int \sin kr\, V \sin\frac{n'\pi}{b} r\, dr\,.$$

Из формулы (П.8) видно, что $W_{nn'}$ убывает с ростом n, как $\approx \frac{1}{n}$. Если предположим, что потенциал взаимодействия $V(r)$ - дифференцируемая функция, то интегрируя по частям (Π_8), легко получить фактор убывания $W_{nn'}$ с ростом n', как $\approx \frac{1}{n'}$. Этого достаточно, чтобы выполнялись условия (14).

Л и т е р а т у р а

1. *С.Г.Михлин. Лекции по линейным интегральным уравнениям. Физматгиз, 1959 год.*
2. *H.Feshbach, Ann. of Phys., 5, 357 (1958).*
   Hahn, Phys. Rev., 142, No. 3, 613 (1966).
   И.Амирханов, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. Препринт ОИЯИ Р4-2983, Дубна, 1966 г. Г.Ф.Друкарев. Теория столкновений электронов с атомами. Физматгиз, 1963 г.
3. *Л.В.Канторович, Г.П.Акимов. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, 1959 год.*
4. *J.Sasakawa , Supplement of the Prog. of Theor. Phys., No. 27, (1963).*

Рукопись поступила в издательский отдел
27 февраля 1968 года.

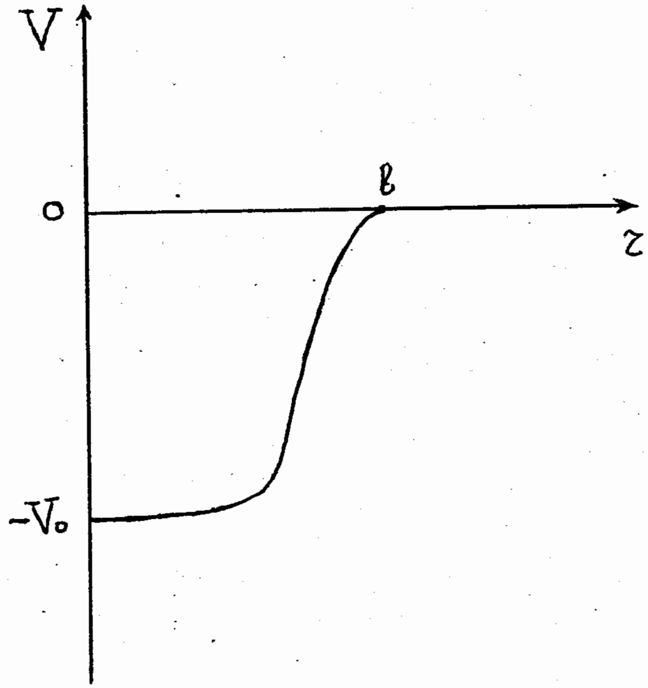

Рис.1.