

УДК 530.145.61+621.384.6

НЕКОТОРЫЕ КУСОЧНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Ю. К. Хохлов

Для получения приближенных решений уравнения $\psi''(x) + Q(x)\psi(x) = 0$ вводятся модельные уравнения $y''(x, \alpha) + q(x, \alpha)y(x, \alpha) = 0$, в которых $\alpha = \{a_1, a_2, \dots\}$ – совокупность параметров. Модельные уравнения конструируются таким образом, что их точные решения выражаются, в основном, через элементарные функции. В работе указан принцип построения таких решений и приведены примеры. Численные значения параметров α определяются на каждом участке оси x из условия близости модельной функции $q(x, \alpha)$ к заданной функции $Q(x)$. Модельные решения $y(x, \alpha)$ могут рассматриваться и как самостоятельные специальные функции, представляющие интерес для задач квантовой и классической механики.

1. В работе рассматривается уравнение

$$\psi''(x) + Q(x)\psi(x) = 0, \quad (1)$$

в котором $Q(x) = E - V(x)$; E и $V(x)$ соответственно – энергия и потенциал, приведенные к размерности $[x^{-2}]$.

Ось x разбивается на несколько участков (практически – на два, три участка), на каждом из которых уравнению (1) сопоставляется модельное уравнение

$$y''(x, \alpha) + q(x, \alpha)y(x, \alpha) = 0, \quad (2)$$

в котором $\alpha = \{a_1, a_2, \dots\}$ – совокупность параметров.

При прямом прочтении уравнения (2) функция $q(x, \alpha)$ считается заданной, а функция $y(x, \alpha)$ – искомой. Возможно и обратное прочтение, называемое здесь *обратным подходом* (ОП). В ОП задается (придумывается) функция $y(x, \alpha)$, выраженная в основном через элементарные функции. После этого функция $q(x, \alpha)$, согласно (2), находится путем дифференцирования. Если коэффициент $q(x, \alpha)$ в (2) получен именно таким способом, то исходная функция $y(x, \alpha)$ по определению является точным решением уравнения (2).

При прямом подходе численные значения параметров определились бы из требования близости $y(x, \alpha)$ к точному решению $\psi(x)$, найденному численно. В противоположность этому, в настоящей работе требуется близость модельного коэффициента $q(x, \alpha)$ к заданному коэффициенту $Q(x)$ уравнения (1).

Формулируя задачу таким образом, мы подразумеваем, что уравнения типа (1, 2) с близкими коэффициентами $q(x, \alpha)$ и $Q(x)$ имеют соответственно близкие решения.

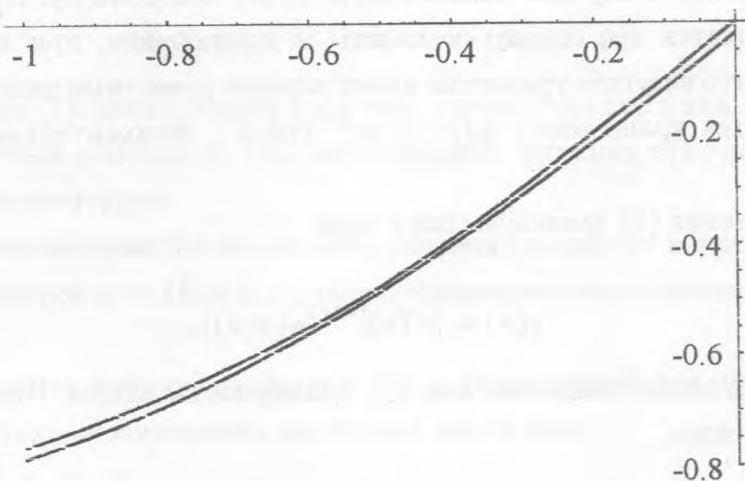


Рис. 1. Верхняя кривая – функция $q(x)$, вычисленная по формулам (19) и (4) при значениях $sa^2 = 0.652160$, $a_1 = 1.326978$, $a_2 = -1.092378$, $a_3 = -1/3$, $a_4 = 0.331744$, $a_5 = -0.187195$. Нижняя кривая – функция $Q(x) = th(x) - 0.02$. Сдвиг на 0.02 введен для удобства различения кривых.

Возможность оценить точность результата путем непосредственного сравнения $q(x, \alpha)$ с $Q(x)$ является несомненным достоинством ОП. Примером такого сравнения является рис. 1, относящийся к наиболее неблагоприятному (с точки зрения метода ВКБ) случаю, когда $Q(x)$ обращается в нуль в одной из точек оси x .

Отдельные примеры использования функций типа $y(x, \alpha)$ фигурируют в некоторых работах, в частности в работе [1], имеющей обширный список литературы. Наша версия ОП изложена в работах [2, 3], выполненных независимо. Настоящая публикация является непосредственным продолжением работы [3]. Аргумент α в дальнейшем часто опускаем.

2. Для определенности будем предполагать, что на рассматриваемом отрезке оси x может находиться точка x_T (классическая точка поворота), такая, что $q(x) < 0$ при $x < x_T$ и $q(x) > 0$ при $x > x_T$.

Уравнению (2) сопоставляется несущее уравнение

$$u''(x) + q_0(x)u(x) = 0,$$

имеющее в большинстве случаев аналогичную точку поворота x_S . Преимущественным значением x_S является x_T , однако возможны и исключения, при которых $x_S < x_T$. Предполагается, что несущее уравнение имеет хорошо известные решения. В настоящей работе используется уравнение с $q_0(x) = sa^2$, где a – положительная константа; $s = \text{sign}(x - x_S)$.

Решение уравнения (2) записывается в виде

$$y(x) = [\sigma'(x)]^{-1/2}u(\sigma(x)), \quad (3)$$

где $\sigma(x)$ – новая функция, имеющая как и x , размерность длины. Подстановка (3) в (2) приводит к уравнению

$$2\sigma''' \sigma' - 3\sigma''^2 - 4q(x)\sigma'^2 + 4sa^2\sigma'^4 = 0. \quad (3')$$

ОП состоит теперь в том, что мы вводим еще одну функцию, $\beta(x) = 1/\sigma'(x)$, как некоторое пробное выражение, содержащее несколько свободных параметров $\{a_1, a_2, \dots\}$. Согласно (3'), функция $\beta(x)$ должна удовлетворять уравнению

$$2\beta\beta'' - \beta'^2 + 4q(x)\beta^2 = 4sa^2. \quad (4)$$

Последовательное дифференцирование (4) приводит к уравнениям:

$$\beta''' / 2 + 2q(x)\beta' + q'(x)\beta = 0, \quad (5)$$

$$\beta''''/2 + 2q(x)\beta'' + 3q'(x)\beta' + q''(x)\beta = 0 \quad (6)$$

и т.д. Весьма существенно, что уравнения (5, 6, ...) линейны.

Функция $\beta(x)$ играет главную роль в предлагаемой схеме реализации ОП.

Приведем несложный пример получения указанной функции. Пусть $\beta(x) = c + bg(z)$, где $z = 2kx$; k, c, b – параметры, и пусть $g(z)$ удовлетворяет уравнению

$$g''(z) = \varepsilon g(z), \quad (7)$$

где $\varepsilon = \pm 1$. В этом случае уравнения (4, 5), с учетом (7), принимают вид:

$$(q(x) + \varepsilon k^2)\beta^2(x) = sa^2 + \varepsilon k^2 c^2 + k^2 b^2 [g'^2(z) - \varepsilon g^2(z)],$$

$$4kbg'(z)(q(x) + \varepsilon k^2) + q'(z)\beta(x) = 0. \quad (8)$$

Вторично используя (7), легко убедиться в том, что выражение в квадратных скобках в (8) представляет собой константу. Соответствующая функция $\sigma(x)$ дается интегралом, вычисляющимся элементарно.

Если на $q(x)$ накладываются какие-либо условия (подобные встречающимся ниже), то значения параметров $\alpha = \{k, a, b, c\}$, обеспечивающие выполнение этих условий, находят из (8).

Интересно сравнить первую из формул (8) с аналогичной формулой стандартного метода ВКБ. В наших обозначениях последняя имеет вид:

$$\beta_{\text{ВКБ}}(x) = \frac{a}{\sqrt{sq(x)}}.$$

Если $q(x)$ обращается в нуль в точке x_T , то данная формула теряет смысл по мере приближения x к x_T . Формула (8) не имеет подобного недостатка ввиду того, что $q(x)$ присутствует в ней только в сумме $q(x) + \varepsilon k^2$ (в этом случае следует полагать $\varepsilon = s$).

Заменим в (4) $q(x)$ на $Q(x)$, сохранив за $\beta(x)$ прежнее обозначение (но не прежнюю величину). Умножив новое уравнение на s и разрешая его относительно β (как это было сделано в [3]), будем иметь

$$\beta(x) = \frac{4a^2 + s\beta'^2}{\sqrt{4sQ(x)(4a^2 + s\beta'^2) + \beta''^2 + s\beta''}}. \quad (9)$$

Формула (9) обобщает аналогичную формулу из [3] на случай $s = -1$.

Если вдали от точки поворота x_T функция $Q(x)$ изменяется достаточно плавно, функции $\beta'(x)$ и $\beta''(x)$ играют в (9) существенную роль только вблизи x_T . Хорошим при приближении для этих функций являются производные полученной ниже функции (20), которую мы здесь обозначим как $\beta_0(x)$. После замены $\{\beta'(x), \beta''(x)\} \rightarrow \{\beta'_0(x), \beta''_0(x)\}$ формула (9) приобретает итерационный смысл: функции $\{\beta'_0(x), \beta''_0(x)\}$ являются нулевым приближением, функция $\beta(x)$ – первым.

3. При больших положительных $q(x)$ функция $y(x)$ быстро осциллирует. Возможность такого поведения предусмотрена самим видом выражения (2). Предполагается, что $\sigma(x)$ и $\beta(x)$ – не осциллируют. Иными словами, мы выражаем одну, возможно осциллирующую, функцию через две, заведомо не осциллирующие. Нетрудно понять, что сделать это единообразно на всей бесконечной оси x обычно невозможно. В связи с этим мы рассмотрим сначала задачу на некотором ограниченном отрезке $[x_1, x_2]$.

Введем обозначение $h = x_2 - x_1$ и положим $x_1 = 0$.

Число учитываемых уравнений (4, 5, ...) непосредственно связано с числом параметров, которое, в свою очередь, определяется числом условий, накладываемых на $q(x)$.

Пусть $\beta(x)$ представляет собой кубический полином:

$$\beta(x) = 1 + bx + cx^2 + dx^3. \quad (10)$$

Подставив (10) в (4, 5), получим:

$$4q(x)\beta^2(x) = 4sa^2 + b^2 - 4c - dx(12 + 6bx + 4cx^2 + 3dx^3), \quad (11)$$

$$q'(x)\beta(x) = -2q(x)(b + 2cx + 3dx^2) - 3d.$$

Чтобы использовать $q(x)$ в качестве приближенного решения уравнения

$$y''(x) + Q(x)y(x) = 0, \quad (12)$$

можно приравнять вектор $\{q(x), q'(x)\}$ вектору $\{Q(x), Q'(x)\}$ в точках x_1 и x_2 . Это приводит к системе четырех уравнений

$$\{q(x_i), q'(x_i)\} = \{Q_i, Q'_i\}, \quad (13)$$

в которых $i = 1, 2$; $Q_i = Q(x_i)$; $Q'_i = Q'(x_i)$. Подставляя в (13) выражения (11), получим систему:

$$4Q_1 = 4sa^2 + b^2 - 4c, \quad (14)$$

$$Q'_1 = -(2Q_1b + 3d), \quad (15)$$

$$4Q_2\beta^2(h) = 4Q_1 - dh(12 + 6bh + 4ch^2 + 3dh^3), \quad (16)$$

$$Q'_2\beta(h) = -2Q_2(b + 2ch + 3dh^2) - 3d. \quad (17)$$

Линейные по b, c, d уравнения (15, 17) позволяют выразить c и d через b :

$$c = (Q'_1T - Q'_2 + (2Q_1T - 2Q_2 - Q'_2h)b)/(4Q_2 + Q'_2h)h,$$

$$d = -\frac{1}{3}(Q'_1 + 2Q_1b); \quad T = 1 + 2Q_2h^2 + \frac{1}{3}Q'_2h^3. \quad (18)$$

Подстановка этих выражений в (16) создает алгебраическое уравнение для b . Решая это уравнение численно и подставляя полученный результат в (14, 18), мы определим все параметры $\{a, b, c, d\}$.

Аналогичным образом можно реализовать схему ОП и в случае

$$\beta(x) = 1 + a_1x + \dots + a_5x^5. \quad (19)$$

Для этого необходимо включить в рассмотрение уравнение (6). Мы опустим возникающие в этом случае довольно громоздкие формулы, ограничившись сравнением вычисленной функции $q(x)$ с заданной $Q(x) = \text{th}(x)$ (рис. 1). Согласие между функциями представляется вполне удовлетворительным.

4. В этом разделе приводится решение, описывающее состояние квантовой частицы, взаимодействующей с потенциальным уступом. Пусть

$$\beta(x) = 1 + b \exp(2kx) + c \exp(4kx). \quad (20)$$

Соответствующая фаза дается формулой

$$a\sigma(x) = a \left(x - \frac{1}{4k} \ln(\beta(x)) + \frac{b}{2kD} \left[\begin{array}{c} -\operatorname{arctg} \\ \operatorname{arth} \end{array} \right] \left((b + 2ce^{2kx})/D \right) \right),$$

в которой верхняя функция относится к случаю $4c - b^2 \geq 0$; $D = |4c - b^2|^{1/2}$; k, a, b, c – задаваемые параметры.

Подстановка (20) в (4, 5) дает:

$$(k^2 + q(x))\beta^2(x) = sa^2 + k^2(1 - ce_4(6 + 4be_2 + 3ce_4)), \quad (21)$$

$$q'(x)\beta(x) = -4k((k^2 + q(x))be_2 + (8k^2 + 2q(x))ce_4), \quad (22)$$

где $s = 3 - 2i$; $e_2 = \exp(2kx)$; $e_4 = \exp(4kx)$.

Пусть точка поворота находится в центре оси x : $x_T = 0$. Будем различать подбарьерную область ($x \leq 0$, $i = 1$) и надбарьерную ($x > 0$, $i = 2$). В каждой области предполагается свой набор параметров.

Рассмотрим сначала подбарьерную область. При заданном положительном k и $s = -1$ параметры $\{a, b, c\}$ определяются условиями

$$q(-\infty) = -a^2, \quad \{q(0), q'(0)\} = \{0, Q'\}, \quad (23)$$

где $Q' = Q'(0)$. Учитывая (21, 22), получим отсюда систему:

$$2b + b^2 + 8c + 6bc + 4c^2 = -a^2/k^2, \quad (24)$$

$$Q'(1 + b + c) = -4k^2(b + 8c). \quad (25)$$

Уравнение (25) определяет c как линейную функцию b :

$$c = -(Q' + (4k^3 + Q')b)/(32k^3 + Q'). \quad (26)$$

Подстановка этого выражения в (24) создает элементарно решаемое квадратное уравнение для b . Возвращаясь в (26) с найденным выражением для b , получаем выражение для c . С целью экономии места мы не приводим здесь соответствующих формул.

В надбарьерной области расчет ведется по аналогичной схеме, с той только разницей, что параметр k задается отрицательным и первое из условий (23) заменяется на $q(\infty) = a^2$, т.е. полагается $s = 1$.

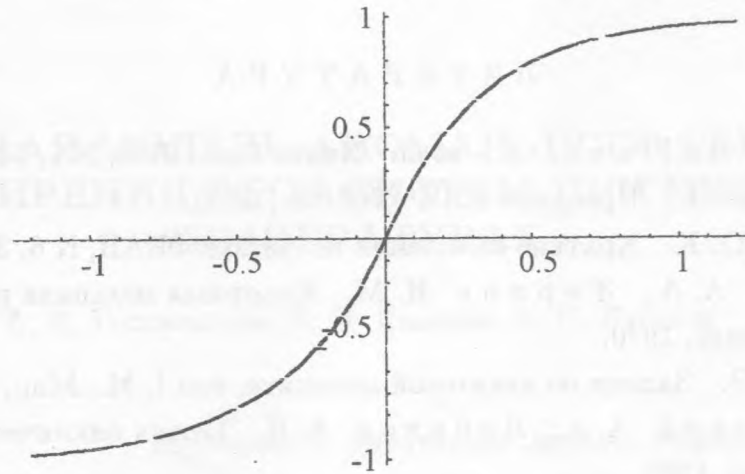


Рис. 2. Функция $q(x)$, вычисленная по формулам (21), (22) для переходной функции $f(x)$ при значениях параметров $s = -1, k = +1, a = 1, b = 3.23079, c = -0.73187; s = +1, k = -1, a = 1, b = 0.054916, c = +0.101555$.

Обратимся к радиальному уравнению

$$y''(r) + (q_N(r) - L(L + 1)/r^2)y(r) = 0, \quad (27)$$

в котором $r \in (0, \infty)$; $q_N(r)$ – регулярная функция; L – угловой момент частицы. Отсутствие полюса r^{-2} делает невозможным применение изложенной выше схемы ОП в окрестности точки $r = 0$. Однако полюс можно устранить путем замены независимой переменной $r = \exp(\kappa\xi)/\kappa$ и функции $y(r) = \exp(\kappa\xi/2)w(\xi)$ [4]. Уравнение приобретает вид, допускающим применение ОП:

$$w''(\xi) + (q_N(r) \exp(2\kappa\xi) - \nu^2 \kappa^2)w(\xi) = 0.$$

Здесь κ – константа; $\nu = L + 1/2$; $\xi \in (-\infty, \xi_T)$.

Другая возможность имеет место в случае, когда в окрестности полюса $q_N(r) = A \pm Br^2$, где A, B – константы. Именно такое выражение характерно для ядерной оптической модели. На этом участке решением уравнения (27) является функция Куммера (см., например [5], стр. 175).

5. Заметим в заключение, что, упомянув в аннотации задачи классической механики, мы имели в виду прежде всего теорию транспортировки и ускорения пучков заряженных частиц (см., например [6]). Оттуда, собственно, и пришло обозначение $\beta(x)$.

Автор благодарен В.Е. Пафому за существенную помощь.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Boffa V., Bollanti S., et al. Nuovo Cim., **99B**, N 1, 53 (1987).
- [2] Хохлов Ю.К. Препринт ИЯИ - 768/92 (1992).
- [3] Хохлов Ю.К. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 6, 38 (2002).
- [4] Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика, М., Просвещение, 1970.
- [5] Флюгге Э. Задачи по квантовой механике, том I, М., Мир, 1974.
- [6] Коломенский А.А., Лебедев А.Н. Теория циклических ускорителей, М., Физматгиз, 1962.

Институт ядерных исследований РАН

Поступила в редакцию 12 июля 2005 г.