

УДК 530.145.61+621.384.6

НЕКОТОРЫЕ КУСОЧНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА II

Ю. К. Хохлов

Описано дальнейшее развитие метода ОП (обратный подход), цель которого – построение более сложных, аналитически интегрируемых одномерных уравнений шредингеровского типа на основе более простых. В рассмотрение включены центробежный и кулоновский потенциалы. Изложение ведется на примере задачи о рассеянии частицы на ядерном оптическом потенциале. Зависимость построенного потенциала от энергии и углового момента оказывается пренебрежимо малой.

Настоящая работа является продолжением работ [1, 2], посвященных разработке некоторого метода решения одномерных уравнений Шредингера. Этот метод, названный обратным подходом (ОП), формулируется здесь следующим образом.

Введем в рассмотрение уравнения

$$u''(\sigma) + K(\sigma)u(\sigma) = 0, \quad (1)$$

$$\tilde{w}''(r) + \tilde{M}(r)\tilde{w}(r) = 0, \quad (2)$$

связанные между собой преобразованием Грина–Лиувилля (ГЛ):

$$\sigma = \tilde{\sigma}(r), \quad \tilde{w}(r) = (\tilde{\sigma}'(r))^{-1/2}u(\tilde{\sigma}(r)). \quad (3)$$

Это преобразование переводит уравнение (1) в уравнение (2), сохраняя тип уравнения (отсутствие первой производной) и его интегрируемость, о которой см. далее. Преобразование определяется одной (здесь – вещественной) функцией $\tilde{\sigma}(r) \equiv \tilde{\sigma}(r; a, b, \dots)$, которая постулируется (угадывается) в соответствии со смыслом той или иной задачи; $\{a, b, \dots\}$ – параметры.

Преобразование ГЛ чаще применяется к сложному уравнению, для приведения его к более простой форме. В методе ОП преобразование ГЛ применяется в противоположном направлении – от более простого уравнения (1) к более сложному (2). Мы как бы выражаем уравнение (2) из (1).

Данная схема, как правило, не может быть реализована единообразно на всей оси независимой переменной r . В связи с этим ось r разбивается на 2-3 участка, на каждом из которых задача решается независимо. Соответственно, на каждом участке вводится местная обезразмеривающая постоянная ω , принимающая значения p, k и т.д., и местная же безразмерная координата z . При этом уравнение (1) сохраняет свой вид, в то время как (2), (3) заменяются на

$$w''(z) + M(z)w(z) = 0, \quad (2')$$

$$\sigma = \sigma(z), \quad w(z) = (\sigma'(z))^{-1/2}u(\sigma(z)). \quad (3')$$

Здесь $M(z) = \tilde{M}(r)/\omega^2$; $\sigma(z) = \tilde{\sigma}(r)$.

Учитывая сказанное и подставляя (3') в (2') с учетом (1), получаем в пределах участка

$$M(z)\alpha^2 = K(\sigma)\alpha^4 + \frac{1}{4}(2\alpha''\alpha - 3\alpha'^2), \quad (4)$$

$$M'(z)\alpha^3 = \frac{\partial}{\partial\sigma}K(\sigma)\alpha^6 + 2M\alpha^2\alpha' + \frac{1}{2}(\alpha'''\alpha^2 - 6\alpha''\alpha'\alpha + 6\alpha'^3). \quad (5)$$

Здесь $\alpha = \sigma'(z)$; $\alpha' = \sigma''(z)$ и т.д. Функция $K(\sigma)$ исключена из (5) с помощью (4).

Продолжая дифференцирование, мы получили бы выражения для $M''(z)$, $M'''(z)$ и т.д. Однако для целей настоящей работы уравнения (4), (5) достаточны.

При заданной $M(z)$ формулу (4) можно рассматривать как дифференциальное уравнение для $\sigma(z)$; при заданной $\sigma(z)$ – как определение функции $M(z)$. Метод ОП использует вторую из этих возможностей. На полученную таким путем функцию $M(z; a, b, \dots)$ далее накладываются определенные условия (подробнее см. далее), число которых равно числу свободных параметров, которое, в свою очередь, равно числу привлеченных уравнений. В настоящей работе привлечены два уравнения, (4) и (5), следовательно речь идет о двух параметрах $\{a, b\}$.

В предыдущих работах [1, 2] использовалась лишь $K(\sigma) = \text{const}$. В настоящей работе $K(\sigma)$ реально зависит от σ , притом содержит кулоновский и центробежный потенциалы.

Изложенная схема применяется ниже к задаче о нерелятивистской ядерной частице с угловым моментом l , рассеивающейся на сумме ядерного и кулоновского потенциалов

$\tilde{V}(r) = \tilde{V}_N(r) + \tilde{V}_C(r)$. Подразумевается, что все величины, имевшие первоначально размерность энергии, здесь умножены на $2m^*/\hbar^2$, в результате чего их размерность теперь есть $[r^{-2}]$; m^* – приведенная масса частицы.

Пусть $r_2 = R$ – эффективный радиус ядерного потенциала; r_1 – вспомогательный радиус, меньший r_2 ; $(0, r_2)$ и (r_2, ∞) – упомянутые выше участки. Назовем эти участки левым (L) и правым (R). В случаях необходимости местные величины снабжаются индексом L и R . Внутри участка индекс может опускаться.

Теперь кулоновский потенциал можно записать в виде

$$\tilde{V}_C(r) = \frac{m^* e_1 e_2}{\hbar^2 r_2^3} \begin{cases} 3r_2^2 - r^2 & \text{на участке } L, \\ 2r_2^3/r & \text{на участке } R, \end{cases}$$

где e_1, e_2 – электрические заряды. В дальнейшем потребуются безразмерные константы $\eta = m^* c_1 c_2 / \hbar^2 k$ и $\lambda^2 = -m^* e_1 e_2 / r_2^3 p^4$. Здесь $k = \sqrt{E}$; E – энергия налетающей частицы; $p = 1/(r_2 - r_1)$.

Пусть на участке L коэффициент уравнения (1) задается в виде

$$K(\sigma) = \kappa^2 - \lambda^2 \sigma^2 - \frac{\Lambda}{\sigma^2}, \tag{6}$$

где $\kappa^2 = (E - \tilde{V}_N(0) - 3\eta k/r_2)p^{-2}$; $\Lambda = l(l+1)$; $l = 0, 1, 2, \dots$

Уравнение (1) с коэффициентом (6) имеет регулярное решение

$$u(\sigma) = \sigma^{l+1} \exp\left(-\frac{\lambda\sigma^2}{2}\right) {}_1F_1\left(\frac{1}{2}(\nu+1-\mu), \nu+1; \lambda\sigma^2\right), \tag{7}$$

в котором $\nu = l+1/2$; $\mu = \kappa^2/2\lambda$ (см. [3], задача 65). Отметим, что в случае отталкивания величина λ мнима: $\lambda^2 = -|\lambda^2|$, но $u(\sigma)$ в целом вещественна.

На вспомогательном участке $(0, r_1)$ ядерный потенциал однороден, следовательно, можно положить $M(z) = K(z)$, где $z = pr$ – местная координата, пробегающая значения от 0 до $X = pr_1$. Решение уравнения (2') в этом случае совпадает с (7).

На участке (r_1, r_2) местная координата определяется как $z = pr - X$, т.е. пробегает значения от 0 до 1. Функция $\tilde{\sigma}(r)$ должна плавно продолжить функцию $\tilde{\sigma}$ с предыдущего участка. Полагаем

$$\begin{aligned} \sigma(z) &= X + z + a\varphi_1(z) + b\varphi_2(z), \\ \varphi_1(z) &= (462z^5 - 165z^9 + 56z^{11})/2310, \\ \varphi_2(z) &= (66z^7 - 55z^9 + 14z^{11})/462. \end{aligned} \tag{8}$$

Выражения для $\alpha(z)$ и $\alpha'(z)$ мы опускаем, поскольку они получаются из (8) элементарным дифференцированием. Численные коэффициенты в (8) определены так, что функции $\sigma'''(z)$ и $\sigma''''(z)$ обращаются в нуль в точке $z = 1$. (На левом краю участка (r_1, r_2) аналогичные величины обращаются в нуль по построению.)

Подстановка выражения (8) в (4) дает функцию $M(z)$. Функция $M'(z)$ в настоящей работе не требуется, поскольку достаточно иметь ее значение в точке $z_2 = 1$, где

$$\begin{aligned}\sigma &= X + 1 + (353a + 125b)/2310, \\ \alpha &= 1 + (131a + 55b)/210, \\ \alpha' &= 16(2a + b)/21.\end{aligned}\tag{9}$$

Система (4), (5) в точке $z = z_2 = 1$ имеет вид:

$$\begin{aligned}M_L \alpha^2 &= -\frac{3}{4} \alpha'^2 + \left(\kappa^2 + \lambda^2 \sigma^2 - \frac{\Lambda}{\sigma^2} \right) \alpha^4, \\ M'_L \alpha^3 &= 2M_L \alpha^2 \alpha' + 3\alpha'^3 + 2 \left(\lambda^2 \sigma + \frac{\Lambda}{\sigma^3} \right) \alpha^6.\end{aligned}\tag{10}$$

Сказанное ранее позволяет написать

$$\begin{aligned}\tilde{M}(r) &\equiv M(z)p^2 = -\tilde{V}_N(r) + E - \tilde{V}_C(r) - \Lambda/r^2, \\ \tilde{M}'(r) &\equiv M'(z)p^3 = -\tilde{V}'_N(r) - \tilde{V}'_C(r) + 2\Lambda/r^3.\end{aligned}\tag{11}$$

Здесь $z = pr - X$; аргументы a, b функции M по-прежнему опущены. В точке r_2 будем иметь

$$\begin{aligned}M_L p^2 &= -\tilde{V}_N + E - \tilde{V}_C - \Lambda/r_2^2, \\ M'_L p^3 &= -\tilde{V}'_N - \tilde{V}'_C + 2\Lambda/r_2^3.\end{aligned}\tag{12}$$

Подчеркнем, что последние два равенства – не уравнения, а элементарное пояснение роли величин \tilde{V}_N и \tilde{V}'_N .

Заданными можно теперь считать не параметры a, b , но значения ядерного потенциала и его производной в точке r_2 , т.е. величины \tilde{V}_N и \tilde{V}'_N . Вычисленные по (12) значения M_L и M'_L подставляются в систему (10), после чего параметры a, b находятся численно как решения этой системы. Уместны упрощенные обозначения

$$V = \tilde{V}_N(r_2), \quad V' = \tilde{V}'_N(r_2).\tag{13}$$

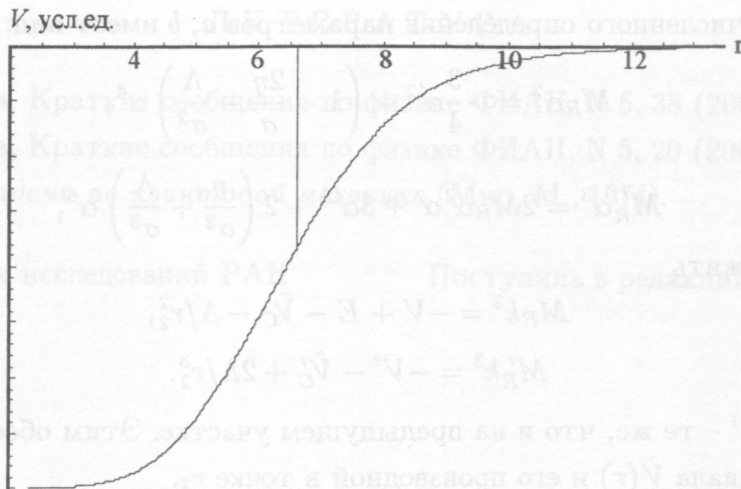


Рис. 1. Пример, относящийся к случаю взаимодействия нейтрона с ядром $A \approx 166$. Заданные величины: $E = 20$ МэВ, $U_0 = 40$ МэВ, $l = \eta = 0$, $r_1 = 2.31$ ферми, $R = 6.6$ ферми, $a_L = -0.35$, $b_L = 0.08$. Вычисленные величины: $V(R) = -19.199716$ МэВ, $V'(R) = 11.165642$, $a_R = -0.712469$, $b_R = -0.896139$.

В конце данного этапа вычислений найденные (или заданные) численные значения параметров a, b запоминаются как a_L, b_L .

На участке (r_2, ∞) местная координата определяется как $z = kr - Y$, где $Y = kr_2$; $k = \sqrt{E}$; тогда $z_2 = 0$. Коэффициент затравочного уравнения (1) выбирается в виде

$$K(\sigma) = 1 - \frac{2\eta}{\sigma} - \frac{\Lambda}{\sigma^2},$$

где η и Λ см. выше. При таком $K(\sigma)$ фундаментальными решениями уравнения (1) являются кулоновские волновые функции $F_l(\eta, \sigma)$ и $G_l(\eta, \sigma)$.

Полагаем

$$\sigma(z) = Y + z + a \left(e^{bz} - \frac{1}{4} e^{2bz} + \frac{1}{27} e^{3bz} \right). \quad (14)$$

Здесь a и b отрицательны; значения коэффициентов при экспонентах вытекают из уже знакомого требования $\sigma'''(0) = \sigma''''(0) = 0$. Имеем также:

$$\sigma(0) = Y + \gamma_0 a, \quad \sigma'(0) = \alpha(0) = 1 + \gamma_1 ab,$$

$$\sigma''(0) = \alpha'(0) = 1 + \gamma_2 ab^2,$$

$$\gamma_0 = \frac{85}{108}, \quad \gamma_1 = \frac{11}{18}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{3}, \quad \gamma_3 = \frac{\gamma_0 \gamma_2}{\gamma_1^2} = \frac{85}{121}.$$

Система для численного определения параметров a, b имеет вид:

$$\begin{aligned} M_R \alpha^2 &= -\frac{3}{4} \alpha'^2 + \left(1 - \frac{2\eta}{\sigma} - \frac{\Lambda}{\sigma^2}\right) \alpha^4, \\ M'_R \alpha^3 &= 2M_R \alpha^2 \alpha' + 3\alpha'^3 + 2\left(\frac{\eta}{\sigma^2} + \frac{\Lambda}{\sigma^3}\right) \alpha^6, \end{aligned} \quad (15)$$

где следует положить

$$\begin{aligned} M_R k^2 &= -V + E - \tilde{V}_C - \Lambda/r_2^2, \\ M'_R k^3 &= -V' - \tilde{V}'_C + 2\Lambda/r_2^3. \end{aligned}$$

Параметры V, V' – те же, что и на предыдущем участке. Этим обеспечивается непрерывность потенциала $\tilde{V}(r)$ и его производной в точке r_2 .

Таким образом, на оси r возникает решение:

$$\begin{aligned} \tilde{w}(r, *, *) &= (\alpha_L(z))^{-1/2} \times \\ &\times \begin{cases} u(\sigma_L(z)), & \text{при } r_1 < r < r_2 \\ C_1 F_l(\eta, \sigma_R(z)) + C_2 G_l(\eta, \sigma_R(z)); z = kr - Y, & \text{при } r < r_2 < \infty. \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

Постоянные C_1 и C_2 определяются из условий сшивания функций в точке r_2 . Значение звездочек объясняется далее.

Запоминание: $a_R = a, b_R = b$.

Подводя итог, перечислим задаваемые величины: $E, l, U_0 \equiv -\tilde{V}_N(0), \eta, R \equiv r_2$. Величина r_1 подбирается вручную, поэтому, с точки зрения компьютера, она также является задаваемой. Кроме того, в расчетах фигурируют параметры

$$\{a_L, b_L\}, \{V, V'\}, \{a_R, b_R\}.$$

Любая пара параметров из этого списка может быть выбрана в качестве задаваемой. Так, если задается пара $\{V, V'\}$, то две оставшиеся пары определяются с помощью систем алгебраических уравнений (10) и (15). Заданная пара параметров занимает места звездочек в формуле (16).

Уместен вопрос: можно ли истолковывать функцию $\tilde{V}_N(r)$ как потенциал, несмотря на то, что ее выражение содержит такие неуместные для потенциала величины, как E и l ? Мы предполагаем, и численные результаты подтверждают это предположение, что влияние указанных величин на $\tilde{V}_N(r)$ мало.

Автор выражает глубокую благодарность В.Е. Пафому за неизменное внимание к работе и существенную помощь.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ю. К. Хохлов, Краткие сообщения по физике ФИАН, N 6, 38 (2002).
- [2] Ю. К. Хохлов, Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5, 20 (2006).
- [3] З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике* (Мир, М., 1974).

Институт ядерных исследований РАН

Поступила в редакцию 26 июня 2008 г.