JINR - P11 - 2000-154

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

LIBRARY

P11-2000-154

И.В.Амирханов, Е.П.Жидков, С.В.Коннова

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИНГУЛЯРНО-ВОЗМУЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА 4-ГО ПОРЯДКА

Fermilab Library
0 1160 0089116 2

2000

Введение

Рассмотрим релятивистское уравнение квазипотенциального типа для волновой функции двухчастичной системы [1]-[3]. В частности, одномерное уравнение Шредингера для радиальной волновой функции, описывающей относительное движение двух скалярных частиц с импульсом q, моментом l и равными массами m, имеет вид

$$\left[2c\sqrt{q^2+m^2c^2}-H_0-V(r)\right]\Psi_{ql}(r)=0, \tag{1}$$

$$H_0=2mc^2ch\left(\frac{i\hbar}{mc}\frac{d}{dr}\right)+\frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{mr\left(r+\dfrac{i\hbar}{mc}\right)}\exp\left(\frac{i\hbar}{mc}\frac{d}{dr}\right),$$

где H_0 – релятивистский гамильтониан, V – квазипотенциал, c – скорость света. Рассмотрим случай S-волны и положим $\hbar=m=1$, $\varepsilon=1/c$. Тогда уравнение (1) можно переписать в более удобном для дальнейших исследований виде:

$$[E_\varepsilon-H_\varepsilon-V(r)]\,\Psi(r)=0, \tag{2}$$

$$E_\varepsilon=\frac{2}{\varepsilon^2}\left[\sqrt{1+\varepsilon^2q^2}-1\right]=\frac{2q^2}{\sqrt{1+\varepsilon^2q^2}+1}, \tag{3}$$

$$H_\epsilon=\frac{2}{\varepsilon^2}\left[ch\left(i\varepsilon\frac{d}{dr}\right)-1\right]. \tag{4}$$

Удобство этих обозначений связано с важным свойством, а именно: при $\varepsilon\to 0$, $E_\varepsilon\to q^2$, $H_\varepsilon\to d^2/dr^2$. Разлагая оператор $ch\,(i\varepsilon d/dr)$ в ряд, можно получить следующее дифференциальное уравнение бесконечного порядка:

$$\left[E_\varepsilon+\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{2\varepsilon^2}{4!}\frac{d^4}{dr^4}+\frac{2\varepsilon^4}{6!}\frac{d^6}{dr^6}+\cdots\right)-V(r)\right]\Psi(r)=0. \tag{5}$$

Если в уравнении отбросить члены высших порядков, то в результате мы получим обыкновенное дифференциальное уравнение

$$H_{2m}\Psi(r)=\left[E_\varepsilon+\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{2\varepsilon^2}{4!}\frac{d^4}{dr^4}+\frac{2\varepsilon^4}{6!}\frac{d^6}{dr^6}+\cdots\right.\right.$$
$$\left.\left.\cdots+\frac{2(-1)^{\frac{2m-2}{2}}\varepsilon^{2m-2}}{m!}\frac{d^{2m}}{dr^{2m}}\right)-V(r)\right]\Psi(r)=0. \tag{6}$$

Если в уравнении (1) величину c формально устремить к бесконечности, $c\to\infty$, то это уравнение переходит в нерелятивистское уравнение Шредингера:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-V(r)+q^2\right]\Psi_{ql}(r)=0. \tag{7}$$

Одной из важных особенностей уравнения (6) является наличие малого параметра при старшей производной, то есть это сингулярно-возмущенное дифференциальное уравнение. Вопрос о сходимости решений релятивистского уравнения Шредингера к решениям уравнения (7) впервые был поставлен и подробно рассмотрен в работе [4].

С помощью аналитических и численных методов в этой области были проведены исследования для конкретно поставленных задач [5]-[7]. Например, в работе [7] была получена асимптотика собственных функций и собственных значений для сингулярно-возмущенного релятивистского аналога уравнения Шредингера при определенном выборе краевых условий.

В настоящей работе проводится сравнительный численный анализ сходимости решения краевой задачи для случая сферически-симметричной потенциальной ямы, соответствующего сингулярно возмущенному релятивистскому уравнению Шредингера 4-го порядка, к решению аналогично поставленной задачи для уравнения Шредингера 2-го порядка.

Краевая задача для уравнения 2-го и 4-го порядка

Рассмотрим движение частицы массы m в сферически-симметричной потенциальной яме конечной глубины U_0:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \le a, \\ 0, & r > a\,. \end{cases} \tag{8}$$

Положим $\hbar = 1$, $m = 1/2$. В случае S-состояния уравнение Шредингера 2-го порядка, определяющее функцию $R(r)$, имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U(r) + E\right] R(r) = 0. \tag{9}$$

Ищем решение уравнения (9), удовлетворяющее краевым условиям

$$\begin{cases} R(0) = 0, \\ R(+\infty) = 0. \end{cases} \tag{10}$$

Найдем решение, соответствующее отрицательным значениям энергии. Положим $\epsilon_0 = -E \ge 0$, тогда можно написать

$$\begin{cases} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \alpha^2\right] R_1(r) = 0, & r \le a, \\ \left[\frac{d^2}{dr^2} - \beta^2\right] R_2(r) = 0, & r > a, \end{cases} \tag{11}$$

где

$$\alpha = \sqrt{U_0 - \epsilon_0}, \ \beta = \sqrt{\epsilon_0}. \tag{12}$$

Решение уравнения (9), удовлетворяющее краевым условиям $R(r)$ в нуле и на бесконечности, ищем в виде

$$\begin{cases} R_1(r) = A \sin(\alpha r), & r \leq a, \\ R_2(r) = B \exp(-\beta r), & r \geq a. \end{cases} \tag{13}$$

При $x = a$ решения этих уравнений должны переходить друг в друга непрерывно и с непрерывной 1-й производной. Получим условие относительно ϵ_0, определяющее уровни энергии системы:

$$\alpha \cot(\alpha a) = -\beta. \tag{14}$$

В работе [8] рассмотрен вопрос о существовании решения уравнения (14). Вводятся новые переменные

$$\xi = a\alpha, \qquad \eta = a\beta. \tag{15}$$

Тогда из формул (14),(15) следует

$$\eta = -\xi \cot(\xi), \tag{16}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = a^2 U_0. \tag{17}$$

Значения η и ξ, удовлетворяющие одновременно обоим уравнениям, определяются точками пересечения кривой (16) с окружностью (17) радиуса $a\sqrt{U_0}$. При $U_0 a^2 < \pi^2/4$ отсутствуют точки пересечения графиков и, следовательно, нет стационарных состояний с отрицательной энергией.

При $U_0 a^2 \geq \pi^2/4$ стационарные состояния существуют и уравнение (14) имеет решение. Это уравнение решается численно, и решение можно представить графически.

Проведем аналогичные рассуждения для случая сингулярно-возмущенного уравнения 4-го порядка. Рассмотрим решение уравнения

$$\left[-\mu \frac{d^4}{dr^4} + \frac{d^2}{dr^2} + (E_\mu - U(r))\right] R_\mu(r) = 0, \tag{18}$$

где $\mu = \varepsilon^2/12$, для потенциала $U(r)$ (8). Для уравнения 4-го порядка дополним два краевых условия (10) вырожденной задачи в точке $r = 0$ и на бесконечности еще двумя:

$$\begin{cases} R_\mu(0) = 0, & \frac{d^2}{dr^2} R_\mu(0) = 0, \\ R_\mu(\infty) = 0, & \frac{d^2}{dr^2} R_\mu(+\infty) = 0. \end{cases} \tag{19}$$

Положим $\epsilon_\mu = -E_\mu \geq 0$. Решения, удовлетворяющие этим граничным условиям, ищем в виде

$$\begin{cases} R_{1\mu}(r) = A_{1\mu}\,\sin(\gamma_{1\mu}r) + A_{2\mu}\,\sinh(\gamma_{2\mu}r)\,, & r \leq a\,, \\ R_{2\mu}(r) = B_{1\mu}\,\exp\left(-\omega_{1\mu}r\right) + B_{2\mu}\,\exp\left(-\omega_{2\mu}r\right)\,, & r \geq a\,. \end{cases} \tag{20}$$

Положим

$$D_1 = 1 + 4\mu\left(U_0 - \epsilon_\mu\right), \qquad D_2 = 1 - 4\mu\epsilon_\mu.$$

Тогда

$$\gamma_{1\mu} = \sqrt{\frac{\sqrt{D_1} - 1}{2\mu}}\,, \qquad \gamma_{2\mu} = \sqrt{\frac{\sqrt{D_1} + 1}{2\mu}}$$

и

$$\omega_{1\mu} = \sqrt{\frac{1 - \sqrt{D_2}}{2\mu}}\,, \qquad \omega_{2\mu} = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{D_2}}{2\mu}}\,.$$

Относительно коэффициентов $\gamma_{1\mu}, \gamma_{2\mu}, \omega_{1\mu}, \omega_{2\mu}$ можно показать, что при $\mu \to 0$

$$\gamma_{1\mu} \to \sqrt{U_0 - \epsilon_\mu}\,, \qquad \omega_{1\mu} \to \sqrt{\epsilon_\mu}$$

и

$$\gamma_{2\mu} \to \sqrt{\frac{1}{\mu} + \left(U_0 - \epsilon_\mu\right)}\,, \qquad \omega_{2\mu} \to \sqrt{\frac{1}{\mu} - \epsilon_\mu}\,.$$

Отметим, что

$$\gamma_{1\mu} \to \alpha, \qquad \omega_{1\mu} \to \beta,$$

где α и β — соответствующие коэффициенты решения уравнения 2-го порядка. Для уравнения 4-го порядка в точке сшивания $x = a$ потребуем равенства значений функций $R_{1\mu}, R_{2\mu}$ и их производных до 3-го порядка включительно. Из полученой системы 4 уравнений находим условие нахождения уровней энергии общей системы ϵ_μ:

$$\gamma_{1\mu}\,\cot\left(\gamma_{1\mu}a\right) = -\left(\omega_{1\mu} + \Omega\left(\mu, a, U_0\right)\right), \tag{21}$$

где

$$\Omega\left(\mu, a, U_0\right) = \frac{\omega_{2\mu} - \omega_{1\mu}}{1 - \dfrac{\left(\gamma_{2\mu}\coth\left(\gamma_{2\mu}\right)a + \omega_{2\mu}\right)\left(\gamma_{1\mu}^2 + \omega_{2\mu}^2\right)\left(\gamma_{2\mu}^2 - \omega_{1\mu}^2\right)}{\left(\gamma_{2\mu}\coth\left(\gamma_{2\mu}\right)a + \omega_{1\mu}\right)\left(\gamma_{1\mu}^2 + \omega_{1\mu}^2\right)\left(\gamma_{2\mu}^2 - \omega_{2\mu}^2\right)}}\,. \tag{22}$$

Рассмотрим вопрос о существовании решения полученного уравнения. Введем новые переменные

$$\xi_\mu = a\gamma_{1\mu}, \qquad \eta_\mu = a\omega_{1\mu} \ . \tag{23}$$

Тогда

$$\eta_\mu = -\xi_\mu \cot(\xi_\mu) - a\Omega(\mu, a, U_0) \ , \tag{24}$$

$$\xi_\mu^2 + \eta_\mu^2 = a^2 \left(\frac{\sqrt{D_1} - \sqrt{D_2}}{2\mu} \right) \ . \tag{25}$$

Значения η_μ и ξ_μ, удовлетворяющие одновременно обоим уравнениям, определяются точками пересечения кривой (24) с окружностью (25) радиуса ρ.

Из уравнения (25) следует, что

$$\lim_{\mu \to 0} \rho = a\sqrt{U_0} \ .$$

Исследование поведения функции $\Omega\,(\mu, a, U_0)$ при $\mu \to 0$ показало, что

$$\lim_{\mu \to 0} \Omega\,(\mu, a, U_0) = 0 \ ,$$

$$\Omega\,(\mu, a, U_0) \geq 0 \ .$$

Сравним системы (16)-(17) и (24)-(25). Из вышесказанного следует, что при $\mu \to 0$ окружность (25) будет переходить в окружность (17). А график (24) получен смещением графика (16) вниз по оси η на величину, стремящуюся к 0 при $\mu \to 0$. Следовательно, при достаточно больших μ одно стационарное состояние с отрицательной энергией высокого порядка для уравнения Шредингера 4-го порядка может отсутствовать. А при $\mu \to 0$ условие нахождения уровней энергий E_μ для уравнения 4-го порядка переходит в условие для нахождения значений энергий E_0 для уравнения Шредингера 2-го порядка (см. рис. 1).

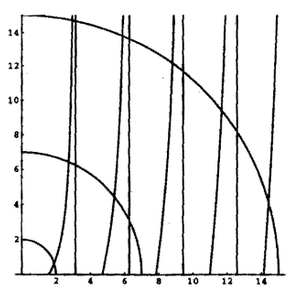

Рис. 1.

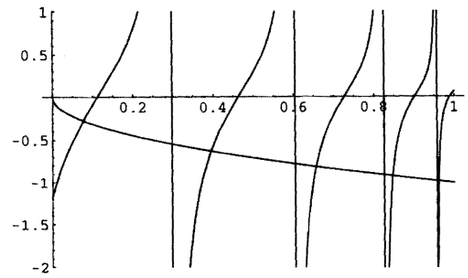

Рис. 2.

Решения уравнений (14), (21) представлены на графике. Ими являются абсциссы точек пересечения графиков (см. рис. 2).

Приведем таблицу найденных уровней энергии при различных значениях μ для глубины потенциальной ямы $U_0 = 1$ и ширины $a = 15$. Строка $\mu = 0$ соответствует решениям вырожденного уравнения.

μ	$E_{0\mu}$	$E_{1\mu}$	$E_{2\mu}$	$E_{3\mu}$	$E_{4\mu}$
0	-.9614	-.8463	-.6559	-.3942	-.0762
0.2	-.9608	-.8407	-.6322	-.3277	–
0.01	-.9614	-.8460	-.6547	-.3904	-.0693
0.001	-.9614	-.8462	-.6558	-.3939	-.0755
0.0001	-.9614	-.8463	-.6559	-.3942	-.0762

Отметим более быструю сходимость к уровням энергии вырожденного уравнения для уровней энергии более низкого порядка.

Исследование волновых функций для уравнения 2-го и 4-го порядка

Для нахождения волновых функций дополним условия сшивания решений и их производных в точке $x = a$ условием нормировки волновых функций. А именно: для уравнения 2-го порядка

$$\int_0^a R_1^2\,dx + \int_a^\infty R_2^2\,dx = 1\ ,$$

для уравнения 4-го порядка

$$\int_0^a R_{1\mu}^2\,dx + \int_a^\infty R_{2\mu}^2\,dx = 1\ .$$

Тогда для каждого уровня энергии, полученного из уравнения (14), численными методами можно однозначно определить неизвестные коэффициенты A_1, B_1 волновых функций уравнения 2-го порядка. И для каждого уровня энергии, полученного из уравнения (21), численными методами можно однозначно определить неизвестные коэффициенты $A_{1\mu}$, $A_{2\mu}$, $B_{1\mu}$, $B_{2\mu}$ для волновых функций уравнения 4-го порядка.

Результаты вычислений представлены в таблицах при различных значениях μ. Строка $\mu = 0$ соответствует решениям вырожденного уравнения. Для нулевого уровня энергии $E_{0\mu} = -.9614$:

μ	$A_{1\mu}$	$A_{2\mu}$	$B_{1\mu}$	$B_{2\mu}$
0	.3533	–	169335.	–
0.1	.3535	$-.122\ 10^{-22}$	440407.	$-.18\ 10^{-18}$
0.01	.3533	$-.44\ 10^{-68}$	183081.	$-.26\ 10^{-68}$
0.001	.3533	$-.42\ 10^{-211}$	170634.	$-.48\ 10^{-220}$
0.0001	.3533	$-.42\ 10^{-656}$	169332.	$-9\ 10^{-646}$

и для 3-го уровня энергии $E_{3\mu} = -.3602$:

μ	$A_{1\mu}$	$A_{2\mu}$	$B_{1\mu}$	$B_{2\mu}$
0	.3471	–	3327.	–
0.1	.3444	$-.125\ 10^{-22}$	2906.	$.28\ 10^{-19}$
0.01	.3469	$-.114\ 10^{-67}$	3284.	$.15\ 10^{-63}$
0.001	.3471	$-.23\ 10^{-209}$	3322.	$.12\ 10^{-207}$
0.0001	.3471	$-.9\ 10^{-656}$	3326.	$.36\ 10^{-647}$

Из приведенных таблиц видно, что коэффициенты, определяющие задание волновых функций возмущенного уравнения, сходятся к соответствующим коэффициентам для задания волновых функций невозмущенного уравнения:

$$A_{1\mu} \to A_1, \qquad A_{2\mu} \to 0,$$
$$B_{1\mu} \to B_1, \qquad B_{2\mu} \to 0.$$

На графике (см. рис. 3) представлены решения сингулярно-возмущенного уравнения Шредингера 4-го порядка, а именно, для трех значений уровней отрицательной энергии построены три соответствующие им волновые функции.

В результате можно сделать вывод, что при введении дополнительных условий в точке сшивания $x = a$, точке $x = 0$ и на бесконечности решение краевой задачи для случая сферически-симметричной потенциальной ямы, соответствующее сингулярно-возмущенному релятивистскому уравнению Шредингера 4-го порядка, сходится к решению аналогично поставленной задачи для уравнения Шредингера 2-го порядка.

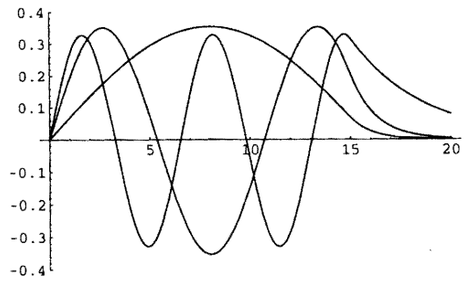

Рис. 3. Волновые функции основного состояния ($n = 0$) и возбужденных состояний с $n = 2$ и $n = 4$

Список литературы

[1] A.A. Logunov, A.N. Tavkhelidze *Nuovo Cim.* **29** (1963) 380.

[2] V.G. Kadyshevsky, *Nucl. Phys.* **B6** (1968) 125;
V.G. Kadyshevsky, M.D. Mateev and R.M. Mir-Kasimov, *Preprint E2-4030*, JINR, Dubna, 1968;
V.G. Kadyshevsky, R.M. Mir-Kasimov and N.B. Skachkov, *Nuovo Cim.* **55A** (1968) 233.

[3] V.G. Kadyshevsky, R.M. Mir-Kasimov and N.B. Skachkov, *ЭЧАЯ.* **2** No 3 (1972) 637.

[4] Е.П. Жидков, В.Г. Кадышевский, Ю.В. Катышев *ТМФ* **3** No 2 (1970) 191.

[5] И.В. Амирханов, Е.П. Жидков, С.В. Коннова , *Сообщ. ОИЯИ*, Р5-99-15, Дубна, 1999.

[6] И.В. Амирханов, Е.П. Жидков, И.Е. Жидкова *Сообщ. ОИЯИ*, Р11-93-350, Дубна, 1993.

[7] И.В. Амирханов, Е.П. Жидков, И.Е. Жидкова, С.А. Васильев *Сообщ. ОИЯИ*, Р11-2000-13, Дубна, 2000.

[8] А.С. Давыдов. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июля 2000 года.

Амирханов И.В., Жидков Е.П., Коннова С.В. P11-2000-154
Исследование решения краевой задачи
для сингулярно-возмущенного уравнения Шредингера
4-го порядка

Проводится сравнительный численный анализ сходимости решения краевой задачи для случая сферически-симметричной потенциальной ямы для сингулярно-возмущенного релятивистского уравнения Шредингера 4-го порядка, к решению аналогично поставленной задачи для уравнения Шредингера 2-го порядка. Попутно рассматривается вопрос существования решения для возмущенной задачи. Приведены результаты численных расчетов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ при финансовой поддержке РФФИ, грант 99-01-01101, грант 00-01-00617.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2000

Перевод авторов

Amirkhanov I.V., Konnova S.V., Zhidkov E.P. P11-2000-154
Investigation of Solutions of Boundary-Value Singular Perturbated
Problem for Schröedinger Equation of 4th Order

For the case of spherical-symmetrical potential we have considered the convergence of the solution of singular-perturbated Schröedinger equation of the 4th order to the solution of the corresponding standard nonrelativistic Schröedinger equation by numerical and analytical methods. The questions of existence of the solutions are explored. Numerical results are given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR, and supported by the Russian Foundation for Basic Research, Projects 99-01-01101, 00-01-00617.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2000