

P11-2012-99

И. В. Амирханов, Н. Р. Саркар, И. Сархатов,
З. К. Тухлиев, З. А. Шарипов

АНАЛИТИЧЕСКОЕ И ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ
ДЛЯ КВАЗИПОТЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Амирханов И. В. и др.

P11-2012-99

Аналитическое и численное исследования
решений задачи рассеяния для квазипотенциального уравнения

Исследованы решения задачи рассеяния для квазипотенциального уравнения с кусочно-постоянными потенциалами при различных значениях параметров задачи. Проведен сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения с решениями уравнения Шредингера.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2012

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2012-99

Analytical and Computational Investigations
of Solutions of Scattering Problem for the Quasipotential Equation

Investigation of solutions of a scattering problem is carried out for the quasipotential equation with piecewise-constant potentials at various values of the parameters of the problem. The comparative analysis of the solutions of the quasipotential equation with the solutions of Schrödinger equation is performed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2012

ВВЕДЕНИЕ

В предыдущих наших работах [3–5] исследовались краевые задачи для квазипотенциального уравнения различными методами и проведен сравнительный анализ полученных решений с решениями аналогичных задач для уравнения Шредингера. Подобные исследования были важны для выявления релятивистских эффектов. В данной работе мы исследуем задачу рассеяния для квазипотенциального уравнения [1] и уравнения Шредингера с различными кусочно-постоянными потенциалами и проведем сравнительный анализ полученных решений.

Исследуем решения задачи рассеяния для следующего уравнения:

$$[E_\varepsilon - H_\varepsilon - V(r)]\psi(r) = 0, \quad (1)$$

где

$$E_\varepsilon = \frac{2q^2}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 q^2} + 1}, \quad H_\varepsilon = \frac{2}{\varepsilon^2} \left[\operatorname{ch} \left(i\varepsilon \frac{d}{dr} \right) - 1 \right],$$

ε — безразмерный параметр, $V(r)$ — потенциал взаимодействия.

Разлагая оператор $\operatorname{ch} \left(i\varepsilon \frac{d}{dr} \right)$ в ряд, уравнение (1) можно свести к дифференциальному уравнению бесконечного порядка. При $\varepsilon \rightarrow 0$, $E_\varepsilon \rightarrow q^2$, $H_\varepsilon \rightarrow -\frac{d^2}{dr^2}$ (1) переходит в нерелятивистское уравнение Шредингера [2]

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - V(r) + q^2 \right] \psi(r) = 0. \quad (2)$$

Поэтому особую актуальность приобретают методы поиска таких решений задачи рассеяния для уравнения (1), которые при $\varepsilon \rightarrow 0$ стремятся к решениям аналогичной задачи рассеяния для уравнения Шредингера (2). Тогда отличие этих решений при $\varepsilon \neq 0$ можно интерпретировать как релятивистский эффект.

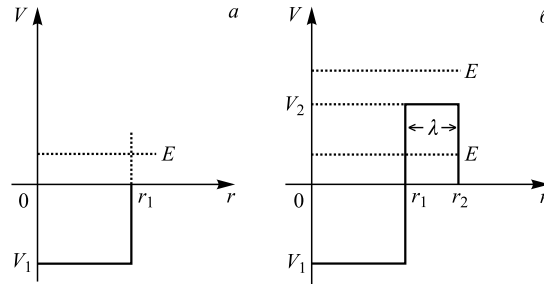


Рис. 1. Вид потенциалов

Как и в предыдущих наших работах [3–5], исследуем решения задачи рассеяния для уравнения (1) с использованием оператора сдвига

$$\exp\left(\pm i\varepsilon \frac{d}{dr}\right) f(r) = f(r \pm i\varepsilon).$$

Далее проведен сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения (1) с решениями уравнения Шредингера (2) для потенциальных ям двух типов, которые показаны на рис. 1.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Сначала получим необходимые формулы для проведения сравнительного анализа решений задачи рассеяния для уравнения Шредингера (2) и квазипотенциального уравнения (1). Затем приведем численные результаты.

а. Решения уравнений (1) и (2) для прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины (рис. 1, а). Решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(\alpha_1 r), & 0 \leq r \leq r_1, \\ \psi_2(r) &= A_2 \sin(\alpha_2 r + \delta), & r_1 \leq r < \infty. \end{aligned} \quad (3)$$

Далее везде $r_1 = \pi$.

Подставляя решения (3) в уравнение (2), находим $\alpha_1^2 = V_1 + E$, $\alpha_2^2 = E$, $E = q^2$.

Из условий непрерывности функции и первой производной функции

$$\psi_1(r)\Big|_{r=r_1} = \psi_2(r)\Big|_{r=r_1}, \quad \psi_1'(r)\Big|_{r=r_1} = \psi_2'(r)\Big|_{r=r_1} \quad (4)$$

получаем выражение для нахождения фазы рассеяния δ :

$$\delta = \operatorname{arcctg} D - \alpha_2 r_1, \quad (5)$$

где $D = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \operatorname{ctg}(\alpha_1 r_1)$.

Подставляя решения (3) в уравнение (1), получаем

$$\alpha_1 = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arcch} \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} (V_1 + E) \right], \quad 0 \leq r \leq r_1, \quad (6)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arcch} \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} E \right], \quad r_1 \leq r < \infty. \quad (7)$$

Для уравнения (1) условия сшивания (4) модифицируем следующим образом:

$$\psi_1(r)\Big|_{r=r_1} = \psi_2(r)\Big|_{r=r_1}, \quad L\psi_1(r)\Big|_{r=r_1} = L\psi_2(r)\Big|_{r=r_1}, \quad (8)$$

где

$$L = \frac{1}{\varepsilon} \left(e^{\varepsilon \frac{d}{dr}} - 1 \right), \quad L \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{dr}. \quad (9)$$

Тогда для фазы рассеяния получаем

$$\delta = \text{arcctg } D_1 - \alpha_2 r_1, \quad (10)$$

где

$$D_1 = \frac{-C_3(\alpha_1, \varepsilon) + \alpha_1 C_4(\alpha_1, \varepsilon) \text{ctg}(\alpha_1 r_1) + C_3(\alpha_2, \varepsilon)}{\alpha_2 C_4(\alpha_2, \varepsilon)},$$

$$C_3(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{1 - \cos(\alpha_1 \varepsilon)}{\varepsilon}, \quad C_3(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{1 - \cos(\alpha_2 \varepsilon)}{\varepsilon},$$

$$C_4(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{\sin(\alpha_1 \varepsilon)}{\alpha_1 \varepsilon}, \quad C_4(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{\sin(\alpha_2 \varepsilon)}{\alpha_2 \varepsilon}.$$

Причем при $\varepsilon \rightarrow 0$ $C_3 \rightarrow 0$ и $C_4 \rightarrow 1$. Тогда уравнение (10) переходит в формулу (5). Это означает, что решения (фазы рассеяния) квазипотенциального уравнения стремятся к решениям уравнения Шредингера.

б. Решения уравнений (1) и (2) для прямоугольной потенциальной ямы с барьером (рис. 1, б). Отдельно рассмотрим случаи, когда $E < V_2$ и $E > V_2$.

При $0 < E < V_2$ решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(\alpha_1 r), & 0 \leq r \leq r_1, \\ \psi_2(r) &= A_2 \exp(-\alpha_2 r) + B_2 \exp(\alpha_2 r), & r_1 \leq r \leq r_2, \\ \psi_3(r) &= A_3 \sin(\alpha_3 r + \delta), & r_2 \leq r < \infty. \end{aligned} \quad (11)$$

Далее везде $r_1 = \pi$.

Подставляя решения (11) в уравнение (2), находим $\alpha_1^2 = V_1 + E$, $\alpha_2^2 = V_2 - E$, $\alpha_3^2 = E$.

Из условий непрерывности функции $\psi(r)$ и ее первой производной в точках

$$r = r_1: \quad \psi_1(r) \Big|_{r=r_1} = \psi_2(r) \Big|_{r=r_1}, \quad \psi_1'(r) \Big|_{r=r_1} = \psi_2'(r) \Big|_{r=r_1} \quad (12)$$

и

$$r = r_2: \quad \psi_2(r) \Big|_{r=r_2} = \psi_3(r) \Big|_{r=r_2}, \quad \psi_2'(r) \Big|_{r=r_2} = \psi_3'(r) \Big|_{r=r_2}$$

получаем

$$\delta = \text{arcctg } D_2 - \alpha_3 r_2, \quad (13)$$

где

$$D_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_3} \frac{-\exp(-\alpha_2 r_2) + \frac{B_2}{A_2} \exp(\alpha_2 r_2)}{\exp(-\alpha_2 r_2) + \frac{B_2}{A_2} \exp(\alpha_2 r_2)},$$

$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{D_3 + 1}{D_2 - D_3} \exp(-2\alpha_2 r_1), \quad D_3 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \operatorname{ctg}(\alpha_2 r_1).$$

Подставляя решения (11) в (1), имеем

$$\alpha_1 = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arccch} \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} (V_1 + E) \right], \quad 0 \leq r \leq r_1, \quad (14)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{\varepsilon} \arccos \left[1 - \frac{\varepsilon^2}{2} (V_2 - E) \right], \quad r_1 \leq r \leq r_2, \quad (15)$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arccch} \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{2} E \right), \quad r_2 \leq r < \infty. \quad (16)$$

Из (15) получаем ограничение на параметр ε : $0 \leq \varepsilon \leq \frac{2}{\sqrt{V_2 - E}}$.

Условия сшивания (12) модифицируем так же, как и в пункте *a* (см. (8), (9)), и находим

$$\delta = \operatorname{arcctg} D_4 - \alpha_3 r_2, \quad (17)$$

где

$$D_4 = \frac{D_5 + C_3(\alpha_3, \varepsilon)}{\alpha_3 C_4(\alpha_3, \varepsilon)},$$

$$D_5 = \frac{\alpha_2 C_5(\alpha_2, \varepsilon) \exp(-\alpha_2 r_2) + \alpha_2 C_6(\alpha_2, \varepsilon) \frac{B_2}{A_2} \exp(\alpha_2 r_2)}{\exp(-\alpha_2 r_2) + \frac{B_2}{A_2} \exp(\alpha_2 r_2)},$$

$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{\alpha_2 C_5 - D_6}{D_6 - \alpha_2 C_5} \exp(-2\alpha_2 r_1), \quad D_6 = C_3(\alpha_1, \varepsilon) + \alpha_1 C_4(\alpha_1, \varepsilon) \operatorname{ctg}(\alpha_1 r_1),$$

$$C_3(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{1 - \cos(\alpha_1 \varepsilon)}{\varepsilon}, \quad C_4(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{\sin(\alpha_1 \varepsilon)}{\alpha_1 \varepsilon},$$

$$C_5(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{1}{\alpha_2 \varepsilon} [\exp(-\alpha_2 \varepsilon) - 1], \quad C_6(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{1}{\alpha_2 \varepsilon} [\exp(\alpha_2 \varepsilon) - 1].$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$ уравнение (17) переходит в выражение (13).

При $V_2 \leq E < \infty$ решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(\alpha_1 r), & 0_1 \leq r \leq r_1, \\ \psi_2(r) &= A_2 \sin(\alpha_2 r) + B_2 \cos(\alpha_2 r), & r_1 \leq r \leq r_2, \\ \psi_3(r) &= A_3 \sin(\alpha_3 r + \delta), & r_2 \leq r < \infty. \end{aligned} \quad (18)$$

Проводя аналогичную процедуру, для уравнения (2) имеем

$$\alpha_1^2 = V_1 + E, \quad \alpha_2^2 = E - V_2, \quad \alpha_3^2 = E, \quad (19)$$

$$\delta = \text{arcctg } D_7 - \alpha_3 r_2,$$

где

$$D_7 = \frac{\alpha_2 \cos(\alpha_2 r_2) - \frac{B_2}{A_2} \sin(\alpha_2 r_2)}{\alpha_3 \sin(\alpha_2 r_2) + \frac{B_2}{A_2} \cos(\alpha_2 r_2)}, \quad \frac{B_2}{A_2} = \frac{\cos(\alpha_2 r_1) - D_8 \sin(\alpha_2 r_1)}{\sin(\alpha_2 r_1) + D_8 \cos(\alpha_2 r_1)},$$

$$D_8 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \text{ctg}(\alpha_1 r_1).$$

Для уравнения (1) имеем

$$\delta = \text{arcctg } D_9 - \alpha_3 r_2, \quad (20)$$

где

$$D_9 = \frac{D_{10} + C_3(\alpha_3, \varepsilon)}{\alpha_3 C_4(\alpha_3, \varepsilon)}, \quad D_{10} = \frac{U_{22} + V_{22} \frac{B_2}{A_2}}{\sin(\alpha_2 r_2) + \frac{B_2}{A_2} \cos(\alpha_2 r_2)},$$

$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{U_{21} - U_1 \sin(\alpha_2 r_1)}{U_1 \cos(\alpha_2 r_1) - V_{21}}, \quad C_3(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} [1 - \cos(\alpha_1 \varepsilon)],$$

$$C_3(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} [1 - \cos(\alpha_2 \varepsilon)], \quad C_3(\alpha_3, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} [1 - \cos(\alpha_3 \varepsilon)],$$

$$C_4(\alpha_1, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\sin(\alpha_1 \varepsilon)}{\alpha_1 \varepsilon}, \quad C_4(\alpha_2, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\sin(\alpha_2 \varepsilon)}{\alpha_2 \varepsilon},$$

$$C_4(\alpha_3, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\sin(\alpha_3 \varepsilon)}{\alpha_3 \varepsilon}, \quad U_1 = -C_3(\alpha_1, \varepsilon) + \alpha_1 C_4(\alpha_1, \varepsilon) \text{ctg}(\alpha_1 r_1),$$

$$U_{21} = -C_3(\alpha_2, \varepsilon) \sin(\alpha_2 r_1) + \alpha_2 C_4(\alpha_2, \varepsilon) \cos(\alpha_2 r_1),$$

$$V_{21} = -C_3(\alpha_2, \varepsilon) \cos(\alpha_2 r_1) - \alpha_2 C_4(\alpha_2, \varepsilon) \sin(\alpha_2 r_1),$$

$$U_{22} = -C_3(\alpha_2, \varepsilon) \sin(\alpha_2 r_2) + \alpha_2 C_4(\alpha_2, \varepsilon) \cos(\alpha_2 r_2),$$

$$V_{22} = -C_3(\alpha_2, \varepsilon) \cos(\alpha_2 r_2) - \alpha_2 C_4(\alpha_2, \varepsilon) \sin(\alpha_2 r_2).$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$ уравнение (20) переходит в формулу (17) и их фазы рассеяния совпадают.

Ниже приведем некоторые из полученных результатов.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 2–4 приведены $\delta(E)$ при различных значениях ε для прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины (рис. 2) и для случаев $0 \leq E \leq V_2$

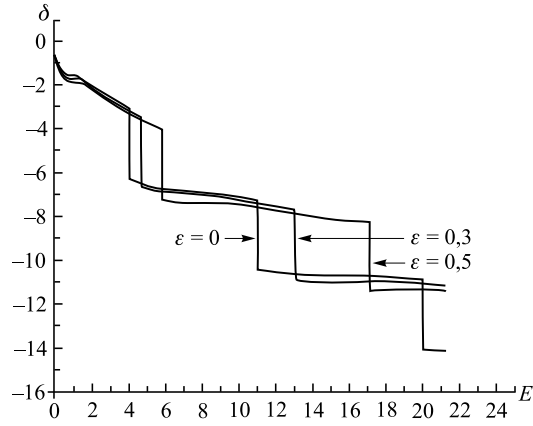


Рис. 2. Зависимость фазы рассеяния от энергии при $V_1 = 5$, $0 < E < E_{\max}$, $E_{\max} = 22$

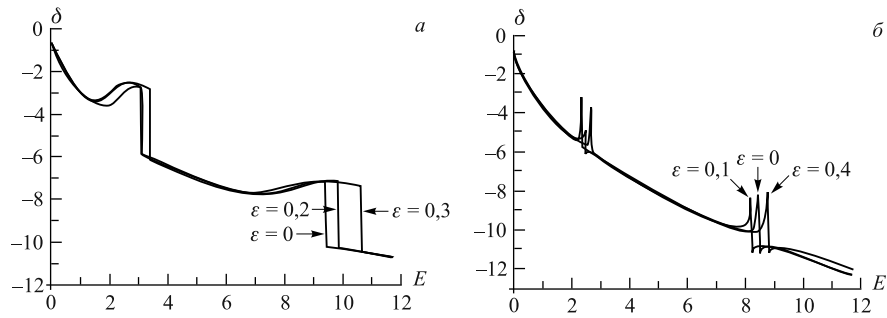


Рис. 3. Зависимость фазы рассеяния от энергии при $r_2 - r_1 = 0,2$ (а) и $r_2 - r_1 = 0,8$ (б), $0 < E < V_2$, $V_2 = 12$

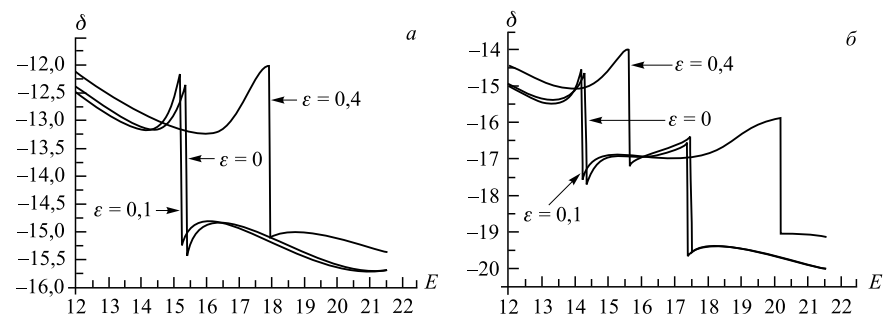


Рис. 4. Зависимость фазы рассеяния от энергии при $r_2 - r_1 = 0,8$ (а) и $r_2 - r_1 = \pi/2$ (б), $V_2 < E < E_{\max}$, $V_2 = 12$, $E_{\max} = 22$

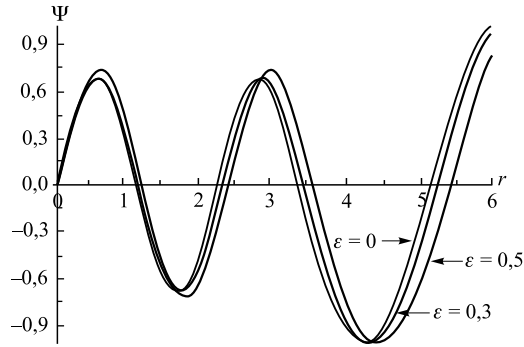


Рис. 5. Волновые функции при параметрах $0 < E < V_1$, $E = 3$, $V_1 = 5$

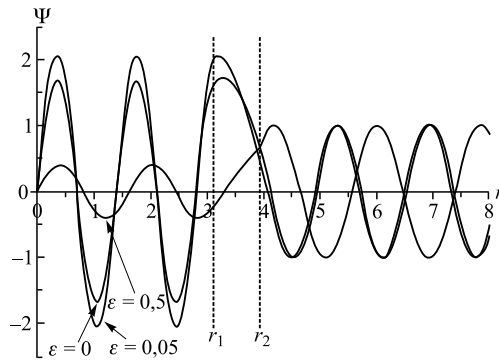


Рис. 6. Волновые функции при параметрах $r_2 - r_1 = \pi/4$, $E < V_2$, $E = 11$, $V_2 = 12$

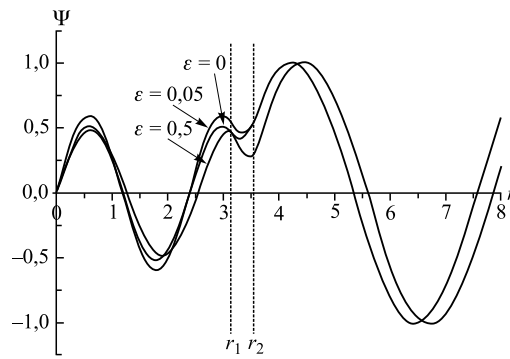


Рис. 7. Волновые функции при параметрах $r_2 - r_1 = \pi/8$, $V_2 < E < E_{\max}$, $E = 15$, $V_2 = 12$, $E_{\max} = 22$

(рис. 3) и $V_2 \leq E < \infty$ (рис. 4). На рис. 5–7 представлены соответственно волновые функции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованы решения задачи рассеяния в рамках уравнения Шредингера и квазипотенциального уравнения при различных значениях параметров задачи. Проведен сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения с решениями уравнения Шредингера. Ниже перечислены некоторые из полученных результатов.

1. Фазы рассеяния и волновые функции для квазипотенциального уравнения при $\varepsilon \rightarrow 0$ совпадают с фазами рассеяния и волновыми функциями для уравнения Шредингера. А при $\varepsilon \neq 0$ волновые функции не совпадают (см. рис. 5–7).

2. Фаза рассеяния для прямоугольной потенциальной ямы радиусом r_1 (см. рис. 2) имеет ступенчатый вид при тех значениях энергии, при которых появляются виртуальные уровни. Так как для квазипотенциального уравнения виртуальные уровни зависят от параметра ε , фаза рассеяния имеет ступенчатый вид при других значениях энергии, т. е. резонансные энергии сдвинуты. Такое поведение фазы рассеяния для случая потенциальной ямы с барьером (см. рис. 3, 4) также связано с виртуальными уровнями в потенциальной яме радиусом r_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 10-01-00467-а, 11-01-00278-а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кадышевский В. Г., Мир-Касимов Р. М., Скачков Н. Б. // ЭЧАЯ. 1972. Т. 2, № 3. С. 637–690.
2. Жидков Е. П., Кадышевский В. Г., Катыев Ю. В. К вопросу о предельном переходе $c \rightarrow \infty$ в релятивистском предельном переходе // ТМФ. 1970. Т. 3, № 2. С. 191–196.
3. Амирханов И. В. и др. // Математическое моделирование. 2007. Т. 19, № 11. С. 65–79.
4. Амирханов И. В. и др. // Вестник РУДН. Сер. Математика. Информатика. Физика. 2010. № 3(2). С. 14–18.
5. Амирханов И. В. и др. Препринт ОИЯИ Р11-2010-96. Дубна, 2010. 14 с.

Получено 3 сентября 2012 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 06.11.2012.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,61. Тираж 245 экз. Заказ № 57820.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/