

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 517.9

**МНОГОКОМПОНЕНТНОЕ ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА
МОДЕЛИРУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ**

В. Н. Сидоренко

(кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Рассматривается многокомпонентное обобщение метода моделирующих потенциалов для построения энергетического спектра уравнения Шрёдингера в рамках квазиклассического подхода.

Рассмотрим обобщение метода моделирующего потенциала [1] на случай системы радиальных уравнений Шрёдингера с n «зацепляющимися» компонентами. В векторной форме данная система имеет следующий вид:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \widehat{D}^{(2)} \Psi(r) + \widehat{W}(r, E) \Psi(r) = 0, \quad \Psi(r) = \begin{pmatrix} \Psi_1(r) \\ \dots \\ \Psi_n(r) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\Psi_i(r) \in L_2(R_+^1)$, μ — приведенная масса, $\widehat{D}^{(2)} = \frac{d^2}{dr^2} I$ (I — единичная матрица), а

$$\widehat{W}(r, E) = \begin{pmatrix} E - U_{11}(r) & \Delta U_{12}(r) & \dots & \Delta U_{1n}(r) \\ \Delta U_{21}(r) & E - U_{22}(r) & \dots & \Delta U_{2n}(r) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta U_{n1}(r) & \Delta U_{n2}(r) & \dots & E - U_{nn}(r) \end{pmatrix} \quad (2)$$

— моделируемый потенциал. Полагаем, что переменная r является скаляром. Сделаем замену переменных в уравнении (1) вида

$$r = f(y), \quad \frac{d}{dr} = \frac{1}{f'(y)} \frac{d}{dy}, \quad (3)$$

$$\Psi(r) \Big|_{r=f(y)} = \sqrt{f'(y)} \widehat{\rho}_0 \Phi(y),$$

где $\widehat{\rho}_0$ — постоянная невырожденная матрица, пропорциональная единичной, т.е. $\widehat{\rho}_0 = IC$, а $C = (C_1, \dots, C_n)^T$ — произвольный постоянный вектор, не равный нулю в силу невырожденности матрицы $\widehat{\rho}_0$. Введение условия взаимной однозначности замены (3) приводит к требованию знакоопределенности функции $f'(y)$. В дальнейшем будем полагать, что $f'(y) > 0$.

Подстановка (3) в (1) дает уравнение той же структуры, что и (1):

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \Phi''(y) + \widehat{W}(y, \tilde{E}) \Phi(y) = 0, \quad (4)$$

где

$$\widehat{W}(y, \tilde{E}) = f'(y) \widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(f(y), E) \widehat{\rho}_0 f'(y) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{2} \{f(y), y\} I, \quad (5)$$

— моделирующий потенциал, который в компонентном виде записывается следующим образом:

$$\widetilde{W}_{ij}(y, \tilde{E}) = \frac{C_j}{C_i} W_{ij}(f(y), E) f'^2(y) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{2} \{f(y), y\} \delta_{ij}, \quad (6)$$

а шварцман $\{f(y), y\}$ задается в виде [2] $\{f(y), y\} = \frac{f'''(y)}{f'(y)} - \frac{3}{2} \left(\frac{f''(y)}{f'(y)} \right)^2$.

Из (6) видно, что существует степень свободы, связанная с комбинацией констант C_i/C_j , которую в дальнейшем будем называть относительным весом i -й компоненты. Таким образом, мы получили обобщенное преобразование Лиувилля. Так же как и в однокомпонентном случае, можно утверждать, что если $\int_a^\infty |\{f(y), y\}| dy < \infty$, где $a \geq 0$, то в результате применения преобразования Лиувилля получится уравнение с суммируемым потенциалом при условии, что исходный потенциал $U(x)$ был суммируемым, т.е. $\int_0^\infty |U(x)| dx < \infty$.

Следует также отметить, что преобразования Лиувилля образуют бесконечномерную группу диффеоморфизмов [3] с единичным элементом — эквивалентным преобразованием — и однозначно определенным обратным элементом, существование которого следует из условия $f'(y) > 0$. Данное утверждение легко проверяется двукратным применением преобразования Лиувилля, использованием теоремы об обратной функции, тождества Кейли [2]

$$\{f(g(y)), y\} = \left(\frac{dg(y)}{dy} \right)^2 \{f, g\} + \{g, y\},$$

связи шварцианов прямой и обратной функций

$$\{f, y\} = - \left(\frac{df(y)}{dy} \right)^2 \{y, f\}$$

и формулы дифференцирования сложной функции.

Кроме того, поскольку $W_{ij}(r, E)$, как известно из теории гамильтоновых многообразий [4], представляет собой с точностью до множителя метрику $g_{ij} = \frac{2\mu}{\hbar} W_{ij}(r, E)$ на поверхности $H(r, p) = E$, то преобразования Лиувилля являются группой движения метрики g_{ij} . Данная группа представляет собой композицию взятого с определенным весом ортогонального преобразования, соответствующего первому члену в (5), и сдвига (второй член в (5)).

Процедура отыскания спектра в задаче с потенциалом $\widehat{W}(f(y), E)$ (см. (2)) сводится к следующему. Для данного потенциала подбирается потенциал $\widehat{V}(y, \tilde{E})$, для которого спектральная задача (4) решается точно и который удовлетворяет описанным ниже условиям. При этом предполагается, что глобальная структура спектра у обоих потенциалов одинакова. В качестве такого потенциала можно выбрать кусочно-линейный. Далее определяем функцию $r = f(y)$ из уравнения

$$If'^2(y) = \widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}^{-1}(f(y), E) \widehat{\rho}_0 \widehat{V}(y, \tilde{E}).$$

Тогда моделирующий потенциал $\widetilde{W}(y, \tilde{E})$ примет вид

$$\widetilde{W}_{ij}(y, \tilde{E}) = V_{ij}(y, \tilde{E}) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{2} \{f(y), y\} \delta_{ij},$$

где $V_{ij}(y, \tilde{E}) = (\tilde{E} - \tilde{U}_{ij}(y)) \delta_{ij} + \frac{C_j}{C_i} \Delta \tilde{U}_{ij}(y) (1 - \delta_{ij})$, а шварциан $\frac{1}{2} \{f(y), y\}$ рассматривается как возмущение при достаточно гладкой функции $f(y)$. Таким образом, $\widehat{V}(y, \tilde{E})$ представляет собой моделирующий потенциал в нулевом приближении. Поскольку $f'(y) > 0$, то получаем условия, которым должен удовлетворять потенциал $\widehat{V}(y, \tilde{E})$:

1) совпадение числа точек поворота для диагонализированных потенциалов $\widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(r, E) \widehat{\rho}_0$ и $\widehat{V}(y, \tilde{E})$, т. е. корней r_n, y_n уравнений $\langle \Psi | \widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(r, E) \widehat{\rho}_0 | \Psi \rangle = 0$, $\langle \Phi | \widehat{V}(y, \tilde{E}) | \Phi \rangle = 0$, которые сводятся к уравнениям, получаемым в однокомпонентном случае, если $V_{ii}(y, \tilde{E}) = V(y, \tilde{E})$ и $(\widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(f(y), E) \widehat{\rho}_0)_{ii} = \widehat{W}(f(y), E)$ для любых $i = 1, \dots, n$ (скалярное произведение при этом обозначает покомпонентную запись данных уравнений и предполагает интегрирование по любым $r' \neq r$ и $y' \neq y$);

2) равенство «классических действий» между соответствующими точками поворота

$$\begin{aligned} S_n(E) &= \left\langle \Psi \left| \int_{y_n}^{r_{n+1}} \sqrt{\widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(r, E) \widehat{\rho}_0} dr \right| \Psi \right\rangle = \\ &= \left\langle \Phi \left| \int_{y_n}^{y_{n+1}} \sqrt{\widehat{V}(y, \tilde{E})} dy \right| \Phi \right\rangle = S_n(\tilde{E}), \end{aligned}$$

где потенциалы $\widehat{V}(y, \tilde{E})$ и $\widehat{\rho}_0^{-1} \widehat{W}(f(y), E) \widehat{\rho}_0$ представлены диагонализированными матрицами.

Далее схема нахождения энергетического спектра исходного уравнения (1) строится следующим образом: а) в нулевом приближении спектр (1) находится путем разрешения относительно E уравнений $S_n(E) = S_n(\tilde{E}^{(0)})$, где $\tilde{E}_n^{(0)}$ — собственные значения при использовании потенциала $\widehat{V}(y, \tilde{E})$; б) последующие приближения определяются подстановкой в точные уравнения $S_n(E) = S_n(\tilde{E})$ приближенных собственных значений для $\widehat{W}(y, \tilde{E})$, получаемых по теории возмущений, и их разрешения относительно E_n . Итак, уравнения для S_n задают связь спектров энергий для исходного и моделирующего потенциалов, зная которую можно определить E . Оценка остаточных членов проводится аналогично одномерному случаю [1] с заменой скалярных функций на операторы. При этом получают скалярные величины $A(R_n^{(0)})$, $M(\tilde{E}_n^{(0)})$ и $w_{nn}(\tilde{E}_n^{(0)})$, которые являются композицией скалярных оценок для i -х компонент, взвешенных с относительными весами C_j/C_i .

В качестве приложения описанного многокомпонентного обобщения метода моделирующих потенциалов рассматривалась задача построения моделирующего потенциала для определения спектра системы двух заряженных частиц с учетом диполь-дипольного взаимодействия (водородоподобный атом) [5]. Оказалось, что данный метод на 50% лучше приблизил точный спектр E_{nl}^{exact} по сравнению с обычной квазиклассикой, хотя и не дал нужной точности в силу того, что сам является модификацией квазиклассического подхода.

Литература

1. Сидоренко В.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 5. С. 59 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 5. P. 73).
2. Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990.
3. Желобенко Д.П., Штерн А.И. Представления групп Ли. М.: Наука, 1983.
4. Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия: Методы и приложения. Т. 1. М.: Эдиториал УРСС, 1998. С. 95–96.
5. Сидоренко В.И. Спектральная задача для системы двух частиц с магнитным диполь-дипольным взаимодействием. М.: Диалог-МГУ, 1999.

Поступила в редакцию
07.07.99