

УДК 530.145

СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ЯДЕРНО-КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

О. С. Павлова, Д. Багаран, А. Р. Френкин

(кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Методом интегральных преобразований, в основе которого лежит исследование лапласовских образов волновых функций, найден дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с ядерно-кулоновским притягивающим потенциалом. Задача сведена к приближенному решению бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. С помощью численных расчетов определен спектр уравнения Шрёдингера с потенциалом Юкавы для S -состояния.

Известно, что нет ни одного локального потенциала, кроме кулоновского и некоторых его модификаций, для которых радиальное уравнение Шрёдингера (УШ) с произвольным орбитальным квантовым числом l имело бы точное решение в замкнутой форме. Поэтому чрезвычайно важна разработка приближенных методов получения спектра УШ с потенциалами более сложного вида, чем кулоновский. В связи с тем что взаимодействие нерелятивистских ядерных частиц (и ряд других задач) часто может быть описано УШ с потенциалами, являющимися комбинацией короткодействующего притягивающего потенциала (обычно потенциала Юкавы) с дальнедействующим (обычно кулоновским), исследуем дискретный спектр УШ с такими потенциалами. При этом мы будем пользоваться примененным в работе [1] методом интегральных преобразований для определения дискретного спектра.

Рассмотрим радиальное уравнение Шрёдингера (УШ) с ядерно-кулоновским потенциалом, к которому добавлен центробежный потенциал A/r^2 ($\hbar = 1$, $2m = 1$):

$$V(r) = -\frac{V_0}{r} e^{-r/a} + \frac{A}{r^2} + \frac{Z}{r} \quad (V_0 > 0). \quad (1)$$

В этом случае УШ имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{B}{r^2}\Psi - \frac{Z}{r}\Psi + \frac{V_0}{r} e^{-r/a}\Psi + E\Psi = 0, \quad (2)$$

где $B = A + l(l+1)$ и орбитальное квантовое число $l = 0, 1, \dots$. При $V_0 > Z$ и $A > -(2l+1)^2/4$ (в этом случае нет падения на центр) УШ может иметь дискретный спектр энергии $E = -|E| < 0$.

Введем новую переменную $x = |E|^{1/2}r$, тогда УШ принимает вид

$$x \frac{d^2\Psi}{dx^2} - x\Psi - \frac{B}{x}\Psi - \gamma\Psi + \lambda e^{-x/b}\Psi = 0, \quad (3)$$

где использованы обозначения

$$b = \frac{V_0}{\lambda}a, \quad \gamma = \frac{\lambda}{V_0}Z, \quad \text{причем } E = -\left(\frac{V_0}{\lambda}\right)^2.$$

Квадратично-интегрируемые решения этого уравнения имеют следующее поведение в нуле и на бес-

конечности:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim x^\alpha \quad \text{при } x \rightarrow 0, \\ \Psi(x) &\sim e^{-x} \quad \text{при } x \rightarrow \infty, \\ \alpha &= \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 4B}\right). \end{aligned} \quad (4)$$

Следуя методу, использованному в работе [1], применим к УШ (3) обобщенное преобразование Лапласа вида

$$\langle \varphi \rangle(\omega) = \frac{\omega^{-(\alpha+\beta)}}{\Gamma(\alpha+\beta)} \int_0^\infty e^{-x/\omega} \varphi(x) x^{\beta-1} dx, \quad (5)$$

в котором параметр β будет определен в дальнейшем. Нормировочный множитель в преобразовании Лапласа для удобства выбран так, чтобы выполнялось условие $\langle x^\alpha \rangle = 1$.

Специально отметим, что волновая функция $\Psi(x)$ удовлетворяет условиям (4) только тогда, когда $\omega = 1$ — правильная точка ее лапласовского образа $\Phi(\omega) = \langle \Psi \rangle(\omega)$. Поэтому, подобно работам [1–3], спектр УШ может быть получен из требования регулярности функции $\Phi(\omega)$ в точке $\omega = 1$.

Для того чтобы при интегрировании по частям величин $\langle x\Psi'' \rangle$ и $\langle \Psi' \rangle$ внеинтегральные члены обрабатывались в нуль, на параметр β следует наложить условие $\beta > 1 - \alpha$. Тогда из уравнения (3) следует

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\omega^2} - 1\right) \langle x\Psi \rangle - \frac{2\beta}{\omega} \langle \Psi \rangle + [\beta(\beta-1) - B] \left\langle \frac{1}{x} \Psi \right\rangle - \\ - \gamma \langle \Psi \rangle + \lambda \langle e^{-x/b} \Psi \rangle = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Если выбрать произвольный параметр β в виде $\beta = \alpha = (1 + \sqrt{1 + 4B})/2$, то уравнение (6) существенно упрощается и принимает вид

$$\left(\frac{1}{\omega^2} - 1\right) \langle x\Psi \rangle - \frac{2\alpha}{\omega} \langle \Psi \rangle - \gamma \langle \Psi \rangle + \lambda \langle e^{-x/b} \Psi \rangle = 0. \quad (7)$$

Лапласовские образы функций (5) здесь определяются формулой

$$\langle \varphi \rangle(\omega) = \frac{\omega^{-2\alpha}}{\Gamma(2\alpha)} \int_0^\infty e^{-x/\omega} \varphi(x) x^{\alpha-1} dx.$$

Приняв за основную функцию лапласовский образ волновой функции $\Phi(\omega)$, выразим через нее все остальные функции в уравнении (7):

$$\langle x\Psi \rangle = \omega^2 \frac{d\Phi(\omega)}{d\omega} + 2\alpha\omega\Phi(\omega),$$

$$\langle e^{-x/b}\Psi \rangle = \left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^{2\alpha} \Phi(\Omega),$$

где введено обозначение $\Omega = b\omega/(b + \omega)$. Теперь УШ в переменных $\Phi(\omega)$ принимает вид

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi(\omega)}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi(\omega) - \gamma\Phi(\omega) + \lambda(\Omega/\omega)^{2\alpha}\Phi(\Omega) = 0. \quad (8)$$

Перейдем в уравнении (8) к новой переменной $y = (1 - \omega)/(1 + \omega)$. Тогда спектр задачи будет определяться из условия регулярности функции $\tilde{\Phi}(y) \equiv \Phi(\omega)$ в точке $y = 0$ [1].

При $\lambda \rightarrow 0$ основное уравнение (8), принимающее вид ($\Phi(\omega) \rightarrow \Phi_0(\omega)$):

$$(1 - \omega^2) \frac{d\Phi_0(\omega)}{d\omega} - 2\alpha\omega\Phi_0(\omega) = 0,$$

имеет решение (при условии $\Phi_0(0) = 1$)

$$\begin{aligned} \Phi_0(\omega) \equiv \tilde{\Phi}_0(y) &= (1 + \omega)^{-2\alpha} \left(\frac{1 - \omega}{1 + \omega}\right)^{-\alpha} = \\ &= 2^{-2\alpha} (1 + y)^{2\alpha} y^{-\alpha}. \end{aligned}$$

Множитель $2^{-2\alpha}(1 + y)^{2\alpha}$ в функции $\tilde{\Phi}_0(y)$ регулярен в точке $y = 0$, поэтому удобно и при $\lambda \neq 0$ представлять $\tilde{\Phi}(y)$ в виде

$$\tilde{\Phi}(y) = 2^{-2\alpha} (1 + y)^{2\alpha} D(y), \quad (9)$$

причем функция $D(y)$, как и функция $\tilde{\Phi}(y)$, для квадратично интегрируемых решений УШ может быть разложена в ряд Тейлора: $D(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n$. Замена переменной в (8) и подстановка представления (9) приводит к уравнению

$$\begin{aligned} y \frac{dD(y)}{dy} + \left(\alpha + \frac{\gamma}{2}\right) D(y) &= \quad (10) \\ &= \frac{\lambda}{2} \left(\frac{b}{b+1}\right)^{2\alpha} \left(1 + \frac{b-1}{b+1}y\right)^{-2\alpha} (1 + Y)^{2\alpha} D(Y), \end{aligned}$$

где

$$Y = \frac{1 - \Omega}{1 + \Omega} = \frac{1 + (2b - 1)y}{1 + 2b - y}.$$

Заметим, что при $a \rightarrow \infty$ величина $b \rightarrow \infty$ и уравнение (10) принимает вид ($Y \rightarrow y$, $D(y) \rightarrow D_{\infty}(y)$)

$$y \frac{dD_{\infty}}{dy} + \left[\alpha + \frac{1}{2}(\gamma - \lambda)\right] D_{\infty} = 0.$$

Его решение $D_{\infty}(y) \sim y^{(\gamma - \lambda)/2 - \alpha}$ регулярно в точке $y = 0$ при условии $(\gamma - \lambda)/2 - \alpha = n$, $n = 0, 1, \dots$,

откуда следует, что $\lambda_n = V_0(n + \alpha)/(V_0 - Z)$. То есть спектр УШ дается формулой $E_n = -(V_0 - Z)^2/[4(n + \alpha)^2]$ и является чисто кулоновским, соответствующим спектру потенциала $V(r) = (Z - V_0)/r$.

Выражая в УШ переменную Y через y и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях y^n в левой и правой частях уравнения (10), получаем бесконечную систему линейных алгебраических уравнений для величин a_n ($n = 0, 1, \dots$):

$$\left(n + \alpha + \frac{Z}{2V_0}\lambda\right) a_n = 2^{2\alpha - 1} \lambda \left(\frac{b}{2b + 1}\right)^{2\alpha} S(n),$$

где

$$\begin{aligned} S(n) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k k!}{\Gamma(k + 2\alpha)} \times \\ &\times \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(2b+1)^{-(k+m)} (2b-1)^{n-m} \Gamma(k+m+2\alpha)}{m!(n-m)!(k+m-n)!}. \end{aligned}$$

Эту систему можно записать в виде ($\mu^{-1} = 2V_0 a$, $b^{-1} = 2\mu\lambda$)

$$\sum_{k=0}^{\infty} (B_{nk} - \delta_{nk}) a_k = 0,$$

где

$$\begin{aligned} B_{nk} &= \frac{\lambda}{2} \frac{k!(1 + \mu\lambda)^{-(n+k+2\alpha)}}{(n + \alpha + Z\lambda/2V_0)\Gamma(k + 2\alpha)} \times \\ &\times \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(\mu\lambda)^{(k-n+2m)} (1 - \mu^2\lambda^2)^{n-m} \Gamma(k+m+2\alpha)}{m!(n-m)!(k+m-n)!}. \end{aligned}$$

Отметим, что кулоновский случай соответствует переходу $a \rightarrow \infty$ (при фиксированном значении V_0), т. е. $\mu \rightarrow 0$.

Спектр УШ определяется из уравнения

$$\det ||B_{nk} - \delta_{nk}|| = 0. \quad (11)$$

Отсюда находятся собственные значения λ_n (т. е. уровни энергии E_n). Для определения спектра бесконечная матрица $||B_{nk} - \delta_{nk}||$ заменяется конечной квадратной матрицей ранга N ($N = 1, 2, \dots$). С ростом ранга матрицы N точность определения спектра возрастает. Корни уравнения (11) находятся с помощью расчетов на ЭВМ.

Приведем подробные вычисления спектра УШ для S -состояния ($l = 0$) с чисто ядерным притягивающим потенциалом Юкавы:

$$V(r) = -\frac{V_0}{r} e^{-r/a}. \quad (12)$$

В этом случае матрица B_{nk} имеет довольно простой вид ($Z = 0, l = 0, \alpha = 1$):

$$B_{nk} = \frac{\lambda (1 + \mu\lambda)^{-(n+k+2)}}{2 (n+1)(k+1)} \times \sum_{m=\max\{n-k, 0\}}^n \frac{(\mu\lambda)^{(k-n+2m)} (1 - \mu^2\lambda^2)^{n-m} (k+m+1)!}{m!(n-m)!(k+m-n)!}.$$

Вычисления на ЭВМ показывают, что с увеличением ранга N конечной матрицы $\|B_{nk} - \delta_{nk}\|$ пороговое значение параметра $\mu_0(N)$, которое определяет появление дискретного спектра УШ (1), возрастает и приближается к известному значению $\mu_0 \approx 0,29765$ [4]. При этом уравнение (11) для фиксированного значения N , когда $\mu \leq \mu_0(N)$, может иметь не более N физических корней $\lambda_n(N)$, которые последовательно появляются при уменьшении параметра μ , причем физические корни $\lambda_n(N)$ возникают в паре с нефизическими корнями $\tilde{\lambda}_n(N)$. При появлении нового состояния оба корня характеристического уравнения (11), $\lambda_n(N)$ и $\tilde{\lambda}_n(N)$ (n фиксировано), совпадают. С уменьшением параметра μ эти пары решений расходятся: величины $\lambda_n(N)$ при любом N стремятся к известным значениям кулоновского поля $\lambda_n = 2(n+1)$, а величины $\tilde{\lambda}_n(N)$ возрастают и стремятся к бесконечности, что соответствует переходу $\tilde{E}_n = -(V_0/\tilde{\lambda}_n)^2 \rightarrow 0$ при $\mu \rightarrow 0$. Именно по этой причине решения второго типа мы называем нефизическими. Мы принимаем, что физические значения уровней энергии E_n (и соответственно величин $\lambda_n(N)$) должны непрерывно зависеть от радиуса действия ядерных сил a , т.е. при заданном значении V_0 от параметра μ . Поскольку при $a \rightarrow \infty$ потенциал Юкавы (12) переходит в притягивающий кулоновский потенциал $V(r) = -V_0/r$, за физические решения мы принимаем решения первого типа, $\lambda_n(N)$, а решения второго типа $\tilde{\lambda}_n(N)$ отбрасываем. Подобная ситуация довольно часто встречается в квантовой физике — это, например, появление «ложных полюсов» при исследовании аналитических свойств S -матрицы [5].

Зависимости значений физических $\lambda_n(N)$ и нефизических $\tilde{\lambda}_n(N)$ корней уравнения (11) от параметра μ для $N = 1, 2, 3, 4$ приведены соответственно на рис. 1–4. Для большей наглядности представлены графики зависимости от параметра μ величин $-\lambda_n^{-1}(N)$ и $-\tilde{\lambda}_n^{-1}(N)$, причем физическим решениям соответствуют нижние ветви графиков, нефизическим — верхние.

Из приведенных расчетов следует, что при больших значениях радиуса действия ядерных сил a («кулоноподобная задача», $\mu \ll 1$) процедура нахождения спектра приводит к лучшим результатам с ростом ранга N конечной матрицы. Это видно из таблицы, где приведены значения физических корней $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ характеристического уравнения (11) для $N = 1, 2, 3, 4$ и некоторых значений параметра μ . Например, при $\mu = 0,0025$ значение $\lambda_0 = 2,020151$

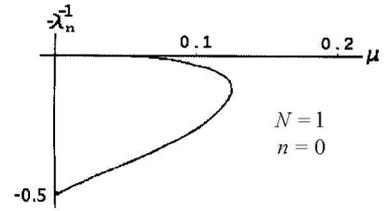


Рис. 1

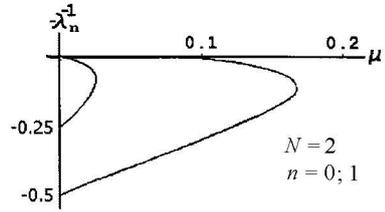


Рис. 2

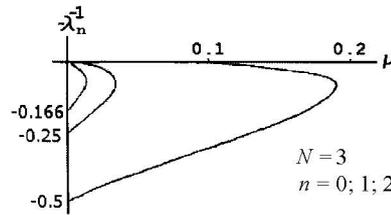


Рис. 3

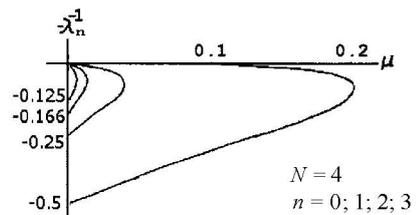


Рис. 4

Зависимость величины физических корней λ_n характеристического уравнения от параметра $\mu = \frac{1}{2aV_0}$ и ранга матрицы N (уровни энергии $E_n = -\left(\frac{V_0}{\lambda_n}\right)^2$)

μ	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	$N = 4$
0,0025	2,02053	4,170309 2,020151	6,643084 4,165000 2,020151	9,9015 6,581153 4,164980 2,020151
0,005	2,041028	4,364577 2,040612	7,610984 4,341010 2,040612	7,280740 4,340690 2,040612
0,01	2,084238	4,853978 2,082503	4,735213 2,082498	4,729675 2,082498
0,02	2,178038	6,831422 2,170478	5,825856 2,170407	5,720048 2,170406
0,04	2,402949	2,366458	2,365287	2,365247

физического корня характеристического уравнения (11), определяющее энергию основного состояния $E_0 = -(V_0/\lambda_0)^2$, вычисляется с точностью до 6-го знака после запятой уже для $N = 2$. При $N = 3$

и $\mu = 0,0025$ значение корня $\lambda_1 = 4,1650$, определяющее энергию первого возбужденного состояния $E_1 = -(V_0/\lambda_1)^2$, имеет точность 4 знака после запятой. Естественно, что при заданном N нижние уровни энергии имеют большую точность, так как они вычисляются в более высоком приближении. Например, рангу матрицы $N = 4$ соответствует четвертое приближение для наименьшего физического корня λ_0 характеристического уравнения (11), тогда как корень λ_3 при этом может быть вычислен (при малых значениях μ) только в первом приближении.

Отметим, что в нашем подходе определение энергетического спектра УШ (1) значительно проще и точнее, чем при использовании стандартной теории возмущений [6], в которой для получения подобной точности требуется проведение значительно более сложных вычислений.

Подобным образом могут быть определены и уровни энергии радиального УШ с произвольными значениями $l \neq 0$ и $Z \neq 0$.

В заключение отметим, что рассмотренный подход может быть использован и для других потенциалов, например для комбинации короткодействующего притягивающего ядерного потенциала $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$, $V_0 > 0$, с дальнедействующими потенциалами: кулоновским и вида $1/r^2$. Тогда эффективный потенциал задачи имеет вид

$$V(r) = -V_0 e^{-r/a} + \frac{Z}{r} + \frac{A}{r^2}.$$

Естественно, предполагается, что величина A , как и в случае потенциала (1), такова, что нет падения на центр, т. е. $A > -(2l+1)^2/4$ при заданном значении орбитального момента l .

Авторы глубоко благодарны А. В. Борисову, В. Ч. Жуковскому и Ю. М. Лоскутову за плодотворное обсуждение результатов работы.

Литература

1. Павлова О.С., Френкин А.Р. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. №1. С. 58 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No 1. P. 69).
2. Вишвецев А.С., Норин Н.В., Сорокин В.Н. // ТМФ. 1996. 109, №1. С. 107.
3. Вишвецев А.С., Вишвецев В.А., Татаринцев А.В., Френкин А.Р. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. №5. С. 61 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 5. P. 76).
4. Блатт Дж., Вайскопф В. Теоретическая ядерная физика. М.: ИЛ, 1954.
5. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989.

Поступила в редакцию
19.01.00

УДК 519.632.4:517.968.23:537.874.37

МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ВОЛНОВОДНОЙ БИОИНФОРМАТИКИ

В. П. Моденов, И. К. Троина

(кафедра математики)

Методом волноводного электромагнитного зондирования исследовано влияние электродинамических и геометрических характеристик биообъекта на распределение рассеянного электромагнитного поля. Рассмотрена дифракция волны H_{10} на диэлектрической неоднородности, моделирующей биологический объект. Соответствующая краевая задача для уравнения Гельмгольца решена методом интегральных уравнений с аналитической регуляризацией ядра.

Введение

Проблема взаимодействия электромагнитных полей с живыми организмами возникла в связи с широким техническим использованием высокочастотных электромагнитных излучений. Результаты большого числа исследований в этом направлении широко применяются в биоинформатике [1–4] и практической медицине для диагностики и лечения различных заболеваний. Одним из перспективных и интенсивно развивающихся методов диагностики является дистанционное определение строения биологического объекта методом СВЧ-томографии [2]. Особый интерес представляет проблема моделирования искусственных объектов [3], дифракционные характеристики которых совпадали бы с характеристиками реаль-

ных живых объектов. Из практических потребностей возникают два основных типа обратных задач: распознавание и синтез [4], решение которых связано с информацией, следующей из решения прямой задачи.

Прямая же задача заключается в отыскании дифракционной картины поля на известном объекте. Математически это означает необходимость решения краевых задач для системы уравнений Максвелла или для уравнения Гельмгольца.

Краевая задача для уравнения Гельмгольца может быть сведена [5, 6] к решению интегрального уравнения Фредгольма второго рода в объеме, содержащем диэлектрическую неоднородность. Преимущество этого метода заключается главным образом в том, что он дает возможность получить картину