
Компьютерные и информационные науки

УДК 519.624.3

Исследование решений квазипотенциального уравнения при комплексных значениях энергии с кусочно-постоянными потенциалами

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

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

Решения уравнения Шрёдингера при комплексных значениях энергии E описывают квазистационарные состояния. Энергетический спектр таких квазистационарных состояний является квазидискретным и состоит из ряда размытых уровней E , ширина которых Γ определяет времена жизни соответствующих состояний. Введение квазистационарных состояний имеет смысл только в том случае, если ширина соответствующих квазидискретных уровней оказывается малой по сравнению с расстояниями между уровнями. В работе проведено исследование решений квазистационарных состояний для квазипотенциального уравнения с кусочно-постоянными потенциалами при различных значениях параметра ε , входящего в уравнение и параметров потенциала. Проведён сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения при различных значениях ε с решениями уравнения Шрёдингера. Установлено, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ решения квазипотенциального уравнения стремятся к решениям уравнения Шрёдингера. С увеличением параметра ε время жизни квазиуровней для квазипотенциального уравнения увеличивается по сравнению с результатами, полученными для уравнения Шрёдингера, кроме уровня, который близко подходит к краю барьера. Для сравнения приведены волновые функции для уравнения Шрёдингера и квазипотенциального уравнения при фиксированных значениях параметров потенциала.

Ключевые слова: квазистационарные состояния, квазипотенциальное уравнение, оператор сдвига, кусочно-постоянные потенциалы, время жизни, ширина уровней.

1. Введение

Решения уравнения Шрёдингера при комплексных значениях энергии $E = E_1 + iE_2$, описывают различные физические процессы [1]. Обычно, это сводится к исследованию аналитических свойств матрицы рассеяния на комплексной плоскости E . Полюсам матрицы рассеяния в нижней полуплоскости E не лежащим на мнимой оси, соответствуют квазистационарные состояния, описывающие распад или же захват в системе. При комплексных значениях энергии в силу того, что плотность вероятности убывает со временем по экспоненциальному закону, сохранение вероятности может быть обеспечено и при наличии только расходящейся волны в асимптотике решения. Плотность вероятности для распадающегося состояния, определяющаяся квадратом модуля волновой функции, затухает по экспоненциальному закону $|\Psi(t)|^2 \sim \exp(-\Gamma t/\hbar)$, где \hbar – постоянная Планка, $\Gamma = 2E_2$, $E = E_1 - iE_2$, $E_1 \geq 0$, $E_2 \geq 0$. Вероятность распада в единицу времени равна $w = \Gamma/\hbar$. Поэтому время жизни распадающегося квазистационарного состояния τ можно определить посредством равенства $\tau = \hbar/\Gamma$. Заметим, что система, распадающаяся со временем, вообще говоря, не обладает дискретным спектром энергий. Вылетающая при распаде частица уходит на бесконечность, поэтому движение системы инфинитно, и, следовательно, энергетический спектр системы непрерывен. Однако если в силу каких-либо причин вероятность распада системы мала, то можно ввести понятие о квазистационарном состоянии. В таком

Статья поступила в редакцию 25 декабря 2014 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ, № 13-01-00595-а, 14-01-00628-а.

квазистационарном состоянии частица в течение длительного времени движется внутри системы, покидая её лишь по истечении значительного промежутка времени $\tau = 1/w$.

Энергетический спектр таких квазистационарных состояний является квазидискретным и состоит из ряда размытых уровней E , ширина которых Γ определяет времена жизни соответствующих состояний $\Gamma = \hbar/\tau$. Очевидно, введение квазистационарных состояний имеет смысл только в том случае, если ширина соответствующих квазидискретных уровней оказывается малой по сравнению с расстояниями между уровнями $\Gamma \ll D$, где D — среднее расстояние между квазидискретными уровнями.

В предыдущей нашей работе [2] исследовались краевые задачи для квазипотенциального уравнения и проведён сравнительный анализ полученных решений с решениями аналогичных задач для уравнения Шрёдингера. Подобные исследования были важны для выявления релятивистских эффектов. В данной работе мы исследуем квазистационарные состояния для квазипотенциального уравнения [3] и уравнения Шрёдингера с различными кусочно-постоянными потенциалами и проводим сравнительный анализ полученных решений. Исследуем решения квазистационарных состояний для следующего уравнения:

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

где

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

ε — безразмерный параметр, $V(r)$ — потенциал взаимодействия. Если оператор $ch \left(i\varepsilon \frac{d}{dr} \right)$ разложить в ряд, то уравнение (1) можно свести к дифференциальному уравнению бесконечного порядка. При $\varepsilon \rightarrow 0$, $E_\varepsilon \rightarrow q^2 = E$, $H_\varepsilon \rightarrow -\frac{d^2}{dr^2}$, уравнение (1) переходит в нерелятивистское уравнение Шрёдингера

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

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

Как и в предыдущей нашей работе [2], исследование решений квазистационарных состояний для уравнения (1) проведено с использованием оператора сдвига

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

Проведён сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения (1) с решениями уравнения Шрёдингера (2) для прямоугольной потенциальной ямы, которая показана на рис. 1.

2. Постановка задачи

Для нахождения квазистационарных состояний уравнения (1) и (2) решаем со следующими граничными условиями:

$$\Psi(r)|_{r=0} = 0 \text{ и } \Psi(r)|_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(i\alpha r), \quad \alpha = \sqrt{E}.$$

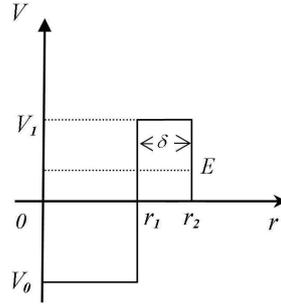


Рис. 1. Тип потенциала

С учётом этих граничных условий решения уравнений (1) и (2) для прямоугольной потенциальной ямы (рис. 1) ищем в виде

$$\begin{cases} \psi_1(r) = A_1 \sin(kr), & 0 \leq r \leq r_1, \\ \psi_2(r) = A_2 \exp(-\kappa r) + B_2 \exp(\kappa r), & r_1 \leq r \leq r_2, \\ \psi_3(r) = A_3 \exp(i\alpha r), & r_2 \leq r < \infty. \end{cases} \quad (3)$$

Подставляя решения (3) в уравнение (2), находим $\kappa = \sqrt{V_1 - E}$, $k = \sqrt{V_0 + E}$, где $E = E_1 - iE_2$.

Из условия непрерывности функции $\psi(r)$ и её первой производной в точках

$$\begin{aligned} r = r_1 : \quad & \psi_1(r)|_{r=r_1} = \psi_2(r)|_{r=r_1}, \quad \psi_1'(r)|_{r=r_1} = \psi_2'(r)|_{r=r_1} \\ & \text{и} \\ r = r_2 : \quad & \psi_2(r)|_{r=r_2} = \psi_3(r)|_{r=r_2}, \quad \psi_2'(r)|_{r=r_2} = \psi_3'(r)|_{r=r_2} \end{aligned} \quad (4)$$

получаем выражение для нахождения E_1, E_2 :

$$\frac{\kappa + k \operatorname{ctg}(kr_1)}{\kappa - k \operatorname{ctg}(kr_1)} - \frac{\kappa + i\alpha}{\kappa - i\alpha} \exp(-2\kappa\delta) = 0, \quad \delta = r_2 - r_1. \quad (5)$$

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

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arccch} \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} E \right], \quad \kappa = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arccos} \left[1 - \frac{\varepsilon^2}{2} (V_1 - E) \right], \quad k = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arccch} \left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2} (V_0 + E) \right].$$

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

$$\begin{aligned} \psi_1(r)|_{r=r_1} &= \psi_2(r)|_{r=r_1}, \quad L\psi_1(r)|_{r=r_1} = L\psi_2(r)|_{r=r_1}, \\ \psi_2(r)|_{r=r_2} &= \psi_3(r)|_{r=r_2}, \quad L\psi_2(r)|_{r=r_2} = L\psi_3(r)|_{r=r_2}, \end{aligned}$$

где

$$L = \frac{1}{\varepsilon} \left[\exp \left(\varepsilon \frac{d}{dr} \right) - 1 \right], \quad L_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{dr}.$$

Тогда для нахождения E_1, E_2 получаем выражение

$$\frac{\kappa C_5 - d_1 \operatorname{ctg}(kr_1)}{d_1 \operatorname{ctg}(kr_1) - \kappa C_6} - \frac{d_2 - \kappa C_5}{\kappa C_6 - d_2} \exp(-2\kappa\delta) = 0, \quad (6)$$

где $C_3 = \frac{1 - \cos(k\varepsilon)}{\varepsilon}$, $C_4 = \frac{\sin(k\varepsilon)}{k\varepsilon}$, $C_5 = \frac{\exp(-\kappa\varepsilon) - 1}{\kappa\varepsilon}$, $C_6 = \frac{\exp(\kappa\varepsilon) - 1}{\kappa\varepsilon}$, $C_7 = \frac{\exp(i\alpha\varepsilon) - 1}{i\alpha\varepsilon}$, $d_1 = -C_3 + kC_4$, $d_2 = i\alpha C_6$. При $\varepsilon \rightarrow 0$, $C_3 \rightarrow 0$, $C_4 \rightarrow 1$, $C_5 \rightarrow -1$, $C_6 \rightarrow 1$, $C_7 \rightarrow 1$. Тогда уравнение (6) переходит в уравнение (5). Это означает, что решения трансцендентного уравнения (6) стремятся к решениям трансцендентного уравнения (5).

3. Обсуждение полученных результатов

Путём решения трансцендентных уравнений (5) и (6) для различных V_1 ($V_1 = 60, 120$), а так же для различных значений ε ($\varepsilon_1 = 0.04, \varepsilon_2 = 0.08, \varepsilon_3 = 0.12$) проведены исследования решений исходных уравнений. В табл. 1, 2 приведены результаты решения трансцендентных уравнений (5) и (6).

Таблица 1
Действительная и мнимая часть энергии и сравнение времени жизни при $V_1 = 60$

	ε	E_1	E_2	τ_{shr}/τ_{kv}
Первый уровень	0,00	3,74549	$9,25308 \cdot 10^{-4}$	1,00000
	0,04	3,66039	$8,02707 \cdot 10^{-4}$	0,86750
	0,08	3,66851	$6,82959 \cdot 10^{-4}$	0,73808
	0,12	3,77528	$5,62976 \cdot 10^{-4}$	0,60841
Второй уровень	0,00	20,68063	$1,14243 \cdot 10^{-2}$	1,00000
	0,04	20,82059	$1,03331 \cdot 10^{-2}$	0,90448
	0,08	21,35872	$9,69425 \cdot 10^{-3}$	0,84856
	0,12	22,36821	$9,44131 \cdot 10^{-3}$	0,82642
Третий уровень	0,00	43,65851	0,10847	1,00000
	0,04	44,34871	0,11381	1,04919
	0,08	46,08685	0,13971	1,28797
	0,12	49,20498	0,21170	1,95155

Из таблиц видно, что условие $\Gamma \ll D$ практически выполняется. Поэтому E_1 можно интерпретировать как квазистационарное состояние. Из анализа результатов, приведённых в таблицах, следует, что значения квазиуровней E_1 для всех $V_1 = 60, 120$ в основном увеличиваются при увеличении параметра ε (кроме первого уровня для $V_1 = 120$).

Значения E_2 в основном уменьшаются для всех квазиуровней, кроме уровня, который близко подходит к краю барьера V_1 . В последней колонке приведены результаты сравнительного анализа времени жизни квазиуровней, полученных для уравнения Шрёдингера и квазипотенциального уравнения (вместо времени жизни τ мы приводим безразмерную величину τ_{shr}/τ_{kv} , где τ_{kv} и τ_{shr} — времена жизни квазистационарных состояний для квазипотенциального уравнения и уравнения Шрёдингера соответственно). С увеличением параметра ε время жизни квазиуровней для квазипотенциального уравнения увеличивается по сравнению с результатами, полученными для уравнения Шрёдингера, кроме уровня, который близко подходит к краю барьера.

Таблица 2

**Действительная и мнимая часть энергии и сравнение времени жизни
при $V_1 = 120$**

	ε	E_1	E_2	τ_{shr}/τ_{kv}
Первый уровень	0,00	4,32313	$2,26512 \cdot 10^{-5}$	1,00000
	0,04	4,17350	$1,83303 \cdot 10^{-5}$	0,80924
	0,08	4,12364	$1,28481 \cdot 10^{-5}$	0,56721
	0,12	4,17970	$7,03513 \cdot 10^{-6}$	0,31058
Второй уровень	0,00	22,13438	$2,29381 \cdot 10^{-4}$	1,00000
	0,04	22,10051	$1,87299 \cdot 10^{-4}$	0,81654
	0,08	22,51127	$1,42048 \cdot 10^{-4}$	0,61926
	0,12	23,42758	$9,44799 \cdot 10^{-5}$	0,41189
Третий уровень	0,00	46,85134	$1,66951 \cdot 10^{-3}$	1,00000
	0,04	47,35411	$1,45260 \cdot 10^{-3}$	0,87007
	0,08	49,15959	$1,32943 \cdot 10^{-3}$	0,79630
	0,12	52,64950	$1,26604 \cdot 10^{-3}$	0,75833
Четвёртый уровень	0,00	78,07376	$1,49632 \cdot 10^{-2}$	1,00000
	0,04	79,64301	$1,55545 \cdot 10^{-2}$	1,03951
	0,08	84,18450	$2,13101 \cdot 10^{-2}$	1,42416
	0,12	93,29735	$4,32784 \cdot 10^{-2}$	2,89231

Для иллюстрации на рис. 2 приведены решения уравнения Шрёдингера (с пунктирами) и квазипотенциального уравнения (с сплошными линиями) при значениях $\delta = 0.5$, $V_0 = 10$, $V_1 = 120$.

4. Заключение

Из сравнительного анализа можно сделать следующие выводы:

- во всех случаях при увеличении ε действительные части квазистационарных состояний для квазипотенциального уравнения принимают большие значения по сравнению с данными, полученными для уравнения Шрёдингера;
- с увеличением параметра ε время жизни квазиуровней для квазипотенциального уравнения увеличивается по сравнению с результатами, полученными для уравнения Шрёдингера, кроме уровня, который близко подходит к краю барьера.

Литература

1. Ситенко А. Г. Лекции по теории рассеяния. — Киев, 1975. — С. 256.
2. Исследование решений краевых задач для квазипотенциального уравнения с использованием оператора сдвига / И. В. Амирханов, Д. З. Музафаров, Н. Р. Саркар и др. // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2011. — № 4. — С. 74–82.
3. Кадышевский В. Г., Мир-Касимов Р. М., Скачков Н. Б. Трёхмерная формулировка релятивистской проблемы двух тел // ЭЧАЯ. — 1971. — Т. 2, № 3. — С. 637–690.

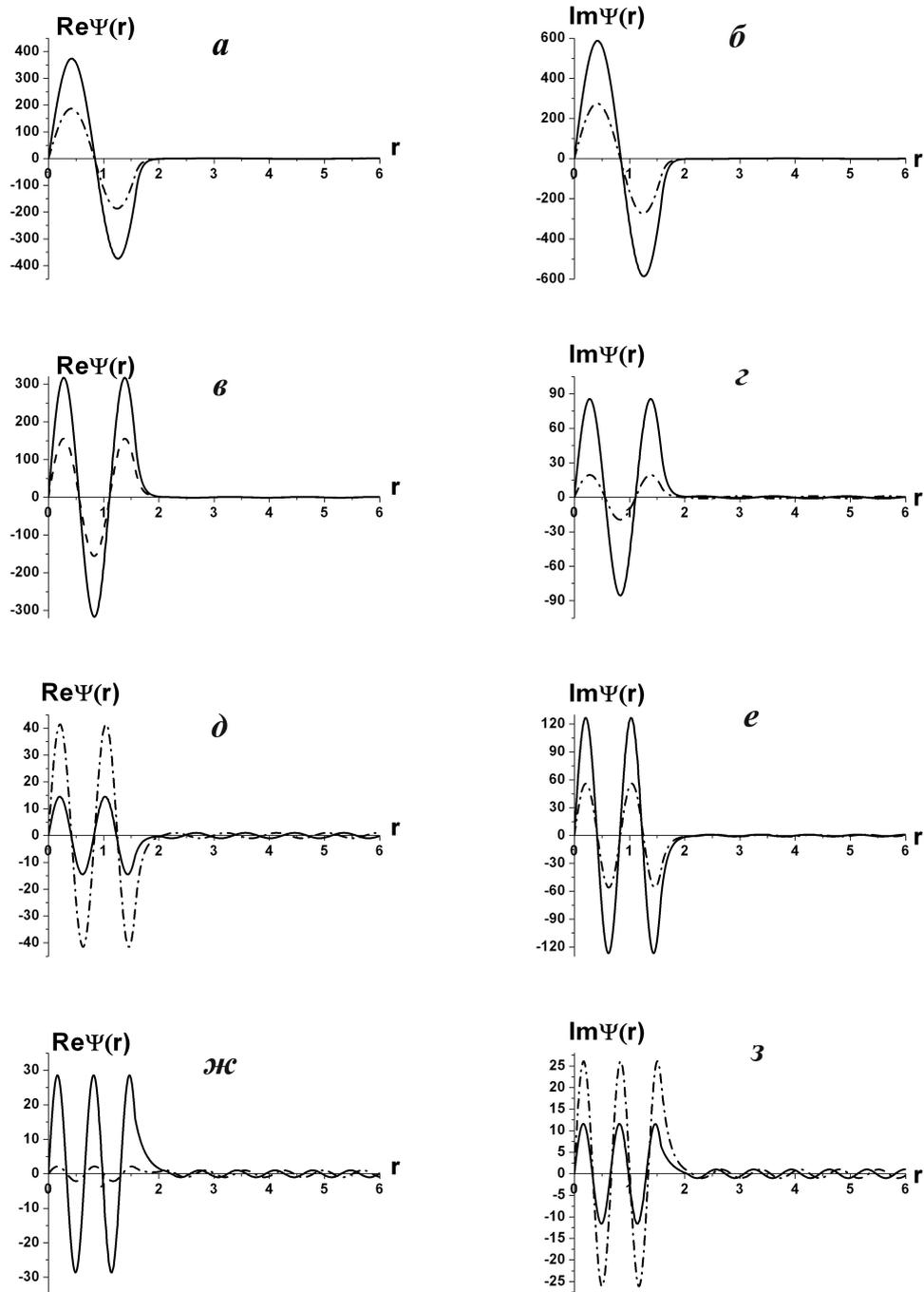


Рис. 2. Решения уравнения Шрёдингера (с пунктирами) и квазипотенциального уравнения (с сплошными линиями) при значениях $\delta = 0.5$, $V_0 = 10$, $V_1 = 120$; а, б — для первого, в, г — для второго, д, е — для третьего и ж, з — для четвёртого уровней

UDC 519.624.3

Investigation of Solutions of a Quasipotential Equation for Complex Values of Energy with Piecewise Constant Potentials**I. V. Amirkhanov, N. R. Sarker, I. S. Sarkhadov,
Z. K. Tukhliev, Z. A. Sharipov***Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

Solutions of the Schrödinger equation for complex values of the energy describe the quasistationary state. The energy spectrum of quasistationary states is quasidiscrete and consists of a series of broadened levels, width of which determines the lifetimes of the respective states. The introduction of quasistationary states only makes sense if the width of the respective quasidiscrete levels is small compared with the distances between levels. An investigation of the solutions of quasistationary states is carried out for the quasipotential equation with piecewise-constant potentials at various values of the parameter of the equation ε , included in the equation and the potential parameters. A comparative analysis of the solutions of the quasipotential equation for the different values of ε with the solutions of the Schrödinger equation is performed. It was found that at $\varepsilon \rightarrow 0$ the solutions of quasipotential equation tend to the solutions of the Schrödinger equation. With the increasing of the parameter ε the lifetime of quasilevels for the quasipotential equation increases as compared with the results obtained for the Schrödinger equation except the level that is close to the edge of the barrier. For comparison, the wave functions for the Schrödinger equation and the quasipotential equation for fixed values of the potential parameters are shown.

Key words and phrases: quasistationary states, the quasipotential equation, the shift operator, piecewise constant potentials, lifetime, potential width.

References

1. A. G. Sitenko, Lectures on the Theory of Scattering, Kiev, 1975, in Russian.
2. I. V. Amirkhanov, D. Z. Muzafarov, N. R. Sarker, et al., Investigation of Solutions of Boundary Problems for the Quasipotential Equation Using the Shift Operator, Bulletin of RPFU. Series "Mathematics. Information Science. Physics" (4) (2011) 74–82, in Russian.
3. V. G. Kadyshevsky, R. M. Mir-Kasimov, N. B. Skachkov, Three-Dimensional Formulation of the Relativistic Two-Body Problem, PEPAN 2 (3) (1971) 637–690, in Russian.