

Аналитическое и численное исследования решений краевых задач для квазипотенциального уравнения

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

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

В работе проведено исследование решений краевых задач для квазипотенциального уравнения с кусочно-постоянными потенциалами при различных значениях параметров задачи. Проведён сравнительный анализ решений квазипотенциального уравнения с решениями уравнения Шрёдингера.

Ключевые слова: квазипотенциальное уравнение, краевая задача, оператор сдвига, символьные вычисления, кусочно-постоянные потенциалы.

1. Введение

Учёт релятивистских эффектов является одной из важнейших проблем в спектроскопии кваркониев, т.е. мезонов, рассматриваемых как связанные состояния кварка и антикварка (простейшие двухчастичные системы). Изучение этих эффектов позволяет установить границы применимости нерелятивистской потенциальной модели и вычислить релятивистские поправки. В этом случае необходимо привлекать для изучения спектроскопии мезонов релятивистские уравнения, например, квазипотенциальные уравнения. Поэтому в данной работе мы исследуем краевые задачи для квазипотенциального уравнения [1] и уравнения Шрёдингера с различными потенциалами и проводим сравнительный анализ полученных решений для выявления релятивистских эффектов.

Проведём исследование решений краевых задач 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 Шрёдингера [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 краевой задачи $\{\Psi_n, E_n\}_{qus}$ для уравнения (1), которые при $\varepsilon \rightarrow 0$ стремятся к решениям аналогичной краевой задачи $\{\Psi_n, E_n\}_{Schr}$ для уравнения Шрёдингера (2). Тогда отличие этих решений при $\varepsilon \neq 0$ можно интерпретировать как релятивистский эффект.

В предыдущих наших работах [3–5] исследовались краевые задачи для квазипотенциального уравнения (1) различными методами. В данной работе исследуем краевые задачи для уравнения (1) 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) с дискретным спектром в потенциальных ямах двух типов (см. рис. 1), а также в бесконечно глубокой потенциальной яме.

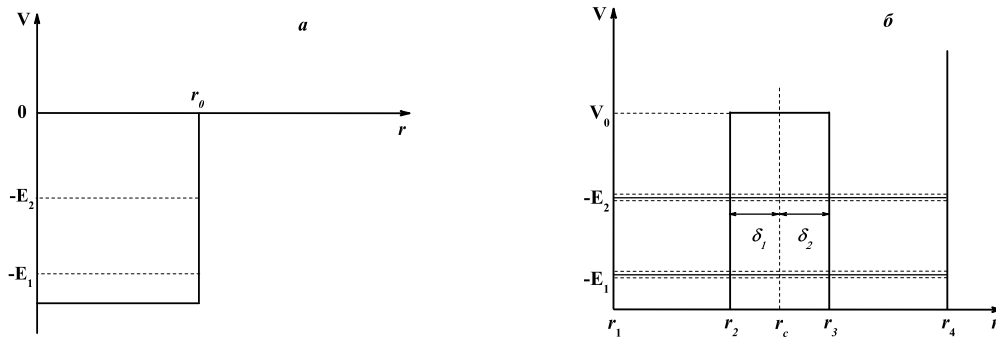


Рис. 1. Вид потенциалов

Выбирая параметры δ_1 и δ_2 различным образом, меняем ширину барьера ($(\delta_1 + \delta_2)$ — определяет ширину барьера) (рис. 1, б). Далее при $\delta_1 = \delta_2$ мы назовём потенциал симметричным, а при $\delta_1 \neq \delta_2$ — несимметричным.

Важной модельной системой является симметричная прямоугольная двойная потенциальная яма. Такая система применяется для моделирования свойств объектов, имеющих две устойчивые конфигурации (два минимума потенциальной энергии), например, молекулы аммиака NH_3 и т.д.

Основной особенностью симметричных двойных потенциальных ям является наличие в нижней части их спектра дублетных энергетических уровней, причём чем меньше энергетическая щель между уровнями в дублетах, тем больше высота и ширина барьера, разделяющего ямы.

Проведём исследование решений краевых задач для уравнения (1) при различных значениях параметра ε .

2. Постановка задачи

Сначала получим необходимые формулы для проведения сравнительного анализа решений краевых задач для уравнения Шрёдингера (2) и квазипотенциального уравнения (1). Затем приведём численные результаты.

а. Решения уравнений (1) и (2) в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокой стенкой, т.е.

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{если } r < r_0, \\ \infty, & \text{если } r > r_0. \end{cases}$$

Далее везде $r_0 = \pi$.

Решения должны удовлетворять граничным условиям $\psi(0) = 0$, $\psi(\pi) = 0$. Внутри ямы решение ищем в виде

$$\psi(r) = A \sin(\alpha r), \quad 0 \leq r \leq \pi. \quad (3)$$

При любом значении α решение (3) удовлетворяет уравнению Шрёдингера (2), т.е. $q^2 = \alpha^2$, причём $\psi(0) = 0$. Из условия $\psi(\pi) = 0$ находим ограничение на параметр α , т.е. $\alpha = n$. Тогда спектр энергии будет $q^2 = n^2$.

Подставляя решение (3) в квазипотенциальное уравнение (1), получаем выражение

$$E_\alpha = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(\alpha\varepsilon) - 1),$$

и из условия $\psi(\pi) = 0$ находим

$$E_n = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(n\varepsilon) - 1).$$

б. Решения уравнений (1) и (2) в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (рис. 1, а). Далее рассматриваем только связанные состояния, т.е. дискретный спектр. Тогда $q^2 = -E$, где $E > 0$, $0 < E < V_0$ и V_0 — глубина ямы.

Решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A \sin(\alpha r), & 0 \leq r \leq \pi, \\ \psi_2(r) &= B \exp(-\beta r), & \pi \leq r < \infty. \end{aligned} \quad (4)$$

Решения (4) удовлетворяют граничным условиям $\psi_1(0) = 0$ и $\psi_2(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$. Подставляя (4) в уравнение (2), получаем $\alpha = \sqrt{V_0 - E}$, $\beta = \sqrt{E}$.

Из условий непрерывности функции и первой производной функции

$$\psi_1(r)|_{r=\pi} = \psi_2(r)|_{r=\pi}, \quad \psi_1'(r)|_{r=\pi} = \psi_2'(r)|_{r=\pi}. \quad (5)$$

получаем трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений E :

$$\alpha \cos(\alpha\pi) + \beta \sin(\alpha\pi) = 0. \quad (6)$$

Подставляя решения (4) в уравнение (1), находим

$$V_0 - E = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(\alpha\varepsilon) - 1), \quad 0 \leq r \leq \pi, \quad (7)$$

$$E = \frac{2}{\varepsilon^2}(1 - \cos(\beta\varepsilon)), \quad \pi \leq r < \infty. \quad (8)$$

Условие (7) выполняется для любого ε . Из условия (8) получаем ограничение на параметр ε :

$$0 \leq \varepsilon \leq \frac{2}{\sqrt{E}}.$$

Для уравнения (1) условия сшивания (5) модифицируем следующим образом:

$$\psi_1(r)|_{r=\pi} = \psi_2(r)|_{r=\pi}, \quad L\psi_1(r)|_{r=\pi} = L\psi_2(r)|_{r=\pi}, \quad (9)$$

где

$$L = \frac{1}{\varepsilon} \left(e^{\varepsilon \frac{d}{dr}} - 1 \right), \quad L \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{dr}. \quad (10)$$

Тогда трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений E принимает вид

$$C_3 = \sin(\alpha\pi) + C_4\alpha \cos(\alpha\pi) - C_5\beta \sin(\alpha\pi) = 0, \quad (11)$$

где

$$C_3 = \frac{\cos(\alpha\varepsilon) - 1}{\varepsilon}, \quad C_4 = \frac{\sin(\alpha\varepsilon)}{\alpha\varepsilon}, \quad C_5 = \frac{1}{\beta\varepsilon}(\exp(-\beta\varepsilon) - 1),$$

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{arcch}\left(\frac{2}{\varepsilon^2}(V_0 - E) - 1\right), \quad \beta = \frac{1}{\varepsilon} \arccos\left(\frac{2}{\varepsilon^2}E - 1\right).$$

Причём при $\varepsilon \rightarrow 0$, $C_3 \rightarrow 0$, $C_4 \rightarrow 1$ и $C_5 \rightarrow -1$. Следовательно, трансцендентное уравнение (11) переходит в уравнение (6). Это означает, что решения (собственные значения и собственные функции) квазипотенциального уравнения стремятся к решениям уравнения Шрёдингера.

в. Решения уравнений (1) и (2) в прямоугольной потенциальной яме с барьером (рис. 1, б). Далее $q^2 = E$ и отдельно рассматриваем случаи, когда $E < V_0$ и $E > V_0$.

При $E < V_0$ решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(k(r - r_1)), & r_1 \leq r \leq r_2, \\ \psi_2(r) &= A_2 \exp(-\kappa(r - r_c)) + B_2 \exp(\kappa(r - r_c)), & r_2 \leq r \leq r_3, \\ \psi_3(r) &= A_3 \sin(k(r - r_4)), & r_3 \leq r \leq r_4. \end{aligned} \quad (12)$$

При численном решении параметры задачи выбираем в следующем образом:

$$r_1 = 0, \quad r_4 = \pi, \quad r_c = \frac{\pi}{2}, \quad r_2 = r_c - \delta_1, \quad r_3 = r_c + \delta_2.$$

Решения (12) удовлетворяют граничным условиям $\psi_1(0) = 0$ и $\psi_3(\pi) = 0$. Подставляя (12) в (2), получаем $k = \sqrt{E}$, $\kappa = \sqrt{V_0 - E}$.

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

$$\begin{aligned} r = r_2 \quad \psi_1(r)|_{r=r_2} &= \psi_2(r)|_{r=r_2}, \quad \psi_1'(r)|_{r=r_2} = \psi_2'(r)|_{r=r_2}, \\ r = r_3 \quad \psi_2(r)|_{r=r_3} &= \psi_3(r)|_{r=r_3}, \quad \psi_2'(r)|_{r=r_3} = \psi_3'(r)|_{r=r_3} \end{aligned} \quad (13)$$

получаем трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений энергии E

$$\det W = 0, \quad (14)$$

где W — матрица 4×4 со следующими элементами:

$$\begin{aligned} w_{11} &= \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_1\right)\right), & w_{12} &= -\exp(\kappa\delta_1), & w_{13} &= -\exp(-\kappa\delta_1), & w_{14} &= 0; \\ w_{21} &= k \cos\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_1\right)\right), & w_{22} &= \kappa \exp(\kappa\delta_1), & w_{23} &= -\kappa \exp(-\kappa\delta_1), & w_{24} &= 0; \\ w_{31} &= 0, & w_{32} &= \exp(-\kappa\delta_2), & w_{33} &= \exp(\kappa\delta_2), & w_{34} &= \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_2\right)\right); \\ w_{41} &= 0, & w_{42} &= -\kappa \exp(-\kappa\delta_2), & w_{43} &= \kappa \exp(\kappa\delta_2), & w_{44} &= -\cos\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_2\right)\right). \end{aligned}$$

Подставляя (12) в (1), вычисляем

$$E = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(k\varepsilon) - 1), \quad (15)$$

$$V_0 - E = \frac{2}{\varepsilon^2}(1 - \cos(\kappa\varepsilon)). \quad (16)$$

Из (16) получаем ограничение на параметр ε : $0 \leq \varepsilon \leq \frac{2}{\sqrt{V_0 - E}}$. Условия сшивания (13) модифицируем так же, как и в предыдущем пункте б (см. (9), (10)). Тогда трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений E принимает вид

$$\det M = 0, \quad (17)$$

где M — матрица 4×4 со следующими элементами:

$$\begin{aligned} m_{11} &= \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_1\right)\right), & m_{12} &= -\exp(\kappa\delta_1), & m_{13} &= -\exp(-\kappa\delta_1), & m_{14} &= 0; \\ m_{21} &= U_1, & m_{22} &= -C_5\kappa \exp(\kappa\delta_1), & m_{23} &= -C_6\kappa \exp(-\kappa\delta_2), & m_{24} &= 0; \\ m_{31} &= 0, & m_{32} &= \exp(-\kappa\delta_2), & m_{33} &= \exp(\kappa\delta_2), & m_{34} &= \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_2\right)\right); \\ m_{41} &= 0, & m_{42} &= C_5\kappa \exp(-\kappa\delta_2), & m_{43} &= C_6\kappa \exp(\kappa\delta_2), & m_{44} &= -U_3; \\ C_3 &= \frac{\cos(k\varepsilon) - 1}{\varepsilon}, & C_4 &= \frac{\sin(k\varepsilon)}{k\varepsilon}, & C_5 &= \frac{1}{\kappa\varepsilon}(\exp(-\kappa\varepsilon) - 1), \\ C_6 &= \frac{1}{\kappa\varepsilon}(\exp(\kappa\varepsilon) - 1); & U_1 &= C_3 \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_1\right)\right) + C_4 k \cos\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_1\right)\right), \\ U_3 &= -C_3 \sin\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_2\right)\right) + C_4 k \cos\left(k\left(\frac{\pi}{2} - \delta_2\right)\right). \end{aligned}$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$ уравнение (17) переходит в уравнение (14), и их спектры совпадают.

При $E > V_0$ решения ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(k(r - r_1)), & r_1 &\leq r \leq r_2, \\ \psi_2(r) &= A_2 \sin(-\kappa(r - r_c)) + B_2 \cos(\kappa(r - r_c)), & r_2 &\leq r \leq r_3, \\ \psi_3(r) &= A_3 \sin(k(r - r_4)), & r_3 &\leq r \leq r_4. \end{aligned} \quad (18)$$

Решения (18) удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$\psi_1(0) = 0, \quad \psi_3(\pi) = 0.$$

Поставляя (18) и (2), получаем $k = \sqrt{E}$, $\kappa = \sqrt{E - V_0}$.

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

$$\begin{aligned} r = r_2 & \quad \psi_1(r)|_{r=r_2} = \psi_2(r)|_{r=r_2}, \quad \psi_1'(r)|_{r=r_2} = \psi_2'(r)|_{r=r_2}, \\ r = r_3 & \quad \psi_2(r)|_{r=r_3} = \psi_3(r)|_{r=r_3}, \quad \psi_2'(r)|_{r=r_3} = \psi_3'(r)|_{r=r_3} \end{aligned} \quad (19)$$

получаем трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений энергии E (см. [5]).

Подставляя решения (18) в уравнение (1), имеем

$$E = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(k\varepsilon) - 1), \quad E - V_0 = \frac{2}{\varepsilon^2}(\operatorname{ch}(\kappa\varepsilon) - 1). \quad (20)$$

Условия сшивания (19) модифицируем так же, как и в предыдущих пунктах, и получаем трансцендентное уравнение для нахождения дискретных значений E (см. [5]).

3. Результаты численного исследования

На рис. 2 и в табл. 1 приведены собственные значения квазипотенциального уравнения при различных значениях ε . Из рис. 2 видно, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ собственные значения квазипотенциального уравнения стремятся к собственным значениям уравнения Шрёдингера. В табл. 1 приведена разность собственных значений ($\varepsilon = 0.15$).

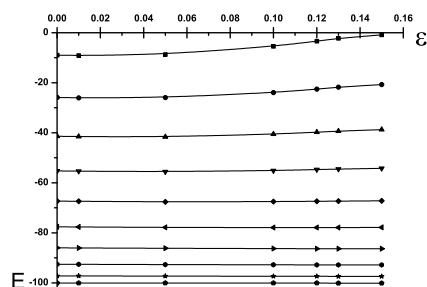


Рис. 2. Зависимость уровней энергии от параметра ε для потенциальной ямы конечной глубины

Таблица 1
Собственные значения квазипотенциального уравнения

E_n^{qus}	E_n^{Schr}	$E_n^{qus} - E_n^{Schr}$
-0.875	-8.9189	8.0439
-20.71	-25.8533	5.1433
-38.73	-41.38	2.65
-54.18	-55.23	1.05
-67.17	-67.31	0.14
-77.84	-77.57	-0.27
-86.35	-85.99	-0.36
-92.84	-92.55	-0.29
-97.39	-97.24	-0.15
-100.1058	-100.0605	-0.0453

На рис. 3 приведена зависимость уровней энергии от δ для случая ниже потенциального барьера. Из рис. 3 можно заключить, что для симметричного потенциала (a, b) собственные значения как функция от δ , при малом значении ε ($\varepsilon = 0,0001$) попарно приближаются друг к другу, а с увеличением ε собственные значения сначала приближаются друг к другу, затем удаляются друг от друга. Аналогичные зависимости приведены для несимметричного потенциала (ε, ε). Физические параметры приведены на верху рисунков.

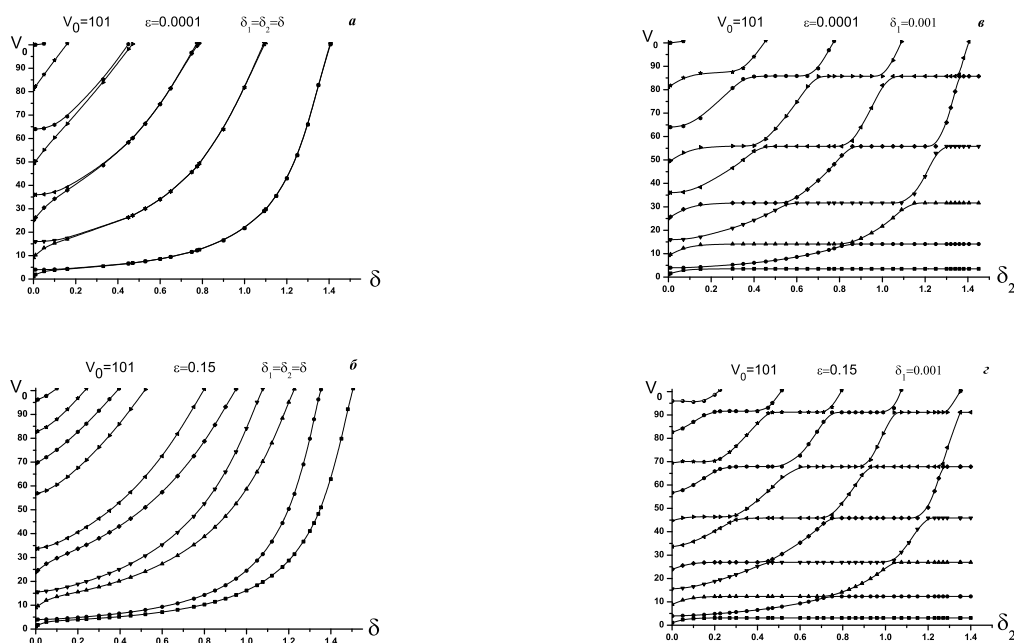


Рис. 3. Зависимость уровней энергии от δ : (a, b) — для симметричного потенциала, а (ε, ε) — для несимметричного потенциала

Рис. 4 иллюстрирует зависимости собственных значений для случая выше потенциального барьера. Физические параметры приведены на верху рисунков.

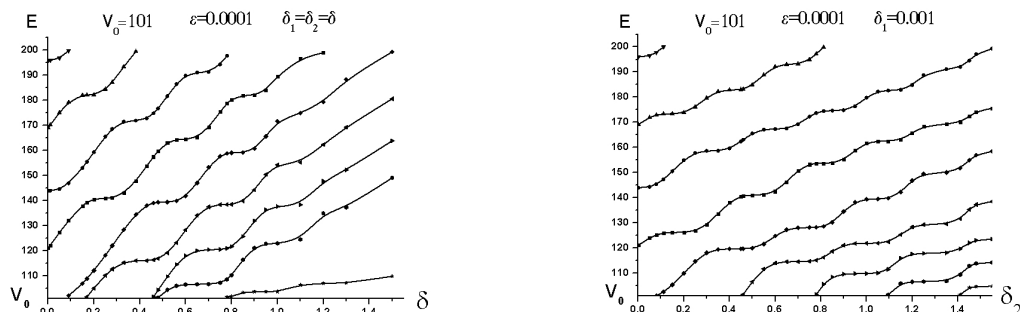


Рис. 4. Зависимость уровней энергии от δ

Для сравнения решений квазипотенциального уравнения с решениями уравнения Шрёдингера, мы приводим решения с двумя и тремя узлами при $E < V_0$ (см. рис. 5–7). Из рис. 5 видно, что решения с двумя узлами практически совпадают, а решения с тремя узлами отличаются. Рис. 6, 7 демонстрируют, что даже при малом $\varepsilon = 0,0001$ для симметричного и несимметричного потенциалов оба типа решения отличаются. Для случая $E > V_0$ при малых ε решения практически совпадают (при любых δ_1 и δ_2). Отличие наблюдается при увеличении ε .

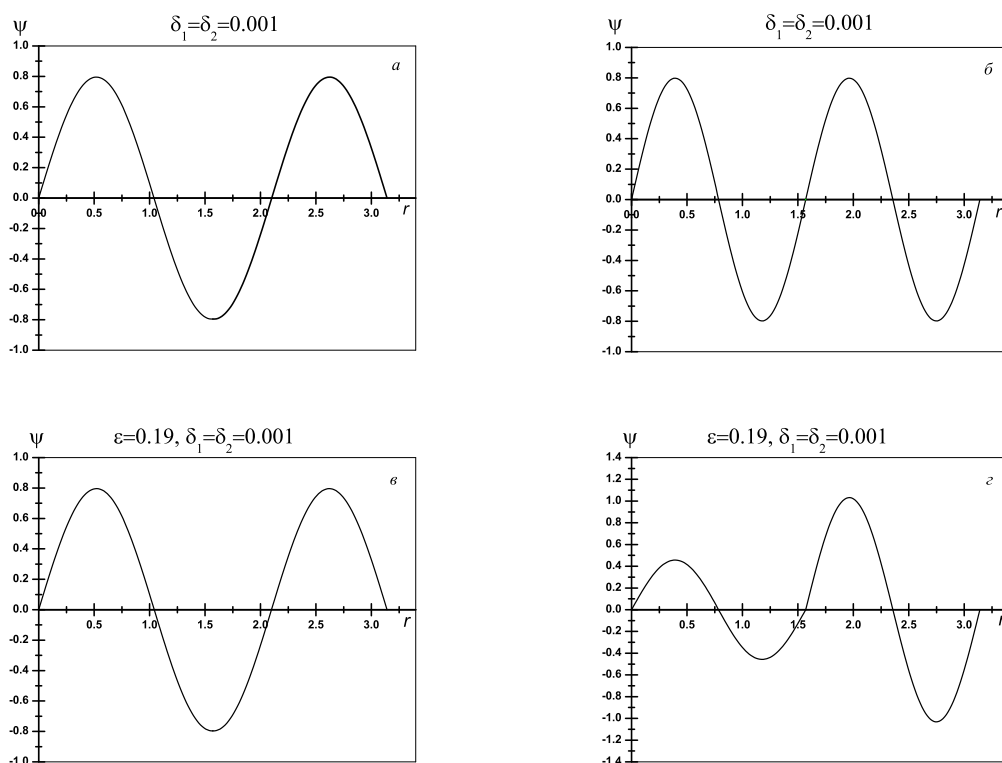


Рис. 5. Решения уравнения Шрёдингера (а,б) и решения квазипотенциального уравнения при $\varepsilon = 0.19$ (в,г)

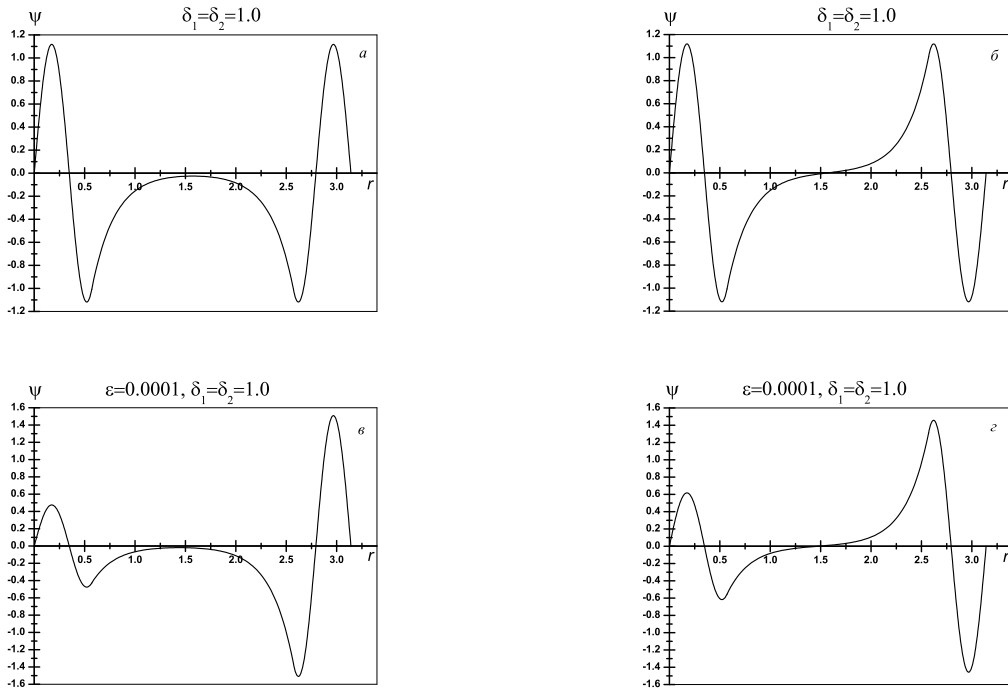


Рис. 6. Решения уравнения Шрёдингера (а, б) и решения квазипотенциального уравнения при $\epsilon = 0.0001$ (в, г)

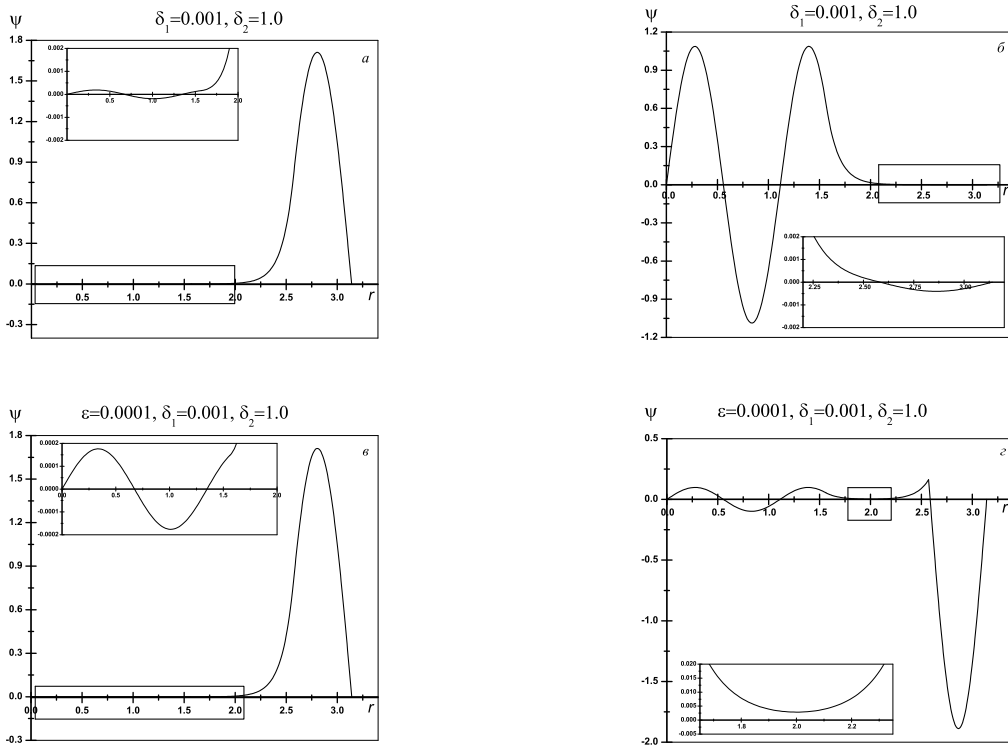


Рис. 7. Решения уравнения Шрёдингера (а, б) и решения квазипотенциального уравнения при $\epsilon = 10^{-4}$ (в, г)

4. Заключение

В заключение перечислим некоторые из полученных результатов:

1) при $\varepsilon \rightarrow 0$, собственные значения квазипотенциального уравнения стремятся к собственным значениям уравнения Шрёдингера (для рассматриваемых потенциалов). Для потенциала с конечной глубиной при увеличении ε собственные значения (по абсолютному значению) уменьшаются;

2) решения краевой задачи с разным количеством узлов по-разному ведут себя в зависимости от параметра ε (см. рис. 5);

3) собственные значения уравнения Шрёдингера при увеличении ширины барьера (при $\delta_1 = \delta_2$) попарно приближаются друг к другу. Собственные значения для квазипотенциального уравнения с увеличением ε попарно сначала приближаются друг к другу, затем удаляются друг от друга.

Литература

1. Кадышевский В. Г., Мир-Касымов Р. М., Скачков Н. Б. // ЭЧАЯ. — 1972. — Т. 2, № 3. — С. 637–390. [*Kadihshevskiyj V. G., Mir-Kasihmov R. M., Skachkov N. B.* // *EhChAYa.* — 1972. — Т. 2, No 3. — S. 637–390.]
2. Жидков Е. П., Кадышевский В. Г., Катъшев Ю. В. К вопросу о предельном переходе $C \rightarrow \infty$ в релятивистском предельном переходе // ТМФ. — 1970. — Т. 3, № 2. — С. 191–196. [*Zhidkov E. P., Kadihshevskiyj V. G., Katihshev Yu. V.* К вопросу о predel'nom perekhode $C \rightarrow \infty$ v relyativistskom predel'nom perekhode // *TMF.* — 1970. — Т. 3, No 2. — S. 191–196.]
3. И. В. Амирханов, Д. З. Музафаров, Н. Р. Саркар и др. // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2010. — № 3(2). — С. 14–18. [*I. V. Amirkhanov, D. Z. Muzafarov, N. R. Sarkar* и др. // *Vestnik RUDN. Seriya «Matematika. Informatika. Fizika».* — 2010. — No 3(2). — S. 14–18.]
4. И. В. Амирханов, Д. З. Музафаров, Н. Р. Саркар и др. // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2011. — № 4. — С. 74–82. [*I. V. Amirkhanov, D. Z. Muzafarov, N. R. Sarkar* и др. // *Vestnik RUDN. Seriya «Matematika. Informatika. Fizika».* — 2011. — No 4. — S. 74–82.]
5. И. В. Амирханов, Н. Р. Саркар, И. Сархадов и др. // Препринт ОИЯИ P11-2011-104. — Дубна, 2011. — 16 с. [*I. V. Amirkhanov, N. R. Sarkar, I. Sarkhadov* и др. // *Preprint OIYaI P11-2011-104.* — Dubna, 2011. — 16 s.]

UDC 519.624.3

Analytical and Computational Investigations of Solutions of Boundary-Value Problems for the Quasipotential Equation

**I. V. Amirkhanov, N. R. Sarker, I. Sarhadov, Z. K. Tukhliev,
Z. A. Sharipov**

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

Investigation of solutions of a boundary-value 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.

Key words and phrases: quasipotential equation, boundary problem, shift operator, symbolic computing, piecewise constant potentials.