ФІЗІКА

УДК 539.12

К. С. БАБИЧ, В. В. АНДРЕЕВ

РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ДВУХЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ С КОРНЕЛЬСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ В ИМПУЛЬСНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

(*Поступила в редакцию 17.12.2010*)

Введение. Проблема точности вычислений характеристик квантовых связанных систем носит не только академический характер. Так, энергетический интервал (1s–2s) в атоме водорода измерен с высокой точностью $\sim 10^{-2}$ кГц [1] и относительная ошибка измерения составляет $\delta \sim 10^{-14}$. Поэтому актуальной задачей является совершенствование методов вычислений и создание методик, позволяющих рассчитывать с высокой точностью как релятивистские, так и квантовоэлектродинамические эффекты.

Как правило, для получения характеристик двухчастичных нерелятивистских связанных систем выполняют решение уравнения Шредингера в координатном представлении

$$\left[-\frac{\vec{\nabla}^2}{2\mu} + V(r)\right]\Psi(r) = E\,\Psi(r), \tag{1}$$

где $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ – приведенная масса, m_1, m_2 – массы конституэнтов связанной системы, k – относительный импульс, $V(r)$ – потенциал взаимодействия, E – энергия связи.

Попытки использовать тот же путь для описания релятивистских систем наталкивается на ряд трудностей. Релятивистский оператор энергии $T(k) = \sqrt{k^2 + m_1^2} + \sqrt{k^2 + m_2^2}$ (в системе центра инерции) содержит оператор $\vec{k}^2 = -\vec{\nabla}^2$ под знаком корня, что существенно осложняет вычисления в координатном пространстве. Кроме этого, при получении релятивистского обобщения потенциала взаимодействия $V(r)$ как фурье-образа амплитуды упругого рассеяния частиц, составляющих систему, возникают технические проблемы из-за расходимостей интегралов. Все это влияет на точность расчетов характеристик связанных систем.

Использование импульсного представления лишено этих недостатков, поскольку амплитуда упругого рассеяния и оператор $T(k)$ сразу записываются в импульсном пространстве.

Для центрально-симметричных потенциалов после парциального разложения уравнение (1) в импульсном представлении примет вид:

$$\frac{k^2}{2\mu}\varphi_l(k) + \int_0^\infty V_l(k,k')\varphi_l(k')k'^2 dk' = E\varphi_l(k), \tag{2}$$

где $\varphi_l(k)$ – радиальная часть фурье-образа волновой функции в координатном представлении $\Psi(r)$, а $V_l(k, k')$ – оператор l-й составляющей парциального разложения потенциала $V(r)$:

$$V_l(k,k') = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty j_l(k'r)V(r)\,j_l(kr)r^2 dr\,, \tag{3}$$

со сферическими функциями Бесселя $j_l(r)$.

Релятивистское обобщение уравнения (2) (так называемое уравнение Томпсона [2]) выполняется простой заменой оператора кинетической энергии $k^2/2\mu$ на релятивистское выражение и имеет вид

$$\left[\sqrt{k^2+m_1^2}+\sqrt{k^2+m_2^2}-(m_1+m_2)\right]\varphi_l(k)+\int_0^\infty V_l(k,k')\varphi_l(k')k'^2dk'=E\varphi_l(k). \quad (4)$$

Однако описание связанных состояний в импульсном представлении усложняется необходимостью решения интегральных уравнений (2), (4), содержащих сингулярные члены. Тип сингулярности определяется видом $V_l(k, k')$.

Продемонстрируем данное утверждение на примере корнельского потенциала, который в координатном представлении есть комбинация кулоновской и линейной частей

$$V(r)=-\frac{\alpha}{r}+\sigma r, \quad (5)$$

а в импульсном представлении принимает вид

$$V_l(k,k')=V_l^{(C)}+V_l^{(L)}. \quad (6)$$

Здесь $V_l^C(k,k')=-\dfrac{\alpha}{\pi}\dfrac{Q_l(y)}{k k'}$, $V_l^L(k,k')=\dfrac{\sigma}{\pi}\dfrac{Q_l'(y)}{(k k')^2}$, α и σ – параметры кулоновского и линейного потенциалов соответственно, $y=\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}$ – комбинация импульсов, $Q_l(y)$, $Q_l'(y)$ – полином Лежандра 2-го рода и его производная соответственно, которые имеют вид

$$Q_l(y)=P_l(y)Q_0(y)-w_{l-1}(y),$$
$$Q_l'(y)=P_l'(y)Q_0(y)+P_l(y)Q_0'(y)-w_{l-1}'(y),$$
$$Q_0'(y)=-\left(\frac{2kk'}{k'+k}\right)^2\frac{1}{(k'-k)^2},$$

причем

$$Q_0(y)=\frac{1}{2}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right|,$$

а $w_{l-1}(y)$ выражается через полиномы Лежандра 1-го рода:

$$w_{l-1}(y)=\sum_{n=1}^{l}\frac{1}{n}P_{n-1}(y)P_{l-n}(y).$$

Поскольку функции Q_l и Q_l' сингулярные в случае, если $k = k'$, то и сам потенциал $V_l(k, k')$ также является сингулярным. Поэтому стандартные методики [2, 3] численного решения уравнений (2) и (4) дают относительно невысокую точность.

Целью данной работы является разработка новой методики высокоточного численного решения уравнений (2), (4) в импульсном представлении, а также исследование некоторых релятивистских эффектов в квантовых связанных системах.

1. Модифицированный полуспектральный метод Чебышева. Одним из общепринятых методов численного расчета интеграла в (2) является преобразование интеграла с промежутка $[0, \infty)$ на $[-1, 1]$ путем замены переменной $k=c\dfrac{1+t}{1-t}$, где $t\in[-1, 1]$.

После такого перехода для кулоновского и линейного потенциалов в (2) появляются интегралы вида

$$\int_{-1}^{1} f(t)\ln\left|t-z\right|dt, \quad |z|\le 1, \tag{7}$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(t)}{(t-z)^2}dt, \quad |z|\le 1, \tag{8}$$

которые чаще всего не могут быть рассчитаны аналитически. Именно точность вычисления (7) и (8) определяет точность собственных значений (2).

В работах [4, 5] для вычисления интеграла (7) был предложен так называемый полуспектральный метод Чебышева, который также был применен для интеграла вида $\int_{-1}^{1} \frac{f(t)}{t-z}dt, \quad |z|\le 1$. В данной работе этот метод был модифицирован для расчета интеграла (8).

В работах [2, 3] показано, что методика введения контрчленов приводит в случае запирающего потенциала к интегралу

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(t)-f(z)}{(t-z)^2}dt, \quad |z|\le 1. \tag{9}$$

Однако в работе [2] интеграл (9) предлагалось вычислять стандартными квадратурными формулами.

Нами предложена новая квадратурная формула для интеграла (9), сочетающая преимущества работы [5] и методики введения контрчлена:

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(t)-f(z)}{(t-z)^2}dt = \sum_{j=1}^{N} \omega_j(z) f(t_j), \tag{10}$$

где весовые коэффициенты $\omega_j(z)$ вычисляются по формулам

$$\omega_j(z) = \frac{2}{N}{\sum_{j=1}^{N}}' T_{i-1}(t_j)\times X_{i-1}(z), \quad X_n(z) = T_n'(z)\ln\left|\frac{1-z}{1+z}\right| + 4{\sum_{k=1}^{n-1}}' U_{n-1-k}(z)R_k(z), \tag{11}$$

$$R_k(z) = {\sum_{k=0}^{n-1}}' T_k(z)\left[\frac{(-1)^{(n-k)+1}+1}{(n-k)}\right].$$

Здесь N – число узлов сетки, t_j – нули полиномов Чебышева 1-го рода $T_N(z)$, а $U_k(z)$ – полиномы Чебышева 2-го рода. Штрих у знака суммы означает, что первое слагаемое следует делить на 2.

Квадратурная формула (10) с коэффициентами (11) позволяет вычислять интегралы вида (9) с высокой степенью точности $\delta \sim 10^{-11} \div 10^{-13}$ уже при небольшом числе узлов N (см. комментарии к табл. 1 и 2). Также, в отличие от [5], исчезает необходимость сводить решение (2) к интегро-дифференциальному уравнению, что негативно сказывается на точности расчетов. Формула (11) получена впервые и лежит в основе методики расчета, названной нами улучшенным полуспектральным методом Чебышева для линейных потенциалов.

В итоге уравнение (2) можно привести к задаче на собственные значения:

$$\sum_{i=1}^{N}\left(W_{ji} + \frac{\tilde{k}_j^2}{2\mu a}\delta_{ji}\right)\varphi_i(\tilde{k}) = \varepsilon\varphi_j(\tilde{k}), \tag{12}$$

где $a = \sqrt{1/\sigma}$, $\tilde{k}$, ε – обезразмеренные импульс и энергия соответственно, а матрица W_{ji} имеет вид

$$W_{ji} = \left[\omega_i(t_j)\,\tilde{V}(t_i,t_j) - \delta_{ij}\times\left[\sum_k \omega_k(t_j)\,\tilde{V}(t_i,t_j)\right]\right].$$

Здесь $\tilde{V}$ – несингулярная часть потенциала взаимодействия в (2).

Переход к релятивистскому случаю делается простой заменой кинетической части уравнения (12) (что еще раз демонстрирует преимущество использования импульсного представления):

$$\sum_{i=1}^{N}\left(W_{ji}+\left[\sqrt{\tilde{k}_j^2+(am_1)^2}+\sqrt{\tilde{k}_j^2+(am_2)^2}-a(m_1+m_2)\right]\delta_{ji}\right)\varphi_i(\tilde{k})=\varepsilon\varphi_j(\tilde{k})\,. \tag{13}$$

2. Проверка метода на точно решаемой задаче. Для нерелятивистского уравнения Шредингера с линейным потенциалом известно точное решение в случае $l = 0$:

$$E_{\text{exact}}=-\frac{z_\nu}{(2\mu a)^{2/3}}\,, \tag{14}$$

где z_ν ($\nu = 1, 2, 3, \ldots$) – нули функции Эйри $Ai(z)$.

Сравнение численных расчетов по квадратурной формуле (10) с точным решением (14), а также с результатами, полученными другим методами, приведено в табл. 1, из которой видно, что методика дает более высокую точность в отличие от работ [2, 5]. Расчет в каждом случае проводился на сетке с указанным числом узлов N, указана также относительная погрешность расчетов в каждом случае.

Таблица 1. **Сравнение точного (E_{exact}) и численного (E) решений уравнения Шредингера с линейным запирающим потенциалом**

n	E_{exact} (точное значение)	E, по формуле (9) $N = 100$	δ, %	E, в [2] $N = 1400$	δ, %	E, в [5] $N = 300$	δ, %
1	2,338 107 410 459 767	2,338 107 410 459 784	7,3E-13	2,336134	8,4E-02	2,338107	1,7E-05
2	4,087 949 444 130 971	4,087 949 444 130 976	1,3E-13	4,083225	1,2E-01	4,087949	1,1E-05
3	5,520 559 828 095 551	5,520 559 828 095 326	4,1E-12	5,511553	1,6E-01	5,520559	1,5E-05
4	6,786 708 090 071 76	6,786 708 090 071 581	2,6E-12	6,771742	2,2E-01	6,786708	1,3E-06
5	7,944 133 587 120 854	7,944 133 587 120 411	5,4E-12	7,921626	2,8E-01	7,944133	7,4E-06
6	9,022 650 853 340 982	9,022 650 853 340 487	5,5E-12	8,991642	3,4E-01	–	–
7	10,040 174 341 558 087	10,040 174 341 556 87	1,2E-11	9,999254	4,1E-01	–	–

3. Уравнение Шредингера с корнельским потенциалом. Для корнельского потенциала даже в случае нерелятивистского уравнения нет точных решений. Имеются различные методы решения уравнения (2) с корнельским потенциалом: вариационный метод [6, 7]; численное решение в координатном пространстве (см. например [8]), численное решение в импульсном пространстве [2–5]. В настоящее время точность решения вариационным методом и в импульсном пространстве достигает $\delta{\sim}10^{-4}{\div}10^{-5}$ [2–5].

С достаточно высокой степенью точности численное решение уравнения (2) выполнено в [8], где расчеты проделаны в координатном представлении. В табл. 2 дается сравнение результатов из [8] с нашими результатами с применением улучшенного полуспектрального метода Чебышева. Величины, по которым проводится сравнение, связаны с обычными параметрами следующими соотношениями:

$$\lambda=\alpha\left(\frac{4\mu^2}{\sigma}\right)^{1/3},\quad \varepsilon=E\left(\frac{2\mu}{\sigma^2}\right)^{1/3}.$$

Из табл. 2 видно, что модифицированный метод Чебышева эффективен даже при малом числе N и с высокой точностью $\delta{\sim}10^{-11}{\div}10^{-12}$ воспроизводит результаты работы [8]. Численный

Таблица 2. **Сравнение результатов численного решения уравнения Шредингера с корнельским потенциалом в координатном и импульсном представлении**

λ	N	ε (1S) (метод этой работы)	N	ε (1S) (в работе [8])	$\Delta\varepsilon$ (в работе [8])
0,0	100	2,338 107 410 459 784	300 000	2,338 107 410 458 750	1,0E–12
0,2		2,167 316 208 772 692		2,167 316 208 771 731	1,0E–12
0,4		1,988 503 899 750 148		1,988 503 899 749 943	9,6E–13
0,6		1,801 073 805 647 306		1,801 073 805 646 145	8,5E–13
0,8		1,604 408 543 236 034		1,604 408 543 235 973	6,6E–13
1,0		1,397 875 641 659 084		1,397 875 641 659 578	3,8E–13
1,2		1,180 833 939 742 701		1,180 833 939 744 863	2,1E–14

расчет проводился на сетке с числом узлов $N = 300\,000$. Приводится также оценка погрешности вычислений.

4. Релятивистские эффекты. Проведем сравнение решений нерелятивистского уравнения Шредингера (2) и его релятивистского обобщения (4).

Эффект замены оператора кинетической энергии $k^2/2\mu$ на релятивистское выражение приводит к уменьшению энергии связи (табл. 3; число узлов в сетке $N = 30$, $m_1 = m_2 = 1{,}37$ ГэВ, $\sigma = 0{,}19$ ГэВ^2). Эффект усиливается с увеличением параметра кулоновской части потенциала $\alpha(\lambda)$.

Данный эффект имеет место и при решении уравнений (2), (4) вариационным методом, поскольку

$$\sqrt{k^2 + m^2} < \frac{k^2}{2m} + m.$$

Таблица 3. **Сравнение результатов численного решения уравнения Томпсона (4) и уравнения Шредингера (2) с корнельским потенциалом в импульсном представлении**

λ	N	ε (1S) (ур. Томпсона)	ε (1S) (ур. Шредингера)	$\Delta\varepsilon$
0,0	30	2,284 344 450 896 527	2,338 107 410 459 784	0,054
0,2		2,103 111 171 121 633	2,167 316 208 772 692	0,064
0,4		1,910 370 148 463 911	1,988 503 899 750 149	0,078
0,6		1,704 328 103 475 576	1,801 073 805 647 306	0,097
0,8		1,482 747 098 457 501	1,604 408 543 236 035	0,122
1,0		1,242 780 343 804 863	1,397 875 641 659 084	0,155
1,2		0,980 720 309 892 567	1,180 833 939 744 863	0,200

Другим релятивистским эффектом является наличие критического значения константы взаимодействия α, при котором энергетический спектр квантовых систем не имеет физических решений.

В работе [9] (см. также ссылки в [10]) было показано, что бесспиновое уравнение Солпитера для системы массой M с кулоновским потенциалом

$$\left[\sqrt{k^2 + m_1^2} + \sqrt{k^2 + m_2^2}\right]\varphi_l(k) + \int_0^\infty V_l(k,k')\varphi_l(k')k'^2 dk' = M\varphi_l(k) \qquad (15)$$

будет иметь критическое значение α.

Далее, кроме уравнения (15) с кулоновским потенциалом, представим результаты вычислений и для корнельского потенциала (6), для которого такие эффекты ранее не исследовались. В табл. 4 приведены решения уравнения (15) с корнельским и кулоновским потенциалами для основного состояния квантовой системы с равными массами $m_1 = m_2 = 1{,}37$ ГэВ (аналог кварк-антикварковой системы) для различных α. Число узлов в сетке $N = 100$, $\sigma = 0{,}19$ ГэВ^2.

Для данной системы с кулоновским потенциалом имеем критическое значение в диапазоне $1{,}3342 < \alpha_{crit} < 1{,}3343$, что неплохо согласуется с оценкой $\alpha_{crit} = 4/\pi$ [9].

В случае корнельского потенциала для $\sigma = 0{,}19$ ГэВ^2, также существует критическое значение, но в диапазоне $1{,}3379 < \alpha_{crit} < 1{,}3384$. Данное значение несколько большее по величине, чем значение для кулоновского случая. Это можно объяснить тем, что необходимо «перекрыть» вклад от линейной части потенциала.

Таблица 4. **Основные состояния бесспинового уравнения Солпитера с кулоновским и корнельским потенциалом для различных значений α**

α	M, ГэВ (кулоновский потенциал)	M, ГэВ (корнельский потенциал)
1,3337	0,04013	0,28510
1,3342	0,00582	0,25776
1,3343	**–0,00142**	0,25201
1,3374	–0,24617	0,05978
1,3379	–0,28961	0,02609
1,3384	–0,33424	**–0,00840**
1,3389	–0,42719	–0,04370

Заключение. В работе представлен новый высокоточный метод решения уравнений в импульсном представлении с корнельским потенциалом, который может эффективно использоваться для решения интегральных уравнений в задачах на связанные состояния.

Расчеты с использованием модифицированного полуспектрального метода Чебышева показали высокую точность и в частных предельных случаях согласуются с ранее известными.

Исследованы релятивистские эффекты двухчастичных квантовых систем с корнельским потенциалом, проявляющиеся в уменьшении энергии связи при релятивизации оператора кинетической энергии и наличии критического значения кулоновской части корнельского потенциала.

Литература

1. U d e m T. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79, N 14. P. 2646–2649.
2. T a n g A., N o r b u r y J. W. // Phys. Rev. 2001. Vol. E63. P. 066703.
3. N o r b u r y J. W. et al. // Can. J. Phys. 1992. Vol. 70. P. 86–89.
4. D e l o f f A. // Ann. Phys. 2007. Vol. 322, N 6. P. 1373–1419.
5. D e l o f f A. // Ann. Phys. 2007. Vol. 322, N 10. P. 2315–2326.
6. K u d r y a s h o v V. V. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2005. Vol. 8, N 1. P. 79–83.
7. K u d r y a s h o v V. V., R e s h e t n y a k V. I. // [Electronic resource] 2009. Mode of access: http://arxiv.org/pdf/math-ph/0911.4256v1. Date of access: 12.03.2010.
8. D a e k y o u n g K., W o n E.// J. Comput. Phys. 2008. Vol. 227. P. 2970–2976.
9. H e r b s t I. W. // Commun. Math. Phys. 1977. Vol. 53. P. 285–294; Vol. 55. P. 316.
10. L u c h a W., S c h ö b e r l F. F. // [Electronic resource] 1994. Mode of access: http://arxiv.org/pdf/hep-ph/9410221. Date of access: 20.01.2010.

K. S. BABICH, V. V. ANDREEV

SOLUTION OF THE INTEGRAL EQUATIONS FOR QUANTUM TWO-PARTICLE SYSTEMS WITH THE CORNELL POTENTIAL IN THE MOMENTUM SPACE

Summary

A new high precision method for solution of integral equations in the momentum space with the Cornell potential is suggested. The method can be used effectively for the bound state equations. Two relativistic effects in the case of the Thompson and spinless Salpeter equations are investigated. The numerical results obtained using the Thompson equation is compared against those using the non-relativistic Schrödinger equation. The presence of a critical value for the Coulomb part parameter of the Cornell potential is demonstrated.