В. В. Андреев
г. Гомель, ГГУ им. Ф. Скорины

ПРЕЦИЗИОННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ГИПЕРСИНГУЛЯРНЫМ ЯДРОМ

В данной работе показано, что уравнение Шредингера в импульсном представлении для линейного запирающего потенциала для состояний с нулевым орбитальным моментом может быть решено с высокой точностью (намного превосходящей другие методики) с помощью специальной квадратурной формулы для гиперсингулярного интеграла.

1. *Методика решения интегральных уравнений*

Уравнение Шредингера в импульсном представлении для центрально-симметричных потенциалов, после парциального разложения примет вид:

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_\ell(k)+\int_0^\infty V_\ell(k,k')\phi_\ell(k')k'^2\mathrm{d}k' = E\phi_\ell(k)\,, \tag{1}$$

где $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ – приведенная масса; m_1, m_2 – массы конституэнтов связанной системы; $\mathbf{k}$ – импульс относительного движения ($|\mathbf{k}| = k$); $\phi_\ell(k)$ – радиальная часть фурье-образа волновой функции в координатном представлении; $V_\ell(k,k')$ – оператор l-той составляющей парциального разложения потенциала взаимодействия; E – энергия связи.

Однако описание связанных состояний в импульсном представлении усложняется необходимостью решения интегрального уравнения (1), содержащего сингулярные члены тип которых определяется видом $V_\ell(k,k')$.

Так для линейного запирающего потенциала $V(r) = \sigma r$ имеем, что

$$V_\ell(k,k') = \frac{\sigma}{\pi(kk')^2}Q'_\ell\left(\frac{k^2+k'^2}{2kk'}\right). \tag{2}$$

где функция $Q_\ell(y)$ – полином Лежандра 2-го рода.

Поскольку функция Q'_ℓ гиперсингулярная в случае, если $k = k'$, то и сам потенциал $V_\ell(k,k')$, также является гиперсингулярным. Стандартные методики численного решения уравнения (1) с потенциалом (2) дают относительно невысокую точность [1, 2]

Численное решение интегрального уравнения (1) может быть сведено к задаче на собственные значения матрицы, которая возникает при использовании квадратурных формул для интегралов, входящих в уравнение.

В итоге интегральное уравнение вида (1) может быть сведено к задаче

$$\sum_{j=1}^{N} H\left(k_i,k_j\right)\phi(k_j) = \sum_{j=1}^{N} H_{ij}\phi(k_j) = E\phi(k_i)\,, \tag{3}$$

где для получения собственных значений и векторов необходимо знать элементы матрицы H_{ij}. И если для $i \neq j$, задача расчета элементов H_{ij} для линейного запирающего потенциалов не является сложной, то при $i = j\left(k = k'\right)$ напрямую это сделать не удается, вследствие наличия сингулярностей.

2. *Построение квадратурных формул для сингулярных интегралов*

Получим квадратурную формулу для интеграла

$$I\left(z\right)=\int\limits_{-1}^{1}F(t)w(t)g\left(t,z\right)\mathrm{d}t \tag{4}$$

где $g\left(t,z\right)$ функция сингулярная при $t=z$.

Для этого функция $F(t)$ в (4) с помощью интерполяционного многочлена

$$G_i\left(t\right)=\frac{P_N^{(\alpha,\beta)}\left(t\right)}{\left(t-\xi_{i,N}\right)P_N^{1pt'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)} \tag{5}$$

заменятся разложением

$$F(t)\approx\sum_{i,=1}^{N}G_i\left(t\right)F\left(\xi_{i,N}\right), \tag{6}$$

где $\xi_{i,N}$ являются корнями многочлена Якоби

$$P_N^{(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)=0\left(i=1,2,\ldots,N\right). \tag{7}$$

Подставляя разложение (6) в $I\left(z\right)$ получим, что квадратурная формула для интеграла принимает вид

$$I\left(z\right)\approx\sum_{i=1}^{N}\omega_i\left(z\right)F\left(\xi_{i,N}\right), \tag{8}$$

где

$$\omega_i\left(z\right)=\frac{1}{P_N^{'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)}\int\limits_{-1}^{1}g\left(t,z\right)w\left(t\right)\frac{P_N^{(\alpha,\beta)}\left(t\right)}{t-\xi_{i,N}}\mathrm{d}t. \tag{9}$$

Таким образом вычисление (9) позволит найти весовые коэффициенты для квадратурной формулы (4), содержащей сингулярности.

3. *Аналитический весовых множителей*

Рассмотрим возможность аналитического вычисления весовых множителей для различных видов сингулярностей т. е. в зависимости от вида функции $g\left(t,z\right)$.

3.1 *Сингулярный интеграл Коши*

Наиболее известным вариантом (4) в литературе является интеграл Коши

$$g\left(t,z\right)=\frac{1}{t-z},\quad -1<z<1.$$

Для этого случая имеется большое количество работ (см., например, [3–5], в которых предлагаются различные варианты квадратурных формул. В этом случае можно получить формулы для весовых множителей (9) непосредственно вычислением интеграла

$$\omega_i^C\left(z\right)=\int\limits_{-1}^{1}\frac{w\left(t\right)}{P_N^{'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)}\frac{P_N^{(\alpha,\beta)}\left(t\right)}{\left(t-\xi_{i,N}\right)\left(t-z\right)}\mathrm{d}t. \tag{10}$$

С помощью тождества

$$\frac{1}{\left(t-\xi_{i,N}\right)\left(t-z\right)}=\frac{1}{z-\xi_{i,N}}\left[\frac{1}{t-z}-\frac{1}{t-\xi_{i,N}}\right] \tag{11}$$

коэффициенты (10) приведем к виду

$$\omega_i^C\left(z\right)=\begin{cases}\dfrac{1}{P_N^{'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)}\dfrac{\Pi_N^{(\alpha,\beta)}\left(z\right)-\Pi_N^{(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)}{\left(z-\xi_{i,N}\right)},\text{если } z\neq\xi_{i,N},\\ \Pi_N^{'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right)/P_N^{'(\alpha,\beta)}\left(\xi_{i,N}\right),\text{если } z=\xi_{i,N}\end{cases} \tag{12}$$

где

$$\Pi_n^{(\alpha,\beta)}\left(z\right)=\int\limits_{-1}^{1}w(t)\frac{P_n^{(\alpha,\beta)}\left(t\right)}{\left(t-z\right)}\mathrm{d}t. \tag{13}$$

Для расчета коэффициентов $\omega_i^C(z)$ с высокой степенью точности необходимо рассчитать аналитически интеграл (13) для различных вариантов функции $w(t)$.

Наиболее известный вариант, когда функция $w(t)$ является весовой функцией полинома Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(t)$ т. е.

$$w(t)=w^{(\alpha,\beta)}(t)\equiv(1-t)^{\alpha}(1+t)^{\beta}.$$

Тогда для интеграла (13) имеем

$$\Pi_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\mathrm{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z),$$

где

$$\mathrm{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\int_{-1}^{1}(1-t)^{\alpha}(1+t)^{\beta}\frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-z)}\mathrm{d}t. \tag{14}$$

В самом общем случае для произвольных α и β, функция $\mathrm{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z)$ связана с полиномами Якоби второго рода $Q_n^{(\alpha,\beta)}(z)$.

3.2 *Гиперсингулярный вариант*

Рассмотрим гиперсингулярный вариант интеграла (9), когда функция $g(t,z)=1/(t-z)^2$

Концепция расчета конечной части такого типа интегралов была впервые введена Адамаром (J. Hadamard, Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations, Yale University Press (1923).) и развита в работах [6–8, и др.]. Конечную часть гиперсингулярного интеграла можно представить в виде

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(t)}{(t-z)^2}\mathrm{d}t=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\int_{-1}^{1}\frac{f(t)}{t-z}\mathrm{d}t\right],\ -1<z<1. \tag{15}$$

Следовательно, весовые коэффициенты квадратурной формулы

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(t)}{(t-z)^2}\mathrm{d}t=\sum_{i=1}^{N}\omega_i^H(z)f(\xi_{i,N}) \tag{16}$$

связаны с коэффициентами (12) соотношением

$$\omega_i^H(z)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\omega_i^C(z)\right]. \tag{17}$$

Тогда весовые коэффициенты для интеграла (4) с функцией $g(t,z)=1/(t-z)^2$ можно рассчитать по формулам

$$\omega_i^H(z)=\begin{cases}\dfrac{1}{P_N^{'(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}\left\{\dfrac{\Pi_N^{'(\alpha,\beta)}(z)}{(z-\xi_{i,N})}-\dfrac{\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(z)-\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})^2}\right\}, \text{если } z\neq\xi_{i,N}, \\ \dfrac{\Pi_N^{''(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{2P_N^{'(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}, \text{если } z=\xi_{i,N}.\end{cases} \tag{18}$$

Для интеграла Коши ($g(t,z)=1/(t-z)$) с $\alpha=-\beta=-1/2$ имеем

$$\Pi_n^{(-1/2,1/2)}(z)=\int_{-1}^{1}\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{V_n(t)}{(t-z)}\mathrm{d}t=\pi W_n(z), \tag{19}$$

где $V_n(z)$ и $W_n(z)$ полиномы Чебышева 3 и 4-го рода соответственно (см. [9]).

Тогда квадратурная формула для интеграла Коши имеет вид:

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{f(t)}{(t-z)}\mathrm{d}t\approx\sum_{i=1}^{N}\omega_i^C(z)f(\xi_{i,N}), \tag{20}$$

где

$$\omega_i^C(z)=\begin{cases}\dfrac{\pi}{V_N'(\xi_{i,N})}\dfrac{W_N(z)-W_N(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})}, \text{если } z\neq\xi_{i,N}, \\ \pi W_N'(\xi_{i,N})/V_N'(\xi_{i,N}), \text{если } z=\xi_{i,N}\end{cases}. \tag{21}$$

Квадратурная формула для гиперсингулярного интеграла имеет вид:

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{f(t)}{(t-z)^2}\mathrm{d}t \approx \sum_{i=1}^{N}\omega_i^H(z) f(\xi_{i,N}), \tag{22}$$

где

$$\omega_i^H(z)=\begin{cases}\dfrac{\pi}{V_N'(\xi_{i,N})}\left\{\dfrac{W_N'(z)}{(z-\xi_{i,N})}-\dfrac{W_N(z)-W_N(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})^2}\right\}, \text{ если } z\neq\xi_{i,N}, \\ \dfrac{\pi}{2}\dfrac{W_N''(\xi_{i,N})}{V_N'(\xi_{i,N})}, \text{если } z=\xi_{i,N}.\end{cases} \tag{23}$$

Формула (23) для весовых коэффициентов позволяет рассчитать их с высокой точностью и следовательно может быть использована для решения уравнения Шредингера с линейным запирающим потенциалом в импульсном пространстве.

4. *Расчет спектра для линейного запирающего потенциала с* $\ell=0$

Уравнение Шредингера с линейным запирающим потенциалом

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_\ell(k)+\frac{\sigma}{\pi k^2}\int_0^\infty Q_\ell'(y)\phi_\ell(k')\mathrm{d}k' = E\phi_\ell(k), \ y=\frac{k^2+k'^2}{2kk'}, \tag{24}$$

приведем к виду

$$\tilde{k}^2\phi_\ell(\tilde{k})+\frac{1}{\pi\tilde{k}^2}\int_0^\infty Q_\ell'(y)\tilde{k}'\phi_\ell(\tilde{k}')\mathrm{d}\tilde{k}' = \varepsilon\phi_\ell(\tilde{k}) \tag{25}$$

с помощью замен $k=\beta\tilde{k}$, $E=\dfrac{\beta^2}{2\mu}\varepsilon$, $\beta=(2\mu\sigma)^{1/3}$.

Используя отображение $\tilde{k}=\beta_0\sqrt{\dfrac{1+z}{1-z}}$, $\tilde{k}'=\beta_0\sqrt{\dfrac{1+t}{1-t}}$ получим, что уравнение (25)для случая $\ell=0$ после упрощений запишется следующим образом:

$$-\frac{1}{\pi\beta_0}(1-z)^2\int_{-1}^{1}\phi_{\ell=0}(t)\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{\mathrm{d}t}{(t-z)^2}=\left(\varepsilon-\beta_0^2\frac{1+z}{1-z}\right)\phi_{\ell=0}(z). \tag{26}$$

Таким образом, для запирающего потенциала имеем гиперсингулярное ядро : $1/(t-z)^2$ и следовательно для численного решения необходимо использовать весовые коэффициенты, приведенные в разделе 3.2. Функция $w(t)$ естественным образом выбирается в виде $w(t)=\sqrt{\dfrac{1+t}{1-t}}$. В итоге матрица для задачи на собственные значения принимает вид:

$$H_{ij}=\left[\beta_0^2\delta_{ij}\left(\frac{1+\xi_{j,N}}{1-\xi_{j,N}}\right)-\frac{\omega_j^H(\xi_{i,N})}{\pi\beta_0}(1-\xi_{i,N})^2\right], \tag{27}$$

где $z\to\xi_{i,N}$ и $t\to\xi_{j,N}$, $\xi_{i,N}$ – нули полинома $V_N(t)$, а матрица $\omega_j^H(\xi_{i,N})$ рассчитывается с помощью (23).

Для линейного запирающего потенциала при $\ell=0$ известно, что

$$\varepsilon=-z_n, \ n=1,2,3\ldots \tag{28}$$

где z_n являются нулями функции Айри. Поэтому имеется возможность сравнить результаты численных расчетов с матрицей (27) и точными значениями (см. таблицу 1).

Таблица 1 – Относительная погрешность δ решения уравнения (27) ($\beta_0=0{,}9999$)

N	$n=1$	$=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$
50	3×10^{-22}	4×10^{-20}	3×10^{-17}	3×10^{-15}	8×10^{-14}	2×10^{-12}
80	5×10^{-33}	2×10^{-29}	1×10^{-26}	3×10^{-24}	4×10^{-22}	3×10^{-20}
100	2×10^{-39}	1×10^{-35}	1×10^{-32}	4×10^{-31}	5×10^{-28}	6×10^{-26}
150	4×10^{-54}	8×10^{-50}	5×10^{-47}	1×10^{-43}	6×10^{-42}	6×10^{-39}

Таким образом, выбор весовых коэффициентов в которых сингулярности обработаны аналитически и функции $w(t)$ связанной с интерполяционными полиномами $P_N^{(\alpha,\beta)}(t)$ позволяет решать уравнение (24) для $\ell = 0$ в импульсном пространстве с высокой точностью. Точность расчетов выше, чем аналогичные расчеты в импульсном пространстве на много порядков [1, 10–13].

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (г. Минск, Республика Беларусь).

Список используемых источников

1 Tang, A. The Nyström plus correction method for solving bound state equations in momentum space / A. Tang, J. W. Norbury // Phys. Rev. – 2001. – Vol. E63. – P. 066703.

2 Norbury, J. W. Confining potential in momentum space / J. W. Norbury, D. E. Kahana, K. Maung Maung // Can. J. Phys. – 1992. – Vol. 70. – P. 86–89.

3 Golberg, M. A. Numerical Solution of Integral Equations / M. A. Golberg // Mathematical concepts and methods in science and engineering. – New York and London : Plenum Press , 1990. – 436 p.

4 Корнейчук, А. А. Квадратурные формулы для сингулярных интегралов / А. А. Корнейчук // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1964. – Т. 4. – С. 64–74.

5 Шешко, М. А. О сходимости квадратурных процессов для сингулярного интеграла / М. А. Шешко // Известия вузов. Математика. – 1976. – Т. 12. – С. 108–118.

6 Hui, C.-Y. Evaluations of hypersingular integrals using Gaussian quadrature / C.-Y. Hui, D. Shia // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 1999. – Vol. 44, № 2. – P. 205–214.

7 Kaya, A. C. On the solution of integral equations with strongly singular kernels / A. C. Kaya, F. Erdogan // Quart. Appl. Math. – 1987. – Vol. XLV. – P. 105–122.

8 Kutt, H. R. On the numerical evaluation of finite part integrals involving an algebraic singularity / H. R. Kutt. – 1975. – National Research Institute for Mathematical Sciences, Pretoria.

9 Mason, J. C. Chebyshev polynomials / J. C. Mason, D. C. Handscomb. – Chapman& Hall/Crc, 2002. – 335 p.

10 Chen, J.-K. Spectral method for the Cornell and screened Cornell potentials in momentum space / J.-K. Chen // Phys. Rev. D. – Vol. 88. – P. 076006. – Erratum Phys. Rev. D 89, 099904 (2014).

11 Deloff, A. Quarkonium bound-state problem in momentum space revisited / A. Deloff // Annals Phys. – 2007. – Vol. 322. – P. 2315–2326.

12 Hersbach, H. Relativistic linear potential in momentum space / H. Hersbach // Phys. Rev. D. – Vol. 47. – P. 3027–3033.

13 Linear confinement in momentum space: singularity-free bound-state equations / S. Leitão, A. Stadler, M. T. Peña, E. P. Biernat // Phys.Rev. – 2014. – Vol. D90, № 9. – P. 096003.