С. 410–420.
5. Андреев, В.В. / В.В. Андреев // Гомель: УО «Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины», 2004. – 235 с.
6. Prange, R. E. / R. E. Prange // Phys. Rev. – Apr 1958. – Vol. 110 , 1. – P. 240–252.
7. Петрунькин, В.А. / В.А. Петрунькин // ЭЧАЯ. – 1981. – Т. 12. – С. 692–753.
8. Drechsel, D. / D. Drechsel, B. Pasquini, M. Vanderhaeghen // Phys. Rept. – 2003. – Vol. 378. – P. 99–205.
9. L’vov, A. I. / A. I. L’vov // Sov. J. Nucl. Phys. – 1981. – Vol. 34. – P. 597–608.
10. Denner, A. / A. Denner, S. ittmaier // Nucl. Phys. – 1999. – Vol. B540. – P. 58–86.
11. Holstein, B. R. / B. R. Holstein, V. Pascalutsa, M. Vanderhaeghen // Phys. Rev. – 2005. – Vol. D72, 9. – P. 094014.
12. Llanta, E. / E. Llanta, R. Tarrach // Phys.Lett. – 1978. – Vol. B78. – P. 586.

К.С. Бабич, В.В. Андреев

УО «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины», Беларусь

ЗАДАЧИ НА СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ С ЛИНЕЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ В ИМПУЛЬСНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Введение

Большинство активно используемых сегодня численных методов для решения уравнений, возникающих в задачах на связанные состояния, дают относительно низкую точность по сравнению с современными экспериментальными данными. Проблемы теории усугубляются тем, что даже потенциалы взаимодействия простейшего вида в импульсном представлении приводят к интегралам с особенностями.

В данной работе показано, как интегральное уравнение, возникающее в задачах на связанные состояния с линейным потенциалом в импульсном представлении, может быть сведено к задаче на собственные значения (СЗ).

1. Уравнение для связанных состояний в импульсном представлении

Простейшим уравнением для связанной системы в импульсном представлении является уравнение Шредингера

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_l(k)+\int_0^{\infty}V_l(k,k')\phi_l(k')k'^2dk'=E\phi_l(k), \tag{1}$$

где $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ – приведенная масса, k – относительный импульс, $\phi_l(k)$ – радиальная часть волновой функции, а $V_l(k,k')$ – оператор l-той составляющей парциального разложения потенциала взаимодействия $V(r)$.

Линейный потенциал, рассматриваемый нами, имеет вид

$$V(r)=\sigma r, \tag{2}$$

и в импульсном представлении задается выражением

$$V_l(k,k')=\frac{\sigma}{\pi}\frac{Q_l'(y)}{kk'}, \tag{3}$$

где $Q_l'(y)$ – производная от полинома Лежандра 2-го рода:

$$Q_l(y)=P_l(y)Q_0(y)-w_{l-1}(y),$$

$$Q_0(y)=\frac{1}{2}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right|=\ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right|;\quad w_{l-1}(y)=\sum_{n=1}^{l}\frac{1}{n}P_{n-1}(y)P_{l-n}(y),$$

и $y=\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}$ – комбинация импульсов, $P_l(y)$ – полиномы Лежандра.

Подставляя выражение (3) в (1) и используя метод введения контрчлена, предложенный в работах [1, 2], приходим к интегральному уравнению

$$\left(E-\frac{k^2}{2\mu}\right)\phi_l(k)=\frac{\sigma}{\pi k^2}\int_0^{\infty}\left[P_l'(y)\ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right|-w_{l-1}'(y)\right]\phi_l(k')dk'-$$

$$-\frac{4\sigma}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{P_l(y)}{(k'+k)^2}\frac{[\phi_l(k')-\phi_l(k)]}{(k-k')^2}dk', \tag{4}$$

в котором содержаться два сингулярных интеграла.

Первый интеграл в (4), содержащий особенность в логарифмической функции, возникает в части потенциала (3) содержащей $Q_0(y)$, а второй сингулярный интеграл обусловлен видом $Q_0'(y)$.

2. Сведение интегрального уравнения к задаче на СЗ

Численное решение уравнения (4) может быть сведено к задаче на собственные значения матрицы. Для этого, выполним замену переменной $k=c\dfrac{1+t}{1-t}$, где $t\in[-1,1]$, которая обеспечивает переход от интервала интегрирования [0, ∞) на [-1, 1]. Далее, используя квадратурные формулы для интегралов, входящих в (4) можно получить явный вид матрицы, собственные значения которой дадут энергетический спектр. Но, при реализации этой схемы в импульсном представлении, возникают проблемы вычислительного характера, связанные с наличием расходимостей при $k = k'$. Для устранения данной проблемы используем подход, разработанный в [3, 4]. Так, в (4) интеграл с логарифмической расходимостью может быть вычислен с помощью формул (57), (58) в [3].

Для интегралов с расходимостью, обусловленной $Q_0'(y)$ нами предлагается новая квадратурная формула, сочетающая преимущества работы [3] и методики введения контрчлена [1, 2]:

$$\int_{-1}^{1} \frac{\phi_l(t) - \phi_l(z)}{(t-z)^2} dt = \sum_{j=1}^{N} \omega_j(z) \phi_l(t_j), \tag{5}$$

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

$$\omega_j(z) = \frac{2}{N} \sum_{j=1}^{N}{}' T_{i-1}(t_j) \times X_{i-1}(z),$$

$$X_n(z) = nU_{n-1}(z) \ln\left|\frac{1-z}{1+z}\right| + 4\sum_{s=1}^{n-1} U_{n-1-s}(z) R_s(z),$$

$$R_s(z) = \sum_{k=0}^{n-1}{}' T_s(z) \left[\frac{(-1)^{(n-s)+1} + 1}{(n-s)}\right]. \tag{6}$$

Здесь N – число узлов сетки, t_j – нули полиномов Чебышева 1-го рода $T_s(t_j)$, а $U_s(t_j)$ являются полиномами Чебышева 2-го рода. Штрих возле знака суммы, здесь и далее означает, что первое слагаемое следует делить на 2.

В отличие от работы [2], где интеграл в (4) вычислялся стандартными квадратурными формулами, а также работ [3, 4], где интегральное уравнение сводилось к интегро-дифференциальному, в разработанном в данной статье подходе уравнение остается интегральным. Найдем, с помощью квадратурной формулы (5), явный вид матрицы для интеграла от $Q_0'(y)$ в (4). Эта часть после замены переменных сведется к интегралу вида

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{V(t,z)(\phi_l(t) - \phi_l(z))}{(t-z)^2} dt, \tag{7}$$

где $V(t,z)$ – не сингулярная функция (часть потенциала).

Разобьем интеграл (7) на две части

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{V(t,z)\phi_l(t) - V(z,z)\phi_l(z)}{(t-z)^2} dt - \phi_l(z) \int_{-1}^{1} \frac{V(t,z) - V(z,z)}{(t-z)^2} dt = I_1 - I_2 \phi_l(z),$$

(8)

и проведем их расчет по отдельности с учетом замены $z = t_j$.

Используя, что любая функция может быть разложена по полиномам Чебышева

$$f(t) = \sum_j \sigma_j(t) f(t_j),$$

где $\sigma_j(t)$ – весовые коэффициенты в полуспектральном методе Чебышева [3]

$$\sigma_j(t) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N}{}' T_{i-1}(t_j) T_{i-1}(t),$$

для числителя в I_1 получим

$$V(t,z)\phi_l(t) - V(z,z)\phi_l(z) = \sum_i \left[\sigma_i(t) - \sigma_i(t_j)\right] V(t_i,t_j)\phi_l(t_i).$$

Тогда для первого слагаемого в (8) будет

$$I_1 = \sum_i \omega_i(t_j)\phi_l(t_i)V(t_i,t_j),$$

где весовые коэффициенты $\omega_i(t_j)$ имеют вид

$$\omega_i(t_j) = \int \frac{\left[\sigma_i(t) - \sigma_i(t_j)\right]}{(t - t_j)^2} dt$$

и находятся по формулам (6).

Интеграл I_2 это частный случай I_1, если положить в (8) $\phi_l(t) = \phi_l(z) = 1$:

$$I_2 = \sum_i \omega_i(t_j) V(t_i,t_j).$$

Соответственно весь интеграл I в (7) будет

$$I = I_1 - \phi_l(t_j) I_2 = \sum_i \omega_i(t_j) V(t_i,t_j)\phi_l(t_i) - \phi_l(t_j)\left(\sum_k \omega_k(t_j) V(t_k,t_j)\right) =$$

$$= \sum_i \left[\omega_i(t_j) V(t_i,t_j) - \delta_{ij} \times \left(\sum_k \omega_k(t_j) V(t_k,t_j)\right)\right]\phi_l(t_i).$$

Таким образом, интеграл в (4) может быть сведен к выражению

$$I = \sum_i W_{ji}\phi_l(t_i),$$

где матрица W_{ji} имеет вид

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

В итоге интегральное уравнение (4) может быть сведено к задаче на собственные значения

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\tilde{k}_j^2}{2\mu a} + W_{ji}^{LOG} + W_{ji} \right) \phi_l(\tilde{k}_i) = \varepsilon \phi_l(\tilde{k}_i), \qquad (12)$$

где $a = \sqrt{1/\sigma}$; ε, $\tilde{k}$ – безразмерные энергия связи и относительный импульс соответственно, а W_{ji}^{LOG} – матрица для интеграла с логарифмической сингулярностью, которая строится по формулам (57), (58) в [3].

Заключение

Эффективность новой квадратурной формулы (5) и методики расчета, названной нами улучшенным полуспектральным методом Чебышева для линейных потенциалов, была нами проверена на простейших задачах, для которых известны точные решения.

Так, для нерелятивистского уравнения Шредингера с линейным потенциалом известно точное решение в случае $l = 0$:

$$E_{точное} = -\frac{z_\nu}{(2\mu a)^{2/3}},$$

где z_ν (ν = 1, 2, 3, …) – нули функции Эйри $Ai(z)$.

Для этого случая формула (12) позволяет получить ответ для первых семи состояний с высокой степенью точности $\delta \sim 10^{-11} \div 10^{-13}$, что на 6–7 порядков лучше, чем в работе [4].

Вычислительная схема также позволяет легко обобщить задачу (1) на релятивистский случай (т. н. бесспиновое уравнение Солпитера) путем простой замены оператора кинетической энергии на релятивистское выражение

$$T(k) = \sqrt{k^2 + m_1^2} + \sqrt{k^2 + m_2^2}\ .$$

Литература

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

2. Tang, A. The Nystrom plus Correction Method for Solving Bound State

Equations in Momentum Space / A.Tang, J.W. Norbury // Phys. Rev. – 2001. –Vol. E63. – P. 066703.

3. Deloff, A. Semi-spectral Chebyshev method in Quantum Mechanics / A. Deloff // Annals of Phys. – 2007. – Vol. 322, № 6. – P. 1373–1419.

4. Deloff, A. Quarkonium bound-state problem in momentum space revisited / A. Deloff // Ann. Phys. – 2007. –Vol. 322, № 10. – P. 2315–2326.

Е.В. Вакулина[1], О.М. Дерюжкова[2], Н.В. Максименко[2]