КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 517.9

МНОГОКОМПОНЕНТНОЕ ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА МОДЕЛИРУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ

В. Н. Сидоренко

(*кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

Рассматривается многокомпонентное обобщение метода моделирующих потенциалов для построения энергетического спектра уравнения Шрёдингера в рамках квазиклассического подхода.

Рассмотрим обобщение метода моделирующего потенциала [1] на случай системы радиальных уравнений Шрёдингера с n «зацепляющимися» компонентами. В векторной форме данная система имеет следующий вид:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\widehat{D}^{(2)}\mathbf{\Psi}(r)+\widehat{W}(r,E)\mathbf{\Psi}(r)=0, \qquad \mathbf{\Psi}(r)=\begin{pmatrix}\Psi_1(r)\\ \cdots\\ \Psi_n(r)\end{pmatrix}, \tag{1}$$

где $\Psi_i(r)\in L_2(R^1_+)$, μ — приведенная масса, $\widehat{D}^{(2)}=\frac{d^2}{dr^2}I$ (I — единичная матрица), а

$$\widehat{W}(r,E)=\begin{pmatrix}E-U_{11}(r) & \Delta U_{12}(r) & \cdots & \Delta U_{1n}(r)\\ \Delta U_{21}(r) & E-U_{22}(r) & \cdots & \Delta U_{2n}(r)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \Delta U_{n1}(r) & \Delta U_{n2}(r) & \cdots & E-U_{nn}(r)\end{pmatrix} \tag{2}$$

— моделируемый потенциал. Полагаем, что переменная r является скаляром. Сделаем замену переменных в уравнении (1) вида

$$r=f(y),\quad \frac{d}{dr}=\frac{1}{f'(y)}\frac{d}{dy},\qquad \mathbf{\Psi}(r)\Big|_{r=f(y)}=\sqrt{f'(y)}\,\widehat{\rho}_0\mathbf{\Phi}(y), \tag{3}$$

где $\widehat{\rho}_0$ — постоянная невырожденная матрица, пропорциональная единичной, т.е. $\widehat{\rho}_0=I\mathbf{C}$, а $\mathbf{C}=(C_1,\ldots,C_n)^T$ — произвольный постоянный вектор, не равный нулю в силу невырожденности матрицы $\widehat{\rho}_0$. Введение условия взаимной однозначности замены (3) приводит к требованию знакоопределенности функции $f'(y)$. В дальнейшем будем полагать, что $f'(y)>0$.

Подстановка (3) в (1) дает уравнение той же структуры, что и (1):

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\mathbf{\Phi}''(y)+\widehat{\widetilde{W}}(y,\widetilde{E})\mathbf{\Phi}(y)=0, \tag{4}$$

где

$$\widehat{\widetilde{W}}(y,\widetilde{E})= = f'(y)\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(f(y),E)\widehat{\rho}_0 f'(y)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{2}\{f(y),y\}I, \tag{5}$$

— моделирующий потенциал, который в компонентном виде записывается следующим образом:

$$\widetilde{W}_{ij}(y,\widetilde{E})=\frac{C_j}{C_i}W_{ij}(f(y),E)f'^2(y)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{2}\{f(y),y\}\delta_{ij}, \tag{6}$$

а шварциан $\{f(y),y\}$ задается в виде [2] $\{f(y),y\}= =\frac{f'''(y)}{f'(y)}-\frac{3}{2}\left(\frac{f''(y)}{f'(y)}\right)^2$.

Из (6) видно, что существует степень свободы, связанная с комбинацией констант C_i/C_j, которую в дальнейшем будем называть относительным весом i-й компоненты. Таким образом, мы получили обобщенное преобразование Лиувилля. Так же как и в однокомпонентном случае, можно утверждать, что если $\int\limits_a^\infty |\{f(y),y\}|dy<\infty$, где $a\geqslant 0$, то в результате применения преобразования Лиувилля получится уравнение с суммируемым потенциалом при условии, что исходный потенциал $U(x)$ был суммируемым, т.е. $\int\limits_0^\infty |U(x)|dx<\infty$.

Следует также отметить, что преобразования Лиувилля образуют бесконечномерную группу диффеоморфизмов [3] с единичным элементом — эквивалентным преобразованием — и однозначно определенным обратным элементом, существование которого следует из условия $f'(y)>0$. Данное утверждение легко проверяется двукратным применением преобразования Лиувилля, использованием теоремы об обратной функции, тождества Кейли [2]

$$\{f(g(y)),y\}=\left(\frac{dg(y)}{dy}\right)^2\{f,g\}+\{g,y\},$$

связи шварцианов прямой и обратной функций

$$\{f,y\} = -\left(\frac{df(y)}{dy}\right)^2 \{y,f\}$$

и формулы дифференцирования сложной функции.

Кроме того, поскольку $W_{ij}(r,E)$, как известно из теории гамильтоновых многообразий [4], представляет собой с точностью до множителя метрику $g_{ij} = \frac{2\mu}{\hbar} W_{ij}(r,E)$ на поверхности $H(r,p)=E$, то преобразования Лиувилля являются группой движения метрики g_{ij}. Данная группа представляет собой композицию взятого с определенным весом ортогонального преобразования, соответствующего первому члену в (5), и сдвига (второй член в (5)).

Процедура отыскания спектра в задаче с потенциалом $\widehat{W}(f(y),E)$ (см. (2)) сводится к следующему. Для данного потенциала подбирается потенциал $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$, для которого спектральная задача (4) решается точно и который удовлетворяет описанным ниже условиям. При этом предполагается, что глобальная структура спектра у обоих потенциалов одинакова. В качестве такого потенциала можно выбрать кусочно-линейный. Далее определяем функцию $r=f(y)$ из уравнения

$$If'^2(y) = \widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}^{-1}(f(y),E)\widehat{\rho}_0\widehat{V}(y,\widetilde{E}).$$

Тогда моделирующий потенциал $\widetilde{W}(y,\widetilde{E})$ примет вид

$$\widetilde{W}_{ij}(y,\widetilde{E}) = V_{ij}(y,\widetilde{E}) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{2}\{f(y),y\}\delta_{ij},$$

где $V_{ij}(y,\widetilde{E}) = \left(\widetilde{E} - \widetilde{U}_{ij}(y)\right)\delta_{ij} + \frac{C_j}{C_i}\Delta\widetilde{U}_{ij}(y)(1-\delta_{ij})$, а шварциан $\frac{1}{2}\{f(y),y\}$ рассматривается как возмущение при достаточно гладкой функции $f(y)$. Таким образом, $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$ представляет собой моделирующий потенциал в нулевом приближении. Поскольку $f'(y)>0$, то получаем условия, которым должен удовлетворять потенциал $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$:

1) совпадение числа точек поворота для диагонализованных потенциалов $\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(r,E)\widehat{\rho}_0$ и $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$, т.е. корней r_n, y_n уравнений $\langle\Psi|\,\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(r,E)\widehat{\rho}_0\,|\Psi\rangle = 0$, $\langle\Phi|\,\widehat{V}(y,\widetilde{E})\,|\Phi\rangle = 0$, которые сводятся к уравнениям, получаемым в однокомпонентном случае, если $V_{ii}(y,\widetilde{E}) = V(y,\widetilde{E})$ и $(\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(f(y),E)\widehat{\rho}_0)_{ii} = \widehat{W}(f(y),E)$ для любых $i=1,\ldots,n$ (скалярное произведение при этом обозначает покомпонентную запись данных уравнений и предполагает интегрирование по любым $r'\neq r$ и $y'\neq y$);

2) равенство «классических действий» между соответствующими точками поворота

$$S_n(E) = \left\langle \Psi \right| \int\limits_{r_n}^{r_{n+1}} \sqrt{\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(r,E)\widehat{\rho}_0}\,dr \left| \Psi \right\rangle = \left\langle \Phi \right| \int\limits_{y_n}^{y_{n+1}} \sqrt{\widehat{V}(y,\widetilde{E})}\,dy \left| \Phi \right\rangle = S_n(\widetilde{E}),$$

где потенциалы $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$ и $\widehat{\rho}_0^{-1}\widehat{W}(f(y),E)\widehat{\rho}_0$ представлены диагонализованными матрицами.

Далее схема нахождения энергетического спектра исходного уравнения (1) строится следующим образом: а) в нулевом приближении спектр (1) находится путем разрешения относительно E уравнений $S_n(E) = S_n(\widetilde{E}^{(0)})$, где $\widetilde{E}_n^{(0)}$ — собственные значения при использовании потенциала $\widehat{V}(y,\widetilde{E})$; б) последующие приближения определяются подстановкой в точные уравнения $S_n(E) = S_n(\widetilde{E})$ приближенных собственных значений для $\widetilde{W}(y,\widetilde{E})$, получаемых по теории возмущений, и их разрешения относительно E_n. Итак, уравнения для S_n задают связь спектров энергий для исходного и моделирующего потенциалов, зная которую можно определить E. Оценка остаточных членов проводится аналогично одномерному случаю [1] с заменой скалярных функций на операторы. При этом получаются скалярные величины $A(R_n^{(0)})$, $M(\widetilde{E}_n^{(0)})$ и $w_{nn}(\widetilde{E}_n^{(0)})$, которые являются композицией скалярных оценок для i-х компонент, взвешенных с относительными весами C_j/C_i.

В качестве приложения описанного многокомпонентного обобщения метода моделирующих потенциалов рассматривалась задача построения моделирующего потенциала для определения спектра системы двух заряженных частиц с учетом диполь-дипольного взаимодействия (водородоподобный атом) [5]. Оказалось, что данный метод на 50% лучше приблизил точный спектр E_{nl}^{exact} по сравнению с обычной квазиклассикой, хотя и не дал нужной точности в силу того, что сам является модификацией квазиклассического подхода.

Литература

1. *Сидоренко В.Н.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 5. С. 59 (Moscow University Phys. Bull. 1999. No. 5. P. 73).
2. *Олвер Ф.* Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990.
3. *Желобенко Д.П., Штерн А.И.* Представления групп Ли. М.: Наука, 1983.
4. *Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т.* Современная геометрия: Методы и приложения. Т. 1. М.: Эдиториал УРСС, 1998. С. 95–96.
5. *Сидоренко В.И.* Спектральная задача для системы двух частиц с магнитным диполь-дипольным взаимодействием. М.: Диалог-МГУ, 1999.

Поступила в редакцию
07.07.99