Указанная частота соответствует ω_{ex} в подструктуре $(CH_2)_n$ [6]. Расчеты проводились на основе формулы (8), для чего были взяты следующие параметры, характерные для связи (C–H): $\mu = 6 \cdot 10^{-24}$ г, $D_0/r_0 = 1$, $(M_{01})^2 = 6 \cdot 10^{-19}$ см^2, и параметры $\mu = 6 \cdot 10^{-24}$ г, $D_0/r_0 = 0.3$, $\omega_B = 2.5 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$, $\alpha_t^2 = 2 \cdot 10^{-19}$ см^2, $b = 1.5 \cdot 10^{-8}$ см для связи (C–CH_3).

Результаты расчетов вероятности диссоциации связи (C–CH_3) в единицу времени или скорости процесса фрагментации в зависимости от энергии E_k образовавшегося фрагмента (CH_3), взятой в относительных единицах $s = E_k/(\hbar\omega_B)$, представлены на рис. 1. Для расчета были взяты следующие параметры: $N = 105$, $K = 35$, $P_{01} = 0.3$ (кривая *1*) и $N = 150$, $K = 50$, $P_{01} = 0.3$ (кривая *2*).

Как видно из рисунка, рассматриваемая функция $P_f(k)$ имеет резонансное поведение. Резонансное поведение функции $P_f(k)$ в зависимости от N и E_k при фиксированных K и P_{01}, а также от E_k и P_{01} при фиксированных K и N представлено на рис. 2 и 3.

Литература

1. *Abella D., Kurnit N.A., Hartmann S.R.* // Phys. Rev. 1966. **141**. P. 391.
2. *Goncalves A.M.P., Tallet A., Lefebvre R.* // Phys. Rev. 1969. **188**. P. 576.
3. *Grad J., Hernandez G., Mukamel S.* // Phys. Rev. 1988. **A37**. P. 3835.
4. *Mukamel S.* // Ann. Rev. Phys. Chem. 2000. **51**. P. 691.
5. *Radzig A.A., Smirnov B.M.* // Data on Atoms, Molecules and Ions. Berlin: Springer-Verlag, 1995.
6. *Nakanishi K.* // Infrared Absorption Spectroscopy. San Francisco; Tokyo, 1962.

Поступила в редакцию
11.03.02

УДК 530.145.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ЯДЕРНО-КУЛОНОВСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

О. С. Павлова, А. Р. Френкин

(*кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

E-mail: th180@phys.msu.su

Методом интегральных преобразований, связанным с исследованием лапласовских образов волновых функций, находится дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с произвольным потенциалом притяжения. В матричных элементах характеристического уравнения, представленных в виде формального разложения по обратным степеням энергии, произведено суммирование рядов. На примерах обобщенного потенциала Юкавы и экранированного кулоновского потенциала продемонстрированы возможности метода, который с успехом может быть использован и для других потенциалов.

В статьях [1, 2] был разработан операторный вариант метода интегральных преобразований [3], позволяющий сравнительно просто определять дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера (УШ) с произвольным потенциалом притяжения. Настоящая работа является продолжением наших исследований в данной области и содержит подробные вычисления на ЭВМ энергетического спектра УШ с типичными ядерно-кулоновскими потенциалами: обобщенным потенциалом Юкавы и экранированным кулоновским, широко используемыми в ядерной и атомной физике.

Будем рассматривать радиальное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Psi - V(r)\Psi + E\Psi = 0 \qquad (1)$$

($\hbar = 2m = 1$, $l = 0, 1, 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число) с потенциалом притяжения

$$V(r) = V(r/a) = \sum_{N=-1}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N, \quad a > 0, \qquad (2)$$

убывающим на бесконечности и имеющим кулоновскую особенность $b_{-1}a/r$ при $r = 0$.

Как показано в работе [2], дискретный спектр энергий E_p $(p = 0, \ldots, p_{\max})$ уравнения (1) определяется из характеристического уравнения

$$\det||\mathcal{B}_{nk} - (n+\delta)\delta_{nk}|| = 0, \quad n, k = 0, 1, \ldots, \qquad (3)$$

где

$$\mathcal{B}_{nk} = -b_{-1}a^2 x\delta_{nk} + a^2 \sum_{N=0}^{\infty} b_N \beta_{nk}(N) x^{N+2},$$

$$E = -\frac{1}{(2ax)^2}, \quad \delta = l+1, \tag{4}$$

$$\beta_{nk}(N) = \frac{(-1)^{n+1}k!}{n!} \times$$
$$\times \sum_{\substack{m=\max\{0,\\ n-N-1\}}}^{k} \frac{(-1)^m \Gamma(m+N+2\delta+1)\Gamma(m+N+2)}{m!(k-m)!\Gamma(m+2\delta)\Gamma(m+N-n+2)}. \tag{5}$$

В этом подходе матрица $\mathcal{B}_{nk}$ в характеристическом уравнении (3) представлена в виде формального разложения по x (обратным степеням $|E|^{1/2}$). Для определения спектра энергий обычно расходящийся ряд в (4) должен быть просуммирован и величины $\mathcal{B}_{nk}$ представлены в замкнутой форме.

В данной работе мы проводим подробные вычисления на ЭВМ спектров энергий УШ, при этом используются два типичных потенциала притяжения:

1) обобщенный потенциал Юкавы с экспоненциальным убыванием на бесконечности, к которому добавлен кулоновский потенциал:

$$V(r) = -\sum_{i=1}^{I} \frac{V_i}{r}\left(\frac{r}{a}\right)^i e^{-r/a} - \frac{z}{r}, \;\; V_i > 0, \;\; a > 0, \;\; z > 0, \tag{6}$$

2) экранированный кулоновский потенциал (со степенным убыванием на бесконечности):

$$V(r) = -\frac{V_0}{r}\frac{1}{1+(r/a)^2} \;\; V_0 > 0, \;\; a > 0. \tag{7}$$

Отметим существенное различие этих двух случаев. При $z=0$ спектр УШ с потенциалом (6) может иметь конечное число $E_0, \dots, E_{\max}$ уровней энергии или не иметь их вообще. Однако при $z \neq 0$ всегда имеется бесконечное число дискретных уровней. Спектр УШ с потенциалом (7) при $a < \infty$ всегда имеет конечное число уровней энергии.

I. Исследуем сначала энергетический спектр с обобщенным потенциалом Юкавы (6). В этом случае коэффициенты разложения b_N в (2) равны

$$b_{-1} = -\frac{V_0+z}{a},$$
$$b_N = \sum_{i=0}^{I} \frac{V_i}{a}\frac{(-1)^{N+i}}{(N+1-i)!}, \quad N = 0, 1, \dots, \tag{8}$$

а матрица $\mathcal{B}_{nk}$ (4) имеет вид

$$\mathcal{B}_{nk} = za\delta_{nk} + \sum_{i=0}^{I} \mathcal{B}^i_{nk},$$
$$\mathcal{B}^i_{nk} = q_0 x \delta_{i0}\delta_{nk} + q_i x^2 \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^{N+1}x^N}{(N+1-i)!}\beta_{nk}(N), \tag{9}$$
$$q_i = V_i a, \quad i = 0, 1, \dots, I.$$

Дифференцируя i раз формулу

$$\delta_{nk} + \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N x^{N+1}}{(N+1)!}\beta_{nk}(N) = \frac{1}{x} b^0_{nk}(x),$$
$$b^0_{nk}(x) = \frac{1}{q_0}\mathcal{B}^0_{nk}, \tag{10}$$

получаем

$$\mathcal{B}^i_{nk} = (-1)^i q_i x^{i+1} \frac{d^i}{dx^i}\left(\frac{1}{x} b^0_{nk}\right). \tag{11}$$

Заметим, что при фиксированных значениях величин n, k, l элементы матрицы $\mathcal{B}^0_{nk}$ могут быть получены непосредственным суммированием ряда (10). Однако проще получить величину $\mathcal{B}^0_{nk}(x)$ в замкнутой форме другим способом, связанным с исследованием некоторого дифференциального уравнения для лапласовских образов волновых функций УШ, что было сделано в нашей работе [3]. Для матрицы $b^0_{nk}(x)$ там было получено выражение

$$b^0_{nk}(x) = \frac{xk!}{(1+x)^{n+k+2\delta}\Gamma(k+2\delta)} \times$$
$$\times \sum_{m=\max\{n-k,0\}}^{n} \frac{x^{k-n+2m}(1-x^2)^{n-m}\Gamma(k+m+2\delta)}{m!(n-m)!\Gamma(k+m-n+1)}. \tag{12}$$

Как и следовало ожидать, оба способа дают одинаковые результаты для величин $b^0_{nk}(x)$.

Специально отметим, что метод определения спектра, разработанный в [3], может быть использован только для потенциалов юкавского типа, для всех остальных потенциалов приходится непосредственно суммировать расходящиеся ряды (4), чтобы записать матрицу $\mathcal{B}_{nk}$ в замкнутой форме.

а) Продемонстрируем сначала возможности метода интегральных преобразований для нахождения энергетического спектра УШ с экспоненциальным потенциалом

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = -\frac{V_1}{a} e^{-r/a} \tag{13}$$

(т. е. в формуле (6) только $V_1 \neq 0$, все остальные величины $V_i = 0$). Известно, что в этом случае при $l = 0$ УШ имеет точное решение, причем энергетический спектр определяется из уравнения [4]

$$J_{1/x}(2\sqrt{q_1}) = 0. \tag{14}$$

В дальнейшем мы сравним решения характеристического уравнения (3) с точным спектром, полученным из (14), и исследуем сходимость значений корней уравнения x_p, $p = 0, \dots, p_{\max}$, с увеличением ранга матрицы $\mathcal{B}_{nk}$. Матрица

$$\mathcal{B}_{nk} = \mathcal{B}^1_{nk} = -q_1 x^2 \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x} b^0_{nk}\right) \tag{15}$$

определяет вид уравнения (3), которое разрешается с помощью ЭВМ.

Приведем значения первых корней x_0 характеристического уравнения (3) в зависимости от ранга K матрицы $\mathcal{B}_{nk}$ при $l=0$ для некоторых значений параметра $q_1 = V_1 a$ и сравним их с точными значениями x_0, полученными из уравнения (14).

Возможности метода интегральных преобразований продемонстрированы в табл. 1.

Таблица 1

Зависимость значений величины x_0 от ранга матрицы K и параметра $q_1 = aV_1$

$2\sqrt{q_1}$	3.8317	5.1356	6.3801	7.5883	8.7714
$K=1$	1.2247	.51195	.34622	.26522	.21626
$K=2$	1.0190	.51190	.33957	.25247	.20080
$K=3$	1.0166	.50464	.33400	.25006	.20006
$K=4$	1.0139	.50096	.33336	.25004	.20004
$K=5$	1.0083	.50012	.33335	.25002	.20000
$K=6$	1.0039	.50001	.33334	.25000	.20000
$K=7$	1.0016	.50001	.33333	.25000	.20000
Точное значение	1.0000	.50000	.33333	.25000	.20000

Параметры q_1 в табл. 1 подобраны так, чтобы точные значения $1/x$ для первых корней были равны целым числам 1, 2, 3, 4, 5. Заметим, что при параметре $q_1 = (5.1356223/2)^2$ значения корней уравнения (3) для рангов матрицы $K=1$ и $K=2$ (т. е. в двух первых приближениях) практически совпадают. Это связано с тем, что для значения корня $x=0.5$, которое соответствует параметру $q_1 = 27/4$ во втором приближении, первые недиагональные элементы матрицы $\mathcal{B}_{01}(x)$ и $\mathcal{B}_{10}(x)$ (15) обращаются в нуль. Поэтому при параметрах q_1, близких к значению $2\sqrt{q_1} = 5.196$ (т. е. при корнях уравнения (3), близких к $x=0.5$), хорошая сходимость результатов наблюдается только с третьего приближения.

б) Исследуем теперь спектр УШ с обобщенным потенциалом Юкавы (6) при $I=1$. Тогда экспоненциальный потенциал можно рассматривать как поправку к потенциалу Юкавы и записать (6) в виде

$$V(r) = -\frac{V_0}{r} e^{-r/a} \left\{1 + \varepsilon\left(\frac{r}{a}\right)\right\}, \ \varepsilon = \frac{V_1}{V_0}, \ V_0 \neq 0, \ z = 0. \tag{16}$$

Матрица $\mathcal{B}_{nk}$ для такого потенциала равна

$$\mathcal{B}_{nk} = \mathcal{B}^1_{nk} = -q_0 x \left\{1 - \varepsilon x \frac{d}{dx}\right\} \left(\frac{1}{x} b^0_{nk}\right). \tag{17}$$

Из характеристического уравнения (3) может быть получен энергетический спектр $E_p = E_p(q_0, \varepsilon, l)$ $(p = 0, \ldots, p_{\max})$ для значений квантовых чисел $l = 0, 1, \ldots$ и любых значений параметров $q_0 = V_0 a$ и ε.

В табл. 2 и 3 приведены значения трех первых корней уравнения (3) для $l=0$ и $l=1$ некоторых значений параметров q_0 и ε при ранге матрицы $K=4$.

Таблица 2

Зависимость значений величин x_0, x_1, x_2 для S-состояния ($l=0$) от параметров q_0 и ε при ранге матрицы $K=4$

q_0	10	30	50	70	100
$\varepsilon=0$	.12369	.03567	.02082	.01470	.01020
		.08916	.04730	.03215	.02170
			.09661	.05754	.03640
$\varepsilon=.25$	.11718	.03507	.02062	.01460	.01015
	.65910	.08272	.04534	.03121	.02126
			.08281	.05301	.03461
$\varepsilon=.5$	.11158	.03450	.02041	.01449	.01010
	.36878	.07751	.04360	.03035	.02085
		.15981	.07463	.04960	.03310
$\varepsilon=.75$	.10670	.03395	.02021	.01439	.01005
	.30128	.07316	.04205	.02955	.02046
		.13364	.06883	.04685	.03178
$\varepsilon=1$	.10239	.03343	.02002	.01429	.01000
	.26177	.06945	.04065	.02882	.02009
		.11872	.06433	.04454	.03061

Таблица 3

Зависимость значений величин x_0, x_1, x_2 для P-состояния от параметров q_0 и ε ($l=1$) при ранге матрицы $K=4$

q_0	10	30	50	70	100
$\varepsilon=0$		.09019	.04747	.03221	.02172
			.09201	.05697	.03635
					.06085
$\varepsilon=.25$	.56203	.08320	.04542	.03124	.02127
		.18684	.08161	.05287	.03461
				.09408	.05318
$\varepsilon=.5$	.37252	.07760	.04361	.03035	.02085
		.15045	.07428	.49557	.03309
			.14869	.07791	.04842
$\varepsilon=.75$	.29926	.07297	.04200	.02953	.02045
		.13071	.06863	.04679	.03176
			.11235	.06923	.04498
$\varepsilon=1$	.25551	.06906	.04056	.02878	.02007
		.11721	.06408	.04443	.03057
			.09705	.63653	.04226

II. Рассмотрим теперь дискретный спектр УШ с экранированным кулоновским потенциалом притяжения (7), для которого отличные от нуля коэффициенты разложения равны

$$b_{-1} = -\frac{V_0}{a}, \quad b_0 = -\frac{V_0}{a}(-1)^N.$$

Тогда матрица $\mathcal{B}_{nk}$ принимает вид

$$\mathcal{B}_{nk} = q_0 x \delta_{nk} + q_0 x^3 \sum_{N=0}^{\infty} (-1)^N x^{2N} \beta_{nk}(2N+1). \tag{18}$$

Следуя работе [2], выделяем под знаком суммы множитель $\beta_{nk}(2N+1)/\Gamma(2N+3)$ и используем интегральное представление для $\Gamma(2N+3)$. Тогда матрица B_{nk} может быть записана в виде

$$B_{nk} = q_0 x \delta_{nk} + q_0 \int\limits_0^\infty e^{-t/x} t^2\, dt \times \\ \times \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N t^{2N} \beta_{nk}(2N+1)}{\Gamma(2N+3)}. \quad (19)$$

Сумма по N в формуле (19) легко вычисляется с помощью ЭВМ при любых значениях l [2] и представляется в виде

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^N t^{2N} \beta_{nk}(2N+1)}{\Gamma(2N+3)} = -\frac{P^l_{n+k+1}(t^2)}{(1+t^2)^{n+k+2\delta}},$$

где $P^l_{n+k+1}(t^2)$ — некоторые полиномы по t^2 степени $n+k+1$ (может быть, и ниже).

Для иллюстрации приведем несколько первых полиномов при $l=0$ $(\delta=1)$, входящих в функции $B_{nk} = q_0 x \delta_{nk} + q_0 \int\limits_0^\infty e^{-t/x} t^2\, dt\, \frac{P^l_{n+k+1}(t^2)}{(1+t^2)^{n+k+2\delta}}$:

$$P^0_1 = 3 + t^2, \quad P^0_2 = 3 - t^2, \quad P^0_3 = 12 - 7t^2 + 6t^4 + t^6.$$

Точно такие же полиномы были получены для потенциала Хюльтена [2].

Приведем результаты вычислений корней характеристического уравнения (3) при $l=0$ и ранге матрицы $K=3$ для трех значений параметра $q_0 = V_0 a$ (табл. 4).

Таблица 4

Зависимость значений величины x_0 от параметра q_0 и ранга матрицы K для S-состояния ($l=0$)

q_0	10	50	100
$K=1$	.10599	.02004797	.010006
$K=2$	.105457	.02004773	.01000599
$K=3$	.105456	.02004772	.01000599

Отметим хорошую сходимость значений корней x_p с увеличением ранга матрицы B_{nk} в характеристическом уравнении. Это связано с отсутствием в разложении (19) для B_{nk} членов, пропорциональных x^2.

Приведенные данные (табл. 4) доказывают прекрасную сходимость результатов вычислений с увеличением ранга матрицы. Даже при сравнительно небольшом значении параметра $q_0 = 10$ для получения высокой точности достаточно трех приближений. Для бо́льших значений $q_0 = 50$ и $q_0 = 100$ (кулоноподобная задача) достаточно и двух приближений.

Приведенные примеры демонстрируют хорошую сходимость процедуры нахождения дискретного спектра УШ методом интегральных преобразований. Подобным образом может быть решено уравнение (3) для многих других голоморфных притягивающих потенциалов.

Авторы благодарны А.В. Борисову и В.Ч. Жуковскому за плодотворное обсуждение результатов работы.

Литература

1. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 2. С. 57 (Moscow University Phys. Bull. 2001. No. 2. P. 66).
2. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 5. С. 37 (Moscow University Phys. Bull. 2001. No. 5. P. 44).
3. *Павлова О.С., Френкин А.Р.* // ТМФ. 2000. **125**. № 2. С. 242.
4. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969.

Поступила в редакцию
15.04.02