

УДК 519.622; 535.4

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА В КАЧЕСТВЕ АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

В. В. Соколовский¹, Ю. В. Попов¹, А. А. Гусев², С. И. Веницкий²

В работе на ряде тестовых примеров показано, что потенциалы нулевого радиуса можно с успехом использовать для конструирования алгоритма численного решения одномерной задачи рассеяния. Предложен класс сепарабельных потенциалов, эквивалентных потенциалам нулевого радиуса, которые позволяют решать трехмерную задачу рассеяния при сохранении требования ограниченности волновой функции.

Ключевые слова: алгоритм, сепарабельные потенциалы, задача рассеяния, численные методы, математическое моделирование.

Введение. В математическом моделировании физических процессов важную роль играют точно решаемые модели, когда можно явно определить спектр, собственные функции, резонансы, параметры рассеяния и т.п. К числу таких моделей относится описание движения частиц в потенциале, сосредоточенном на некотором дискретном множестве точек (δ -потенциал). Большинство работ на эту тему выполнено в квантовой механике.

Одноцентровый гамильтониан с точечным взаимодействием в трехмерном случае впервые был исследован Бете и Пайерлсом в 1935 г. при рассмотрении дейтрона [1]. Ферми в 1936 г. при исследовании движения нейтронов в водородной среде ввел δ -потенциал, получивший позже название псевдопотенциала Ферми [2]. Обширный обзор приложений в атомной физике дан в монографии Демкова и Островского [3].

Несмотря на огромный объем физических и математических работ по δ -потенциалам (см., например, монографию [4]), практически в стороне осталась одна достаточно простая тема: можно ли при решении задачи рассеяния приблизить произвольный ограниченный потенциал конечной решеткой, состоящей из δ -функций. Поскольку задача рассеяния на узлах решетки решается точно, то такой подход имеет преимущества по сравнению с традиционным разложением неизвестной волновой функции в ряд по некоторому ортонормированному базису. В самом деле, при разложении волновой функции в квантовой задаче рассеяния для системы нескольких частиц возникают известные проблемы [5–7]. Во-первых, практически очень тяжело оценивать вклад отброшенной части базиса. Во-вторых, асимптотика полученного решения, как правило, отличается от асимптотики точного решения. В-третьих, уточнение любых спектральных характеристик (энергии связанных состояний, ширины и положения резонансов, положения угловых пиков и т.п.) требует значительного увеличения размеров базиса.

Можно ли приблизить кусочно-непрерывный ограниченный потенциал конечной суммой сингулярных δ -функций и использовать такое представление в качестве алгоритма решения эллиптического дифференциального уравнения? Ответ на этот вопрос далеко не очевиден, поскольку в самом уравнении появляется произведение функций, сингулярных в одной точке (сингулярность самой функции накладывается на сильную сингулярность дельта-функции). В данной работе на основе численного эксперимента показано, что в одном измерении такое приближение хорошо работает и, при увеличении числа дельта-функций, сходится к точному решению. Попутно обнаружено, что сетка равных площадей, предложенная в [3], менее эффективна, чем простая сетка равных интервалов.

В трехмерном пространстве отмеченная выше сингулярность волновой функции значительно сильнее, чем простой излом в одномерном случае. Хотя амплитуда рассеяния и здесь определяется специальными граничными условиями, однако приходится отказаться от требования ограниченности волновой функции [4]. В настоящей работе предложен способ преодолеть эту трудность и получена математическая схема, которая позволяет в принципе приближать потенциал δ -функциями в многомерном пространстве и свести исходную задачу нахождения амплитуды рассеяния к решению системы линейных алгебраических уравнений.

¹ Институт ядерной физики, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992, Москва; e-mail: vvolf@mail.ru; popov@srd.sinp.msu.ru

² Объединенный институт ядерных исследований, 141980, г. Дубна; e-mail: gusev_baatar@mail.ru; vinitsky@thsun1.jinr.ru

1. Приближение непрерывного ограниченного потенциала δ -функциями в одномерном случае

1.1. Постановка задачи. В этом разделе проверяется гипотеза о возможности использования представления потенциала взаимодействия δ -функциями в качестве алгоритма решения дифференциального уравнения на примере уравнения Гельмгольца. Рассмотрены потенциалы взаимодействия, которые локализованы в ограниченной области пространства, что позволяет приблизить их конечным числом δ -функций.

Уравнение Гельмгольца в случае одной переменной записывается в виде

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f + (k^2 - V(x))f = 0, \quad -\infty < x < \infty. \quad (1)$$

Будем считать, что потенциал $V(x)$ — вещественная кусочно-непрерывная функция, удовлетворяющая условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|) |V(x)| dx < \infty,$$

и что для задачи рассеяния ($k > 0$) формулируются следующие граничные условия:

$$f(x)_{x \rightarrow -\infty} = e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}, \quad f(x)_{x \rightarrow +\infty} = D(k)e^{ikx}. \quad (2)$$

Величина $R(k)$ называется амплитудой отражения, а $D(k)$ — амплитудой прохождения, $|R(k)|^2$ и $|D(k)|^2$ называются соответственно коэффициентами отражения и прохождения. Из условия сохранения потока для любого k выполняется равенство

$$|R(k)|^2 + |D(k)|^2 = 1,$$

причем $|D(0)|^2 = 0$, $|R(0)|^2 = 1$, т.е. $D(0) = 0$, $R(0) = -1$, при $k = 0$.

В задачах рассеяния дифференциальное уравнение (1) удобно преобразовать в одномерное интегральное вида

$$f(x) = e^{ikx} \left[1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^x V(\xi) e^{-ik\xi} f(\xi) d\xi \right] + e^{-ikx} \left[-\frac{i}{2k} \int_x^{\infty} V(\xi) e^{ik\xi} f(\xi) d\xi \right], \quad (3)$$

из которого, с учетом (2), следуют определения

$$R(k) = -\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\xi) e^{ik\xi} f(\xi) d\xi, \quad D(k) = 1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\xi) e^{-ik\xi} f(\xi) d\xi. \quad (4)$$

Только одномерный потенциал без специальных оговорок можно представить суммой δ -функций:

$$V(x) \approx V^{(N)} = \sum_{n=1}^N V_n \delta(x - x_n). \quad (5)$$

Реализовать такое представление можно разными способами. Например, в [3] предлагается следующий вариант. Для знакопостоянного потенциала $V(x)$ необходимо разбить интервал $\Omega = (-\infty, \infty)$ на N частей $\Omega_N = \{(-\infty, \bar{x}_1), (\bar{x}_1, \bar{x}_2), \dots, (\bar{x}_{N-1}, \infty)\}$ таким образом, чтобы на каждом интервале интеграл

$S_j = \int_{\bar{x}_{j-1}}^{\bar{x}_j} V(x) dx$ имел одно и то же значение $S_j = S = N^{-1} \int_{\Omega} V(x) dx$. Тогда коэффициенты при δ -

функциях получаются одинаковыми: $V_j = S$, $j = 1, \dots, N$, а δ -потенциалы помещают в “центры тяжести” потенциала $V(x)$ на каждом интервале, то есть

$$x_j = \frac{\int_{\bar{x}_{j-1}}^{\bar{x}_j} x V(x) dx}{\int_{\bar{x}_{j-1}}^{\bar{x}_j} V(x) dx}.$$

Такую сетку $\Omega_S(x_j, j = 1, \dots, N)$ с неравномерным распределением узлов x_j мы будем далее называть сеткой равных площадей, или S -сеткой. Кроме того, очевидно определение сетки равных интервалов $\Omega_L(x_j, j = 1, \dots, N)$, или L -сетки, с равномерным распределением узлов x_j на конечном интервале $\Omega_{AB} = [A, B]$:

$$x_j = A + (j - 1/2)h, \quad V_j = \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} V(x) dx, \quad h = \frac{B - A}{N}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Подставляя в (3) представление потенциала (5), получим

$$f(x) = e^{ikx} - \frac{i}{2k} \sum_{n=1}^N V_n e^{ik|x-x_n|} f_n, \quad f_n \equiv f(x_n). \quad (6)$$

Дискретное представление для амплитуды отражения и прохождения получаем из (4):

$$R(k) \approx R^{(N)}(k) = -\frac{i}{2k} \sum_{n=1}^N V_n e^{ikx_n} f_n, \quad D(k) \approx D^{(N)}(k) = 1 - \frac{i}{2k} \sum_{n=1}^N V_n e^{-ikx_n} f_n. \quad (7)$$

Для нахождения коэффициентов f_n из (6), которые, собственно, и характеризуют распределение волнового поля в среде, следует линейная система алгебраических уравнений

$$\left(1 + \frac{iV_j}{2k}\right) f_j + \frac{i}{2k} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq j}}^N V_n e^{ik|x_n - x_j|} f_n = e^{ikx_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (8)$$

Определим локальные коэффициенты D_n и R_n , связанные с коэффициентами f_n соотношениями

$$\begin{aligned} D_n &= 1 - \frac{i}{2k} \sum_{j=1}^n V_j f_j e^{-ikx_j}, \quad D_N = D^{(N)}(k), \quad D_0 = 1, \\ R_n &= -\frac{i}{2k} \sum_{j=n+1}^N V_j f_j e^{ikx_j}, \quad R_N = 0, \quad R_0 = R^{(N)}(k). \end{aligned} \quad (9)$$

Отсюда и из уравнения (8) следует

$$f_n = D_n e^{ikx_n} + R_n e^{-ikx_n}, \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), получаем систему двучленных рекуррентных соотношений для перенормированных коэффициентов $\hat{R}_n = \frac{R_n}{D^{(N)}(k)}$, $\hat{D}_n = \frac{D_n}{D^{(N)}(k)}$, $D^{(N)}(k) \neq 0$:

$$\begin{pmatrix} \hat{R}_{n-1} \\ \hat{D}_{n-1} \end{pmatrix} = A_n \begin{pmatrix} \hat{R}_n \\ \hat{D}_n \end{pmatrix}, \quad A_n = \begin{pmatrix} 1 - \frac{iV_n}{2k} & -\frac{iV_n}{2k} e^{i2kx_n} \\ \frac{iV_n}{2k} e^{-i2kx_n} & 1 + \frac{iV_n}{2k} \end{pmatrix}, \quad \det(A_n) = 1 \quad (11)$$

с граничными условиями

$$\hat{D}_0 = \frac{1}{D^{(N)}(k)}, \quad \hat{R}_0 = \frac{R^{(N)}(k)}{D^{(N)}(k)}, \quad \hat{D}_N = 1, \quad \hat{R}_N = 0, \quad (12)$$

откуда вычисляются искомые значения амплитуд отражения $R^{(N)}(k)$ и прохождения $D^{(N)}(k)$:

$$R^{(N)}(k) = \frac{\hat{R}_0}{\hat{D}_0}, \quad D^{(N)}(k) = \frac{1}{\hat{D}_0}. \quad (13)$$

Заметим, что для всех n матрица A_n имеет собственные значения $\lambda_{1,2} = \lambda_n = 1$ и нормированные собственные вектора с произвольной фазой $\varphi \pmod{2\pi}$:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ikx_n} \\ -e^{-ikx_n} \end{pmatrix}.$$

1.2. Расчеты на различных сетках. В данном разделе обсуждаются результаты расчетов коэффициента прохождения с использованием S - и L -сеток. Для оценки эффективности типа сетки результаты численных расчетов для трех известных потенциалов по схеме (11)–(13) сравниваются с аналитическими значениями коэффициента прохождения $|D(k)|^2$, показанными на рис. 1.

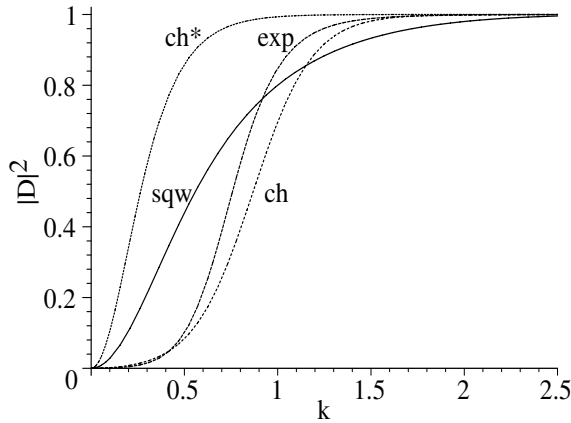


Рис.1. Коэффициенты прохождения $|D|^2$ для потенциалов V_{sqw} , V_{exp} и V_{ch} при значениях параметров $V_0 = 1$ и $a = 1$. Кривая ch^* соответствует потенциалу V_{ch} при значениях параметров $V_0 = -1$ и $a = 1$

Для потенциала “прямоугольной стенки” $V_{sqw} = V(x) = \{V_0, |x| \leq a/2, 0, |x| > a/2\}$ (высота V_0 и ширина a) коэффициенты прохождения и отражения имеют вид

$$|D_{sqw}|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2 k_0 a}, \quad |R_{sqw}|^2 = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2 k_0 a}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2 k_0 a}, \quad \text{где } k_0 = \sqrt{k^2 - V_0}.$$

Для потенциала $V_{exp} \equiv V(x) = V_0 e^{-|x|/a}$ коэффициенты прохождения и отражения выражаются соотношениями

$$|D_{exp}|^2 = \frac{1-f}{2}, \quad |R_{exp}|^2 = \frac{1+f}{2}, \quad f = \operatorname{Re} \left(\frac{I_{i\gamma}(\alpha) \frac{d}{d\alpha} I_{-i\gamma}(\alpha)}{I_{-i\gamma}(\alpha) \frac{d}{d\alpha} I_{i\gamma}(\alpha)} \right) \bigg|_{\alpha=2a\sqrt{V_0}},$$

где $I_{i\gamma}(\alpha)$ — модифицированная функция Бесселя 1-го рода, $\gamma = 2ak$.

Для потенциала $V_{ch} \equiv V(x) = V_0 \operatorname{ch}^{-2} \left(\frac{x}{a} \right)$ коэффициенты отражения и прохождения также известны в аналитическом виде:

$$|D_{ch}|^2 = [1+g]^{-1}, \quad |R_{ch}|^2 = [1+g^{-1}]^{-1}, \quad g = \frac{\cos^2 \frac{\pi}{2} \sqrt{1-4\xi}}{\operatorname{sh}^2 \pi k a} = \frac{\operatorname{ch}^2 \frac{\pi}{2} \sqrt{4\xi-1}}{\operatorname{sh}^2 \pi k a},$$

где $\xi = V_0 a^2$. Следует отметить любопытную особенность этого потенциала в случае $V_0 < 0$. Если параметры потенциала связаны соотношением $V_0 a^2 = -n(n+1)$, где n — целое число, то $g = 0$ и, соответственно, $|R(k)|^2 \equiv 0$, т.е. имеет место полное прохождение волны независимо от величины ее волнового вектора k .

По качеству результатов расчетов коэффициентов отражения и прохождения для потенциальных барьеров вещественную ось k можно разбить на три области: область подбарьерного отражения ($k^2 \ll V_{\max}$), область критических частот ($k^2 \sim V_{\max}$) и область надбарьерного отражения ($k^2 \gg V_{\max}$). Кроме этого, следует рассмотреть случай потенциальной ямы. В области подбарьерного отражения преобладающая часть волны отражается (коэффициент отражения близок к 1), в области критических частот коэффициент отражения резко падает практически до нуля, а в области надбарьерного отражения преобладающая часть волны проходит. Практический интерес обычно представляет область критических частот, где и коэффициент отражения, и коэффициент прохождения не являются очень малыми величинами.

Сравнение численного решения с аналитическим производится оцениванием абсолютной погрешности коэффициента прохождения, представленной на рис. 2.

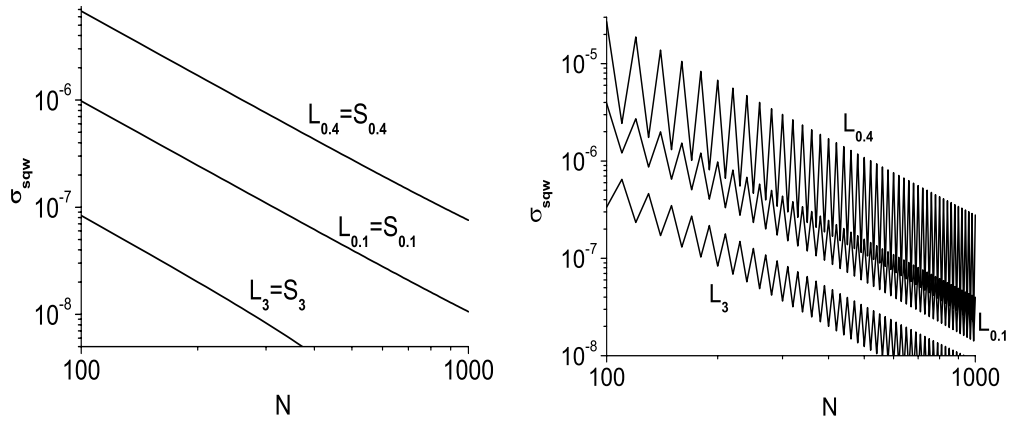


Рис. 2а. Абсолютная погрешность коэффициента прохождения $\sigma_{sqw} = ||D^{(N)}|^2 - |D_{sqw}|^2|$ для потенциала V_{sqw} на L_k - и S_k -сетках при $k = 0.1, 0.4, 3$ в зависимости от числа δ -функций $N = 100, (10), 1000$ при значениях параметров $V_0 = 1$ и $a = 1$ (здесь и ниже скобками обозначен шаг по оси абсцисс для построения графиков). На рисунке слева разбиение потенциала проводилось на интервале $x \in [-1/2, 1/2]$, на рисунке справа — $x \in [-1, 1]$

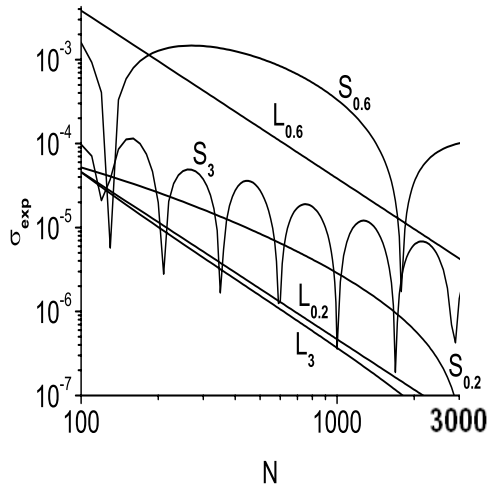


Рис. 2б. Абсолютная погрешность коэффициента прохождения $\sigma_{exp} = ||D^{(N)}|^2 - |D_{exp}|^2|$ для потенциала V_{exp} на L_k - и S_k -сетках при $k = 0.2, 0.6, 3$ в зависимости от числа δ -функций $N = 100, (10), 1000, (30), 3010$ при значениях параметров $V_0 = 1$ и $a = 1$. Разбиение потенциала проводилось на интервале $x \in [-17, 17]$

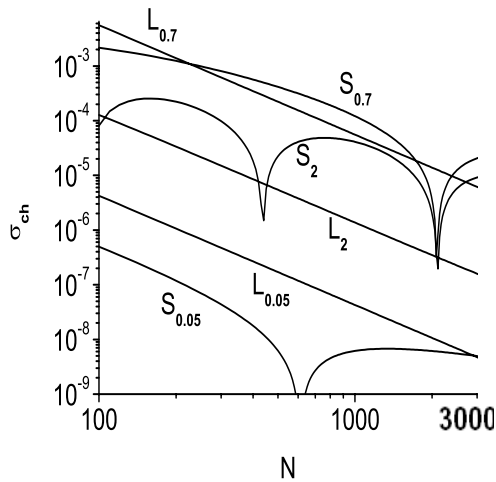


Рис. 2в. Абсолютная погрешность коэффициента прохождения $\sigma_{ch} = ||D^{(N)}|^2 - |D_{ch}|^2|$ для потенциала V_{ch} на L_k - и S_k -сетках при $k = 0.05, 0.7, 2$ в зависимости от числа δ -функций $N = 100, (10), 1000, (30), 3010$ при значениях параметров $V_0 = 1$ и $a = 1$. Разбиение потенциала проводилось на интервале $x \in [-9, 9]$

Как и следовало ожидать, наибольшие абсолютные погрешности коэффициентов прохождения наблюдаются в области критических значений, с уменьшением k относительная погрешность коэффициента прохождения не изменяется, а с увеличением k относительная погрешность коэффициента отражения возрастает. Относительная погрешность коэффициента прохождения при $N = 100$ не превышает 5 % для потенциалов V_{exp} и V_{ch} . Для потенциала “прямоугольной стенки” V_{sqw} оба вида разбиений совпадают и дают одинаковое приближенное решение, совпадающее с точным решением с погрешностью 0.1 %. Как видно из рис. 2а, графики абсолютной погрешности аппроксимации — это прямые линии, которые показывают, что L - и S -сетки дают аппроксимацию второго порядка точности (по числу узлов N). Выбор интервала разбиения не влияет на структуру S -сетки. Однако при формальном построении L -сетки для потенциала “прямоугольной стенки” на интервале $[A, B] \supset [a, b]$ имеются два узла сетки $a + \varepsilon_1$ и $b + \varepsilon_2$, $|\varepsilon_{1,2}| < h/2$, которые не совпадают с граничными точками интервала $[a, b]$, т.е. могут находиться как внутри, так и во вне $[a, b]$. Поэтому погрешности решения на такой L -сетке осциллируют, хотя в среднем второй порядок точности сохраняется, что и показано на правом рис. 2а.

Для потенциалов V_{exp} и V_{ch} наблюдаются осцилляции приближенного решения, полученного на S -сетке, вокруг точного решения (см. рис. 2б и 2в). Построив верхнюю огибающую, для осциллирующих погрешностей получаем, что S -сетка дает аппроксимацию первого порядка точности. При этом L -сетка для этих потенциалов дает равномерную сходимость второго порядка точности.

Отдельно исследован расчет коэффициентов отражения и прохождения для потенциальной ямы. Этот случай рассмотрен на примере потенциала V_{ch} . L -сетка и здесь дает приближение второго порядка точности (рис. 3, $V_0 = -1$, $a = 1$). Потенциал V_{ch} примечателен тем, что позволяет исследовать качество приближенного решения даже в экстремальном случае полного прохождения, которое, как упомянуто выше, наблюдается, например, при значениях параметров $V_0 = -2$, $a = 1$. L -сетка и в этом случае также дает приближение второго порядка точности.

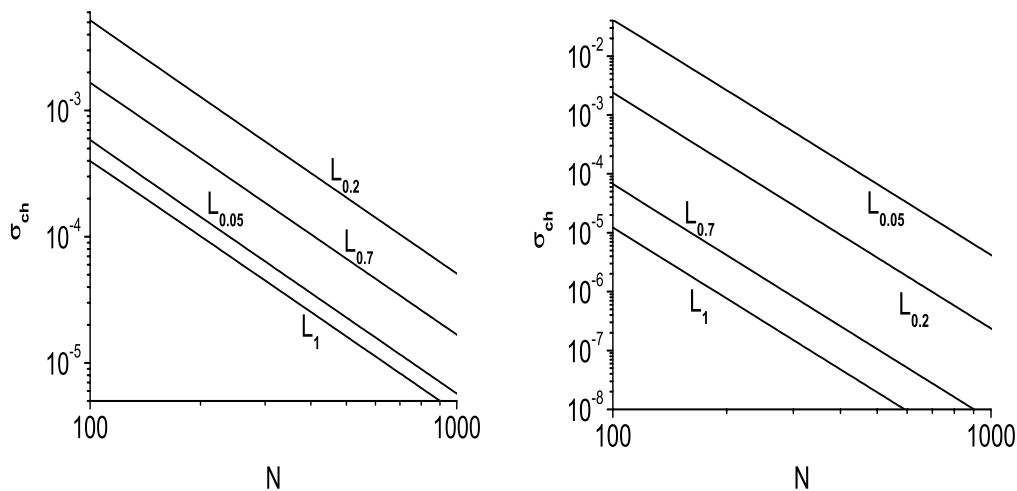


Рис. 3. Абсолютная погрешность коэффициента прохождения $\sigma_{\text{ch}} = ||D^{(N)}|^2 - |D_{\text{ch}}|^2|$ для потенциальной ямы V_{ch} на L_k -сетке при $k = 0.02, 0.2, 0.7, 1$ в зависимости от числа δ -функций $N = 100, (10), 1000$ при $a = 1$. Разбиение потенциалов проводилось на интервале $x \in [-9, 9]$. Слева: $V_0 = -1$, справа: $V_0 = -2$

Для контроля проведенных расчетов на L -сетке вычислялся коэффициент Рунге

$$r(k, N) = \log_2 \frac{|D(k, N) - D(k, 2N)|}{|D(k, 2N) - D(k, 4N)|},$$

при $N = 50, 100, 200, 400, 800$. На всем интервале $k \in [0.01, 3]$ получены значения $r(k, N) \approx 2$, что соответствует теоретической оценке точности аппроксимации второго порядка по числу узлов N сетки Ω_L .

Таким образом, на ряде точно решаемых одномерных моделей показано, что гипотеза о возможности использования представления потенциала взаимодействия δ -функциями в качестве основы численного алгоритма решения одномерного уравнения Гельмгольца вполне подтверждается. Обнаружено существенное различие качества приближений с помощью разных S - и L -сеток. Численным экспериментом установлено, что L -сетка более пригодна для вычислений во всех диапазонах k как для потенциальных барьеров, так

и для потенциальных ям, поскольку требует меньшего числа узлов N для достижения той же точности приближенного решения.

2. Рассеяние на потенциалах нулевого радиуса в трех измерениях

2.1. Постановка задачи. В трехмерном случае уравнение (1) принимает вид

$$\nabla^2 f + (k^2 - V(\vec{r}))f = 0, \quad \vec{r} \in \Omega \subset \{R^3 \setminus \{\vec{\Omega}_N\}\}, \quad f \in W_2^1(\Omega), \quad (14)$$

где потенциал $V(\vec{r})$ — вещественная кусочно-непрерывная функция, удовлетворяющая условию

$$|V(\vec{r})| < C(1 + |\vec{r}|)^{-3-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

Его можно переписать в известном интегральном представлении

$$f(\vec{k}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') f(\vec{k}, \vec{r}'). \quad (15)$$

Определение амплитуды рассеяния следует из асимптотики $f(\vec{k}, \vec{r})$ при $r \rightarrow \infty$:

$$t(\vec{k}, \vec{k}') = \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}') f(\vec{k}, \vec{r}'), \quad (16)$$

где $\vec{k} = k\vec{r}/r$. В квантовой механике (оптике) модуль амплитуды (16) описывает наблюдаемое распределение рассеянных частиц (компонент электромагнитного поля) как функции углов и энергии (длины волны). Амплитуда рассеяния $t(\vec{k}, \vec{k}')$ является обобщением амплитуд прохождения и отражения (4) на трехмерный случай.

Если мы по аналогии с (5) представим потенциал в виде суммы

$$V(\vec{r}) \simeq V^{(N)} = \sum_{n=1}^N V_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n), \quad (17)$$

подставим ее в (15) и попытаемся найти функции $f(\vec{k}, \vec{r}_n) = f_n$ полученного алгебраического уравнения, то придем к бесконечно большим коэффициентам этого уравнения, связанным с поведением функции Грина при $|\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow 0$.

Эта известная проблема многомерных δ -функций решается разными способами [4]. Наиболее распространенный способ состоит в следующем. Пусть $\vec{\rho}_j = \vec{r} - \vec{r}_j$, а $\vec{R}_{nj} = \vec{r}_n - \vec{r}_j$. Решение уравнения (14) ищется в виде

$$f(\vec{k}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N c_j \frac{e^{ik\rho_j}}{\rho_j}, \quad (18)$$

а вместо величин V_j вводятся величины α_j , удовлетворяющие граничному условию в окрестности j -й вершины системы точек $\vec{\Omega}_N$:

$$f|_{\rho_j \rightarrow 0} = -\frac{1}{4\pi} c_j \left[\frac{1}{\rho_j} - \alpha_j \right]. \quad (19)$$

Сравнивая (18) и (19), получаем для коэффициентов c_j систему уравнений

$$c_n(ik + \alpha_n) + \sum_{j \neq n}^N c_j \frac{e^{ikR_{nj}}}{R_{nj}} = 4\pi e^{i\vec{k}\vec{r}_n}. \quad (20)$$

Вместо c_n удобно ввести другие искомые величины $F_n = f_n^{-1} c_n e^{-i\vec{k}\vec{r}_n}$, для которых из (20) следует система уравнений

$$F_n = 1 - \frac{1}{4\pi} \sum_{j \neq n}^N f_j \frac{e^{ikR_{nj} - i\vec{k}\vec{R}_{nj}}}{R_{nj}} F_j. \quad (21)$$

В формуле (21) величина $f_n = 4\pi(\alpha_n + ik)^{-1}$ определяется как s -амплитуда рассеяния на уединенном центре. Рассматривая поведение волновой функции (18) при $r \rightarrow \infty$

$$f(\vec{k}, \vec{r})|_{r \rightarrow \infty} = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \sum_{j=1}^N f_j e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}_j} F_j,$$

получаем амплитуду рассеяния на системе центров нулевого радиуса

$$t^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{j=1}^N f_j e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_j} F_j(\vec{k}). \quad (22)$$

Как же быть, если мы хотим приблизить заданный трехмерный потенциал решеткой центров нулевого радиуса? Прежде всего необходимо установить связь величин α_i с параметрами потенциала V_i . Такая задача может быть решена методом проекционных операторов, который в теории интегральных уравнений квантовой теории рассеяния приводит к замене ядра уравнения на вырожденное (см., например, монографию [8], где приведен краткий обзор способов сепарабельзации потенциалов). При этом доказывается утверждение, что если $\hat{V}$ — вполне непрерывный оператор, то его можно сколь угодно точно по норме аппроксимировать оператором конечного ранга $\hat{V}^{(N)}$. “Правильный выбор” проекционного оператора обеспечивает более быструю сходимость интерполяционного процесса и, как правило, определяется “физическим чутьем” исследователя или применением известных вариационных принципов в теории рассеяния [3, 8].

Применим сказанное выше к нашему случаю. Из (15) и (16) следует интегральный аналог уравнения (14), так называемое уравнение Липпманна–Швингера для амплитуды рассеяния:

$$t(\vec{k}, \vec{k}'; E) = V(\vec{k}, \vec{k}') + \int \frac{d^3\vec{k}''}{(2\pi)^3} \frac{V(\vec{k}, \vec{k}'') t(\vec{k}'', \vec{k}'; E)}{E - (k'')^2 + i0}. \quad (23)$$

Вообще говоря, $k^2 = (k')^2 = E$, но при решении (23) можно отвлечься от этих ограничений и сделать предельный переход на завершающей стадии вычислений. В случае локального потенциала функция

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} V(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (24)$$

зависит от аргумента $(\vec{k} - \vec{k}')$, но для поиска амплитуды желательно использовать уравнение (23) в импульсном представлении. Локальный потенциал $V(\vec{r})$ — удобная абстракция, но в большинстве случаев реальный потенциал нелокален и зависит от E .

Если формально подставить (17) в (24), то получим

$$V(\vec{k}, \vec{k}') \approx V^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{n=1}^N V_n e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_n}. \quad (25)$$

Это типичный сепарабельный потенциал в импульсном представлении, для которого можно написать общее представление

$$\hat{V} \approx \hat{V}^{(N)} = \sum_{n=1}^N V_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n|. \quad (26)$$

Проекционный оператор $\hat{P} = \sum_{n=1}^N |\chi_n\rangle \langle \chi_n|$ должен удовлетворять условию $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Положим $\chi_n(\vec{k}) = \zeta_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}_n}$. На энергетической поверхности $k = k'$, и из (26) следует

$$V(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{n=1}^N V_n |\zeta_n(\vec{k})|^2 e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_n}. \quad (27)$$

Если $|\zeta_n(\vec{k})|^2 = 1$, то приходим к (25). Амплитуду рассеяния $t(\vec{k}, \vec{k}') \equiv t(\vec{k}, \vec{k}'; E)$ при $E = k^2 = (k')^2 > 0$ ищем в виде разложения с неизвестными функциями $S_n(\vec{k}')$:

$$t^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{n=1}^N V_n \chi_n(\vec{k}) S_n(\vec{k}'). \quad (28)$$

Подставляя (26) и (28) в уравнение (23), получим систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $S_n(\vec{k}')$:

$$S_n(\vec{k}') = \chi_n^*(\vec{k}') + \sum_{j=1}^N A_{nj}(k) V_j S_j(\vec{k}'), \quad (29)$$

где коэффициентная функция $A_{jn}(k) = A_{nj}(k)$ задана интегралом

$$A_{nj}(k) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{\chi_n^*(\vec{p})\chi_j(\vec{p})}{k^2 - p^2 + i0}. \quad (30)$$

Уравнение (29) можно записать иначе:

$$[1 - A_{nn}(k)V_n]S_n(\vec{k}') - \sum_{j=1, j \neq n}^N A_{nj}(k)V_jS_j(\vec{k}') = \chi_n^*(\vec{k}'). \quad (31)$$

Коэффициентная функция $A_{nn}(k) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{|\zeta_n(\vec{p})|^2}{k^2 - p^2 + i0}$ ограничена, если интеграл сходится. В случае (25) $|\zeta_n(\vec{p})|^2 = 1$ и интеграл расходится, из-за чего и возникают проблемы, обсуждаемые в этом разделе. Таким образом, введение регуляризующих функций (формфакторов) $|\zeta_n(\vec{k})|^2$ в формулу (27) обеспечивает конечность коэффициентов $A_{nm}(k)$.

2.2. Сравнение подходов. Мы имеем два выражения для амплитуды: (28) и (22). Как при этом связаны параметры α_j и V_j ? Для ответа на этот вопрос рассмотрим рассеяние на одном центре. Из (21) и (22) следует

$$t^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{4\pi}{\alpha_1 + ik} e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}_1}. \quad (32)$$

В то же время, из системы (28) и (29) получаем

$$\tilde{t}^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{|\zeta_1(\vec{k})|^2 e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}_1}}{\frac{1}{V_1} - A_1(k)}, \quad A_1(k) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{|\zeta_1(\vec{p})|^2}{k^2 - p^2 + i0}. \quad (33)$$

Выражение (33) перепишем в виде, удобном для сравнения с (32):

$$\tilde{t}^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{4\pi}{\frac{4\pi}{V_1 |\zeta_1(\vec{k})|^2} + iB} e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}_1}, \quad (34)$$

где

$$B(k) = \frac{4\pi i}{|\zeta_1(\vec{k})|^2} \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{|\zeta_1(\vec{p})|^2}{k^2 - p^2 + i0}. \quad (35)$$

Выберем формфактор $|\zeta_1(\vec{p})|^2$ в простейшем виде: $|\zeta_1(\vec{p})|^2 = \frac{X^2}{p^2 + X^2}$. Из (35) получаем $B = k - iX$; из (34) следует

$$\tilde{t}^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{4\pi}{\alpha_1 + ik} e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}_1}, \quad (36)$$

где

$$\alpha_1 = \frac{4\pi}{V_1 |\zeta_1(\vec{k})|^2} + X. \quad (37)$$

Из (32) и (36) видно, что $\tilde{t}^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}') = t^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}')$, но в (37) α_1 уже определено через потенциал V_1 и характеристики регуляризующей функции $\zeta_1(\vec{k})$.

Сепарабельное представление (26) для потенциала $V(\vec{k}, \vec{k}') = \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle$ в координатном представлении определяется соотношением

$$V(\vec{r}, \vec{r}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}\vec{r}} V(\vec{k}, \vec{k}') e^{i\vec{k}'\vec{r}'},$$

откуда, принимая во внимание (27), следует

$$V(\vec{r}, \vec{r}') \approx V^{(N)}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{n=1}^N V_n g_n(\vec{r} - \vec{r}_n) g_n^*(\vec{r}' - \vec{r}_n), \quad g_n(\vec{r} - \vec{r}_n) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \zeta_n(\vec{p}) e^{-i(\vec{r} - \vec{r}_n)\vec{p}}. \quad (38)$$

Напомним, что для локального потенциала матричный элемент $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}')$. Для функций $g_n(\vec{r})$, сосредоточенных в достаточно “узкой” пространственной области с характерным размером r_0 , нелокальный потенциал $V(\vec{r}, \vec{r}')$ становится квазилокальным и приближает его. Функцию $g_n(\vec{r})$ можно при этом назвать “размазанной” (или “диффузной”) δ -функцией, которая в пределе и определяет собственно δ -функцию.

Таким образом, выражение (28) и система линейных уравнений (29), основанные на введении регуляризующих формфакторов, выглядят перспективными для обобщения результатов, полученных в одномерном случае для (7) – (8), на две и три переменных, хотя вопрос о построении рекуррентной процедуры, аналогичной схеме (11) – (13), пока остается открытым, что ограничивает вычислительные возможности изучения сходимости аппроксимации потенциала (26) по числу вершин N решетки $\bar{\Omega}_N = \bigcup_{i=1}^N \bar{\omega}_i$. Однако схему (28) – (31) удобно применять для построения некоторых моделей квантовой механики или оптики, например, рассеяния плоской волны на системе квантовых точек для оценки ожидаемого распределения интенсивности и фазы рассеянной волны в дальней зоне. При этом параметры размытости (X) и интенсивности (V) δ -функции связаны с коэффициентами отражения (преломления) в области ее “диффузности”. В следующих разделах приведены примеры такого моделирования.

2.3. Задача рассеяния на двух точечных центрах. Рассмотрим простейшую задачу рассеяния плоской волны на двух обособленных точечных центрах, представленных диффузными δ -функциями (38). Пусть один центр находится в начале системы координат, а второй — на расстоянии $\vec{d}$ от него. Пусть для простоты “сила” потенциалов одинаковая: $V_1 = V_2 = V$. Амплитуда на поверхности энергий, согласно (28), принимает вид

$$t^{(2)}(\vec{k}, \vec{k}') = V|\zeta(\vec{k})|^2 \frac{[(1 - VA)(1 + e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{d}}) + VB(e^{i\vec{k}\vec{d}} + e^{-i\vec{k}'\vec{d}})]}{(1 - VA)^2 - V^2B^2},$$

где $k = k'$, $\vec{k}$ — волновой вектор падающей волны, $\vec{k}' = k\vec{r}/r$ — волновой вектор рассеянной волны в точке наблюдения, $|\zeta(\vec{k})|^2 = X^2/(X^2 + k^2)$ — регуляризующая функция,

$$A = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{|\zeta(\vec{p})|^2}{k^2 - p^2 + i0} = -\frac{1}{4\pi} |\zeta(\vec{k})|^2 (X + ik), \quad B = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{|\zeta(\vec{p})|^2 e^{i\vec{p}\vec{d}}}{k^2 - p^2 + i0} = -\frac{1}{4\pi} |\zeta(\vec{k})|^2 \frac{(e^{ikd} - e^{-Xd})}{d}.$$

Допустим, что в некотором оптическом приборе, например профилометре, мы хотим наблюдать эти два центра раздельно при большой длине опорной волны. Область сверхразрешения определяется неравенством $kd \ll 1$. Кроме того, потребуем $X \gg k$. Тогда

$$t^{(2)}(\vec{k}, \vec{k}') \approx \frac{4\pi}{\alpha + ik} \left[1 + \frac{i}{2} (\vec{k} - \vec{k}')\vec{d} \right], \quad \alpha = \frac{2\pi}{V} + \frac{1 + Xd - e^{-Xd}}{2d}. \quad (39)$$

Выражение (39) есть произведение амплитуды рассеяния на одиночном центре на угловой фактор, отражающий наличие второго центра.

Если $k/\alpha \ll 1$, то для фазы амплитуды (39) получаем выражение

$$\varphi \approx \frac{1}{2} (\vec{k} - \vec{k}')\vec{d} - \frac{k}{\alpha}. \quad (40)$$

Из (40) видно, что фаза имеет первый порядок малости по переменной kd . В то же время модуль амплитуды, как легко проверить, имеет второй порядок малости по той же переменной. Меняя точку наблюдения, из поведения фазы можно сделать заключение о величине d . Для этого, однако, надо иметь очень хорошее разрешение фазы [9].

Рассмотрим зависимость фазы φ от расстояния d в широком диапазоне его изменения. Формулу для амплитуды параметризуем следующим образом (λ — длина волны излучения):

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad d = \lambda s; \quad \vec{k}\vec{d} = 2\pi s \cos \theta_0; \quad \vec{k}'\vec{d} = 2\pi s \cos \theta; \quad X\lambda = \frac{\lambda}{r_0} = Q; \quad \frac{V}{4\pi\lambda} = P.$$

В такой параметризации при $N = 2$

$$\varphi(s, \theta_0, \theta; P, Q) = \arctg \frac{\text{Im } t^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}')}{\text{Re } t^{(N)}(\vec{k}, \vec{k}')}.$$

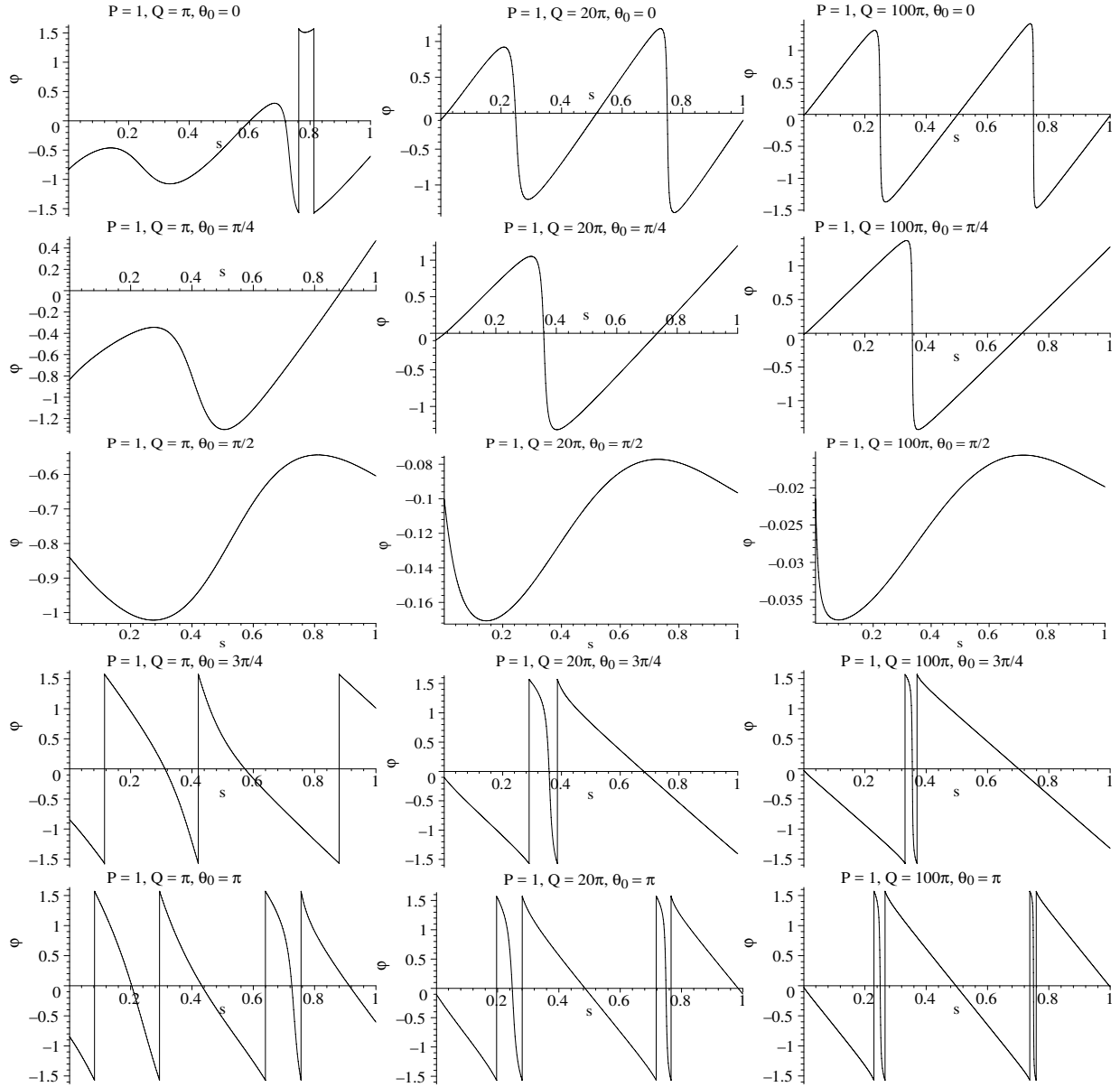


Рис. 5. Зависимость фазы φ от расстояния между центрами s при значениях параметра $Q = \pi, 20\pi, 100\pi$ и при значениях углов $\theta = \pi - \theta_0$ и $\theta_0 \in [0, \pi]$, кратных $\pi/4$

Для удобства дальнейшего анализа положим $\theta = \pi - \theta_0$ и представим фазу в виде суммы 4-х слагаемых $\varphi = 2\pi s \cos \theta_0 + \varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3$, где

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \varphi_1 &= \frac{2\pi s \cos(2\pi s \cos \theta_0) - \sin(2\pi s)}{s \left(Q + \frac{1}{P|\zeta(\vec{k})|^2} \right) \cos(2\pi s \cos \theta_0) + e^{-Qs} - \cos(2\pi s)}, \\ \operatorname{tg} \varphi_2 &= \frac{2\pi s + \sin(2\pi s)}{s \left(Q + \frac{1}{P|\zeta(\vec{k})|^2} \right) - e^{-Qs} + \cos(2\pi s)}, \quad \operatorname{tg} \varphi_3 = \frac{2\pi s - \sin(2\pi s)}{s \left(Q + \frac{1}{P|\zeta(\vec{k})|^2} \right) + e^{-Qs} - \cos(2\pi s)}. \end{aligned}$$

Для определенности выберем $P = 1$ и будем рассматривать Q и θ_0 в качестве параметров. На рис. 5 показана зависимость $\varphi(s)$ в интервале главного значения $(-\pi/2 < \varphi < \pi/2)$. Следует отметить ряд особенностей поведения фазы. При больших $Q = 100\pi$, что соответствует высокой степени локализации

диффузной δ -функции, фаза является практически везде линейной функцией s , за исключением узких переходных областей в окрестностях точек $s_n = \frac{2n+1}{4|\cos\theta_0|}$, где вклад фазы φ_1 становится большим. В остальных же областях изменения переменной s из анализа фазы можно сделать заключение о расстоянии между рассеивающими центрами. При таких условиях фаза φ рассеяния имеет смысл геометрической фазы φ_G , которая определяется геометрической группой симметрии рассеивателей [10].

При $\theta_0 = \pi/2$ картина резко меняется, поскольку доминирующий в общей фазе линейный член исчезает. При уменьшении Q , когда радиус локализации r_0 диффузной δ -функции становится сравнимым с расстоянием между центрами d , в области сверхрэлеевского разрешения ($s \ll 1$) поведение суммарной фазы также начинает заметно отличаться от линейного за счет существенного вклада фаз φ_1 , φ_2 и φ_3 . В этом случае можно сказать, что мы наблюдаем суммарную фазу $\varphi = \varphi_G + \Delta\varphi$, т.е. фаза $\Delta\varphi$ имеет смысл френелевской фазы φ_F , связанной с динамическими характеристиками рассеивателей P и Q .

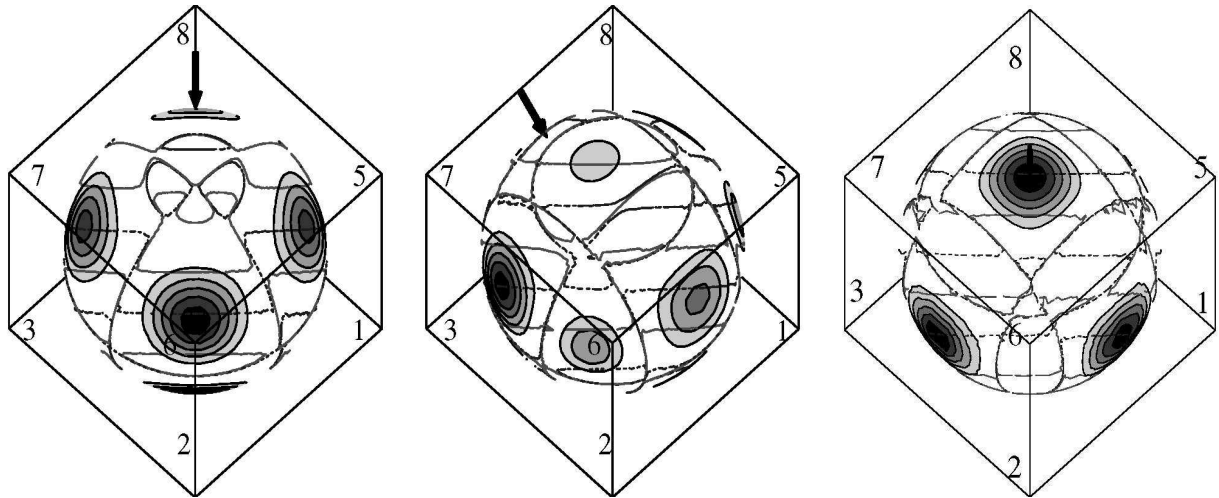


Рис. 6. Изолинии интенсивности $|t^{(8)}(\vec{k}, \vec{k}')|^2$ по 4 π -направлениям $\vec{k}'$ поля рассеянной волны (более темным участкам соответствуют максимумы интенсивности) при фиксированном направлении $\vec{k}$ падающей волны: а) падение в вершину куба, б) падение в ребро куба, в) нормальное падение на грань куба. Линии постоянного значения фазы $\varphi = 0, \pi$ и $\varphi = \pm\pi/2$ обозначены сплошной и пунктирной линиями соответственно. Значения параметров $s = 1$, $P = 1$, $Q = 20\pi$. Вершина 1 находится в начале координат

2.4. Задача рассеяния на восьми точечных центрах, расположенных в вершинах куба.

Рассмотрим задачу рассеяния плоской волны с волновым вектором $\vec{k}$ на восьми обособленных точечных центрах, представленных диффузными δ -функциями и находящимися в вершинах куба с длиной ребра d . Амплитуда рассеяния $t^{(8)}(\vec{k}, \vec{k}')$ вычисляется по формуле (28) из решений системы уравнений (31) при $N = 8$. Параметры задачи определены в силу ее симметрии аналогично предыдущему примеру:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad d = \lambda s, \quad X\lambda = \frac{\lambda}{r_0} = Q, \quad \frac{V}{4\pi\lambda} = P.$$

Результаты вычислений при значениях параметров $s = 1$, $P = 1$, $Q = 20\pi$ представлены на рис. 6. Изолинии интенсивности $|t^{(8)}(\vec{k}, \vec{k}')|^2$ по 4 π -направлениям $\vec{k}'$ поля рассеянной волны при различных фиксированных направлениях $\vec{k}$ падающей волны позволяют идентифицировать форму и оценить размеры фигуры. Дополнительную информацию несут линии постоянного значения фазы. Как видно из рисунков, максимумы интенсивности совпадают со значением фазы $\varphi = \pm\pi/2$ в случаях а) и в); в случае б) имеет место вырождение для двух максимумов интенсивности (серые пятна) на гранях, прилежащих ребру падения плоской волны. Любопытно отметить, что при нормальном падении на грань куба мы как бы наблюдаем все шесть его граней и даже образы ребер.

3. Результаты. В заключение кратко перечислим результаты, полученные в работе. На ряде точно решаемых моделей показано, что гипотеза о возможности использования аппроксимации потенциала суммой δ -функций в качестве основы алгоритма решения одномерного уравнения Гельмгольца вполне приемлема. В рамках численного эксперимента показано, что в одномерном случае для гладких потенциалов

сетка “равных интервалов” (L -сетка) значительно эффективнее для использования в широком диапазоне волновых чисел, чем сетка “равных площадей” (S -сетка). Предложен класс сепарабельных потенциалов для использования при решении трехмерного интегрального уравнения квантовой задачи рассеяния. Эти потенциалы близки к δ -потенциалу в конфигурационном пространстве, позволяют получать точные решения многомерного уравнения Гельмгольца и в то же время сохраняют ограниченность волновой функции. При этом к данному классу сепарабельных потенциалов применимы все математические теоремы, определяющие сходимость интерполяционных схем для операторов конечного ранга.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 03-02-16263) и в рамках контракта № 40.018.1.1.1314 Минпромнауки РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bethe H., Peierls R.* // Proc. Roy. Soc. (London) 1935. **148A**, 146–156.
2. *Fermi E.* // Ricerca Scientifica. 1936. **7**, 13–52.
3. *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975.
4. *Альбеверио С., Гестези Ф., Хезг-Крон Р., Хольден Х.* Решаемые модели в квантовой механике. М.: Мир, 1991.
5. *Shablov V.L., Bilyk V.A., Popov Yu.* // Phys. Rev. A. 2002. **65**. 042719–042722.
6. *Bray I., Stelbovits A.T.* // Phys. Rev. A. 2002. **66**. 036701–036702.
7. *Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Larsen S.Y., Vinitsky S.I.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. **35**. L513–L525.
8. *Зубарев А.Л.* Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоиздат, 1981.
9. *Andreev V.A., Indukaev K.V.* // Journal of Russian Laser Research. 2003. **24**, N 3. 220–236.
10. *Виницкий С.И., Дербов В.Л., Дубовик В.М., Марковски Б.Л., Степановский Ю.П.* // УФН. 1990. **160**, 1–49.

Поступила в редакцию
21.01.2004
