On a Method of Investigation Nonlinear Self-consistent Eigen-value Problem with the Growing Potential of Even power

Ilkizar V. Amirkhanov, Niladri R. Sarker

Laboratory of information technologies
Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

Email: sarker@jinr.ru

In this paper we propose a method for investigating the properties of solutions of a nonlinear self-consistent boundary value problem with a growing potential of even degree. A comparative analysis of the solutions of the linear boundary value problem for a quadratic growing potential with a nonlinear self-consistent boundary value problem for this potential is carried out. Formulas are obtained that allow us to calculate the shift of the eigenvalues. If the distances between the levels of a linear problem are equidistant, then in a self-consistent problem this property is also satisfied. In addition, when investigating problems with potentials above the quadratic one, new growing potentials appear to a lesser degree in the self-consistent problem than the original potential.

The work is supported by RFBR grants No 17-01-00661a.

Key words and phrases: autolocalization, self-consistent problem, eigenvalues, polaron, growing potentials, nonlinear boundary value problem.

In: K. E. Samouilov, L. A. Sevastianov, D. S. Kulyabov (eds.): Selected Papers of the VII Conference "Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems", Moscow, Russia, 24-Apr-2017, published at http://ceur-ws.org

Об одном методе исследования нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения с растущим потенциалом четной степени

И. В. Амирханов, Н. Р. Саркар

Лаборатория информационных технологий
Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна

Email: sarker@jinr.ru

В работе предложен метод исследования свойств решений нелинейной самосогласованной краевой задачи с растущим потенциалом четной степени. Проведен сравнительный анализ решений линейной краевой задачи для квадратичного растущего потенциала с нелинейной самосогласованной краевой задачей для этого потенциала. Получены формулы, позволяющие вычислить сдвиг собственных значений. Если растояния между уровнями линейной задачи эквидистанты, то в самосогласованной задаче это свойство тоже выполняется. Кроме этого, при исследовании задач с потенциалами выше квадратичного, в самосогласованной задаче появляются новые растущие потенциалы меньшей степени, чем исходный потенциал.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 17-01-00661а.

Ключевые слова: автолокализация, самосогласованная задача, собственные значения, полярон, растущие потенциалы, нелинейная краевая задача.

1. Введение

Успех в решении многочастичных задач во многих случаях связан с выбором адекватной модели. В качестве простейшего примера можно привести концепцию полярона, являющейся с одной стороны простейшей моделью квантовой теории поля, а с другой имеющей многочисленные приложения в физике конденсированных систем. Отметим, что проблема полярона была первоначально сформулирована как проблема автолокализованного электрона в ионном кристалле. В настоящее время имеется большое число физических примеров, теория поляронов [1], биполяронов [2,3], модель бинуклона сильной связью [4], обобщенная модель полярона [5] и т.д.

Эффект автолокализации в жидкостях приводит к образованию в них сольватированных электронов, играющих важную роль во многих химических процессах [6, 7]. Под действием облучения вода (или иная среда) переходит в особое состояние, характеризуемое специальными физическими и химическими свойствами [8].

Подобные задачи возникают в рамках квантово-механической задачи двух тел, и ее изучение есть актуальная проблема современной физики элементарных частиц. Например, в нерелятивистской потенциальной модели описание спектра тяжелых кваркониев [11] сводится к решению уравнения Шредингера.

С другой стороны, релятивистское обобщение этой модели в рамках КХД, необходимое для единообразного описания спектров легких и тяжелых кваркониев, приводит к релятивистским вариантам уравнения Шредингера. В качестве эффективного потенциала межкваркового взаимодействия обычно используется сочетание растущего и кулоновского потенциалов. О некоторых проблемах численного исследования задач на собственные значения в импульсном представлении с кулоновским и линейным потенциалами проведено в работах [12, 13].

Для исследования подобных задач, можно привлечь методы самосогласованного описания многочастичных систем.

2. Постановка задачи

Изучение стационарных автолокализованных состояний в среде, как правило, сводится к исследованию свойств решений нелинейной краевой задачи в рамках уравнения Шредингера, которое в безразмерных переменных имеет вид

$$\left[\Delta - E - c\,\Phi\left(|\,\psi|^{\,2}\right)\right]\,\psi\left(\vec{r}\right) = 0, \tag{1}$$

где

$$\Phi = \int d\vec{r}_1 V\left(|\vec{r} - \vec{r}_1|\right)\,|\psi\left(\vec{r}_1\right)|^2\,, \tag{2}$$

при условии сохранения нормировки

$$\int d\vec{r}_1\,|\psi\left(\vec{r}_1\right)|^2 = 1,$$

а также граничные условия имеют вид

$$\psi\left(0\right) = \text{const}, \quad \psi\left(\vec{r}\right) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0. \tag{3}$$

При исследовании состояний полярона потенциал имеет вид:

$$V\left(|\vec{r} - \vec{r}_1|\right) = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|}.$$

Тогда функция Φ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\Delta\Phi = -4\pi\,|\psi|^2\,. \tag{4}$$

Численно более удобно исследовать систему дифференциальных уравнений (1) и (4) по сравнению с системой интегро-дифференциальных уравнений (1)–(2).

Обратим внимание, что при исследовании самосогласованной задачи в ядерной или атомной физике, например, для системы N — электронов, сводится к решению уравнения Хартри [9]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{яд}}\left(r_j\right) + \sum_{\substack{i=1\\ j\neq i}}^{N} e^2\Phi_i\left(r_j\right)\right]\,\psi_j = \varepsilon_j\psi_j, \quad 1 \leqslant j \leqslant N, \tag{5}$$

где самосогласованные потенциалы определяются из системы N уравнений Пуассона

$$\Delta\Phi_i = -4\pi\psi_i^*\psi_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant N. \tag{6}$$

Систему (5)–(6) представляет собой систему $2N$ интегро-дифференциальных уравнений, так же как и система (1)–(2), или система (1) и (3).

3. Методы исследования и анализ полученных результатов

В данной работе проводится исследование нелинейной краевой задачи (1)–(2) выбирая потенциал в виде

$$V\left(|\vec{r}-\vec{r}_1|\right) = |\vec{r}-\vec{r}_1|^n\,, \quad n = 2, 4, 6, \cdots\,,$$

т.е. n принимает четные степени. Так как, когда n принимает нечетные степени ($n = 1,\ 3,\ 5,\ \ldots$) решения краевой задачи исследуются другими методами, то результаты будут приведены в другой нашей работе.

Сферически симметричное решение (1) ищем в виде $\psi\left(\vec{r}\right) = \frac{\varphi(r)}{r} Y_{00}$, с граничными условиями $\varphi\left(0\right) = \varphi\left(\infty\right) = 0$, где $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Тогда (2) примет следующий вид

$$\Phi = \frac{1}{4\pi}\int\limits_0^\infty dr_1\,\varphi^2\left(r_1\right)\int\limits_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int\limits_0^\pi d\theta_1 \sin\theta_1 \left|\vec{r}-\vec{r_1}\right|^n.$$

При $n = 2$, после интегрирования по углам получим

$$\Phi = A_1 r^2 + A_2, \quad A_1 = \int\limits_0^\infty dr_1 \varphi^2\left(r_1\right), \tag{7}$$

с учетом нормировки

$$A_1 = 1, \quad A_2 = \int\limits_0^\infty dr_1 r_1^2 \varphi^2\left(r_1\right).$$

Уравнение (1) для сферически симметричных решений в безразмерных переменных перепишем в виде

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + E_m - c\Phi\right]\varphi_m\left(r\right) = 0 \quad m = 0,\ 1,\ 2, \ldots, \tag{8}$$

с граничными условиями $\varphi_m\left(0\right) = \varphi_m\left(\infty\right) = 0$, E_m — собственные значения.

Далее будем сравнивать решения линейной задачи с потенциалом $\Phi = r^2$ и самосогласованной задачи с потенциалом (9). Нижние четыре уровня ищем в виде

$$\varphi_i = N_i\,\bar{\varphi}_i, \tag{9}$$

где $N_i\ \left(i = 0, 1, 2, \cdots\right)$ — нормировочные постоянные, которые имеют вид

$$N_i = \frac{1}{\sqrt{\int\limits_0^\infty \bar{\varphi}_i^2\,dr}}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\bar{\varphi}_0 = r\,e^{-\beta\,r^2};$$

$$\bar{\varphi}_1 = r\,\left(r^2 - a_1\right) e^{-\beta\,r^2};$$

$$\bar{\varphi}_2 = r\,\left(r^2 - a_2\right)\,\left(r^2 - a_3\right) e^{-\beta\, r^2};$$

$$\bar{\varphi}_3 = r\,\left(r^2 - a_4\right)\,\left(r^2 - a_5\right)\,\left(r^2 - a_6\right) e^{-\beta\, r^2}.$$

Подставляя выражения (9) в уравнение (8) с потенциалом $\Phi = r^2$ для линейной задачи получаем собственные значения E_m $(m = 0,\ 1,\ 2,\ 3)$ и a_i $(1, 2, 3, 4, 5, 6)$, а именно

$$E_0 = 3\sqrt{c}, \quad E_1 = 7\sqrt{c}, \quad E_2 = 11\sqrt{c}, \quad E_3 = 15\sqrt{c},$$

$$a_1 = \frac{3}{2\sqrt{c}}, \quad a_2 = \frac{1}{2\sqrt{c}}\left(5 - \sqrt{10}\right), \quad a_3 = \frac{1}{2\sqrt{c}}\left(5 + \sqrt{10}\right), a_4 = \frac{1}{2\sqrt{c}}\,(14.06579808)\,,$$

$$a_5 = \frac{1}{2\sqrt{c}}\,(1.332651815)\,, \quad a_6 = \frac{1}{2\sqrt{c}}\,(5.601550108)\,.$$

Для самосогласованной задачи с потенциалом $\Phi_m = r^2 + A_{2m}$, где $A_{2m} = \int\limits_0^\infty dr\, r^2 \varphi_m^2\,(r)$, собственные значения $\overline{E}_m$ сдвигаются на A_{2m}. Тогда имеем

$$\overline{E_0} = E_0 + A_{20}, \quad \overline{E_1} = E_1 + A_{21}, \quad \overline{E_2} = E_2 + A_{22}, \quad \overline{E_3} = E_3 + A_{23}.$$

Таким образом, решение самосогласованной задачи с потенциалом (7) свели к решению линейной задачи с потенциалом $\Phi = r^2$. Так как, линейная задача имеет аналитическое решение, то и самосогласованная задача так же имеет аналитическое решение.

Из полученных результатов следует, что если расстояния между уровнями линейной задачи эквидистантны, то в самосогласованной зададе это свойство тоже выполняется (см. последние колонки табл. 1).

Таблица 1

c	**0.5**	**1.0**	**0.3**
E	4.242640688	3.000000000	6.062177827
	9.899494939	7.000000000	14.14508160
	15.55634919	11.000000000	22.22798537
	21.21320344	15.000000000	30.31088914
$\overline{E}$	2.121320344	4.500000000	5.196152424
	4.949747468	10.50000000	12.12435566
	7.778174593	16.50000000	19.05255889
	10.60660172	22.50000000	25.98076212
Расстояние между уровнями	5.656854251	6.000000000	8.082903773

Численными методами проверено, что решения (9) ортогональны при разных значениях c.

При $n = 4$, получим

$$\Phi = \frac{10}{3} A_2 r^2 + A_1 r^4 + A_3 \ , \quad \text{где } A_3 = \int\limits_0^\infty dr_1 r_1^4 \varphi^2 (r_1), \tag{10}$$

При $n = 6$, получим

$$\Phi = 7A_3 r^2 + 7A_2 r^4 + A_1 r^6 + A_4, \quad \text{где } A_4 = \int\limits_0^\infty dr_1 \, r_1^6 \varphi^2 (r_1), \tag{11}$$

и т.д.

К сожалению, линейные задачи с потенциалами $\Phi = r^4$, $\Phi = r^6$, и т.д. не имеют аналитических решений. Поэтому самосогласованные задачи с потенциалами (10) и (11) так же не имеют аналитических решений. Поэтому задачу нужно решать численными методами. Однако, не решая численно можно сделать выводы, что в этом случае уровни сдвигаются на A_3 и A_4. Сдвиг собственных значений зависит от самого решения. Кроме этого, вместо потенциалов $\Phi = r^4$, $\Phi = r^6$ исходной задачи, в самосогласованной задаче появляются новые растущие потенциалы меньшей степени (см. (10) и (11)).

Не зависимо от явного вида потенциала $V(|\vec{r} - \vec{r}_1|)$ в линейной задаче, если $\Phi(0) < \infty$, то в самосогласованной задаче уровни сдвигаются на $\Phi(0)$ (см. A_2, A_3 и A_4).

Аналогичный сдвиг собственных значений получен для стационарной задачи полярона [10] $\left(\text{сдвиг на } A_{2m} = \int\limits_0^\infty dr_1 \frac{\varphi_m^2(r_1)}{r_1}\right)$, точное решение кулоновской задачи $E_0 = -0,500$, $E_1 = -0,250$, $E_2 = -0,125$, численные результаты для полярона $E_0 = -0,16277$, $E_1 = -0,03080$, $E_2 = -0,01250$.

4. Выводы

Из полученных результатов можно сделать следующие выводы:

а) если расстояния между уровнями линейной задачи эквидистантны, то в самосогласованной зададе это свойство тоже выполняется;

б) кроме этого, вместо потенциалов $\Phi = r^4$, $\Phi = r^6$ и т.д. исходной задачи, в самосогласованной задаче появляются новые растущие потенциалы меньшей степени (см. (10) и (11));

в) для произвольного потенциала $V(|\vec{r} - \vec{r}_1|)$ в линейной задаче, если $\Phi(0) < \infty$, то в самосогласованной задаче уровни сдвигаются на $\Phi(0)$ (см. A_2, A_3 и A_4).

Литература

1. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов. Москва: ГИТ-ГЛ, 1951, 256 с.
2. Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах. Моска: Физматлит, 2013, 292 с.
3. И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, Т. А. Стриж, В. Д. Лахно, Решение уравнений ЛЛП в теории биполярона. Известия АН, серия физическая (1995), Т. 59, no. 8, С. 106–110.

4. И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Д. Лахно, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Т. А. Стриж, Численное исследование квантово-полевой модели бинуклона сильной связи. Препринт ОИЯИ, Дубна, 1996, Р11-96-268, 24 с.
5. И. В. Амирханов, В. Д. Лахно, И. В. Пузынин, Т. А. Стриж, В. К. Федяин, Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели полярона. Препринт, Биологические исследования АН СССР, Пущино, 1988, 23 с.
6. Дж. Томпсон, Электроны в жидком аммиаке. Москва: Мир,1979, 138 с.
7. И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, Т. А. Стриж, О .В. Васильев, В. Д. Лахно, Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели сольватированного электрона. Препринт, Биологические исследования СССР, Пущино, 1990, 24 с.
8. В. Д. Лахно, А. В. Волохова, Е. В. Земляная, И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Поляронная модель формирования состояний гидратированного электрона. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (2015), no. 1, C. 1–6.
9. Д. Поттер, Вычислительные методы в физике. Москва: Мир, 1975.
10. И. В. Амирханов и др. Численное исследование динамики поляронных состояний. Вестник тверского университета. Серия: Прикладная математика (2009), no. 17, C. 5–14.
11. А. А. Быков, И. М. Дремин, А. В. Леонидов, УФМ (1984), Т. 143, С. 3.
12. И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Т. А. Стриж, О некоторых проблемах численного исследования задачи на собственные значения в импульсном представлении. Математическое моделирование (1997), Т. 9, no. 10, C. 111–119.
13. И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Т. А. Стриж, Численное исследование релятивистских уравнений на связанные состояния с кулоновским и линейным потенциалами. Математическое моделирование (2000), Т. 12, no. 12, C. 79–96.