Академия наук СССР
Журнал экспериментальной и теоретической физики
Том 33, вып. 6(12), 1957 г.

Ю. Н. Демков, Ф. П. Шепеленко

СВЯЗЬ МЕЖДУ МЕТОДАМИ ХЮЛЬТЕНА И КОНА В ТЕОРИИ СТОЛКНОВЕНИЙ

Т. 33. Журнал экспериментальной и теоретической физики. Вып. 6(12)

1957

СВЯЗЬ МЕЖДУ МЕТОДАМИ ХЮЛЬТЕНА И КОНА В ТЕОРИИ СТОЛКНОВЕНИЙ

Ю. Н. Демков, Ф. П. Шепеленко

Рассматриваются различные варианты прямых вариационных методов для определения фазы радиальной волновой функции. Показано, что наиболее естественным критерием качества пробной функции является условие совместности системы уравнений. Сравнение результатов, полученных для фазы по методам Хюльтена и Кона, а также проверка того, выполняется ли интегральное тождество, не являются независимыми критериями и фактически сводятся к условию совместности. Показано также, каким образом в методе Хюльтена из двух значений для фазы выбрать правильное, не прибегая к сравнению с другими расчетами.

Рассмотрим уравнение, определяющее фазу в теории столкновений,

$$\psi''(r) + (k^2 - V)\psi(r) = 0; \tag{1}$$

$$\psi(0) = 0, \quad \psi|_{r\to\infty} \sim A\sin(kr + \eta). \tag{2}$$

Вариационный принцип для этой задачи можно записать в виде [1]

$$\delta J = \delta\int_0^\infty \psi(r)\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V\right)\psi(r)\,dr = -A^2k\delta\eta. \tag{3}$$

Подставляя в функционал приближенную функцию $\tilde{\psi}(r)$, удовлетворяющую условиям (2) и зависящую от параметров α_i, мы можем получить из вариационного принципа систему уравнений для определения этих параметров. Известно, что в отличие от задачи дискретного спектра в данном случае эта система уравнений может быть составлена неоднозначно.

Рассмотрим простейший, но весьма важный случай, когда в функционал J подставляется линейная комбинация n функций $\varphi_i(r)$

$$\tilde{\psi}(r) = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i(r). \tag{4}$$

Пусть при этом

$$\varphi_i(0) = 0, \; i = 1, 2, \ldots, n; \tag{5}$$

$$\text{при } r\to\infty \quad \varphi_1 \sim \sin kr, \; \varphi_2 \sim \cos kr, \; \varphi_j \to 0, \; j = 3, 4, \ldots, n.$$

Тогда функционал J будет квадратичной формой относительно α_i

$$J(\tilde{\psi}) = \sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j J_{ij}, \tag{6}$$

где

$$J_{ij} = \frac{1}{2}\left[\int_0^\infty \varphi_i\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V\right)\varphi_j\,dr + \int_0^\infty \varphi_j\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V\right)\varphi_i\,dr\right]. \tag{7}$$

При таком выборе волновой функции амплитуда и фаза определяются коэффициентами α_1 и α_2. Очевидно, что $\alpha_1 = A\cos\eta$, $\alpha_2 = A\sin\eta$ и

$$A^2\delta\eta = \alpha_1\delta\alpha_2 - \alpha_2\delta\alpha_1. \tag{8}$$

Таким образом, вариационный принцип (3) может быть записан в виде

$$\delta J = k(\alpha_2 \delta\alpha_1 - \alpha_1 \delta\alpha_2). \tag{9}$$

Уравнения для определения коэффициентов $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ имеют в данном случае вид [2]

$$\sum_{j=1}^{n} J_{1j}\alpha_j = \frac{k\alpha_2}{2}; \quad \sum_{j=1}^{n} J_{2j}\alpha_j = -\frac{k\alpha_1}{2}; \quad \sum_{j=1}^{n} J_{ij}\alpha_j = 0 \ (i = 3, 4, \ldots, n). \tag{10}$$

Условие наличия ненулевых решений этой системы

$$\begin{vmatrix} J_{11} & J_{12} - k/2 & \ldots & J_{1n} \\ J_{21} + k/2 & J_{22} & \ldots & J_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ J_{n1} & J_{n2} & & J_{nn} \end{vmatrix} = 0, \tag{11}$$

вообще говоря, не выполняется. Отбрасывая одно из уравнений (10), можно сделать систему разрешимой и прийти к различным формулировкам вариационного принципа. Так, например, отбрасывая первое из написанных здесь уравнений, получим метод Кона [3]. Коэффициент α_1 при этом не варьируется и полагается равным 1. Тогда $\alpha_2 = \operatorname{tg}\eta$, $\delta\alpha_1 = 0$ и

$$\delta J = -k\delta\alpha_2 = -k\delta(\operatorname{tg}\eta). \tag{12}$$

В методе Хюльтена [1] отбрасываются первые два уравнения системы (10), но зато добавляется уравнение $J = 0$, которое получится, если каждое из уравнений (10) умножить соответственно на α_i и сложить их. Условие $J = 0$ вытекает из стационарности функционала относительно вариации нормировочного множителя A.

В методе Кона [3] для определения коэффициентов α имеем систему уравнений

$$\begin{aligned} J_{21} + J_{22}\alpha_2 + \ldots + J_{2n}\alpha_n &= -k/2, \\ J_{31} + J_{32}\alpha_2 + \ldots + J_{3n}\alpha_n &= 0, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ J_{n1} + J_{n2}\alpha_2 + \ldots + J_{nn}\alpha_n &= 0. \end{aligned} \tag{13}$$

Решая эту систему, находим приближенную волновую функцию $\widetilde{\psi}$. Поскольку коэффициент α_1 фиксирован, мы уже не можем свободно варьировать нормировочный множитель A, и, следовательно, величина $J(\widetilde{\psi})$ будет, вообще говоря, отлична от нуля. Это дает возможность улучшить значение для $\operatorname{tg}\eta$, воспользовавшись формулой (12). Таким образом

$$\operatorname{tg}\eta = \alpha_2 + J(\widetilde{\psi})/k. \tag{14}$$

Эту формулу можно преобразовать, используя систему (13). Действительно,

$$J(\widetilde{\psi}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (J_{i1}\alpha_1 + J_{i2}\alpha_2 + \ldots + J_{in}\alpha_n) = \alpha_1 (J_{11}\alpha_1 + J_{12}\alpha_2 + \ldots + J_{1n}\alpha_n) -$$

$$- k\alpha_2/2 = J_{11} + J_{12}\alpha_2 + J_{13}\alpha_3 + \ldots + J_{1n}\alpha_n - k\alpha_2/2, \tag{15}$$

и формула (14) примет вид

$$k \operatorname{tg}\eta = J_{11} + (J_{12} + k/2)\alpha_2 + J_{13}\alpha_3 + \ldots + J_{1n}\alpha_n. \tag{16}$$

Чтобы установить связь между методами Хюльтена и Кона, исключим $\alpha_3, \alpha_4, \ldots, \alpha_n$ при помощи последних $(n-2)$ уравнений системы (13). Это приводит к системе двух уравнений для α_1 и α_2

$$A_{11}\alpha_1 + A_{12}\alpha_2 = k\alpha_2/2, \quad A_{21}\alpha_1 + A_{22}\alpha_2 = -k\alpha_1/2. \tag{17}$$

Умножая первое уравнение на α_1, второе на α_2 и складывая их, получим уравнение Хюльтена

$$J = A_{11}\alpha_1^2 + 2A_{12}\alpha_1\alpha_2 + A_{22}\alpha_2^2 = 0. \tag{18}$$

Отсюда для искомой величины $\alpha_2/\alpha_1 = \operatorname{tg}\eta$ получаем по методу Хюльтена

$$\operatorname{tg}\eta = (-A_{12} \pm \sqrt{A_{12}^2 - A_{11}A_{22}})/A_{22}. \tag{19}$$

Аналогично, по методу Кона

$$\alpha_2 = -\frac{1}{A_{22}}\left(A_{12} + \frac{k}{2}\right);$$
$$\operatorname{tg}\eta = -\frac{1}{A_{22}}\left(A_{12} + \frac{k}{2}\right) + \frac{1}{A_{22}k}\left(A_{11}A_{22} - A_{12}^2 + \frac{k^2}{4}\right). \tag{20}$$

Результаты, полученные обоими методами, будут совпадать, если уравнения (17) совместны, т. е., если выполняется условие

$$A_{12}^2 - A_{11}A_{22} = k^2/4. \tag{21}$$

Это условие, очевидно, совпадает с условием (11).

Легко видеть, что если в формуле (19) взять знак минус перед радикалом, то при выполнении (21) формулы (19) и (20) действительно совпадают. Таким образом, для того чтобы выбрать из двух возможных корней уравнения Хюльтена истинный, нет необходимости (как это указывается, например, в [4]) сравнивать полученные результаты с результатами других приближенных расчетов. Физический смысл имеет корень со знаком минус перед радикалом. Кроме того, само условие (21) дает достаточно надежный критерий качества выбранной волновой функции. Отсюда же видно, почему метод Хюльтена не должен давать комплексных значений для $\operatorname{tg}\eta$, если только функция выбрана удовлетворительно. Действительно, подкоренное выражение в этом случае близко к величине $k^2/4$ и, таким образом, положительно.

Чтобы понять формальную природу второго решения в методе Хюльтена, отметим, что если выполняется условие (21), то второй корень будет равен

$$\operatorname{tg}\eta = (-A_{12} + k/2)/A_{22}. \tag{22}$$

Такое же значение для $\operatorname{tg}\eta$ можно получить из формальной попытки удовлетворить в пространстве функций (4) вариационному равенству

$$\delta J = -k(\alpha_2\,\delta\alpha_1 - \alpha_1\,\delta\alpha_2) = A^2 k\delta\eta, \tag{23}$$

которое получается из вариационного принципа (9) путем замены k на $-k$ в правой части.

Очевидно, однако, что равенство (23) не имеет смысла. Действительно, волновая функция определяется однозначно уже из требования стационарности функционала J относительно вариаций, исчезающих на бесконечности. Отсюда следует, что тот результат, который получается для δJ при вариации асимптотического вида функции, однозначен и не может быть изменен по произволу. Следовательно, уравнение (23) вообще не определяет никакой функции. Если решать задачу по методу Хюльтена, постепенно увеличивая число n функций φ_i, то второй корень (знак плюс в формуле (19)) либо вообще не будет стремиться к определенному пределу, либо же этот предел будет существенно зависеть от выбора последовательности функций φ_i. Конкретные расчеты подтверждают это утверждение.

Рассмотрим теперь вопрос о том, в какой мере для полученных приближенных функций должно выполняться интегральное тождество, вытекающее из вариационного принципа. В данном случае, это тождество имеет вид

$$\operatorname{tg}\eta = \frac{1}{k}\int_0^\infty \psi(r)\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V\right)\sin kr\,dr = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \psi(r)\,V\sin kr\,dr, \tag{24}$$

$$\psi\,|_{r\to\infty} \sim \sin kr + \operatorname{tg}\eta\cos kr.$$

Предположим, что $\varphi_1(r) = \sin kr$; такой выбор наиболее прост и практически именно так всегда и поступают. Подставим в формулу (24) вместо точной волновой функции ее приближенное выражение (4). Тогда получим

$$\operatorname{tg}\eta = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\int_0^\infty \varphi_i\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V\right)\varphi_1\,dr = \frac{1}{k}\sum\alpha_i J_{i1} + \frac{1}{2}\alpha_2. \tag{25}$$

Эта формула совпадает с (16) и, таким образом, при расчете фазы по методу Кона интегральное тождество автоматически выполняется.

Вместе с тем, если в левую часть формулы (25) подставить вместо $\operatorname{tg}\eta$ коэффициент α_2, то получим первое уравнение системы (10). Отсюда следует, что если при расчете фазы по методу Хюльтена интегральное тождество выполняется, то система уравнений (10) является совместной, детерминант (11) равен нулю и как метод Хюльтена, так и метод Кона дают одинаковые результаты. Таким образом, проверка выполнения интегрального тождества эквивалентна прямому сравнению результатов расчета фазы по методам Хюльтена и Кона, и поэтому не является каким-либо независимым критерием, подтверждающим правильность вариационного расчета.

В качестве примера нами был произведен расчет фазы η для случая рассеяния электронов статическим полем атома водорода с

$$V = -2\,(1 + 1/r)\,e^{-2r}$$

в атомных единицах. При этом были использованы следующие функции

$$\varphi_1 = \sin kr,\quad \varphi_2 = (1 - e^{-r})\cos kr,\quad \varphi_3 = e^{-r}(1 - e^{-r})\cos kr; \tag{a}$$

$$\varphi_1 = \sin kr,\quad \varphi_2 = \cos kr - e^{-r},\quad \varphi_3 = re^{-kr}. \tag{b}$$

Функция (*a*) была использована в работе Месси и Моисеевича и нами взята для сравнения, как дающая результаты, близкие к данным численного интегрирования. Данные для $\operatorname{tg}\eta$, вычисленных обоими методами, а также значения $D = A_{12}^2 - A_{11}A_{22}$ в сравнении с $k^2/4$ для каждой функции приводятся в таблице.

Таблица

k	Функция (*a*)			Функция (*b*)			$\frac{k^2}{4}$
	$\operatorname{tg}\eta$		D	$\operatorname{tg}\eta$		D	
	по Хюльтену	по Кону		по Хюльтену	по Кону		
0,1	0,8783	0,8787	0,0026	0,4156	0,4184	0,0018	0,0025
0,15	1,2173	1,2174	0,0058	0,6138	0,6217	0,0036	0,0056
0,2	1,4248	1,4242	0,0104	0,7848	0,8009	0,0057	0,0100
0,3	1,7181	1,7189	0,0236	1,0373	1,0749	0,0107	0,0225
0,4	1,9076	1,9087	0,0429	1,1837	1,2399	0,0170	0,0400
0,5	1,7202	1,7211	0,0667	1,2564	1,3246	0,0252	0,0625
0,6	1,6285	1,6298	0,0964	1,2830	1,3546	0,0359	0,0900
0,8	1,4332	1,4353	0,1710	1,2630	1,3222	0,0692	0,1600
1,0	1,2722	1,2733	0,2616	1,1978	1,2343	0,1274	0,2500
1,2	1,1411	1,1404	0,3726	1,1192	1,1360	0,2244	0,3600
1,5	1,0031	0,9950	0,5533	0,9962	0,9978	0,4823	0,5625
2,0	0,8327	0,8356	0,9581	0,8266	0,8324	1,3807	1,0000

Как видно из таблицы, для функции (a) значение D близко к $k^2/4$ и значения $\operatorname{tg}\eta$, полученные обоими методами, практически совпадают. Для функции (b) D значительно отличается от $k^2/4$, а сами $\operatorname{tg}\eta$, по Хюльтену и Кону, заметно отличаются друг от друга и от результатов, полученных с функцией (a), особенно при $k < 1$. Функция (b) дает, очевидно, худшие результаты для $\operatorname{tg}\eta$. Однако при $k = 1{,}7$ условие $D = k^2/4$ приближенно выполняется, и значения $\operatorname{tg}\eta$, по Кону и Хюльтену, совпадают с данными численного интегрирования.

Таким образом, условие (21), т. е. условие совместности исходной системы (10), может служить достаточно надежным критерием правильности выбора варьируемой функции. Если это условие выполняется, то выполняется также интегральное тождество (24), и результаты расчета фазы по методам Хюльтена и Кона совпадают.

Ленинградский государственный университет

Поступила в редакцию 30 мая 1957 г.

Литература

[1] L. Hulthén. Kgl. Fys. Sällskap. Förh. **14**, *2*, 1944.
[2] Ю. Н. Демков. ДАН СССР, 89, 249, 1953.
[3] W. Kohn. Phys. Rev., **74**, 1763, 1948.
[4] H. S. W. Massey, B. L. Moiseiwitsch. Proc. Roy. Soc., **A205**, 483, 1951.

CONNECTION BETWEEN THE HULTHÉN AND KOHN METHODS IN COLLISION THEORY

Yu. N Demokov, F. P. Shepelenko

Various possible direct variational methods for determination of the phase shifts of the radial wave function are considered. It is shown that the most natural criterion of quality of the trial function is the condition of consistency of the equations. A comparison of phase shift results obtained by the Hulthén and Kohn methods and also a check of the integral identity are not independent criteria and in fact reduce to the consistency requirement. It is also shown how the correct value can be chosen from two phase shift values obtained by the Hulthén method without resorting to comparison with the results of other methods.