Московский физико-технический институт
(государственный университет)

Численный анализ особенностей обобщенного пребразования рассеяния для двумерного уравнения Шредингера

выпускная квалификационная работа
на степень бакалавра
студента 328 группы
Кучумова Рустама Закиевича

Научный руководитель:
к.ф.-м.н. Гриневич Петр Георгиевич

2007

Введение.

Теория потенциального рассеяния одна из важных частей современной физики. Как известно, изучение процессов рассеяния частиц, начиная с экспериментов Резерфорда и кончая современными экспериментами на ускорителях, главный источник информации о микромире. Рассеяние частиц на кристаллах является одним из главных методов в физике твердого тела. Также задачи теории рассеяния естественным образом возникают в оптике и геофизике (восстановление структуры Земли по сейсмическим данным). В качестве первоначального введения в теорию рассеяния можно посоветовать монографию [1].

Общая формулировка задачи рассеяния и обсуждение известных результатов.

Мы будем рассматривать квантовомеханическое описание нерелятивистского потенциального рассеяния двух частиц в случае, когда потенциалы взаимодействия зависят только от расстояния между частицами. При этом мы будем считать частицы бесспиновыми, а потенциалы изотропными.

При сделанных предположениях движение частиц в системе их центра тяжести может быть описано следующим уравнением Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\Psi(\vec{r}) + U(r)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}),$$

где $\hbar$ - постоянная Планка, $M = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ - приведенная масса, а m_1 и m_2 - массы частиц, $U(r)$ - потенциал, $\vec{r}$ - относительное расстояние между частицами и $E = k^2$ - энергия системы, причем непрерывному спектру соответствуют вещественные $k > 0$, а дискретному - точки мнимой оси $k = i\kappa_n, \kappa_n > 0$. В дальнейшем мы будем считать $\hbar = 2M = 1$. Тогда имеем:

$$-\Delta\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = k^2\Psi(\vec{r}). \tag{1}$$

Помимо этого, нас будет интересовать обратная задача рассеяния, т.е. восстановление параметров взаимодействия частиц по известным данным рассеяния (в нашем случае восстановление потенциала $U(\vec{r})$). При этом возникает вопрос: какого именно набора данных рассеяния достаточно для этого? Это зависит от размерности задачи.

I. Одномерный случай.

В одномерном случае решение, описывающее процесс рассеяния имеет следующую асимптотику при $x \to \infty$

$$e^{-ikx} + r(k)e^{ikx},$$

т.е. представляет собой суперпозицию падающей и отраженной волн. Функция $r(k)$ - есть коэффициент отражения.
Собственные функции связанных состояний $(\varphi^{(n)}(x))$ на бесконечности имеют вид

$$\Psi \to c_{\pm} e^{\mp \kappa_n x}.$$

Фиксируем n-ую собственную функцию ее асимптотикой на $-\infty$ по x:

$$\varphi^{(n)}(x) = e^{\kappa_n x} + o(e^{\kappa_n x}).$$

При этом, при $x \to \infty$ функции

$$\varphi^{(n)}(x) = b_n e^{-\kappa_n x} + o(e^{-\kappa_n x})$$

очевидно, вещественны, так что вещественны и величины b_n.

Совокупность $s = \{r(k), \kappa_n, |b_n|\}$ называется данными рассеяния в одномерном случае. Отображение $u(x) \to s$ потенциалов $u(x)$ в данные рассеяния однозначно обратимо. Процедура восстановления $u(x)$ по s и составляет предмет обратной задачи рассеяния. В общем случае она приводит к системе интегральных уравнений. Желающие могут ознакомиться с этой теорией подробнее, например, по книге [2].

II. Многомерный случай.

В случае произвольной размерности n решение, описывающее процесс рассеяния имеет при больших r в направлении $\vec{r}$ следующую асимптотику

$$e^{i(\vec{k}\vec{r})} + F(\vec{k}, \frac{|\vec{k}|}{|\vec{r}|}\vec{r}) \frac{e^{i|\vec{k}||\vec{r}|}}{\sqrt{|\vec{r}|^{n-1}}} + o(\frac{1}{\sqrt{|\vec{r}|^{n-1}}}), \tag{2}$$

где $F(\vec{k}, \frac{|\vec{k}|}{|\vec{r}|}\vec{r})$ - так называемая, амплитуда рассеяния. Обратная задача для этого случая, решенная Фадеевым[3],[4], гораздо сложнее одномерного аналога. Дело в том,что амплитуда рассеяния $F(\vec{k}, \frac{|\vec{k}|}{|\vec{r}|}\vec{r})$ в n-мерном пространстве функция $2n-1$ вещественных переменных, а потенциал $U(\vec{r})$ - функция n переменных. Таким образом, задача становится переопределенной и для данных рассеяния должны быть получены некие „условия совместности“.

III. Двумерный случай.

Для того, чтобы избежать сложного анализа условий совместности данных рассеяния предлагается использовать для построения потенциала только часть исходных данных.

В двумерном случае задача перестает быть переопределенной, если мы рассматриваем данные рассеяния при фиксированной энергии.

При этом, удобно с помощью подходящей замены координат привести задачу с фиксированной энергией ϵ_0 к одному из трех случаев: $\epsilon_0 = 1$, $\epsilon_0 = 0$, или $\epsilon_0 = -1$. В первом из этих случаев задача восстановления потенциала решена в работе [5] для потенциалов достаточно малой нормы. Второй случай заметно сложнее двух остальных из-за того, что функция Грина уравнения в этом случае логарифмически расходится при $p \to 0$. Исследование этого вопроса содержится в работах [6], [7]. Случай $\epsilon_0 = -1$ также разобран в работе [5] при некоторых предположениях относительно данных рассеяния (таких как кусочная непрерывность), однако для получаемого в этом случае оператора $L = -\Delta + U(x,y)$ спектр целиком лежит выше значения $\epsilon_0 = -1$. Возникает вопрос:“Какими особенностями будут обладать данные рассеяния, если спектр оператора L простирается и ниже этого значения?“ Рассмотрению этого вопроса и посвящена настоящая работа.

Постановка задачи.

Мы будем считать, что $\epsilon_0 = -1$ и использовать следующие комплексные обозначения

$$z = x + iy, \overline{z} = x - iy, \partial_z = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y), \partial_{\overline{z}} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y), x = z_R, y = z_I.$$

$$L = -4\partial_z\partial_{\overline{z}} + U(z,\overline{z})$$

Многообразие $k_x^2 + k_y^2 = 1$ параметризуем комплексным параметром λ

$$k_x = \frac{1}{2}(\lambda + \frac{1}{\lambda}), k_y = -\frac{i}{2}(\lambda - \frac{1}{\lambda}).$$

Теперь, по аналогии с задачей рассеяния в непрерывном спектре, мы можем определить *обобщенную задачу рассеяния при отрицательной энергии:*

$$\begin{array}{l} (-4\partial_z\partial_{\overline{z}} + U(z,\overline{z}))\Psi(\lambda,z) = -\Psi(\lambda,z), \\ \text{притом, } \Psi(\lambda,z) = e^{\frac{1}{2}(\lambda\overline{z} + z/\lambda)}\chi(\lambda,z), \chi(\lambda,z) = 1 + o(1), \text{ при } |z| \to \infty. \end{array} \tag{3}$$

Кроме того, нас будут интересовать только потенциалы U вида $U(\vec{r}) = U(r)$, тогда легко видеть, что поворотом системы координат задача сводится к задаче с действительным $\lambda = \overline{\lambda}$.

В работе [5] доказано, что при определенных условиях обратная задача в такой постановке однозначно разрешима, и весь спектр оператора L лежит выше значения $\epsilon_0 = -1$. Однако, в противоположном случае у данных рассеяния должны появиться особенности в комплексной λ-плоскости, что накладывает на них дополнительные ограничения. В данной работе проведен численный анализ положения этих особенностей и их характера.

Вывод интегрального уравнения и обобщенных данных рассеяния.

Исходное уравнение
$$(-4\partial_z\partial_{\overline{z}} + U(z,\overline{z}))\Psi = -\Psi;$$
заменой $\Psi = e^{\frac{1}{2}(\lambda\overline{z}+z/\lambda)}\chi$,где $\chi = (1+o(1))$ при $|z| \to \infty$ сводится к уравнению:
$$(-4\partial_z\partial_{\overline{z}} - 2\lambda\partial_z - \frac{2}{\lambda}\partial_{\overline{z}} + U(z,\overline{z}))\chi = 0,$$
$$\chi = (1+o(1)), |z| \to \infty.$$
Функция Грина этого уравнения выглядит следующим образом:
$$G(\lambda,z) = \int\int \frac{e^{\frac{i}{2}(k\overline{z}+\overline{k}z)}}{k\overline{k} - ik/\lambda - i\overline{k}\lambda}\frac{dk_R dk_I}{(2\pi)^2}$$
А интегральное уравнение:
$$\chi(\lambda,z) = 1 - \int\int G(\lambda, z-z')U(z')\chi(\lambda,z')dz'_R dz'_I.$$
Для нахождения данных рассеяния нам нужно найти асимптотику $G(\lambda,z)$ и асимптотику самой $\chi(\lambda,z)$ при $|z| \to \infty$.
Асимптотику $G(\lambda,z)$ можно найти используя формулу:
$$\frac{1}{\pi^2}\int\int \frac{\exp(i(k\overline{z}+\overline{k}z))}{ak+b\overline{k}}dk_R dk_I = \frac{i}{\pi}sgn(a\overline{a}-b\overline{b})\frac{1}{az-b\overline{z}}.$$
Это приводит к выражению:
$$G(\lambda,z) =_{|z|\to\infty} \frac{1}{2\pi}sgn(\lambda\overline{\lambda}-1)\left\{\frac{1}{z/\lambda - \overline{z}\lambda} - \frac{\exp\left[\,-\frac{1}{2}(\lambda - 1/\overline{\lambda})\overline{z} + \frac{1}{2}(\overline{\lambda}-1/\lambda)z\right]}{\overline{\lambda}z - \overline{z}/\overline{\lambda}}\right\}$$
Для функции $\chi(\lambda,z)$ имеем следующее:
$$\begin{aligned}\chi = 1 - \tfrac{1}{2\pi}\tfrac{sgn(\lambda\overline{\lambda}-1)}{z/\lambda-\overline{z}\lambda}\int\int U(z')\chi(\lambda,z')dz'_R dz'_I + \\ \tfrac{1}{2\pi}\tfrac{sgn(\lambda\overline{\lambda}-1)}{\overline{\lambda}z-\overline{z}/\overline{\lambda}}\exp\left[\,-\tfrac{1}{2}(\lambda-1/\overline{\lambda})\overline{z} + \tfrac{1}{2}(\overline{\lambda}-1/\lambda)z\right]\,\times \\ \times\int\int \exp\left[\,\tfrac{1}{2}(\lambda-1/\overline{\lambda})\overline{z'} - \tfrac{1}{2}(\overline{\lambda}-1/\lambda)z'\right]\,U(z')\chi(\lambda,z')dz'_R dz'_I.\end{aligned}$$

Далее будем исследовать особенности функции
$$b(\lambda) = \int\int \exp\left\{\frac{1}{2}(\lambda - 1/\overline{\lambda})\overline{z} - \frac{1}{2}(\overline{\lambda}-1/\lambda)z\right\}U(z)\chi(\lambda,z)dz_R dz_I$$

Т.к. в нашем случае можно считать, что $\lambda = \overline{\lambda}$, то

$$b(\lambda) = -U_0 \int\int dxdy \exp\left[\, -iy(\lambda - 1/\lambda)\right]\ \chi(\lambda, x, y).$$

Описание численного метода.

Подставим в исходное уравнение $\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial}{r\partial r} - \frac{\partial^2}{r^2\partial\varphi^2} + U(r)\right)\ \Psi = -\Psi$ следующий вид $\Psi = \exp\left(\frac{r}{2}(\lambda e^{-i\varphi} + \lambda^{-1}e^{i\varphi})\right)\ \chi$. Это приводит к уравнению:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial}{r\partial r} - \frac{\partial^2}{r^2\partial\varphi^2} - (\lambda e^{-i\varphi} + \lambda^{-1}e^{i\varphi})\frac{\partial}{\partial r} - (-i\lambda e^{-i\varphi} + i\lambda^{-1}e^{i\varphi})\frac{\partial}{r\partial\varphi} + U(r)\right)\ \chi = 0.$$

А в переменных (x, y) получаем:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - (\lambda + \lambda^{-1})\frac{\partial}{\partial x} + i(\lambda - \lambda^{-1})\frac{\partial}{\partial y} + U(x, y)\right)\ \chi = 0.$$

Выделяя в решении действительную и мнимую части: $\chi = \chi_1 + i\chi_2$, получим:

$$-(\lambda + \lambda^{-1})\frac{\partial\chi_1}{\partial x} - (\lambda - \lambda^{-1})\frac{\partial\chi_2}{\partial y} - \frac{\partial^2\chi_1}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\chi_1}{\partial y^2} + U(x, y)\chi_1 = 0,$$

$$-(\lambda + \lambda^{-1})\frac{\partial\chi_2}{\partial x} + (\lambda - \lambda^{-1})\frac{\partial\chi_1}{\partial y} - \frac{\partial^2\chi_2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\chi_2}{\partial y^2} + U(x, y)\chi_2 = 0.$$

Теперь сделаем так: замена

$$x = \mathrm{tg}(\frac{\xi}{2}),$$

$$y = \mathrm{tg}(\frac{\eta}{2}).$$

и соответственно:

$$\frac{\partial}{\partial x} = 2\cos^2\frac{\xi}{2}\frac{\partial}{\partial\xi},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = 2\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial}{\partial\eta},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}\frac{\partial}{\partial\xi} + 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = -4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial}{\partial\eta} + 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}$$

приводит исходную пару уравнений к виду:

$-2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} - 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - (-4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} + 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\xi^2}) - (-4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} + 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\eta^2}) + U(\xi,\eta)\chi_1 = 0,$

$-2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - (-4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\xi^2}) - (-4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} + 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\eta^2}) + U(\xi,\eta)\chi_2 = 0.$

притом, теперь $\xi,\eta \in (-\pi,\pi)$ и точка $-\pi$ соответствует $-\infty$ в старых координатах, а π - соответствует ∞. Поэтому теперь можно решать задачу дирихле с граничными условиями для $\chi_1 = 1$ и $\chi_2 = 0$ в квадрате $[-\pi,\pi]\times[-\pi,\pi]$.

Классическим подходом является решение динамической задачи (равновесным решением которой и будет искомое):

$\dot\chi_1 = -2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} - 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - (-4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} + 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\xi^2}) - (-4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} + 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\eta^2}) + U(\xi,\eta)\chi_1,$

$\dot\chi_2 = -2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - (-4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\xi^2}) - (-4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} + 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\eta^2}) + U(\xi,\eta)\chi_2.$

Слегка преобразуем последние равенства:

$\dot\chi_1 = (4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2} - 2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} - 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\xi^2} + 4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\eta^2} + U(\xi,\eta)\chi_1,$

$\dot\chi_2 = (4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2} - 2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\xi^2} + 4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\eta^2} + U(\xi,\eta)\chi_2.$

Далее заметим, что если пара $(\chi_1(\xi,\eta),\chi_2(\xi,\eta))$ является решением этой системы, то пара $(\chi_1(\xi,\eta),\chi_2(\xi,-\eta))$ решение системы:

$\dot\chi_1 = (4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2} - 2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial\chi_1}{\partial\xi} + 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\xi^2} + 4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_1}{\partial\eta^2} + U(\xi,\eta)\chi_1,$

$\dot\chi_2 = (4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2} - 2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial\chi_2}{\partial\xi} + 2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_1}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\xi^2} + 4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial\chi_2}{\partial\eta} - 4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2\chi_2}{\partial\eta^2} + U(\xi,\eta)\chi_2.$

Теперь складываем и вычитаем эти уравнения. Кроме того, переходим к переменным $s=\chi_1+\chi_2$ и $t=\chi_1-\chi_2$:

$\dot{s}=(4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}-2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial s}{\partial\xi}+2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial s}{\partial\eta}-4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2 s}{\partial\xi^2}+4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial s}{\partial\eta}-4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2 s}{\partial\eta^2}+U(\xi,\eta)s.$

$\dot{t}=(4\sin\frac{\xi}{2}\cos^3\frac{\xi}{2}-2(\lambda+\lambda^{-1})\cos^2\frac{\xi}{2})\frac{\partial t}{\partial\xi}-2(\lambda-\lambda^{-1})\cos^2\frac{\eta}{2}\frac{\partial t}{\partial\eta}-4\cos^4\frac{\xi}{2}\frac{\partial^2 t}{\partial\xi^2}+4\sin\frac{\eta}{2}\cos^3\frac{\eta}{2}\frac{\partial t}{\partial\eta}-4\cos^4\frac{\eta}{2}\frac{\partial^2 t}{\partial\eta^2}+U(\xi,\eta)t.$

Далее заметим, что $t(\xi,\eta)=s(\xi,-\eta)$, тогда $\chi_1(\xi,\eta)=\frac{1}{2}(s+t)=\frac{1}{2}(s(\xi,\eta)+s(\xi,-\eta))$. А $\chi_2(\xi,-\eta)=\frac{1}{2}(s(\xi,\eta)-s(\xi,-\eta))$, т.е. $\chi_2(\xi,\eta)=\frac{1}{2}(s(\xi,-\eta)-s(\xi,\eta))$.
Это означает, что численно достаточно решить только первое из уравнений. Теперь вспоминаем формулу:

$$b(\lambda)=-U_0\int\int dxdy\exp\left[\,-iy(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi(\lambda,x,y).$$

Далее вспоминаем, что:

$$x=\operatorname{tg}\frac{\xi}{2},$$
$$y=\operatorname{tg}\frac{\eta}{2}.$$

Тогда якобиан преобразования:

$$J=\frac{1}{4\cos^2\xi/2\cos^2\eta/2}.$$

Это приводит к следующему выражению для $b(\lambda)$:

$$b(\lambda)=-U_0\int\int\frac{d\xi d\eta}{4\cos^2\xi/2\cos^2\eta/2}\exp\left[-i\operatorname{tg}\frac{\eta}{2}(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi(\lambda,\xi,\eta).$$

Перейдем к функциям χ_1 и χ_2, которые мы и находили численно, тогда (опускаем лишние постоянные множители)

$$Re(b(\lambda))=\int\int\frac{d\xi d\eta}{4\cos^2\xi/2\cos^2\eta/2}\left\{\cos\left[\ \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi_1+\sin\left[\ \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi_2\right\}.$$

$$Im(b(\lambda))=\int\int\frac{d\xi d\eta}{4\cos^2\xi/2\cos^2\eta/2}\left\{\cos\left[\ \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi_2-\sin\left[\ \operatorname{tg}\frac{\eta}{2}(\lambda-1/\lambda)\right]\ \chi_1\right\}.$$

Подставляя сюда выражения для χ_1 и χ_2 через s, получаем

$$b(\lambda)=\int\int\frac{s(\xi,\eta)d\xi d\eta}{\cos^2\xi/2\cos^2\eta/2}\cos((\lambda-\lambda^{-1})\operatorname{tg}\eta/2+\pi/4).$$

Численные результаты.

Уравнение для функции s решалось с помощью итерационного разностного метода (фактически, решалась краевая задача). Однако, применение итерационного метода к решению дифференциального уравнения для s не позволяет при фиксированном λ опуститься ниже некоторого значения U_0. Однако, можно наоборот зафиксировать U_0 и подходить к особенности $b(\lambda)$ из области больших λ. В этом случае точность алгоритма и время счета приемлемы и можно вычислить функцию s. Далее подставляем ее в последний интеграл (численно) и получаем значение данных рассеяния при данном λ. Это приводит к следующим зависимостям (рис.1)

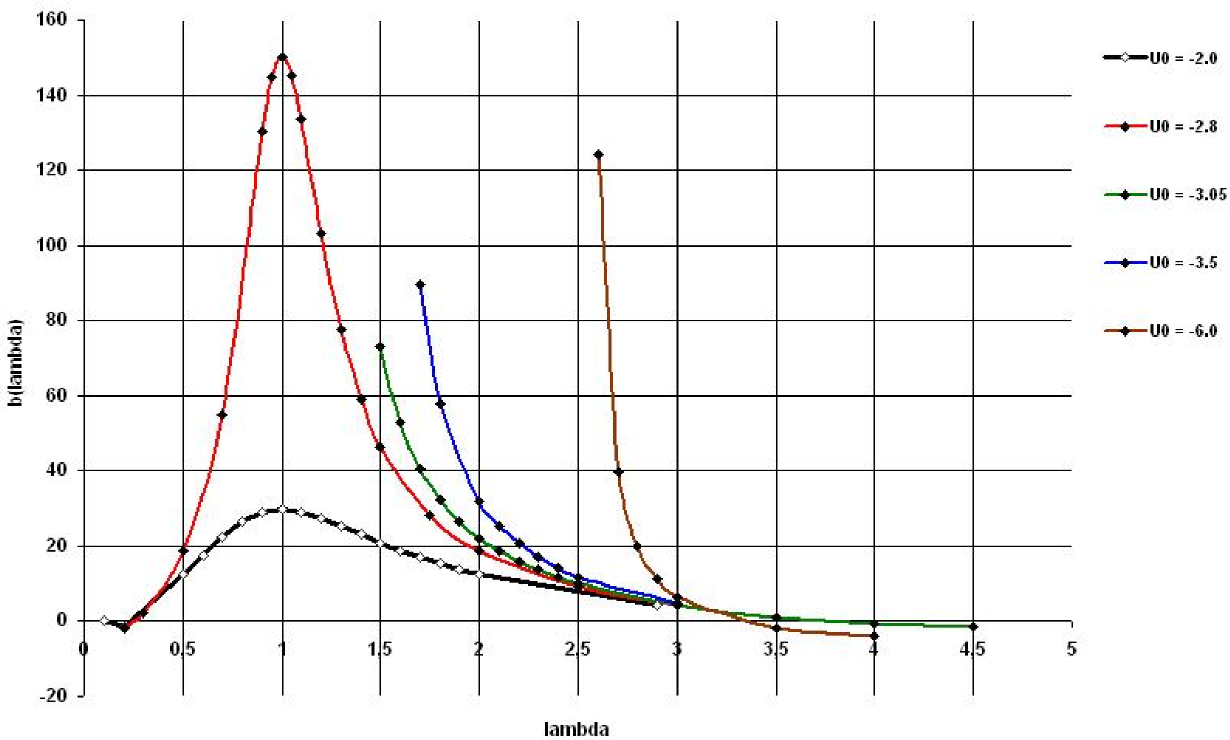

Рис. 1: Зависимость обобщенных данных рассеяния b от λ. В качестве потенциала была взята круглая яма радиуса $R = 1.0$ и глубины U. На графике приведены зависимости $b(\lambda)$ при разных U.

Как видим, при малых значениях глубины ямы $U < 3.0$ данные рассеяния не имеют особенностей. Анализ зависимостей $b(\lambda)$ при $U > 3.0$ показывает, что возникают полюсные особенности, причем полюс при увеличении глубины ямы смещается в область больших λ.

Обсуждение гипотез и заключительные замечания.

Одно из предположений о виде функции $b(\lambda)$ заключается в том, что она не имеет особенностей, когда основное состояние в данном потенциале лежит выше, чем $\epsilon_0 = -1$. Полагая, что радиус ямы $R_0 = 1$, получим уравнение на критическое значение глубины потенциала U_0^*.

Внутри ямы уравнение для функции основного состояния имеет вид:

$$\Psi''_{rr} + \frac{1}{r}\Psi'_r + (U_0 - 1)\Psi = 0.$$

Его решением (конечном в нуле) является функция бесселя нулевого порядка $\Psi = const \cdot J_0\left(r\sqrt{U_0 - 1}\right)$.

Вне ямы уравнение принимает такой вид:

$$\Psi''_{rr} + \frac{1}{r}\Psi'_r - \Psi = 0.$$

Его решением (имеющим на бесконечности асимптотику $\propto e^{-r}$) явяется функция макдональда нулевого порядка $\Psi = const \cdot K_0(r)$.

Сшиваем логарифмические производные этих функций при $r = 1$ и получаем искомое соотношение на U_0^*:

$$\frac{J_0'(\sqrt{U_0^* - 1})\sqrt{U_0^* - 1}}{J_0(\sqrt{U_0^* - 1})} = \frac{K_0'(1)}{K_0(1)}.$$

Используя свойства функций Бесселя, получим:

$$\frac{J_1(\sqrt{U_0^* - 1})\sqrt{U_0^* - 1}}{J_0(\sqrt{U_0^* - 1})} = \frac{K_1(1)}{K_0(1)}.$$

Численное решение этого уравнения дает первый корень $U_0^* = 3.053$. Это совпадает с той точкой, в которой у нас появился полюс в данных рассеяния.

Такое поведение данных рассеяния означает, что обратная задача для данных рассеяния с особеностями скорее всего не разрешима в общем случае, а только для каких-то определенных положений полюсов в данных рассеяния существует соответствующий потенциал. Возможно, расположение этих полюсов должно подчиняться какому-то закону для корректной постановки обратной задачи. Выяснить, так ли это и каков этот закон еще предстоит.

Список литературы.

[1] R.G.Newton, *Scattering theory of waves and particles* Springer-Verlag, Berlin 1982.

[2] В.Е.Захаров, С.В.Манаков, С.П.Новиков, Л.П.Питаевский, *Теория солитонов: метод обратной задачи.*

[3] Л.Д.Фадеев, *Фактоизация S-матрицы для многомерного оператора Шредингера* Докл. Акад. Наук СССР 167 (1966).

[4] Л.Д.Фадеев, *Обратная задача квантовой теории рассеяния.*

[5] П.Г.Гриневич, *Преобразование рассеяния при фиксированной ненулевой энергии для двумерного оператора Шредингера с потенциалом убывающим на бесконечности,* Успехи Мат. Наук 55:6 1015-1083.

[6] M.Boiti, J.Leon, M.Manna and F.Pempinelli, „On a spectral transform of a KDV-like equation related to the Schrödinger operator in the plane“, *Inverse Problems* **3** (1987), 25-36.

[7] T.Y.Tsai, „The Schrödinger operator in the plane“, *Inverse Problems* **9** (1993), 763-767.