ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2000, том 374, № 5, с. 602–605

МАТЕМАТИКА

УДК 517.9

АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ

© 2000 г. А. М. Молчанов

Представлено академиком Т.М. Энеевым 31.12.99 г.

Поступило 20.01.2000 г.

1. ВВЕДЕНИЕ

Временнóе уравнение Шредингера,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + W(x,t)\psi,$$

допускает разделение переменных x и t

$$\psi(x,t) = e^{\frac{Et}{i\hbar}}\psi(x)$$

даже в случае нелинейного, нелокального потенциала $W(x, t)$,

$$W(x,t) = U(x) + \int\limits_y K[x, y, |\psi(y,t)|]dy.$$

Отыскание стационарного решения $\psi(x)$ приводит к краевой задаче с нелинейным, нелокальным потенциалом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + W(x)\psi = E\psi,$$

$$W(x) = U(x) + \int\limits_y K[x, y, |\psi(y)|]dy.$$

В приложениях часто встречается уравнение Шредингера "поляронного типа" – уравнение Боголюбова–Пекара, когда потенциал наиболее просто зависит от искомой функции:

$$W(x) = U(x) + \int\limits_y K(x,y)\psi^2(y)dy.$$

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Заметка посвящена построению аналитических решений для одномерного уравнения Шредингера

$$-\psi'' + W(x)\psi = E\psi,$$

$$W(x) = U(x) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} K(x,y)\psi^2(y)dy.$$

Основное предположение состоит в том, что ядро $K(x, y)$ заменяется его галёркинской аппроксимацией из трех слагаемых

$$K(x,y) = a(x)b(y) + a_1(x)b_1(y) + a_2(x)b_2(y).$$

Стандартная процедура понижения порядка, восходящая к Д'Аламберу, приводит к системе двух уравнений первого порядка

$$\psi'(x) = -z\psi, \quad z' - z^2 + W = E.$$

В линейном случае второе уравнение (для z) не содержит ψ и решается независимо, после чего решение ψ записывается в виде

$$\psi(x) = C\exp\{-Z(x)\}, \quad Z'(x) = z.$$

В нашем случае эта процедура дает интегродифференциальное уравнение для функции z

$$z'(x) - z^2(x) + U(x) +$$

$$+ C^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty} K(x,y)\exp\{-2Z(y)\}dy = E.$$

3. АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ

Решение z ищем в виде

$$z(x) = p(x) + \alpha q(x), \quad Z(y) = P(y) + \alpha Q(y),$$

где функции $P(x)$, $Q(x)$ суть первообразные от функций $p(x)$, $q(x)$: $P'(y) = p(y)$, $Q'(y) = q(y)$. Подставляя в уравнение и разделяя переменные x и α, получаем четыре соотношения для функций от переменной x и три соотношения для функций от параметра α:

$$p'(x) - p^2(x) + U(x) = A, \quad a(x) = 1,$$

$$a_1(x) = q'(x) - 2p(x)q(x), \quad a_2(x) = q^2(x);$$

Институт математических проблем биологии Российской Академии наук, Пущино Московской обл.

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} b(y)\exp\{-2Z(y,\alpha)\}dy + A = E,$$

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} b_1(y)\exp\{-2Z(y,\alpha)\}dy + \alpha = 0,$$

$$C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} b_2(y)\exp\{-2Z(y,\alpha)\}dy - \alpha^2 = 0.$$

Интегралы сходятся, если $P(y)$ достаточно быстро – быстрее, чем $Q(y)$, – стремится к плюс бесконечности. Формулы для функций $a_i(x)$ и $U(x)$ задают "функциональную параметризацию" класса уравнений Боголюбова–Пекара. Этот класс определяется семью функциями:

$$U(x),\ a(x),\ a_1(x),\ a_2(x);\quad b(y),\ b_1(y),\ b_2(y),$$

которые выражаются через пять функций и одно число:

$$A;\quad p(x),\ q(x);\quad b(y),\ b_1(y),\ b_2(y).$$

Уравнение Боголюбова–Пекара на указанном "пятимерном" (определяемом пятью независимыми функциями) многообразии имеют аналитические решения

$$\psi(x) = C\exp\{-P(x) - \alpha Q(x)\}.$$

Исключение C и E из системы уравнений для искомых параметров E, C, α приводит к резольвенте $R(\alpha)$ – уравнению для параметра α:

$$R(\alpha) = 0.$$

Резольвента определяется довольно сложным образом – интегралом вида

$$R(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} [b_2(y) + \alpha b_1(y)] \times \exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy.$$

Уравнение $R(\alpha) = 0$ – это аналог характеристического ("векового") уравнения для линейных систем. В конечномерном случае $R(\alpha) = D(\alpha)$ – это просто многочлен и число корней равно его степени. В нашем случае $R(\alpha)$ может иметь бесконечное множество корней. Если это уравнение, $R(\alpha) = 0$, удается решить, то для каждого корня α параметры C и E вычисляются по формулам

$$C^2 = \frac{\alpha^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} b_2(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy},$$

$$E = A + C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} b(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy.$$

4. ИЗОСИСТЕМЫ

В линейном случае, когда $K(x, y) \equiv 0$, величина E имеет смысл полной энергии. В общем случае она может иметь совершенно другой физический (или химический) смысл. Однако математически это всегда константа разделения пространственных и временны́х переменных.

Формула для E дает, что при $b(y) = 0$ система оказывается "изоэнергетической", ибо тогда $E \equiv A$, при любом α.

5. КОНТИНУУМ РЕШЕНИЙ

Качественное отличие интегродифференциальных уравнений от обыкновенных дифференциальных резко проявляется в одном весьма интересном частном случае.

Пусть под знаком интеграла в выражении для резольвенты $R(\alpha)$

$$R(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} [b_2(y) + \alpha b_1(y)] \times \exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy$$

стоит полная производная по переменной y:

$$R(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} d[L(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}].$$

В этом случае интеграл вычисляется явно:

$$R(\alpha) = [L(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}]_{y=-\infty}^{y=+\infty}$$

и резольвента $R(\alpha)$ оказывается тождественно (при всех α) равной нулю:

$$R(\alpha) \equiv 0.$$

Уравнение Боголюбова–Пекара может иметь, следовательно, не просто бесконечное множество решений, а континуальное (в нашем примере однопараметрическое) семейство решений. Это замечательное обстоятельство вытекает из тождества

$$[b_2(y) + \beta b_1(y)]\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy \equiv \equiv d[L(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}].$$

Оно приводит к выражению двух функций $b_1(y)$ и $b_2(y)$ через одну (произвольную) функцию $L(y)$:

$$b_1(y) = -2L(y)q(y),$$
$$b_2(y) = -2L(y)p(y) + L'(y).$$

В этих формулах $p(y)$, $q(y)$ – функции, введенные ранее как функции $p(x)$ и $q(x)$. Итак, зададим произвольно одно число и четыре функции:

$$A;\quad P(x),\,Q(x);\quad b(y),\,L(y)$$

и определим семь элементов уравнения Боголюбова–Пекара:

$$U(x) = A + p^2(x) - p'(x),\quad a(x) = 1,$$

$$a_1(x) = q'(x) - 2p(x)q(x),\quad a_2(x) = q^2(x),$$

$$b(y) = b(y),\quad b_1(y) = -2L(y)q(y),$$

$$b_2(y) = -2L(y)p(y) + L'(y).$$

Подобное уравнение при любом α имеет решение

$$\psi(x) = C\exp\{-P(x) - \alpha Q(x)\};$$

здесь

$$C^2 = \frac{\alpha^2}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} b_2(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy}.$$

6. ОКРЕСТНОСТЬ ОСЦИЛЛЯТОРА ПЛАНКА–ШРЕДИНГЕРА

Поучительно рассмотреть важный частный случай:

$$A = 1;\quad P(x) = \frac{x^2}{2},\quad Q(x) = -x;$$

$$b(y) = 0,\quad L(y) = -\varepsilon y.$$

Несложные выкладки дают

$$U(x) = x^2,\quad K(x, y) = -\varepsilon(1 + 4xy - 2y^2),$$

$$C^2 = \frac{\alpha^2}{\varepsilon\int\limits_{-\infty}^{+\infty}(2y^2 - 1)\exp\{-y^2 - 2\alpha y\}dy},$$

$$\psi(x) = C\exp\left\{-\frac{x^2}{2} - \alpha x\right\}.$$

Полное решение состоит из двух линий в плоскости α, C: либо $\alpha = 0$ и C произвольно (как в линейном случае $\varepsilon = 0$), либо α произвольно и $C^2 = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}e^{-\alpha^2}$. Более наглядна другая параметризация решения:

$$\psi(x) = B\exp\left\{-\frac{1}{2}(x - \alpha)^2\right\},$$

которая явно выражает сдвиговую (вдоль оси x) симметрию найденного решения. При такой параметризации полное решение состоит из двух перпендикулярных прямых в плоскости α, B: либо B произвольно и $\alpha = 0$, либо α произвольно и $B^2 = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Найдены аналитические решения для уравнения Шредингера "поляронного типа"–

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + W(x)\psi = E\psi$$

– уравнения Боголюбова–Пекара, когда потенциал наиболее просто зависит от искомой функции:

$$W(x) = U(x) + \int\limits_y K(x, y)\psi^2(y)dy,$$

а ядро – это галёркинская аппроксимация из трех слагаемых

$$K(x, y) = a(x)b(y) + a_1(x)b_1(y) + a_2(x)b_2(y).$$

1) Уравнение, имеющее аналитические решения, строится по функциям A; $p(x)$, $q(x)$; $b(y)$, $b_1(y)$, $b_2(y)$.

$U(x) = A - p'(x) + p^2(x)$,
$a(x) = 1$,
$a_1(x) = q'(x) - 2p(x)q(x)$,
$a_2(x) = q^2(x)$,
$K(x, y) = a(x)b(y) + a_1(x)b_1(y) + a_2(x)b_2(y)$.

Для построения решения нужно дополнительно найти функции $P(x)$, $Q(x)$ – первообразные от функций $p(x)$, $q(x)$:

$$P'(y) = p(y),\quad Q'(y) = q(y).$$

Сначала строим резольвенту

$$R(\alpha) \equiv \int\limits_{-\infty}^{+\infty}[b_2(y) + \alpha b_1(y)]\times$$

$$\times\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy,$$

затем находим параметр α из уравнения

$$R(\alpha) = 0$$

и получаем решение в виде

$$\psi(x) = C\exp\{-P(x) - \alpha Q(x)\},$$

где

$$C^2 = \frac{\alpha^2}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} b_2(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy},$$

$$E = A + C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} b(y)\exp\{-2P(y) - 2\alpha Q(y)\}dy.$$

2) Важной особенностью нелинейного, нелокального уравнения Шредингера является возможность существования однопараметрического семейства решений. Это семейство возникает, если наложить дополнительные условия на функции от переменной y

$$b_1(y) = -2L(y)q(y),$$
$$b_2(y) = -2L(y)p(y) + L'(y).$$

В этом случае резольвента обращается в нуль тождественно:

$$R(\alpha) \equiv 0$$

и любое значение параметра α дает решение уравнения Шредингера.

3) Окрестность осциллятора Планка–Шредингера. Уравнение

$$-\psi'' + W(x)\psi = \psi,$$
$$W(x) = x^2 - \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + 4xy - 2y^2)\psi^2(y)dy$$

имеет однопараметрическое семейство решений

$$\psi(x) = B\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\alpha)^2\right\}.$$

Это семейство решений инвариантно относительно сдвига вдоль оси x. Полное решение состоит из двух перпендикулярных прямых в плоскости α, B: либо B произвольно и $\alpha = 0$, либо α произвольно и $B^2 = \dfrac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}$.

Вторая прямая уходит на бесконечность при стремлении возмущения к нулю. Это совершенно неожиданный результат. Он допускает парадоксальную интерпретацию: обыкновенные дифференциальные уравнения соответствуют бесконечно удаленным особым точкам в классе нелинейных интегродифференциальных уравнений.