

ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА  
Кафедра фізики і хімії твердого тіла

**ВОЗНЯК О.М.**

**РІЗНИЦЕВА СХЕМА ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ  
ОДНОВИМІРНОГО РІВНЯННЯ ШРЕДИНГЕРА**

(Навчальні матеріали з підготовки фахівців за магістерською  
програмою зі спеціальностей 104 - "фізика та астрономія" та 105 -  
"прикладна фізика і наноматеріали")

ІВАНО-ФРАНКІВСЬК - 2021

# Зміст

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Різницеве одновимірне рівняння Шредингера</b>   | <b>3</b>  |
| 1.1      | Різницева схема для одновимірного рівняння Шредингера .                                    | 3         |
| 1.2      | Збезрозмірювання рівняння Шредингера . . . . .   | 4         |
| 1.2.1    | Граничні умови для збезрозміреного рівняння Шредингера . . . . .                           | 6         |
| 1.3      | Чисельна реалізація розв'язку рівняння Шредингера . . . . .                                | 8         |
| 1.3.1    | Знаходження власних значень для різницевого рівняння Шредингера . . . . .                  | 9         |
| 1.3.2    | Алгоритм методу пристрілу (пристріл) . . . . .   | 9         |
| 1.3.3    | Алгоритм методу прогону (прогін) . . . . .   | 10        |
| 1.3.4    | Алгоритм методу прогону для задачі розсіювання .   | 18        |
| 1.3.5    | Метод Нумерова . . . . .   | 22        |
| 1.3.6    | Приклад. Прямокутна потенціальна яма . . . . .   | 25        |
| <b>2</b> | <b>Різницевий варіант оберненої задачі для одновимірного рівняння Шредингера</b>           | <b>27</b> |
| 2.1      | Виведення умов повноти і ортогональності власних функцій . . . . .                         | 28        |
| 2.2      | Розсіювання на потенціалі скінченного радіуса дії . . . . .                                | 31        |
| 2.3      | Наближення потенціалів кусково-постійними функціями . . .                                  | 34        |
| 2.4      | Реконструкція потенціалів за допомогою багаторазового розв'язування прямої задачі. . . . . | 37        |
| <b>3</b> | <b>Рівняння Гельфанда-Левитана-Марченка</b>  | <b>38</b> |
| <b>4</b> | <b>Алгебраїчна форма рівняння Гельфанда-Левитана</b>                                       | <b>41</b> |
| <b>5</b> | <b>Зв'язок коефіцієнтів <math>K(n, m)</math> із потенціалом <math>V(n)</math></b>          | <b>44</b> |
| <b>6</b> | <b>Приклади</b>  | <b>48</b> |
| 6.1      | Задача 1. . . . .  | 48        |
| 6.2      | Задача 2. . . . .  | 50        |
| 6.2.1    | Реконструкція безвідбивного потенціала із $\delta$ -ями. . .                               | 56        |
| 6.2.2    | Задача 2 із двома рівнями. . . . .   | 57        |
| 6.2.3    | Задача 2 із $\kappa_1 = 1, 5\kappa$ із двома рівнями. . . . .                              | 60        |

# 1 Різницеве одновимірне рівняння Шредингера

На жаль, лише небагато задач квантової механіки вдається розв'язати точно. Тобто, лише для невеликої кількості потенціалів вдається знайти розв'язок рівняння Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

у аналітичній формі. Для розв'язку інших задач існує ряд чисельних методів, серед яких є такі, у основі яких лежать різні різницеві схеми.

## 1.1 Різницєва схема для одновимірного рівняння Шредингера

Для побудови різницевої схеми на інтервал  $[0, a]$ , на якому реалізується розрахунок, наносять сітку  $N$  рівновіддалених ліній з кроком  $\Delta$ .

У методі скінчених різниць диференціальне рівняння заміняють різницевим на вибраній сітці з вузлами у точках  $x_n = n \cdot \Delta$

$$\psi_n'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_n) \psi_n = 0.$$

Для апроксимації похідної  $\psi'$  розглянемо ліву різницєву похідну

$$\psi'_n = \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta}$$

та праву різницєву похідну

$$\psi'_n = \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta}$$

і запишемо середнє значення цих похідних на проміжку  $[n - 1, n + 1]$ , використовуючи її симетричне визначення

$$\psi'(x_n) = \frac{\psi_{n+1} - \psi_{n-1}}{2\Delta} \equiv \frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Другу різницєву похідну визначимо як

$$\psi''(x_n) \equiv \psi_n'' \equiv \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta}}{\Delta} = \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta^2},$$

яка є триточковим визначенням другої різницевої похідної, що дає другий порядок точності по  $\Delta$ , де  $\Delta$  - крок дискретизації,  $n$  - номер вузла сітки. Тоді рівняння Шредингера набуває вигляду

$$\frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{\Delta^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)\psi_n = 0, \quad (n = 1, 2, \dots, N - 1) \quad (2)$$

де  $V_n$  - значення потенціальної енергії у вузлах сітки,  $\psi_n$  - значення хвильової функції у вузлах сітки. Або

$$\psi_{n-1} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)\Delta^2 - 2 \right] \psi_n + \psi_{n+1} = 0, \quad (n = 1, 2, \dots, N - 1) \quad (3)$$

Для одержання частинного розв'язку рівняння Шредингера до нього зазвичай додають т.з. крайові умови. У цьому випадку задача, яку слід розв'язати стає крайовою задачею. Крайові задачі для звичайних диференціальних рівнянь, яким є рівняння (2) відрізняються від задач Коші тим, що для крайових задач граничні умови задають не у одній точці, а на границях інтервалу розрахунку. Зокрема для нашого одновимірного рівняння Шредингера граничні умови матимуть вигляд

$$\begin{aligned} \psi(0) &= \psi_0, \\ \psi(a) &= \psi_a. \end{aligned}$$

Незважаючи на позірну близькість крайових задач і задач Коші чисельні методи їх розв'язування суттєво відмінні. Алгоритм розв'язування задач Коші полягає у тому, що починаючи із заданих початкових умов просто прораховують шукані значення функції у вузлах сітки через відомі значення у попередній точці. Для крайових задач, якщо записати їх різницеві рівняння граничні умови записані не на одній, а на обидвох границях інтервалу  $[0, a]$ , а тому невідомі значення  $\psi_n$  у вузлах сітки пов'язані між собою системою алгебраїчних рівнянь. Чисельне розв'язування такої системи є окремою, і часто непростою, задачею.

## 1.2 Збезрозмірювання рівняння Шредингера

У рівняння (3) входять величини різних порядків. Зокрема, крім числа 2 воно містить масу електрона  $m = 9,105 \cdot 10^{-31}$  кг, сталу Планка

$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж с. Цей факт ускладнює застосування чисельних методів, тому що призводить до значних похибок рахунку. Цього ускладнення можна уникнути, якщо збезрозмірити рівняння. Цей процес доцільно вибрати таким, що приводить до величин, що мають близькі порядки. Після того як спосіб збезрозмірення вибраний, рівняння Шредингера слід переписати у нових одиницях і лише після цього розв'язати. Після проведення розрахунків одержані величини можна перевести у вихідні одиниці.

Один із можливих способів збезрозмірювання можна реалізувати так: вибрати за одиниці вимірювання сталу Планка  $\hbar$ , масу електрона  $m$  та довжину інтервала  $a$  і через них виразити всі інші величини. Зокрема за одиницю хвильового числа  $k_0$  можна взяти величину  $k_0 = 1/a$ . Якщо врахувати, що енергія найнижчого енергетичного рівня у нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі шириною  $a$  рівна

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

то за одиницю вимірювання енергії можна вибрати

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Тепер безрозмірні величини матимуть вигляд

$$\begin{aligned} \bar{l} &= \frac{l}{a}, \\ k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \rightarrow ka = \sqrt{\frac{2ma^2E}{\hbar^2}} \rightarrow \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{2E}{E_0}}, \\ \bar{k} &= \sqrt{2\bar{E}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Збезрозмірене рівняння Шредингера можна одержати помноживши рівняння (2) на  $a^2$

$$\psi_{n-1} + \left[ \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_n \left( \frac{\Delta}{a} \right)^2 - 2 \right] \psi_n + \psi_{n+1} = -\frac{2ma^2}{\hbar^2} \left( \frac{\Delta}{a} \right)^2 E \psi_n. \quad (5)$$

Якщо ввести безрозмірну потенціальну енергію

$$v_n = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_n = 2 \frac{V_n}{E_0}$$

та безрозмірне власне значення енергії

$$\varepsilon = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E = 2 \frac{E}{E_0},$$

перепозначивши  $\frac{\Delta}{a} = \bar{\Delta} \equiv \Delta$  і увівши

$$u_n = \varepsilon - v_n - 2$$

одержимо різницеве рівняння у такому вигляді

$$\psi_{n-1} + u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0. \quad (6)$$

Числове значення  $E_0$  рівне

$$E_0 = \frac{(1.055)^2 \cdot 10^{-68}}{9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-9})^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-18}} = 0.7630 \text{ eV}.$$

### 1.2.1 Граничні умови для збезрозміреного рівняння Шредингера

Оскільки розв'язок різницевого рівняння другого порядку визначається двома довільними сталими, то його частинний розв'язок можна одержати задавши дві додаткові умови. Якщо ці умови задані у двох сусідніх точках, то таку задачу називають задачею Коші. Якщо ж умови задані у двох точках, які не є сусідніми, то таку задачу називають крайовою.

**Задача Коші** полягає у тому, щоб знайти розв'язок різницевого рівняння Шредингера

$$\psi_{n-1} + u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0 \quad (7)$$

при додаткових умовах

$$\begin{aligned} \psi|_{n=0} &= \psi_0, \\ \psi|_{n=1} &= \psi_1. \end{aligned}$$

Ці додаткові умови можна записати у іншому вигляді врахувавши, що

$$\Delta\psi_0 = \psi_1 - \psi_0 \equiv \bar{\psi}_1$$

і стверджувати, що для задачі Коші додаткові умови задані у одній точці  $n = 0$

$$\begin{aligned} \psi|_{n=0} &= \psi_0, \\ \Delta\psi|_{n=0} &= \bar{\psi}_0. \end{aligned}$$

**Крайова задача** полягає у тому, щоб знайти розв'язок того ж рівняння

$$\psi_{n-1} + u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0 \quad (8)$$

при додаткових умовах

$$\begin{aligned} \psi|_{n=0} &= \psi_0, \\ \psi|_{n=N} &= \psi_N. \end{aligned}$$

У граничних вузлах  $n = 0$  та  $n = N$  можна задати не лише значення функції, але і їх різниці та комбінації

$$\begin{aligned} \alpha_1 \Delta \psi_0 + \beta_1 \psi_0, \\ \alpha_2 \Delta \psi_N + \beta_2 \psi_N. \end{aligned}$$

Тоді умови можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \kappa_1 \psi_1 + \mu_1, \\ \psi_N &= \kappa_2 \psi_{N-1} + \mu_2. \end{aligned}$$

Зазначимо, що при  $\kappa_1 = \kappa_2 = 0$  останні крайові умови переходять у умови першого роду

$$\begin{aligned} \psi|_{n=0} &= \psi_0, \\ \psi|_{n=N} &= \psi_N. \end{aligned}$$

Якщо ж і  $\kappa_1$  і  $\kappa_2$  не рівні нулю і не рівні одиниці, то граничні умови є граничними умовами третього роду

$$\begin{aligned} -\kappa_1 \Delta \psi_0 + (1 - \kappa_1) \psi_0 &= \mu_1, \\ \kappa_2 \Delta \psi_N + (1 - \kappa_2) \psi_N &= \mu_2. \end{aligned}$$

Розв'язок задачі Коші знаходять безпосередньо із різницевого рівняння Шредингера  $\psi_{n+1}$ , що дає рекурентне співвідношення

$$\psi_{n+1} = -(u_n \psi_n + \psi_{n-1})$$

при додаткових умовах

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \mu_1, \\ \psi_N &= \mu_2. \end{aligned}$$

Розв'язок крайових задач є складнішою задачею і вимагає спеціальних методів.

### 1.3 Чисельна реалізація розв'язку рівняння Шредингера

У розгорнутому вигляді різниці рівняння мають вигляд

$$\begin{aligned}
 n = 1 : & \quad (2 + v_1 \Delta^2) \psi_1 - \psi_2 = \varepsilon \Delta^2 \psi_1, \\
 n = 2 : & \quad -\psi_1 + (2 + v_2) \psi_2 - \psi_3 = \varepsilon \Delta^2 \psi_2, \\
 n = 3 : & \quad -\psi_2 + (2 + v_3) \psi_3 - \psi_4 = \varepsilon \Delta^2 \psi_3, \\
 & \quad \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \\
 n = i : & \quad -\psi_{i-1} + (2 + v_i) \psi_i - \psi_{i+1} = \varepsilon \Delta^2 \psi_i, \\
 & \quad \dots\dots\dots = \dots\dots\dots \\
 n = N - 1 : & \quad -\psi_{N-2} + (2 + v_{N-1}) \psi_{N-1} - \psi_N = \varepsilon \Delta^2 \psi_{N-1}.
 \end{aligned}$$

Система рівнянь (9) еквівалентна рівнянню Шредингера (1), але на відміну від (1), яке може мати і нескінченну кількість власних значень, системі (9) відповідає лише  $N$  зв'язаних станів із власними значеннями  $E_\lambda (\lambda = 1, 2, \dots, N)$ . Тому ми одержуємо не лише дискретну, але і скінченновимірну (в сенсі розмірності простору Гільберта хвильових функцій) квантово-механічну модель. Обмеженість розмірності простору полегшує розв'язок задачі, оскільки вимагає обмеженої кількості алгебраїчних операцій.

У векторній формі систему рівнянь (9) можна переписати як

$$\hat{A} \vec{\psi} = \hat{\varepsilon} \vec{\psi},$$

де матриця  $\hat{A}$  має вигляд

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 + v_1 \Delta^2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 + v_2 \Delta^2 & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 + v_3 \Delta^2 & -1 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 2 + v_{N-1} \Delta^2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$



$\vec{\psi}$  - вектор-стовпчик

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix},$$

$$\hat{\varepsilon} = \Delta^2 \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \varepsilon_N \end{pmatrix}.$$

### 1.3.1 Знаходження власних значень для різницевого рівняння Шредингера

Задачі на власні значення є крайовими задачами для диференціальних рівнянь у яких праві частини залежать від одного чи кількох параметрів. Самі розв'язки крайової задачі існують лише при певних значеннях параметрів, які називають власними значеннями крайової задачі.

Відмінність задачі на власні значення полягає у тому, що метод зв'язування слід застосовувати не лише щодо лівих граничних умов, які - невідомі, але і щодо власних значень. Тобто до початкових умов яких не вистачає слід включити і початкові наближення для кожного із власних значень.

Власні значення  $E_\lambda$  системи рівнянь (9) можна знайти шляхом діагоналізації матриці  $\hat{A}$ . При цьому ми одержимо не всі власні значення, якщо  $N$  менше від їх кількості у вихідній задачі, або у випадку коли  $N$  більше від кількості власних значень на інтервалі  $[0, a]$ , не всі знайдені діагональні елементи відповідатимуть розв'язкам вихідної задачі.

### 1.3.2 Алгоритм методу пристрілу (пристріл)

Для розв'язку крайових задач існує алгоритм, що має назву методу пристрілу, який зводить крайову задачу до серії задач Коші з різними початковими умовами. Суть цього алгоритму полягає у пробному заданні невідомих граничних умов на лівій границі інтервалу і розв'язуванні

задачі Коші методом біжучого розв'язку. У нашому випадку не вистачає однієї початкової умови  $\psi'(0)$ .

Для запуску алгоритму пристрілу задають для  $\psi'(0)$  довільне значення, з допомогою якого прораховують  $\psi(x)$  в усіх вузлах сітки. Внаслідок довільного вибору  $\psi'(0)$  на правій границі інтервалу  $[0, a]$  одержують розв'язок, що не співпадає із значенням  $\psi(b)$ . На наступному кроці вибирають інше значення  $\psi'(0)$ , яке наблизить розв'язок до  $\psi(b)$ . Продовжуючи "пристріл" по незаданій початковій умові можна знайти правильний розв'язок крайової задачі. Вибираючи пробні початкові умови і розв'язуючи серію задач Коші знаходять розв'язок рівняння Шредингера із заданою точністю на іншій границі інтервалу.

### 1.3.3 Алгоритм методу прогону (прогін)

Для чисельного розв'язку крайових задач часто застосовують ще один метод - метод прогону. Спочатку розглянемо цей метод стосовно системи лінійних алгебраїчних рівнянь, а потім застосуємо його до розв'язку звичайних диференціальних рівнянь другого порядку.

#### Метод прогону для системи лінійних алгебраїчних рівнянь

Метод прогону для системи лінійних алгебраїчних рівнянь є модифікацією методу Гаусса для частинного випадку розріджених систем – системи рівнянь із тридіагональною матрицею. Запишемо систему рівнянь у такій формі

$$\begin{aligned}
 b_1x_1 + c_1x_2 &= d_1, \\
 a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 &= d_2, \\
 a_3x_2 + b_3x_3 + c_3x_4 &= d_3, \\
 &\dots\dots\dots \\
 a_{N-1}x_{N-2} + b_{N-1}x_{N-1} + c_{N-1}x_N &= d_{N-1}, \\
 a_Nx_{N-1} + b_Nx_N &= d_N.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Метод прогону, як і метод Гаусса, містить прямий і зворотний прогін. Прямий прогін полягає у тому, що кожному із невідомих  $x_n$  виражають через  $x_{n+1}$  з допомогою коефіцієнтів прогону  $A_n$  і  $B_n$

$$x_n = A_nx_{n+1} + B_n, \quad n = 1, 2, \dots, N - 1. \tag{11}$$

Із першого рівняння системи (10) знайдемо  $x_1$

$$x_1 = -\frac{c_1}{b_1}x_2 + \frac{d_1}{b_1}.$$

Записавши вираз (10) для  $n = 1$

$$x_1 = A_1x_2 + B_1, \quad (12)$$

і порівнявши його із попереднім виразом знаходимо, що

$$\begin{aligned} A_1 &= -\frac{c_1}{b_1}, \\ B_1 &= \frac{d_1}{b_1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Тепер із другого рівняння системи (10) знайдемо  $x_2$ , виразивши його через  $x_3$ , і, замінивши  $x_1$  знайденим для нього виразом, одержуємо

$$a_2(A_1x_2 + B_1) + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2,$$

звідки

$$x_2 = \frac{-c_2x_3 + d_2 - a_2B_1}{a_2A_1 + b_2},$$

а, порівнявши знайдений вираз із виразом

$$x_2 = A_2x_3 + B_2$$

знаходимо

$$\begin{aligned} A_2 &= -\frac{c_2}{a_2A_1 + b_2}, \\ B_2 &= \frac{d_2 - a_2B_1}{a_2A_1 + b_2}. \end{aligned}$$

У подібний спосіб можна одержати коефіцієнти прогону для будь-якого номера  $n$

$$\begin{aligned} A_n &= -\frac{c_n}{a_nA_{n-1} + b_n}, \\ B_n &= \frac{d_n - a_nB_{n-1}}{a_nA_{n-1} + b_n}, \quad n = 2, 3, \dots, N - 1. \end{aligned} \quad (14)$$

Зворотний прогін передбачає обчислення невідомих  $x_n$ . Спочатку слід знайти  $x_N$ . З цією метою використаємо співвідношення (12) при  $n = N-1$  і останнє рівняння системи (10), записавши їх у такий спосіб

$$\begin{aligned}x_{N-1} &= A_{n-1}x_N + B_{N-1}, \\ a_N x_{N-1} + b_N x_N &= d_N.\end{aligned}$$

Виключивши з цих рівнянь  $x_{N-1}$  знаходимо  $x_N$

$$x_N = \beta_N = \frac{d_N - a_N B_{N-1}}{b_N + a_N A_{N-1}}.$$

Далі, використовуючи формули (10) і вирази для коефіцієнтів прогону (14) і (13), послідовно обчислюємо всі  $x_{N-1}, x_{N-2}, \dots, x_1$ . Процес прогону можна проілюструвати такою блок-схемою (Рис. 1)

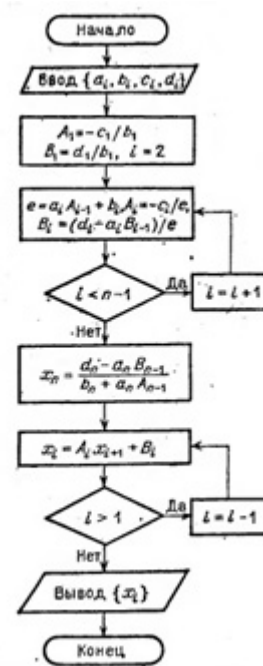


Рис. 1: Блок-схема методу прогону.

## Метод прогону для диференціальних рівнянь другого порядку

Розглянемо спочатку загальний підхід до розв'язку звичайного диференціального рівняння другого порядку методом прогону, а потім спеціалізуємо його до розв'язку рівняння Шредінгера.

Розглянемо різницеве рівняння

$$a_n y_{n-1} - b_n y_n + c_n y_{n+1} = f_n, \quad a_n \neq 0, \quad c_n \neq 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (15)$$

що є різницеvim аналогом диференціального рівняння

$$y''(x) = f(x, y, y').$$

До цього рівняння слід додати граничні умови

$$\begin{aligned} y'(0) + \kappa_1 y(0) &= \mu_1, \\ y'(L) + \kappa_2 y(L) &= \mu_2, \end{aligned}$$

різницеvий аналог, яких можна одержати, записавши односторонні різницеві похідні  $y'(x)$  у початковій та кінцевій точці інтервалу

$$\begin{aligned} \frac{y_1 - y_0}{\Delta} + \kappa_1 y_0 &= \mu_1, \\ \frac{y_N - y_{N-1}}{\Delta} + \kappa_2 y_N &= \mu_2. \end{aligned}$$

Якщо ж апроксимувати похідні різницями другого порядку точності, то граничні умови набувають вигляду

$$\begin{aligned} \frac{y_1 - y_{-1}}{\Delta} + \kappa_1 y_0 &= \mu_1, \\ \frac{y_{N+1} - y_N}{\Delta} + \kappa_2 y_N &= \mu_2. \end{aligned}$$

У ці вирази входять значення функції у так званих фіктивних вузлах  $y_{-1}$  і  $y_{N+1}$ , які лежать поза інтервалом у якому визначена функція. У цих вузлах функцію  $y(x)$  також треба визначити. Внаслідок цього кількість невідомих значень функції у вузлах сітки збільшується на два. Для того, щоб система рівнянь була замкнутою, слід додати ще два різницевих

рівняння при  $i = 0$  та  $i = N + 1$ . Перетворивши останні співвідношення одержимо граничні умови у такому вигляді

$$\begin{aligned} y_0 - (1 + \kappa_1 \Delta)y_1 &= \mu_1, \\ y_{N+1} - (1 - \kappa_2 \Delta)y_N &= \mu_2. \end{aligned} \quad (16)$$

Визначивши матрицю  $\hat{A}$  розмірністю  $(N + 1) \times (N + 1)$  як

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & -\kappa_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ a_1 & -b_1 & c_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & a_i & -b_i & c_i & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & a_{N-1} & -b_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -\kappa_2 & 1 \end{pmatrix}$$

та ввівши вектори

$$\begin{aligned} \vec{y} &= (y_0, y_1, \dots, y_{N-1}, y_N), \\ \vec{f} &= (\mu_1, f_1, \dots, f_{N-1}, f_N), \end{aligned}$$

крайову задачу можна переписати у матричній формі

$$\hat{A} \cdot \vec{y} = \vec{f}.$$

Для розв'язку граничної задачі (15, 16) використаємо метод, що одержав назву *методу прогону*, у якому припускають, що виконується співвідношення, яке своєю формою нагадує граничні умови

$$y_n = \alpha_{n+1}y_{n+1} + \beta_{n+1} \quad (17)$$

і містить невизначені коефіцієнти  $\alpha_{n+1}$  і  $\beta_{n+1}$ . Запишемо співвідношення (17) для  $n - 1$  вузла

$$y_{n-1} = \alpha_n y_n + \beta_n \quad (18)$$

і підставимо його у рівняння (15). Тоді одержимо

$$(a_n \alpha_n - b_n)y_n + c_n y_{n+1} = f_n - a_n \beta_n.$$

Порівнюючи одержаний вираз із співвідношенням (17) знайдемо, що

$$\begin{aligned} \alpha_{n+1} &= \frac{c_n}{b_n - a_n \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N - 1, \\ \beta_{n+1} &= \frac{a_n \beta_n - f_n}{b_n - a_n \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N - 1. \end{aligned} \quad (19)$$

Порівнявши граничну умову

$$y_0 = \kappa_1 y_1 + \mu_1, \quad (20)$$

із співвідношенням (18) записаним для  $i = 0$

$$y_0 = \alpha_1 y_1 + \beta_1$$

знаходимо, що

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \kappa_1, \\ \beta_1 &= \mu_1. \end{aligned}$$

Тепер, маючи  $\alpha_1$  і  $\beta_1$  та переходячи від  $i$  до  $i + 1$  у співвідношеннях (19) знайдемо  $\alpha_i$  і  $\beta_i$  для усіх  $i = 2, 3, \dots, N$ .

Використовуючи співвідношення (17) організуємо рекурсивний процес, переходячи від  $i + 1$  до  $i$ , тобто за відомим  $y_{i+1}$  знаходимо  $y_i$ . Для запуску рекурсивного процесу спочатку слід задати  $y_N$ , яке можна визначити із крайової умови

$$y_N = \kappa_2 y_{N-1} + \mu_2$$

та умови (17) при  $i = N - 1$

$$y_{N-1} = \alpha_N y_N + \beta_N.$$

Підставивши вираз для  $y_{N-1}$  із другого рівняння у перше, одержимо для  $y_N$

$$y_N = \frac{\kappa_2 \beta_N + \mu_2}{1 - \kappa_2 \alpha_N}.$$

Тепер схема прогону набуває такого вигляду:

прямий прогон для розрахунку коефіцієнтів  $\alpha_n$  і  $\beta_n$

$$\begin{aligned} \alpha_{n+1} &= \frac{c_n}{b_n - a_n \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N - 1, \quad \alpha_1 = \kappa_1, \\ \beta_{n+1} &= \frac{a_n \beta_n - f_n}{b_n - a_n \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N - 1, \quad \beta_1 = \mu_1, \end{aligned} \quad (21)$$

зворотний прогон для розрахунку значень функції  $y(x)$  у вузлах сітки

$$y_n = \alpha_{n+1} y_{n+1} + \beta_{n+1} \quad n = N - 1, N - 2, \dots, 2, 1, 0, \quad (22)$$

і значення функції для  $N$ -го вузла

$$y_N = \frac{\kappa_2 \beta_N + \mu_2}{1 - \kappa_2 \alpha_N}.$$

Стосовно різницевого рівняння Шредингера

$$\psi_{n-1} + u_n \psi_n + \psi_{n+1} = 0 \quad (23)$$

значення констант є такими  $a_n = 1$ ,  $b_n = -u_n$ ,  $c_n = 1$ ,  $f_n = 0$  і  $y_n = \psi_n$ . Для цього рівняння константи  $\alpha_{n+1}$  і  $\beta_{n+1}$  набувають вигляду

$$\begin{aligned} \alpha_{n+1} &= -\frac{1}{y_n + \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \\ \beta_{n+1} &= -\frac{\beta_n}{u_n + \alpha_n}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (24)$$

Розглянутий метод прогону (21), (22), з допомогою якого визначення  $y_n$  реалізується послідовно справа наліво, називають правим прогоном. У подібний спосіб можна одержати і формули лівого прогону. Для цього виразимо  $y_{n+1}$  через  $y_n$  подібно до (17)

$$y_{n+1} = \zeta_{n+1} y_n + \eta_{n+1} \quad (25)$$

і підставимо вираз для  $y_{n+1}$  у рівняння (15)

$$a_n y_{n-1} - b_n y_n + c_n y_{n+1} = f_n. \quad (26)$$

Тоді

$$a_n y_{n-1} + (c_n \zeta_{n+1} - b_n) y_n + c_n \eta_{n+1} = f_n,$$

а

$$y_n = \frac{a_n}{b_n - c_n \zeta_n} + \frac{c_n \eta_n - f_n}{b_n - c_n \zeta_n}.$$

Порівнюючи одержаний вираз із виразом

$$y_n = \zeta_n y_{n-1} + \eta_n \quad (27)$$

знаходимо, що

$$\begin{aligned} \zeta_n &= \frac{a_n}{b_n - c_n \zeta_n}, \\ \eta_n &= \frac{c_n \eta_n - f_n}{b_n - c_n \zeta_n}. \end{aligned}$$



Порівнюючи вираз для  $y_N$

$$y_N = \zeta_n y_{N-1} + \mu_2$$

із другою граничною умовою

$$y_N = \kappa_2 y_{N-1}$$

одержуємо, що

$$\zeta_N = \kappa_2,$$

$$\eta_N = \mu_2.$$

Так само на лівій границі інтервалу

$$y_1 = \zeta_1 y_1 + \eta_1,$$

а за першою граничною умовою

$$y_0 = \kappa_1 y_1 + \mu_1,$$

Із цих двох співвідношень одержуємо

$$y_0 = \frac{\kappa_1 \eta_1 + \mu_1}{1 - \kappa_1 \zeta_1}.$$

Тепер схема прогону має такий вигляд:

зворотний прогон для розрахунку коефіцієнтів  $\zeta_n$  і  $\eta_n$

$$\zeta_n = \frac{a_n}{b_n - c_n \zeta_n}, \quad n = N - 1, N - 2, \dots, 2, 1, \quad \zeta_N = \kappa_2,$$

$$\eta_n = \frac{c_n \eta_n - f_n}{b_n - c_n \zeta_n}, \quad n = N - 1, N - 2, \dots, 2, 1, \quad \zeta_N = \mu_2,$$

прямий прогон для розрахунку  $y_n$

$$y_{n+1} = \zeta_{n+1} y_n + \zeta_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1, \quad y_0 = \frac{\kappa_1 \eta_1 + \mu_1}{1 - \kappa_1 \zeta_1}.$$

### 1.3.4 Алгоритм методу прогону для задачі розсіювання

Якщо  $V(x)$  не рівне нулю на проміжку  $[0, a]$  і, якщо падаючий потік нормований на одиницю, то на проміжку  $(-\infty, 0]$

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + re^{-ikx},$$

а при  $x > a$

$$\psi_3(x) = te^{ik(x-a)}.$$

З умов неперервності хвильової функції та її похідної у точці  $x = 0$  одержуємо

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 1 + r, \\ \psi'(0) &= ik(1 - r)\end{aligned}$$

та виключивши  $r$  знаходимо

$$\psi'(0) = ik(2 - \psi(0)).$$

У такий спосіб приходимо до такої граничної умови

$$\psi'(0) + ik\psi(0) = 2ik. \quad (28)$$

Так само на правому краї інтервалу

$$\psi'(a) - ik\psi(a) = 0. \quad (29)$$

Для різницевого аналога рівняння Шредингера, для одержання правильних граничних умов крайової задачі, вводять "фіктивний" вузол сітки  $x_{-1}$  та апроксимують похідну на лівому краї інтервалу  $\psi'(0)$  триточковим виразом

$$\psi'(0) = \frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2\Delta},$$

який також є величиною другого порядку малості за  $\Delta$ . Взевши у рівнянні

$$\psi_{n-1} + u_n\psi_n + \psi_{n+1} = 0, \quad (30)$$

$n = 0$  та позначивши  $\varepsilon - v_n\Delta^2 - 2 = u_n$  знайдемо, що

$$\psi_1 + u_0\psi_0 + \psi_{-1} = 0 \rightarrow \psi_{-1} = -(\psi_1 + u_0\psi_0)$$

Тоді

$$\psi'_0 \equiv \psi'(0) \approx \frac{\psi_1 + \psi_1 + u_0\psi_0}{2\Delta} = \frac{\psi_1 + 0.5u_0\psi_0}{\Delta}. \quad (31)$$

Підставивши знайдений вираз для  $\psi'(0)$  у (31) приходимо до такої граничної умови на лівому краї інтервалу

$$\frac{\psi_1 + 0.5u_0\psi_0}{\Delta} + ik\psi_0 = 2ik \rightarrow \psi_1 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta. \quad (32)$$

Так само для знаходження другої граничної умови введемо інший "фіктивний" вузол  $x_{N+1}$  та апроксимуємо похідну на правому краї інтервалу

$$\psi'(N) = \frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2\Delta}.$$

Із (9) при  $n = N$  знаходимо, що

$$\begin{aligned} \psi_{N+1} &= -(\psi_{N-1} + u_N\psi_N), \\ \psi'(N) &= -\frac{\psi_{N-1} + 0.5u_N\psi_N}{\Delta}, \end{aligned}$$

а враховуючи останній вираз у (29) знаходимо другу граничну умову

$$\psi_{N-1} + (0.5u_N + ik\Delta)\psi_N = 0. \quad (33)$$

Тепер система рівнянь, що містить різницеві рівняння (30) та граничні умови (32) і (33), набуває вигляду

$$\begin{aligned} \psi_{n-1} + u_n\psi_n + \psi_{n+1} &= 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \\ \psi_1 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 &= 2ik\Delta, \\ \psi_{N-1} + (0.5u_N + ik\Delta)\psi_N &= 0. \end{aligned}$$

Розв'язок рівняння (30) шукатимемо у вигляді

$$\psi_{n+1} = R_n\psi_n. \quad (34)$$

Підставивши (34) у (30) одержуємо

$$\psi_{n-1} + u_n\psi_n + R_n\psi_n = 0 \rightarrow \psi_n = -\frac{\psi_{n-1}}{R_n + u_n}.$$

З іншого боку

$$\psi_n = R_{n-1}\psi_{n-1}. \quad (35)$$

Звідси випливає

$$R_{n-1} = -\frac{1}{R_n + u_n}, \quad (36)$$

що є рекурентним співвідношенням для коефіцієнтів  $R_n$

Спочатку запишемо граничну умову для  $R_n$  на правій границі інтервалу, оскільки для цього випадку вона буде однорідною і незалежною від хвильової функції. З цією метою у рівнянні (33) зробимо заміну  $\psi_N = R_{N-1}\psi_{N-1}$ . Тоді

$$\psi_{N-1} + (0.5u_n + ik\Delta)R_{N-1}\psi_{N-1} = 0,$$

Або

$$[1 + (0.5u_n + ik\Delta)R_{N-1}]\psi_{N-1} = 0.$$

Звідси при довільній функції  $\psi_{N-1}$

$$1 + (0.5u_n + ik\Delta)R_{N-1} = 0 \quad -> \quad R_{N-1} = -\frac{1}{0.5u_n + ik\Delta}. \quad (37)$$

Тепер починаючи із  $R_{N-1}$ , яке визначається співвідношенням (37) з допомогою рекурентного співвідношення (36), шукатимемо  $R_{N-2}$  і т. д. рухаючись від  $(N-1)$  - вузла до вузла 0, послідовно обчислюючи  $R_{N-2}$ ,  $R_{N-3}$ , ...,  $R_1$ ,  $R_0$ , знайдемо всі  $N$  значень  $R_n$ , ( $n = 0, 1, \dots, N$ ).

А тепер використовуючи вираз для  $R_0$  і підставивши його у рівняння

$$\psi_1 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta$$

одержимо

$$R_0\psi_0 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta,$$

а звідси хвильову функцію  $\psi_0$

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + 0.5u_0 + ik\Delta}. \quad (38)$$

Тепер рухаючись у зворотному напрямку від вузла 0 до  $(N-1)$  - вузла з допомогою (30) послідовно знайдемо хвильову функцію у всіх внутрішніх вузлах сітки  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ .

Отже, алгоритм прогону полягає у тому, що ми використовуємо значення  $R_{N-1}$  і за формулою (37) обчислюємо коефіцієнти  $R_n$  ( $n = N -$

2,  $N - 3, \dots, 0$ ), а потім використовуємо  $R_0$  і за формулою  $\psi_n = R_{n-1}\psi_{n-1}$  обчислюємо хвильові функції  $\psi_n$ , ( $n = 1, 2, \dots, N$ ). У цій процедурі граничні умови ніби проганяють спочатку справа наліво, а потім зліва направо, чим і пояснюється назва методу - "прогін".

Наводимо приклад реалізації алгоритму методу прогону для задачі розсіювання на потенціалі  $V(x) = -\frac{2}{(\cosh(x-x_0))^2}$  за допомогою пакету Maple

```

> restart; > N:=100;
> L:=10;
> h:=L/N;
> step:=0.1;
> V(x) = -2/(cosh(x - x0))^2;
> vj := (j) - > -2/(cosh((j - N/2) * h))^2;
> for i from 0 by step to L do > e:=i;
> k:=sqrt(i):
> v[N]:=evalf(vj(N)):
> u[N] := evalf((e - v[N]) * h^2 - 2):
> R[N-1]:=evalf(-2/(2*I*k*h+u[N])):
> for j from 99 by -1 to 1 do
> v[j]:=evalf(vj(j)):
> u[j] := (e - v[j]) * h^2 - 2:
> R[j-1]:=evalf(-1/(R[j]+u[j])):
> od:
> print("R[0]= R[0]):
> v[0]:=evalf(vj(0)):
> u[0] := evalf((e - v[0]) * h^2 - 2):
> psi[0]:= evalf(4*I*k*h/(2*R[0]+u[0]+2*k*h*I)):
> for j from 0 to 99 do
> psi[j+1]:=evalf(R[j]*psi[j]):
> od:
> print("psi[100]= psi[100]): > r[i]:=psi[0]-1;
> R[i]:=evalf(psi[0]-1)*conjugate(psi[0]-1);
> t[i]:=psi[100];
> T[i]:=evalf(Re((psi[100])*conjugate(psi[100])));
> od:
> with(plots):
> Tipoints := []:
for i from 0 by step to L do

```

```
Tipoints := [op(Tipoints), [i, T[i]]]:
```

```
od:
```

```
pointplot(Tipoints);
```

Результати розрахунків за наведеною програмою для потенціала Гауса  $V(x) = -3 \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2}\right)$  наведені на рис.2.

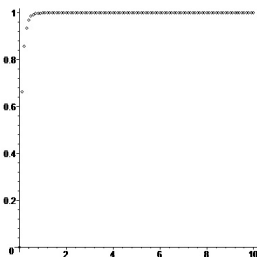


Рис. 2: Результати розрахунків коефіцієнта проходження для потенціала Гауса  $V(x) = -3 \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2}\right)$ .

### 1.3.5 Метод Нумерова

Зручним методом чисельного розв'язування звичайних диференціальних рівнянь другого порядку є метод Нумерова. Цей метод має переваги у тому випадку, коли у рівнянні відсутні вклади із першою похідною від шуканої функції. У цьому випадку метод забезпечує четвертий порядок точності. Для лінійних диференціальних рівнянь схему Нумерова можна зробити явною. Рівняння Шредингера є саме таким рівнянням, тобто воно не містить першої похідної від хвильової функції і є лінійним.

Для розгляду методу Нумерова запишемо рівняння Шредингера у зручній для його застосування формі

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2(x)\psi(x) = 0, \quad (39)$$

де

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}.$$

Розкладемо хвильову функцію  $\psi(x)$  у околі точки  $x_0$  у ряд Тейлора до четвертого порядку точності включно

$$\begin{aligned}\psi(x) = & \psi(x_0) + \psi'(x_0) (x - x_0) + \frac{1}{2!} \psi''(x_0) (x - x_0)^2 + \\ & \frac{1}{3!} \psi'''(x_0) (x - x_0)^3 + \frac{1}{4!} \psi''''(x_0) (x - x_0)^4 + \dots\end{aligned}$$

При нанесенні сітки з кроком  $\Delta$  у області дії потенціала введемо позначення  $\psi(x_0) = \psi_n$ ,  $\psi(x_0 + \Delta) = \psi_{n+1}$ ,  $\psi(x_0 - \Delta) = \psi_{n-1}$  та запишемо розклади хвильової функції для  $n + 1$ -го та  $n - 1$ -го вузлів сітки

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} = & \psi_n + \psi'_n \Delta + \frac{1}{2!} \psi''_n \Delta^2 + \frac{1}{3!} \psi'''_n \Delta^3 + \frac{1}{4!} \psi''''_n \Delta^4 + \dots, \\ \psi_{n-1} = & \psi_n - \psi'_n \Delta + \frac{1}{2!} \psi''_n \Delta^2 - \frac{1}{3!} \psi'''_n \Delta^3 + \frac{1}{4!} \psi''''_n \Delta^4 + \dots\end{aligned}$$

Додавши ці два рівняння одержимо

$$\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1} = \psi''_n \Delta^2 + \frac{1}{12} \psi''''_n \Delta^4. \quad (40)$$

Оскільки

$$\psi''_n = -k_n^2 \psi_n,$$

а

$$\psi''''_n = (\psi''_n)'' = \frac{k_{n-1}^2 \psi_{n-1} - 2k_n^2 \psi_n + k_{n+1}^2 \psi_{n+1}}{\Delta^2}, \quad (41)$$

то після підстановки (41) у (40) одержимо

$$\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1} = -k_n^2 \psi_n \Delta^2 - \frac{1}{12} k_{n-1}^2 \psi_{n-1} + \frac{1}{6} k_n^2 \psi_n + -\frac{1}{12} k_{n+1}^2 \psi_{n+1}.$$

Або звівши подібні приходимо до такого різницевого рівняння Шредингера

$$\left(1 + \frac{\Delta^2}{12} k_{n-1}^2\right) \psi_{n-1} - 2 \left(1 - \frac{5\Delta^2}{12} k_n^2\right) \psi_n + \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} k_{n+1}^2\right) \psi_{n+1} = 0, \quad (42)$$

яке можна розглядати як рекурентне співвідношення для процесу побудови розв'язку зліва направо

$$\psi_{n+1} = \frac{\left(2 - \frac{5\Delta^2}{6} k_n^2\right) \psi_n - \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} k_{n-1}^2\right) \psi_{n-1}}{1 + \frac{\Delta^2}{12} k_{n+1}^2}, \quad (43)$$

чи справа наліво

$$\psi_{n-1} = \frac{\left(2 - \frac{5\Delta^2}{6}k_n^2\right)\psi_n - \left(1 + \frac{\Delta^2}{12}k_{n+1}^2\right)\psi_{n+1}}{1 + \frac{\Delta^2}{12}k_{n-1}^2}. \quad (44)$$

Зауважимо, що точність даного методу є на порядок вищою, аніж точність методу Рунге-Кутта четвертого порядку. Вищою також є ефективність цього методу, оскільки він вимагає розрахунку функції  $k^2(x)$  лише у вузлах сітки.

Рівнянню (42) можна надати зручнішого вигляду, якщо ввести позначення

$$\begin{aligned} T_n &= -\frac{\Delta^2}{12}k_n, \\ F_n &= (1 - T_n)\psi_n, \\ u_n &= \frac{2 + 10T_n}{1 - T_n}. \end{aligned} \quad (45)$$

У цих позначеннях рівняння (42) набуває вигляду

$$F_{n+1} - u_n F_n + F_{n-1} = 0. \quad (46)$$

Перевагою такого запису є те, що для цього рівняння на один крок алгоритму для визначення  $F_n$ , потрібне на одне множення менше, аніж при визначенні  $\psi_n$ .

Наступне перетворення служить для заміни рекурентного співвідношення, що включає три точки на рекурентне співвідношення, що залучає дві точки. Цієї мети вдається досягнути, якщо ввести функцію

$$R_n = \frac{F_{n+1}}{F_n}. \quad (47)$$

Підставивши вираз для  $R_n$  у рівняння (46) одержимо рекурентну формулу

$$R_n = U_n - \frac{1}{R_{n-1}}. \quad (48)$$

Вираз для  $R_n$  можна також записати у вигляді неперервного дробу

$$R_n = U_n - \frac{1}{U_{n-1} - \frac{1}{U_{n-2} - \dots - \frac{1}{U_1 - \frac{1}{R_0}}}}.$$



Величина  $R_n$  зручніша при застосуванні, аніж  $F_n$ , оскільки на відміну від останньої не зростає експоненціально у класично заборонених областях.

Рівняння (51) можна ітерувати, якщо відоме початкове значення  $R_0$ . Зауважимо, що значення для  $R_0$ , яке відповідає співвідношенням  $\psi_0 = 0$ ,  $\psi_1 \neq 0$  рівне  $R_0 = \psi_1/\psi_0 \rightarrow \infty$ . Якщо ітерації зупинити у довільній точці  $x_n$ , то значення  $R_n$  і  $1/R_{n-1}$ , у цій точці – відомі без додаткових розрахунків. Із цих значень, використовуючи формули (47) і (45), тобто  $F_n = (1 + T_n)\psi_n$  можна розрахувати хвильову функцію у точках  $x_{n+1}$ ,  $x_n$  і  $x_{n-1}$ .

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \frac{R_n}{1 - T_n} \psi_n, \\ \psi_n &= \frac{F_n}{1 - T_n}, \\ \psi_{n-1} &= \frac{F_n}{R_{n-1}(1 - T_{n-1})}.\end{aligned}\tag{49}$$

Рівняння (46) можна ітерувати і у зворотному напрямку, тобто у напрямку зменшення індексу  $n$ . Для оберненої ітерації визначимо коефіцієнт

$$\tilde{R}_n = \frac{F_{n-1}}{F_n}.\tag{50}$$

Підставивши  $\tilde{R}_n$  у рівняння (46) одержимо двокрокову ітераційну формулу

$$\tilde{R}_n = U_n - \frac{1}{\tilde{R}_{n+1}}.\tag{51}$$

Цю формулу можна застосувати, якщо відоме початкове значення  $R_N$ . Значення  $R_N$ , яке відповідає  $\psi_N = 0$  і  $\psi_{N-1} \neq 0$  відповідає  $R_N \rightarrow \infty$ .

### 1.3.6 Приклад. Прямокутна потенціальна яма

Потенціал прямокутної потенціальної ями нескінченної глибини має вигляд

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

Граничні умови для цієї задачі мають вигляд

$$\psi(0) = \psi(a) = 0.$$

Ця задача має точний розв'язок вигляду

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}nx\right),$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2}{2} E_0 = 3.8150 eB.$$

Чисельно розв'язати цю задачу зручніше, якщо значення хвильової функції  $\psi(x)$  відомі у двох сусідніх точках з одного краю проміжку  $[0, a]$ , тоді як у крайових задачах граничні умови задані на різних кінцях інтервалу. Тому, замість  $\psi(x)$  шукатимемо так звані регулярні розв'язки, які за граничні умови мають такі умови

$$\varphi(0) = 0 \quad i \quad \varphi'(0) = 1$$

для неперервного рівняння Шредингера і

$$\varphi(0) = 0 \quad i \quad \varphi(1) = \Delta \tag{52}$$

для його різницевого аналога. Умови (52) відповідають вимозі того, щоб різницева, як і неперервна, похідні у початку координат була рівна одиниці. Справді

$$\frac{\varphi(1) - \varphi(0)}{\Delta} = 1.$$

Умова  $\varphi'(0) = 1$  впливає із точного розв'язку цього прикладу, але часто використовується як стартова у методі пристрілу і для потенціалів довільного вигляду.

Розв'язок, який відшукують  $\psi(x)$ , можна виразити через  $\varphi(x)$ , який відповідає *неоднорідним* граничним умовам і який може бути визначений при *довільних* значеннях енергії  $E$ , тоді як  $\psi(x)$  існують лише при вибраних її значеннях  $E_\lambda$ . Лише при  $E = E_\lambda$  існують обидва розв'язки, і вони можуть відрізнитися лише на постійний множник. Тобто

$$\psi(E_\lambda, n) = c_\lambda \varphi(E_\lambda, n)$$

тому що одна із граничних умов для обидвох розв'язків співпадає  $\psi(0) = \varphi(0) = 0$ . Оскільки розв'язок рівняння другого порядку однозначно визначається їх значенням у двох точках і у точці  $n = 0$  функції  $\psi(x)$  і  $\varphi(x)$  співпадають, а у точці  $n = 1$   $\varphi(1) = \Delta$ , а  $\psi(E_\lambda, 1) = c_\lambda$ , то домноживши  $\varphi(n)$  на множник  $c_\lambda = \psi(E_\lambda, n)/\Delta$  дістаємо функцію, що співпадає із  $\psi(n)$  у двох точках  $n = 0$  і  $n = 1$ , а, отже і у всіх інших точках.

Числові коефіцієнти  $c_\lambda$  після обчислення  $\varphi(E_\lambda, n)$  можна знайти із умов нормування

$$\sum_{n=1}^N \psi^2(E_\lambda, n)\Delta = \sum_{n=1}^N c_\lambda^2 \varphi^2(E_\lambda, n)\Delta = 1.$$

$$c_\lambda^{-2} = \Delta \cdot \sum_{n=1}^N \varphi^2(E_\lambda, n). \quad (53)$$

Отже, задавши значення  $\varphi(n)$  у двох сусідніх точках на краю інтервалу, на якому реалізують обчислення, можна знайти із першого рівняння системи (9) функцію  $\varphi(2)$

$$\varphi(2) = (2 + [v_1 - \varepsilon]\Delta^2)\varphi(1).$$

З другого рівняння цієї системи, за відомими  $\varphi(1)$  і  $\varphi(2)$ , можна знайти  $\varphi(3)$

$$\varphi(3) = (2 + [v_2 - \varepsilon]\Delta^2)\varphi(2) - \varphi(1)$$

і так далі на усьому проміжку  $[0, a]$ . Загальний вираз для хвильової функції у довільній точці сітки має вигляд

$$\varphi(E_\lambda, n + 1) = (2 + [v_n - \varepsilon]\Delta^2)\varphi(n) - \varphi(n - 1).$$

## 2 Різницевий варіант оберненої задачі для одновимірного рівняння Шредингера

Розглянемо обернену задачу у підході, що базується на методі скінчених різниць. Задання сталих  $c_\lambda$  визначає значення хвильової функції  $\psi$  у точці  $n = 1$  при  $E = E_\lambda$ , яка визначається виразом

$$\psi(E_\lambda, 1) = c_\lambda \cdot \Delta.$$

Тобто ми знаємо хвильову функцію у двох точках: при  $n = 0$ , де відповідно до граничних умов  $\psi(0) = 0$  і  $n = 1$ , де  $\psi(E_\lambda, 1) = c_\lambda \cdot \Delta$ . Проте цих даних недостатньо для того, щоб розв'язати обернену задачу, оскільки для її розв'язку треба знайти не лише  $\psi(E_\lambda, n = 2, 3, \dots)$ , як це було у випадку прямої задачі, але і  $v$  ( $n = 1, 2, \dots$ ). Рівнянь (9) для цього недостатньо, тому, тепер у задачі невідомих  $2N - 2$ , а рівнянь лише  $N - 1$ .

Зокрема, у першому рівнянні системи (9) при  $n = 1$  і  $E = E_\lambda$  тепер вже не одна, а дві невідомих:  $\psi(E_\lambda, 1)$  і  $v(1)$ . Перехід до наступного рівняння системи щоразу дає нове алгебраїчне рівняння з двома новими невідомими. Для розв'язку задачі тепер необхідні додаткові рівняння, які пов'язують невідомі величини. Такими додатковими рівняннями можуть бути умови ортогональності та повноти системи власних функцій

$$\sum_{\lambda=1}^N \psi(E_\lambda, n)\psi(E_\lambda, m) = \frac{\delta_{mn}}{\Delta}, \quad (54)$$

$$\sum_{n=1}^N \psi(E_\lambda, n)\psi(E_\mu, n)\Delta = \delta_{\lambda\mu}. \quad (55)$$

## 2.1 Виведення умов повноти і ортогональності власних функцій

Важливим для одержання умов повноти і ортонормованості системи власних функцій є наявність для неї дискретного спектру. Оскільки ми розглядаємо обернену задачу на прикладі нескінченно глибокої прямокутної потенціальної ями, то ця умова безумовно виконується. Для виведення цих умов домножимо рівняння Шредінгера для хвильової функції  $\psi_\lambda(n)$ , яка відповідає власному значенню  $\lambda$  на  $\psi_{\lambda'}(n) \cdot \Delta$ , а рівняння для хвильової функції  $\psi_{\lambda'}(n)$ , яка відповідає власному значенню  $\lambda'$  домножимо на  $\psi_\lambda(n) \cdot \Delta$ . Тоді прийдемо до таких двох рівнянь

$$\frac{\psi_\lambda(n-1)\psi_{\lambda'}(n) - [v_n\Delta^2 + 2]\psi_\lambda(n)\psi_{\lambda'}(n) + \psi_\lambda(n-1)\psi_{\lambda'}(n)}{\Delta} = \varepsilon_\lambda \Delta \psi_\lambda(n)\psi_{\lambda'}(n)$$

$$\frac{\psi_{\lambda'}(n-1)\psi_\lambda(n) - [v_n\Delta^2 + 2]\psi_{\lambda'}(n)\psi_\lambda(n) + \psi_{\lambda'}(n-1)\psi_\lambda(n)}{\Delta} = \varepsilon_{\lambda'} \Delta \psi_{\lambda'}(n)\psi_\lambda(n)$$

Підсумуємо кожне із одержаних рівнянь по всіх  $n$  та віднімемо від першого одержаного рівняння - друге. Зважаючи, що суми по  $n$  від добутків хвильових функцій різних вузлів

$$\sum_{n=1}^N \psi_{\lambda'}(n \pm 1)\psi_\lambda(n)\Delta = 0$$

внаслідок ортогональності хвильових функцій. Вклади

$$[v_n \Delta^2 + 2] \psi_{\lambda'}(n) \psi_{\lambda}(n)$$

у обох рівняннях співпадають, тому їх різниця також рівна нулю. Підсумково одержуємо

$$(\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}) \sum_{n=1}^N \psi_{\lambda}(n) \psi_{\lambda'}(n) \cdot \Delta = 0. \quad (56)$$

Якщо  $\lambda \neq \lambda'$ , то власні функції ортогональні і віднормувавши їх на одиницю одержимо

$$\sum_{n=1}^N \psi_{\lambda}(n) \psi_{\lambda'}(n) \cdot \Delta = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Умову повноти можна одержати, якщо останнє рівняння домножити на  $\psi_{\lambda'}(m)$  і просумувати по всіх  $\lambda'$

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda'=1}^N \left( \Delta \sum_{n=1}^N \psi_{\lambda}(n) \psi'_{\lambda'}(n) \right) \psi_{\lambda'}(m) \Delta = \\ \sum_{n=1}^N \left( \Delta \sum_{\lambda'=1}^N \psi'_{\lambda}(n) \psi_{\lambda'}(m) \right) \psi_{\lambda}(n) = \sum_{\lambda'=1}^N \psi_{\lambda'}(m) \delta_{\lambda\lambda'}. \end{aligned}$$

Звідси видно, що вираз у дужках у другому виразі, пов'язаний із символом Кронекера. Тобто

$$\sum_{\lambda'=1}^N \psi_{\lambda'}(m) \psi_{\lambda'}(n) = \frac{\delta_{mn}}{\Delta}. \quad (57)$$

Застосуємо умову ортогональності (54) хвильових функцій у різних точках інтервалу для того, щоб вилючити невідому функцію  $\psi(E_{\lambda}, 2)$  у першому рівнянні системи (9) із  $n = 1$  і  $E = E_{\lambda}$ . З цією метою домножимо це рівняння на  $\psi(E_{\lambda}, 1)$  та підсумуємо по всіх  $\lambda$ . Завдяки цьому одержимо рівняння із однією невідомою  $v(1)$

$$(2 + v(1)) \sum_{\lambda=1}^N \psi(E_{\lambda}, 1) \psi(E_{\lambda}, 1) + \sum_{\lambda=1}^N \psi(E_{\lambda}, 1) \psi(E_{\lambda}, 2) = \sum_{\lambda=1}^N E_{\lambda} \psi(E_{\lambda}, 1) \psi(E_{\lambda}, 1).$$

Сума у першому доданку рівна

$$\sum_{\lambda=1}^N \psi(E_\lambda, 1)\psi(E_\lambda, 1) = \frac{\delta_{11}}{\Delta} = \frac{1}{\Delta},$$

а у другому доданку

$$\sum_{\lambda=1}^N \psi(E_\lambda, 1)\psi(E_\lambda, 2) = \frac{\delta_{12}}{\Delta} = 0.$$

Тому, остаточно

$$(2 + v(1))\frac{1}{\Delta} = \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \psi^2(E_\lambda, 1),$$

звідки знаходимо, що

$$v(1) = \Delta \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \psi^2(E_\lambda, 1) - 2, \quad (58)$$

де  $\psi(E_\lambda, 1) = c_\lambda \Delta$ . Тим самим ми на першому кроці визначили значення для потенціалу у точці  $n = 1$  через набір спектральних даних  $\{E_\lambda, c_\lambda\}$ . Визначивши  $v(1)$  із першого рівняння системи (9) знайдемо значення хвильової функції у наступній точці, тобто  $\psi(E_\lambda, 2)$

$$\psi(E_\lambda, 2) = \{\Delta^2[v(1) - E_\lambda] + 2\} \psi(E_\lambda, 1).$$

Повторюючи подібну процедуру у наступній точці знайдемо  $v(2)$  і  $\psi(E_\lambda, 3)$  і так далі. Отже, у різницевому підході розв'язок оберненої задачі полягає у почерговому застосуванні формул

$$v(n) = \Delta \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \psi^2(E_\lambda, n) - 2, \quad (59)$$

і

$$\psi(E_\lambda, n + 1) = \{\Delta^2[v(n) - E_\lambda] + 2\} \psi(E_\lambda, n) - \psi(E_\lambda, n - 1). \quad (60)$$

Як видно з останніх формул, на відміну від прямої задачі, використання умови повноти системи власних функцій у процес розв'язку включені стани всього спектру системи.

## 2.2 Розсіювання на потенціалі скінченного радіуса дії

До задач із неперервним спектром і потенціалом скінченного радіуса дії також можна застосувати методику, що базується на різницевому рівнянні Шредингера, якщо залучити R-матричну теорію розсіювання. Основна ідея теорії R-матриці полягає у поділі усього простору, у якому шукають розв'язок на дві чи більше областей, у яких властивості системи суттєво різні. У кожній із цих областей існують свої хвильові функції, які пов'язані між собою на відповідних границях з допомогою R-матриці.

Для сил, які мають скінчений радіус дії, досить знати хвильову функцію на інтервалі  $[0, a]$ , оскільки поза областю дії потенціала розв'язок рівняння Шредингера має вигляд вільних хвиль. На границі області взаємодії асимптотична функція  $\psi(x)$  повинна гладко зшиватися з хвильовою функцією при  $x < a$ . Задання функції із рівняння

$$\psi(x) \approx \frac{i}{2} [e^{-ikx} - s(k) e^{ikx}] |_{x=a}$$

при  $x = a$  еквівалентне заданню логарифмічної похідної  $\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} |_{x=a} = \Re^{-1}(E)$  на краю області взаємодії. У різницевій схемі  $\Re^{-1}(E)$  визначається як

$$\Re^{-1}(E) = \frac{\psi(N+1) - \psi(N)}{\psi(N)} \frac{a}{\Delta}.$$

А використовуючи зліченність множини власних функцій на інтервалі  $[0, a]$  у різницевому рівнянні Шредингера вдається дискретно параметризувати неперервну залежність від енергії логарифмічної похідної у точці  $a$ , а разом з тим і дані розсіювання. Особливо компактний вигляд для параметризації можна одержати для величини  $R(E)$ , яка пов'язана із  $\Re(E)$  таким співвідношенням

$$R(E) = \frac{\Re(E)}{1 + \Re(E) \frac{a}{\Delta}}.$$

Функцію  $R(E)$  називають R-матрицею, яка у одновимірному випадку є просто скалярною функцією, але в літературі прийнято застосовувати загальний термін як у тривимірних так і у одновимірних задачах. Підставивши у цю формулу вираз для  $\Re(E)$

$$\Re(E) = \frac{\psi(N)}{\psi(N+1) - \psi(N)} \frac{\Delta}{a}$$

одержуємо зв'язок між функціями  $\psi(N)$  і  $\psi(N + 1)$

$$\psi(N) = R(E) \psi(N + 1) \frac{a}{\Delta}. \quad (61)$$

На межі двох областей асимптотичну хвильову функцію  $\psi(x)$  можна розкласти по дискретному набору власних функцій

$$u(E_\lambda, n) \equiv u_\lambda(n)$$

рівняння Шредингера, але за умови на границі областей виберемо однорідні граничні умови

$$u_\lambda(0) = u_\lambda(N + 1) = 0.$$

За цих умов енергетичні залежності  $R(E)$  і  $s(E)$  параметризуються дискретним набором параметрів, кількість яких, до того ж, у різнищевій схемі є скінченим і рівним  $2N$ . Ці "допоміжні" функції  $u_\lambda(n)$  співпадають з функціями зв'язаних станів  $\psi(E_\lambda, n)$ , але тепер у точці  $n = N + 1$  замість нескінченної потенціальної стінки

$$V(N + 1) = 0,$$

але ми все ж таки виставимо вимогу

$$u_\lambda(N + 1) = 0.$$

Тепер роль констант нормування  $c_\lambda$  відіграють інші параметри  $\gamma_\lambda$ , які на відміну від  $c_\lambda$  є значеннями власних функцій не у точці  $n = 1$ , а у точці  $n = N$  – на іншому кінці інтервалу  $[0, a]$ . Тепер за набором  $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$ , як і у випадку зв'язаних станів можна відновити  $v(n)$ . Проте тепер слід відбудувувати  $v(n)$  і  $u_\lambda(n)$  переходячи від точки до точки у зворотному напрямі від  $n = N$  до  $n = 0$ , замінивши у формулах (59 і 60)  $n + 1 \leftrightarrow n - 1$ .

Вираз для  $R(E)$  можна одержати розклавши хвильову функцію  $\psi(E_\lambda, n)$  по повній системі власних функцій  $u_\lambda(n)$

$$\psi(E_\lambda, n) = \sum_{n=1}^N A_\lambda(E) u_\lambda(n). \quad (62)$$



Домножимо це рівняння на  $u_\lambda(n)$  і підсумуємо по всіх  $n = N$ . Тоді

$$\sum_{n=1}^N \psi(E_\lambda, n) u_\lambda(n) = \sum_{\lambda=1}^N A_\lambda(E) \sum_{n=1}^N u_\lambda(n) u_\lambda(n) = \frac{A_\lambda(E)}{\Delta}.$$

Тоді

$$A_\lambda(E) = \sum_{n=1}^N \psi(E_\lambda, n) u_\lambda(n) \Delta.$$

Домножимо різницеве рівняння Шредингера

$$\frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{\Delta^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_n \psi_n = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n \quad (63)$$

на  $u_\lambda(n)$  і таке ж саме рівняння для  $u_\lambda(n)$

$$\frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Delta^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_n u_n = -\frac{2m}{\hbar^2} E_\lambda u_n \quad (64)$$

на  $\psi(E, n)$ . Тоді

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{n-1} u_n - 2\psi_n u_n + \psi_{n+1} u_n}{\Delta^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_n \psi_n u_n &= -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_n u_n, \\ \frac{u_{n-1} \psi_n - 2u_n \psi_n + u_{n+1} \psi_n}{\Delta^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_n u_n \psi_n &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_\lambda u_n \psi_n. \end{aligned} \quad (65)$$

віднявши від першого рівняння перше і підсумувавши по всіх  $n$  одержимо

$$\sum_{n=1}^N \frac{\psi_{n+1} u_n + \psi_{n-1} u_n - u_{n+1} \psi_n - u_{n-1} \psi_n}{\Delta^2} = \sum_{n=1}^N \frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - E) \psi_n u_n. \quad (66)$$

Розписавши суму у лівій частині рівняння, враховуючи лише вираз у чисельнику

$$\begin{aligned} &\psi(2)u_\lambda(1) + \psi(3)u_\lambda(2) + \dots + \psi(N)u_\lambda(N-1) + \psi(N+1)u_\lambda(N) + \\ &\psi(0)u_\lambda(1) + \psi(1)u_\lambda(2) + \dots + \psi(N-1)u_\lambda(N) + \psi(N)u_\lambda(N+1) + \\ &-\psi(1)u_\lambda(2) - \psi(2)u_\lambda(3) - \dots - \psi(N-1)u_\lambda(N) - \psi(N)u_\lambda(N+1) - \\ &-\psi(1)u_\lambda(0) - \psi(2)u_\lambda(1) - \dots - \psi(N)u_\lambda(N-1) - \psi(N+1)u_\lambda(N), \end{aligned} \quad (67)$$

та враховуючи, що  $\psi(0) = 0$ ,  $u_\lambda(0) = 0$ ,  $\psi(N+1)$ ,  $u_\lambda(N+1) = 0$  та скоротивши подібні приходимо до

$$\psi(N+1)u_\lambda(N) = \sum_{n=1}^N \frac{2m}{\hbar^2} (E_\lambda - E) \psi_n u_n,$$

Звідки, оскільки

$$\sum_{n=1}^N \psi_n u_n = \frac{A_\lambda(E)}{\Delta}$$

одержуємо, що

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2m\Delta} \frac{\psi(N+1)u_\lambda(N)}{E_\lambda - E}.$$

Підставивши знайдений вираз для  $A_\lambda(E)$  у рівняння (62) одержуємо

$$\psi(E, n) = \frac{\hbar^2}{2m\Delta} \sum_{\lambda=1}^N \frac{u_\lambda(n)u_\lambda(N)}{E_\lambda - E} \psi(E, N+1). \quad (68)$$

Увівши позначення

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2ma}} u_\lambda(N) = \gamma_\lambda$$

із рівняння (68) при  $n = N$  одержуємо

$$\psi(E, N) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E} \frac{a}{\Delta} \psi(E, N+1). \quad (69)$$

Порівнявши цей вираз із виразом

$$\psi(E, N) = R(E) \psi(E, N+1) \frac{a}{\Delta} \quad (70)$$

знаходимо, що

$$R(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E}. \quad (71)$$

Якщо для потенціала існують зв'язані стани, то параметри  $E_\lambda < 0$  і  $\gamma_\lambda$  можна одержати із даних з розсіювання.

### 2.3 Наближення потенціалів кусково-постійними функціями

Прямокутні потенціальні бар'єри та ями є найпростішими моделями квантової механіки. Потенціали апроксимовані кусково-постійними залежностями зручні і для одержання чисельних розв'язків прямих і обернених

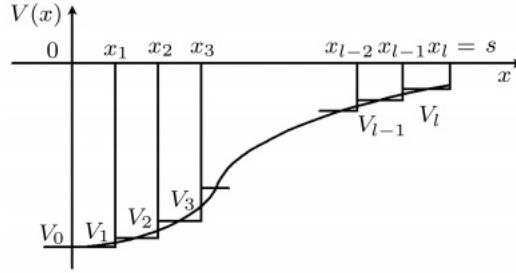


Рис. 3: Кусково-постійна апроксимація для потенціальної ями довільної форми.

задач для одновимірного рівняння Шредингера. Такий підхід має ту перевагу, що при зростанні енергії можливість його застосування не погіршується на відміну від, наприклад, методів, які ґрунтуються на скінченно-різницевих схемах.

Важливою перевагою кусково-постійних потенціалів є простий вигляд хвильової функції на кожній із його сходинок. Загальний розв'язок рівняння Шредингера на  $n$ -му інтервалі  $x_{n-1} \geq x \geq x_n$  на якому  $V_n = const$  є сумою якихось двох лінійно-незалежних частинних розв'язків із довільними коефіцієнтами  $a_n$  і  $b_n$ , наприклад

$$\psi(x_{n-1} \geq x \geq x_n) = a_n e^{ik_n x} + b_n e^{-ik_n x}, \quad (72)$$

де  $k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)$ . Такий вигляд розв'язок має за умови  $E > V_n$ . У протилежному випадку розв'язок виражається через експоненціально зростаючі і спадні функції, оскільки  $k_n = ik_n$ .

З умови неперервності хвильової функції та її першої похідної можна одержати систему рекурентних співвідношень для констант  $a_n$  і  $b_n$

$$\begin{aligned} a_n e^{ik_n x_n} + b_n e^{-ik_n x_n} &= a_{n+1} e^{ik_{n+1} x_n} + b_{n+1} e^{-ik_{n+1} x_n}, \\ k_n a_n e^{ik_n x_n} - k_n b_n e^{-ik_n x_n} &= k_{n+1} a_{n+1} e^{ik_{n+1} x_n} - k_{n+1} b_{n+1} e^{-ik_{n+1} x_n}. \end{aligned} \quad (73)$$

Розв'язуючи цю систему рівнянь знайдемо  $a_n$  і  $b_n$

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_{n+1}}{k_n} \right) e^{i(k_{n+1}-k_n)x_n} a_{n+1} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_{n+1}}{k_n} \right) e^{-i(k_{n+1}+k_n)x_n} b_{n+1}, \\ b_n &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_{n+1}}{k_n} \right) e^{i(k_{n+1}+k_n)x_n} a_{n+1} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_{n+1}}{k_n} \right) e^{-i(k_{n+1}-k_n)x_n} b_{n+1}. \end{aligned}$$

Ці рівняння можна записати у матричній формі

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \hat{M}_n \begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix},$$

де ми ввели матриці переносу  $\hat{M}_i$  для кожної із прямокутних областей

$$\hat{M}_n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{i(k_{n+1}-k_n)x_n} & \left(1 - \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{-i(k_{n+1}+k_n)x_n} \\ \left(1 + \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{i(k_{n+1}+k_n)x_n} & \left(1 + \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{-i(k_{n+1}-k_n)x_n} \end{pmatrix}.$$

Використовуючи ці рівняння при різних  $n$  можна розв'язати *пряму задачу*, тобто знайти всі  $a_n$  і  $b_n$ . Різні граничні умови, тобто на одному чи різних краях інтеграла інтегрування рівняння, враховують у той же спосіб, як і для різницевого рівняння Шредингера.

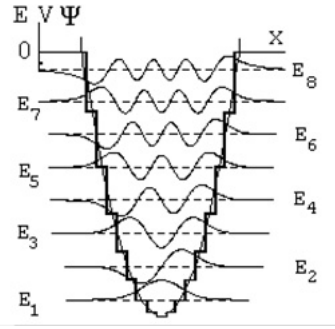


Рис. 4: Приклад кусково-постійної апроксимації для осциляторної потенціальної ями.

При розв'язку *оберненої задачі* на кожній сходинці крім  $a_n$  і  $b_n$  треба знайти ще і  $V_n$ . На відміну від різницевих схем при кусково-постійній апроксимації значення потенціала  $V_n$  входить у рекурентні співвідношення нелінійно, тобто у аргументи функцій  $\sin$  і  $\cos$  чи експонент через  $k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_n)$ , що суттєво ускладнює одержання  $V_n$ . Для наочності розглянемо лише один крок розв'язку оберненої задачі.

У цьому випадку зручніше використовувати іншу, еквівалентну форму розв'язку

$$\psi(x_{n-1} \leq x \leq x_n) = A_n \cos(k_n x) + B_n \sin(k_n x), \quad (74)$$

Вважатимемо заданими значення хвильової функції  $u_\nu(a)$  і її похідної  $u'_\nu(a)$  у точці  $x_N$ . Зшиваючи значення  $\psi_\nu(x_N)$  у вигляді (74) і  $\psi'_\nu(x_N)$  на  $N$ -ій сходинці  $x_{N-1} \leq x \leq x_N = a$  із  $u_\nu(a)$  і  $u'_\nu(a)$  одержимо

$$\begin{aligned} A_N^\nu \cos\left(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}\right) + B_N^\nu \sin\left(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}\right) &= u_\nu(a), \\ - A_N^\nu \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)} \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}a\right) + \\ B_N^\nu \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)} \cos\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}a\right) &= u'_\nu(a). \end{aligned}$$

Звідси знаходимо  $A_N^\nu$  і  $B_N^\nu$  як функції параметра  $V_N$ . Для визначення  $V_N$  використаємо співвідношення повноти і ортогональності функцій  $u_\nu$  ( $\nu = 1, 2, \dots$ ) у різних точках інтервалу  $[x_{N-1}, x_N]$

$$\sum_{\nu}^{\infty} u_\nu(x)u_\nu(x' \neq x) = 0. \quad (75)$$

Підставивши у (75) їх вирази із (74) при  $E = E_\nu$  та  $i = N$   $\psi_\nu(x) = A_N \cos(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}x) + B_N \sin(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}x)$  у яких  $A_N^\nu$  і  $B_N^\nu$  явно виражені через  $V_N$  із граничних умов

$$A_N^\nu = u_\nu(a) \cos\left(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}\right) - \frac{u_\nu(a)}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}} \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}a\right),$$

$$A_N^\nu = u_\nu(a) \sin\left(\sqrt{2m(E_\nu - V_N)}\frac{a}{\hbar^2}\right) - \frac{u_\nu(a)}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}} \cos\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu - V_N)}a\right),$$

одержуємо нелінійне рівняння для  $V_N$ .

## 2.4 Реконструкція потенціалів за допомогою багатозразового розв'язування прямої задачі.

Перші спроби використання потенціалів найпростішого виду (прямокутна яма, Саксона-Вуда і ін.), коли методом "проб і помилок" два-три параметра взаємодії підганялися для найкращого опису спостережуваних

величин, і при кожній спробі знову розв'язували рівняння Шредінгера, були вже, по суті, розв'язком оберненої задачі за допомогою розв'язування прямої. Згодом алгоритми цього підходу в оберненій задачі удосконалювалися. Спочатку це був єдиний спосіб відновлення потенціалів. Але і після появи рівнянь Гельфанда-Левитана-Марченка у цього способу залишаються свої важливі переваги. Зокрема, для нього не існує обмежень на вихідні дані розсіювання (типу  $I = \text{const}$  або  $E = \text{const}$ ) - можна використовувати всі наявні характеристики зв'язаних станів і розсіювання (в тому числі і перерізи розсіювання). Певна його зручність полягає і в тому, що при конкретних розрахунках не використовуються співвідношення повноти, хоча вони і потрібні при доведенні збіжності наближень. Разом з тим необхідність багатократного розв'язування рівнянь руху робить цей метод менш економним порівняно із методами власне оберненої задачі. Природно також, що труднощі пов'язані із нестійкістю процесу обчислень, які не давали про себе знати при малій кількості параметрів взаємодії, проявляються тут сповна, тому що розширюється клас функцій на яких шукають потенціал. Так що некоректність оберненої задачі не вдається обійти, розв'язуючи її за допомогою прямої.

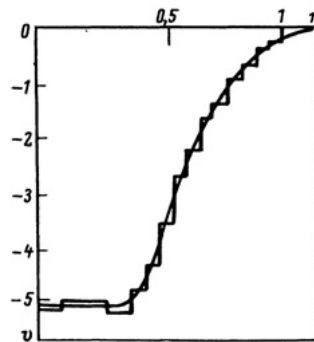


Рис. 5: Реконструкція потенціальної ями Вуда-Саксона шляхом підгону за двома параметрами.

### 3 Рівняння Гельфанда-Левитана-Марченка

Рівняння Гельфанда-Левитана-Марченка виникає при описі квантових зіткнень, які описуються неперервними хвильовими функціями, що за-

лежать від неперервних змінних і відповідають неперервному спектру гамільтоніана взаємодіючих частинок. Проте скінчено-різницева рівняння Шредингера для випадку взаємодій скінченного радіуса дії зводиться до скінченної системи алгебраїчних рівнянь. Тому існує алгебраїчний аналог теорії Гельфанда-Левитана-Марченка, що має фізичний зміст у квантовій моделі розсіювання із дискретними просторовою і енергетичною змінними. Ми одержимо інтегральні рівняння оберненої задачі з допомогою граничного переходу  $\Delta \rightarrow 0$  із їх різницевих аналогів.

Розглянемо залежність від енергії розв'язків різницевого рівняння Шредингера із граничними умовами  $\varphi(0) = 0$   $\varphi(1) = \Delta$  для нульового потенціала  $\overset{\circ}{V}(n) = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} \{ \overset{\circ}{\varphi}(E, n-1) - 2\overset{\circ}{\varphi}(E, n) + \overset{\circ}{\varphi}(E, n+1) \} = E\overset{\circ}{\varphi}(E, n). \quad (76)$$

Переконаємося, що  $\varphi(E)$  і  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$  є поліномами  $n-1$  степеня відносно енергії. Справді, оскільки

$$\varphi(E, 1) = \overset{\circ}{\varphi}(E, 1) = \Delta$$

розв'язки не залежать від енергії  $E$  і тому є поліномами нульового степеня по енергії. У наступній точці сітки  $n=2$ , як  $\varphi(E)$  так і  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$  залежать від енергії  $E$  лінійно тому що вони виражаються із (76) і (2) через енергію  $E$ , яка є множником у правій частині рівнянь (76) і (2) та сталі

$$\varphi(E, 0) = \overset{\circ}{\varphi}(E, 0) = 0, \quad \varphi(E, 1) = \overset{\circ}{\varphi}(E, 1) = \Delta$$

При наступних переміщеннях на один крок сіткою  $E$  збільшує степінь полінома у залежності  $\varphi(E)$  і  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$  від енергії на одиницю. Відмінність поліномів  $\varphi(E)$  і  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$  визначається лише коефіцієнтами при  $E$ . Можна побудувати  $\varphi(E)$  за відомими  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$ , оскільки поліноми  $\varphi(E, n)$  степінь яких  $n-1$  у вигляді лінійної комбінації відомих поліномів  $\overset{\circ}{\varphi}(E, m)$  степінь яких рівні  $m-1 = n-1, n-2, \dots, 0$ , а коефіцієнти при них  $K(n, m)$  містять

ую інформацію про потенціал взаємодії.

$$\begin{aligned}
 \varphi(E, 1) &= K(1, 1) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)\Delta, \\
 \varphi(E, 2) &= K(2, 2) \overset{\circ}{\varphi}(E, 2)\Delta + K(2, 1) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)\Delta, \\
 \varphi(E, 3) &= K(3, 3) \overset{\circ}{\varphi}(E, 3)\Delta + K(3, 2) \overset{\circ}{\varphi}(E, 2)\Delta + K(3, 1) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)\Delta, \\
 &\dots, \\
 \varphi(E, n) &= K(n, n) \overset{\circ}{\varphi}(E, n)\Delta + K(n, n-1) \overset{\circ}{\varphi}(E, n-1)\Delta + \dots + K(n, 1) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)\Delta, \\
 &\dots.
 \end{aligned} \tag{77}$$

Множники  $\Delta$  у всіх сумах по координатній змінній введено щоб при переході до границі  $\Delta \rightarrow 0$ , ці суми переходили у інтеграли. Отже, для знаходження функцій  $\varphi$  досить визначити коефіцієнти  $K(n, m)$ , тому що вони і є розв'язками оберненої задачі і тому через них, тобто  $K(n, m)$ , виражається  $V(n)$ .

Оскільки  $\varphi(E, 1) = \overset{\circ}{\varphi}(E, 1) = \Delta$ , то із рівняння  $\varphi(E, 1) = K(1, 1) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)\Delta$  видно, що  $K(1, 1) = \frac{1}{\Delta}$ . Виходячи із того, що матриця (9) – тридіагональна та враховуючи, що потенціальна енергія  $V(n)$  входить лише у діагональні елементи при послідовній побудові  $\varphi(E, n = 2, 3, \dots)$  коефіцієнт при найвищому степені  $E^{n-1}$  формується від вкладів, які не залежать від  $V$ . Мова іде про праву частину матричного рівняння (9). Тому коефіцієнти при  $\varphi(E)$  і  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$  будуть однаковими і рівними  $K(n, n) \Delta = 1$ . Тобто для діагональних коефіцієнтів  $K(n, n)$  ми одержуємо значення

$$K(n, n) = \frac{1}{\Delta}.$$

Тепер систему рівнянь (77)

$$\begin{pmatrix} \varphi(1) \\ \varphi(2) \\ \varphi(3) \\ \vdots \\ \varphi(n) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{1,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{2,1} & K_{2,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{3,1} & K_{3,2} & K_{3,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ K_{n,1} & K_{n,2} & K_{n,3} & \cdot & \cdot & \cdot & K_{n,n} & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\varphi}(1) \\ \overset{\circ}{\varphi}(2) \\ \overset{\circ}{\varphi}(3) \\ \vdots \\ \overset{\circ}{\varphi}(n) \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{78}$$



враховуючи, що матриця коефіцієнтів  $K(n, m)$  – трикутна можна переписати у такій формі

$$\varphi(E, n) = \overset{\circ}{\varphi}(E, n) + \sum_{m=1}^{n-1} K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(m) \Delta. \quad (79)$$

В континуальному представленні, яке можна досягнути переходом до границі  $\Delta \rightarrow 0$ , це рівняння набуває вигляду

$$\varphi(E, x) = \overset{\circ}{\varphi}(E, x) + \int_0^x K(x, x') \overset{\circ}{\varphi}(E, x') dx'. \quad (80)$$

## 4 Алгебраїчна форма рівняння Гельфанда-Левитана

Для визначення функцій  $\varphi(E)$  використаємо одержану раніше умову повноти  $\sum_{\lambda=1}^N \psi(E_\lambda, n) \psi(E_\lambda, m) = \frac{\delta_{nm}}{\Delta}$  переписавши її у такій формі

$$\sum_{\lambda=1}^N c_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, m) = \frac{\delta_{nm}}{\Delta} \quad (81)$$

та для функцій  $\overset{\circ}{\varphi}(E)$

$$\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(\overset{\circ}{E}_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(\overset{\circ}{E}_\lambda, m) = \frac{\delta_{nm}}{\Delta}. \quad (82)$$

у яких  $\overset{\circ}{E}_\lambda$  – власні значення різницевого рівняння Шредингера при нульовому потенціалі  $V(n) = 0$ , а

$$\overset{\circ}{c}_\lambda^2 = \left[ \Delta \sum_{n=1}^N \overset{\circ}{\varphi}^2(\overset{\circ}{E}_\lambda, n) \right]^{-1}.$$

Співвідношення (82) є умовами ортонормування за змінною  $E_\lambda$  для сукупності векторів  $\{\varphi_n\}$  проте з різними ваговими множниками  $c_\lambda^2$  і  $\overset{\circ}{c}_\lambda^2$ . Отже, перехід від відомого базису  $\{\overset{\circ}{\varphi}_n\}$  у  $N$ -вимірному векторному просторі до нового базису  $\{\varphi_n\}$  можна трактувати як процедуру ортонормування векторів  $\{\overset{\circ}{\varphi}_n\}$  із новими ваговими множниками  $c_\lambda^2$  замість  $\overset{\circ}{c}_\lambda^2$ . Із умови ортонормування можна визначити коефіцієнти  $K(n, m)$ .

Сама процедура ортонормування організована у такий спосіб. За перший вектор нового базису згідно із (80) виберемо вектор  $\overset{\circ}{\varphi}(E, 1)$ . Коefіцієнт  $K(2, 1)$  для одержання другого вектора  $\varphi(E, 2)$  знайдемо із умови

$$\varphi(E, 2) \perp \varphi(E, 1)$$

еквівалентної

$$\varphi(E, 2) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, 1),$$

оскільки  $\varphi(E, 1) = \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)$ . Наступний вектор  $\varphi(E, 3)$  повинен бути ортогональним і до  $\varphi(E, 2)$  і до  $\varphi(E, 1)$ , тобто  $\varphi(E, 3) \perp \varphi(E, 2)$  і  $\varphi(E, 3) \perp \varphi(E, 1)$ , але оскільки  $\varphi(E, 2)$  є лінійною комбінацією  $\overset{\circ}{\varphi}(E, 2)$  і  $\overset{\circ}{\varphi}(E, 1)$  із умови  $\varphi(E, 3) \perp \varphi(E, 2)$  випливає умова  $\varphi(E, 3) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, 2)$ . Дві умови  $\varphi(E, 3) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, 2)$  і  $\varphi(E, 3) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, 1)$  визначають коefіцієнти  $K(3, 1)$  і  $K(3, 2)$

$$\varphi(E, 3) \overset{\circ}{\varphi}(E, 2) = \Delta K(3, 2),$$

$$\varphi(E, 3) \overset{\circ}{\varphi}(E, 1) = \Delta K(3, 1).$$

Продовжуючи процедуру можна знайти коefіцієнти  $K(n, m)$  із  $n$ -го рядка системи рівнянь (80) ортогоналізуючи  $\varphi(E, n)$  до всіх  $\varphi(E, m)$  із  $m < n$

$$\sum_{\lambda=1}^N c_{\lambda}^2 \varphi(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m) = 0, \quad m < n. \quad (83)$$

Підставивши  $\varphi(E, n)$  у формі (79) одержимо

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{\lambda=1}^N c_{\lambda}^2 \varphi(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m) \\ &= \sum_{\lambda=1}^N c_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m) + \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \sum_{\lambda=1}^N c_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m) \Delta. \end{aligned}$$

Перепишемо умову повноти множини власних функцій у формі

$\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) - \frac{\delta_{nm}}{\Delta} = 0$  і додамо її до другого доданка. Тоді

$$\begin{aligned}
& \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \sum_{\lambda=1}^N \left( c_\lambda^2 + \overset{\circ}{c}_\lambda^2 - \frac{\delta_{n,m}}{\Delta} \right) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = \\
& \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \sum_{\lambda=1}^N c_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta + \\
& \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta + \\
& \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) (-\delta_{n,m}) \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) = 0
\end{aligned} \tag{84}$$

Останній доданок дає вклад

$$\sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) (-\delta_{n,m}) \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) = \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) (-\delta_{n,m}) \frac{\delta_{\rho,m}}{\Delta} = -\frac{\delta_{n,m}}{\Delta}.$$

Другий доданок дає вклад

$$\sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, \rho) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) \delta_{\rho,m} = K(n, m).$$

Якщо ввести позначення

$$Q(n, m) = \sum_{\lambda=1}^N c_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) - \frac{\delta_{n,m}}{\Delta}, \tag{85}$$

або, врахувавши (82), переписати вираз для  $Q(n, m)$  в такому вигляді

$$Q(n, m) = \sum_{\lambda=1}^N c_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) - \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m), \tag{86}$$

рівняння (90) можна записати так

$$K(n, m) + Q(n, m) + \sum_{\rho=1}^{n-1} K(n, \rho) Q(\rho, m) = 0, \quad m < n. \tag{87}$$

де

$$Q(r, r') = \sum_{\lambda}^{\infty} c^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, r) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, r') - \sum_{\lambda}^{\infty} \overset{\circ}{c}_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(\overset{\circ}{E}_{\lambda}, r) \overset{\circ}{\varphi}(\overset{\circ}{E}_{\lambda}, r'). \quad (88)$$

Рівняння (87) для коефіцієнтів ортогоналізації є алгебраїчним аналогом рівняння Гельфанда-Левитана, яке одержується із (87) при  $\Delta \rightarrow 0$

$$K(r, r') + Q(r, r') + \int_0^r K(r, r'') Q(r'', r) dr'' = 0. \quad (89)$$

Перехід до одновимірного випадку здійснимо зробивши у рівнянні (87) заміну

$$\begin{aligned} K(r, r') &\rightarrow K(x, y), \\ Q(r, r') &\rightarrow F(x + y), \\ c_{\lambda} &\rightarrow a(i\kappa_n). \end{aligned} \quad (90)$$

Тепер рівняння Гельфанда-Левитана набуває вигляду

$$K(x, y) + F(x + y) + \int_x^{\infty} K(x, z) F(z + y) dz = 0, \quad (91)$$

де

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \frac{b_n e^{-\kappa_n x}}{ia'(i\kappa_n)} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(k) e^{ikx} dk. \quad (92)$$

Доданок  $\sum_{n=1}^N \frac{b_n e^{-\kappa_n x}}{ia'(i\kappa_n)}$  у  $F(x)$  враховує внесок від зв'язаних станів, а другий доданок  $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(k) e^{ikx} dk$  пов'язаний із відбиванням частинок ( $r(k)$  - коефіцієнт відбивання) від області у якій діє потенціал  $V(x)$ .

## 5 Зв'язок коефіцієнтів $K(n, m)$ із потенціалом $V(n)$

Для одержання виразів для потенціала через коефіцієнти  $K(n, m)$  домножимо різницеве рівняння Шредингера на  $\overset{\circ}{c}_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n)$  та підсумуємо по всіх  $\lambda$ . Тоді

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n-1) + \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n) - \\
& \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n+1) + \sum_{\lambda=1}^N V(n) \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n) = \\
& \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n).
\end{aligned}$$

В одержане рівняння підставимо вираз для  $\varphi(E_\lambda, n)$  у формі (79)

$$\begin{aligned}
\varphi(E, n) &= \overset{\circ}{\varphi}(E, n) + \sum_{m=1}^{n-1} K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(m) \Delta, \\
\varphi(E, n-1) &= \overset{\circ}{\varphi}(E, n-1) + \sum_{m=1}^{n-2} K(n-1, m) \overset{\circ}{\varphi}(m) \Delta, \\
\varphi(E, n+1) &= \overset{\circ}{\varphi}(E, n+1) + \sum_{m=1}^n K(n+1, m) \overset{\circ}{\varphi}(m) \Delta.
\end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n-1) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) + \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) - \\
& \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n+1) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) + \sum_{\lambda=1}^N V(n) \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) - \\
& \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) + -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n-1) \sum_{m=1}^{n-2} K(n-1, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta + \\
& \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^{n-1} K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta - \\
& \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n+1) \sum_{m=1}^n K(n+1, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta + \\
& \sum_{\lambda=1}^N V(n) \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^n K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = \\
& \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \overset{\circ}{c}_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^n K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m).
\end{aligned}$$

Розглянемо кожен із доданків окремо нумеруючи їх у тому порядку

у якому вони записані в останньому рівнянні

1.  $\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n-1) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) = 0,$
2.  $\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) = 1,$
3.  $\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n+1) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) = 0,$
4.  $\sum_{\lambda=1}^N V(n) \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) = V(n),$
6.  $\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n-1) \sum_{m=1}^{n-2} K(n-1, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = 0,$
7.  $\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^{n-1} K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = 0,$
8.  $\sum_{\lambda=1}^N \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n+1) \sum_{m=1}^n K(n+1, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) = K(n+1, n),$
9.  $\sum_{\lambda=1}^N V(n) \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^n K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \Delta = 0.$

Врахувавши знайдені значення для доданків, рівняння набуває вигляду

$$\frac{\hbar^2}{m} + V(n) - \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) + K(n+1, n) =$$

$$\sum_{\lambda=1}^N E_\lambda \overset{\circ}{c}_\lambda \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) \sum_{m=1}^n K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m).$$

Виконавши таку ж саму процедуру стосовно різницевого рівняння Шре-

дингера з нульовим потенціалом  $V(n) = 0$  одержимо

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m} - \sum_{\lambda=1}^N E_{\lambda} c_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) + K(n+1, n) = \\ \sum_{\lambda=1}^N E_{\lambda} c_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) \sum_{m=1}^n K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m), \end{aligned}$$

а врахувавши його у попередньому рівнянні знаходимо, що

$$V(n) = \frac{\hbar^2}{2m} [K(n+1, n) - K(n-1, n)]. \quad (93)$$

Таким чином, розв'язок оберненої задачі зводиться до обчислення  $Q(n, m)$  у формі (85) за спектральними параметрами  $c_{\lambda}, E_{\lambda}$ . Наступним кроком є розв'язок рівняння (87), а потім за одержаними значеннями  $K(n, m)$  знаходження потенціала за формулою (93). Хвильову функцію  $\psi(E_{\lambda}, n) = c_{\lambda} \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n)$  знаходять за формулою (79).

У континуальному підході замість рівняння (93) одержуємо зв'язок потенціала  $V(r)$  із ядром інтегрального перетворення  $K(r, r')$ , додавши справа у (93) величину  $[K(n, n) - K(n, n)]/2\Delta$  та перегрупувавши доданки у суму різницевих похідних від  $K$  по першій та другій змінній, що приводить при  $\Delta \rightarrow 0$  до повної похідної від  $K$

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{dK(r, r')}{dr}. \quad (94)$$

## 6 Приклади

### 6.1 Задача 1.

Знайти потенціал, якщо дискретний спектр відсутній, а коефіцієнт відбивання має лише один полюс

$$r(k) = \frac{ib}{k + ib},$$

де  $b > 0$  - деякий додатний параметр. Тобто у ядрі інтегрального перетворення  $F(x)$  перший доданок, який враховує вклади від зв'язаних станів,



буде відсутнім і буде врахований другий доданок. Знайдемо Фур'є-образ коефіцієнта відбивання

$$F(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ib}{k + ib} e^{ikx} dk.$$

Для обчислення інтеграла застосуємо методи теорії функцій комплексної змінної, зокрема представлення інтеграла за допомогою контурного інтеграла. Якщо  $x > 0$ , то контур інтегрування слід замкнути у верхній півплощині, де підінтегральна функція не має полюсів, тому інтеграл буде рівним нулю. При  $x < 0$  контур інтегрування замикається у нижній півплощині, де підінтегральна функція має полюс у точці  $k = -ib$ , тоді інтеграл буде рівним лишкові, що визначається наявним полюсом, що відповідає інтегральному представленню функції Гевісайда.

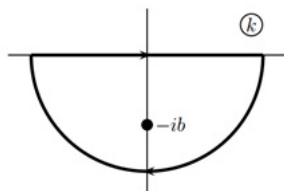


Рис. 6: Контур інтегрування при  $x < 0$ .

Тоді

$$F(x) = b\Theta(-x)e^{bx}.$$

Внаслідок наявності  $\Theta$ -функції в інтегралі рівняння (91) верхня межа стає скінченою і тоді

$$K(x, y) = F(x + y) + \int_x^{-y} K(x, s)F(y + s)ds.$$

Тепер розглянемо два випадки, що відрізняються знаком суми  $x + y$ . Якщо  $x + y > 0$ , то внаслідок визначення  $\Theta$ -функції, яка при  $\Theta(-x)$  відмінна від нуля при від'ємних  $x$  знаходимо, що  $F(x + y) = 0$ , як у першому доданку, так і під інтегралом ( $x + y < y + s < 0$ ). У рівнянні  $K(x, y)$  права частина стає рівною нулю, отже  $K(x, y) = 0$ . Якщо ж  $x + y < 0$ , то  $F(x + y) = be^{b(x+y)}$ , і інтегральне рівняння набуває вигляду

$$K(x, y) = be^{b(x+y)} + b \int_x^{-y} K(x, s)e^{b(s+y)} ds. \quad (95)$$

Це рівняння має розв'язок  $K = const$ . Постійну можна знайти обчисливши інтеграл від експоненти, який рівний

$$b \int_x^{-y} const e^{b(s+y)} ds = const (1 - e^{b(x+y)}).$$

Підставивши знайдений інтеграл у рівняння (95), одержуємо

$$const = b e^{b(x+y)} + const + const e^{b(x+y)},$$

а  $K = b$ . Тоді

$$K(x, y) = b\Theta(x, y).$$

Потенціал знаходять диференціюючи вираз для  $K(x, y)$  по  $x$ . Тоді

$$V(x) = 2 \frac{d}{dx} K(x, x) = 2b\delta(x).$$

Це так званий  $\delta$ -функційний потенціал.

## 6.2 Задача 2.

Знайти безвідбивний потенціал у спектрі якого є лише один зв'язаний стан.

Існує клас потенціалів для яких як пряма, так і обернена задача розсіювання має точний розв'язок. Це т.зв. безвідбивні потенціали, для яких коефіцієнт відбивання  $r(k)$  рівний нулю при всіх  $k$ . Таким чином ядро  $F(x)$  інтегрального перетворення у рівнянні Гельфанда-Левитана (Г-Л) матиме вигляд

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \frac{b_n}{ia'(i\kappa_n)} e^{-\kappa_n x} = \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n x}, \quad (96)$$

де  $\beta_n > 0$ . Саме рівняння (Г-Л) має вигляд

$$K(x, y) + F(x + y) + \int_x^\infty K(x, z)F(z + y)dz = 0$$

Зазначимо, що, оскільки ядром інтегрального перетворення є  $F(x) = \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n x}$ , то, оскільки,  $e^{-\kappa_n(x+y)} = e^{-\kappa_n x} e^{-\kappa_n y}$  легко бачити, що рівняння Гельфанда-Левитана є рівнянням із виродженим ядром і тому його можна легко розв'язати. Зокрема будемо шукати розв'язок  $K(x, y)$  у

такому вигляді

$$K(x, y) = \sum_{n=1}^N K_n(x) e^{-\kappa_n x}.$$

Запишемо також необхідні для підстановки у рівняння для  $K(x, y)$  вирази

$$\begin{aligned} F(x + y) &= \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n(x+y)}, \\ F(z + y) &= \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n(z+y)}, \\ K(x, z) &= \sum_{m=1}^N K_m(x) e^{-\kappa_m z}. \end{aligned}$$

Тоді

$$\sum_{n=1}^N K_n(x) e^{-\kappa_n y} + \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n(x+y)} + \int_x^\infty \sum_{m=1}^N K_m(x) e^{-\kappa_m z} \sum_{n=1}^N \beta_n e^{-\kappa_n(z+y)} dz = 0,$$

або

$$\sum_{n=1}^N \left\{ K_n(x) e^{-\kappa_n y} + \beta_n e^{-\kappa_n x} e^{-\kappa_n y} + \sum_{m=1}^N \int_x^\infty K_m(x) e^{-(\kappa_n + \kappa_m)z} \beta_n e^{-\kappa_n y} dz \right\} = 0,$$

або

$$\sum_{n=1}^N \left\{ K_n(x) + \beta_n e^{-\kappa_n x} + \sum_{m=1}^N K_m(x) \beta_n \int_x^\infty e^{-(\kappa_n + \kappa_m)z} dz \right\} e^{-\kappa_n y} = 0.$$

Розрахунок інтеграла у цьому рівнянні дає

$$\int_x^\infty e^{-(\kappa_n + \kappa_m)z} dz = \frac{e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x}}{\kappa_n + \kappa_m}.$$

Тепер рівняння набуває вигляду

$$\sum_{n=1}^N \left\{ K_n(x) + \beta_n e^{-\kappa_n x} + \sum_{m=1}^N K_m(x) \beta_n \frac{e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x}}{\kappa_n + \kappa_m} \right\} = 0.$$

Звідси знаходимо рівняння для  $K_n(x)$

$$K_n(x) + \sum_{m=1}^N K_m(x) \beta_n \frac{e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x}}{\kappa_n + \kappa_m} = -\beta_n e^{-\kappa_n x}, \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

Цю систему рівнянь можна записати у матричній формі, ввівши квадратну матрицю  $\hat{A}(x)$  розмірністю  $N \times N$  із матричними елементами

$$A_{nm}^{(n)} = \delta_{nm} + \frac{\beta_n}{\kappa_n + \kappa_m} e^{-(\kappa_n + \kappa_m)x}$$

та матриці-стовпці  $\vec{K} = (K_1, K_2, \dots, K_N)$  і  $\vec{\beta} = (\beta_1 e^{-\kappa_1 x}, \beta_2 e^{-\kappa_2 x}, \dots, \beta_N e^{-\kappa_N x})$ . Тоді рівняння (Г-Л) набуває вигляду

$$\hat{A} \cdot \vec{K} = \vec{\beta}.$$

Розв'язком системи рівнянь для  $K_n(x)$  є

$$K_n(x) = \frac{\det A_n(x)}{\det A(x)},$$

у якому  $\hat{A}^{(n)}(x)$  - матриця одержана із матриці  $\hat{A}(x)$  шляхом заміни  $n$ -го стовпця на стовпець  $-\beta_m e^{-\kappa_m x}$ , тобто

$$A_{mn}^{(n)} = -\beta_m e^{-\kappa_m x}, \quad m = 1, 2, \dots, N.$$

Оскільки потенціал  $V(x)$  можна визначити із  $K(x)$ , то знайдемо

$$K(x, x) = \frac{1}{\det A} \sum_{n=1}^N \det A^{(n)}(x) e^{-\kappa_n x}.$$

Застосовуючи правило диференціювання визначників, відмітимо, що чисельник цього виразу є похідною від  $\det A$ . Тому

$$K(x, x) = \frac{d}{dx} (\ln(\det A(x))),$$

а вираз для потенціала є таким

$$V(x) = -2 \frac{d^2}{dx^2} (\ln(\det A(x))).$$

Ця формула дає повний опис усіх безвідбивних потенціалів.

У найпростішому випадку безвідбивного потенціала, коли для цього потенціала існує єдиний дискретний рівень з енергією  $E = -\kappa_1^2$ , рівняння для  $K_n(x)$  при  $n = 1$  набуває вигляду

$$K_1(x) + \frac{\beta_1}{2\kappa_1} e^{-2\kappa_1 x} K_1(x) = -\beta_1 e^{-\kappa_1 x},$$

звідки

$$K_1(x) = -\frac{\beta_1 e^{-\kappa_1 x}}{1 + \frac{\beta_1}{2\kappa_1} e^{-2\kappa_1 x}}.$$

Тоді

$$K(x, y) = K_1(x) e^{-\kappa_1 y},$$

а

$$K(x, x) = K_1(x) e^{-\kappa x} = -\frac{\beta e^{-2\kappa x}}{1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x}},$$

де ми здійснили перепозначення  $\kappa_1 \equiv \kappa$ ,  $\beta_1 \equiv \beta$ . Графік функції  $K(x, x)$  має вигляд

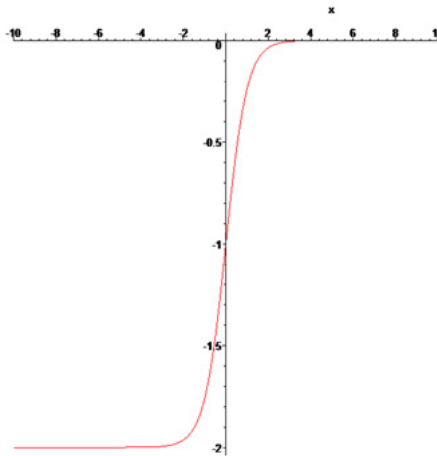


Рис. 7: Графік функції  $K^{(1)}(x, x)$  для безвідбивного потенціала з одним рівнем.

Тепер потенціал  $V(x)$  буде

$$V(x) = -2 \frac{d}{dx} (K(x, x)) = 2 \frac{d}{dx} \left( \frac{\beta e^{-2\kappa x}}{1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x}} \right) =$$

$$2 \frac{-2\beta\kappa e^{-2\kappa x} \left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x}\right) - \beta e^{-2\kappa x} (-\beta) e^{-2\kappa x}}{\left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x}\right)^2} =$$

$$- \frac{4\beta\kappa e^{-2\kappa x}}{\left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x}\right)^2}.$$

Графік протенціала із одним рівнем зв'язаного стану зображено на рисунку

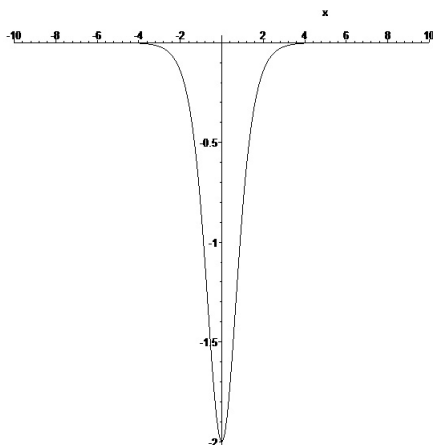


Рис. 8: Графік функції  $V^{(1)}(x)$ .

Дослідимо знайдений потенціал, зокрема знайдемо його екстремальні точки. Для цього знайдемо похідну від нього по координаті та прирівняємо її до нуля, тобто  $dV/dx = 0$ .

$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{8\beta\kappa^2 e^{-2\kappa x_0} \left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x_0}\right)^2 + 4\beta\kappa e^{-2\kappa x_0} \left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x_0}\right) (-\beta)}{\left(1 + \frac{\beta}{2\kappa} e^{-2\kappa x_0}\right)^4} = 0.$$

Перетворивши чисельник та врахувавши, що знаменник дробу відмінний від нуля приходимо до рівняння

$$2\kappa - \beta e^{-2\kappa x_0} = 0,$$

або

$$\frac{\beta}{2\kappa} = e^{2\kappa x_0}.$$

Звідси знаходимо, що

$$x_0 = \frac{\ln\left(\frac{\beta}{2\kappa}\right)}{2\kappa}.$$

Підставивши знайдений вираз для  $x_0$  у вираз для потенціала, знайдемо екстремальне значення для нього

$$V(x_0) = -4\kappa^2.$$

Через  $x_0$  можна виразити і  $\beta$

$$\beta = 2\kappa e^{-2\kappa x_0}$$

з допомогою якого можна записати вираз для потенціала у зручній формі. Справді

$$\begin{aligned} V(x) &= -\frac{4(2\kappa e^{2\kappa x_0})\kappa e^{-2\kappa x}}{\left(1 + \frac{2\kappa e^{2\kappa x_0}}{2\kappa} e^{-2\kappa x}\right)^2} = -\frac{8\kappa^2 e^{-2\kappa(x-x_0)}}{(1 + e^{-2\kappa(x-x_0)})^2} = \\ &= -\frac{8\kappa^2}{(e^{\kappa(x-x_0)} + e^{-\kappa(x-x_0)})^2} = -\frac{2\kappa^2}{\cosh^2(\kappa(x-x_0))}, \end{aligned}$$

де  $x_0 = \frac{1}{2\kappa} \ln\left(\frac{2\kappa}{\beta}\right)$ .

Якщо параметри потенціала вибрати так, щоб  $x_0$  було рівним нулю, то у цьому випадку  $\beta = 2\kappa$

$$K^{(1)}(x, x) = -\frac{e^{-2\kappa x}}{1 + e^{-2\kappa x}},$$

а потенціал  $V(x)$  набуває вигляду

$$V(x) = -\frac{4\kappa^2 e^{-\kappa x}}{(1 + e^{-2\kappa x})^2} = -\frac{2\kappa^2}{\cosh^2(\kappa x)}.$$

що є відомим безвідбивним потенціалом - модифікованим потенціалом Пешль-Теллера з єдиним параметром  $\kappa$ .

### 6.2.1 Реконструкція безвідбивного потенціала із $\delta$ -ями.

Задачею теорії розсіювання, що має точний розв'язок, є задача про розсіювання на потенціалі нульового радіуса дії, тобто на  $\delta$ -ями, який запишемо у такому вигляді

$$V(x) = -\alpha\delta(x).$$

При  $E \leq 0$  у ямі існує єдиний рівень зв'язаного стану, який відповідає енергії

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2},$$

і описується хвильовою функцією

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha^2}}{\hbar^2} e^{-\frac{m\alpha|x|}{\hbar^2}}.$$

При  $E \geq 0$  енергетичний спектр системи - неперервний і її стан, для правої задачі розсіювання описується хвильовими функціями

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, \\ \psi_2(x) &= t(k)e^{ikx},\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}r(k) &= \frac{i\beta}{1 - i\beta}, \\ t(k) &= \frac{1}{1 - i\beta}.\end{aligned}$$

Параметр розсіювання  $\kappa$  для цієї задачі має вигляд

$$\kappa_\delta = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

на відміну від випадку модифікованого потенціала Пешль-Теллера для якого

$$\kappa_1 = \alpha.$$

Функція  $K(x, x)$  для цієї задачі відрізнятиметься від випадку потенціала Пешль-Теллера лише позначеннями

$$K(x, x) = -\frac{\beta_\delta e^{-2\kappa_\delta x}}{1 + \frac{\beta_\delta}{2\kappa_\delta} e^{-2\kappa_\delta x}}.$$



Відповідно і потенціал відрізнятиметься від попереднього випадку лише позначеннями

$$V(x) = -\frac{4\kappa_\delta^2 e^{-\kappa_\delta x}}{(1 + e^{-2\kappa_\delta x})^2},$$

і його також можна звести до звичної попередньої форми

$$V(x) = -\frac{2\kappa_\delta^2}{\cosh^2(\kappa_\delta x)}.$$

З цього можна зробити висновок, що безвідбивні потенціали із одним рівнем зводяться до потенціала Пешль-Теллера.

### 6.2.2 Задача 2 із двома рівнями.

Модифікований потенціал Пешль-Теллера з кількома рівнями задається рівнянням (З.Флюгге, задача 2.39)

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cosh^2(\alpha x)}, \quad \lambda > 1$$

і для безвідбивного потенціала  $\lambda$  - цілочисельне. Енергетичні рівні зв'язаних станів визначаються співвідношенням

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda - 1 - n)^2, \quad n \leq \lambda - 1.$$

Для ями з двома рівнями слід вибрати  $\lambda = 3$  і  $n = 1$  та  $n = 0$ . Тоді

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m},$$

$$E_0 = -4\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}.$$

Ями з одним, двома та трьома рівнями зображено на рисунку

Система рівнянь Гельфанда-Левитана-Марченка для ями із двома рівнями має вигляд

$$K_1(x) + K_1(x) \frac{\beta_1}{2\kappa_1} e^{-2\kappa_1 x} + K_2(x) \frac{\beta_1}{\kappa_1 + \kappa_2} e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)x} = \beta_1 e^{-\kappa_1 x},$$

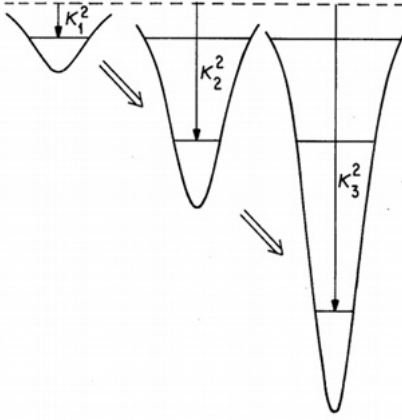


Рис. 9: Графіки ям з одним, двома та трьома рівнями зв'язаних станів.

$$K_1(x) \frac{\beta_2}{\kappa_1 + \kappa_2} e^{-(\kappa_1 + \kappa_2)x} + K_2(x) + K_2(x) \frac{\beta_2}{2\kappa_2} e^{-2\kappa_2 x} = \beta_2 e^{-\kappa_2 x}.$$

Враховавши, що для потенціалу Пешль-Теллера  $\kappa_1 = 2\kappa_2$ , та перепозначивши  $\kappa_2 = \kappa$  і  $\kappa_1 = 2\kappa$ , одержимо систему рівнянь у такому вигляді

$$\begin{aligned} K_1(x) \left( 1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} \right) + K_2(x) \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} &= \beta_1 e^{-2\kappa x}, \\ K_1(x) \frac{\beta_2}{3\kappa} e^{-3\kappa x} + K_2(x) \left( 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \right) &= \beta_2 e^{-\kappa x}. \end{aligned}$$

Визначник цієї системи рівнянь рівний

$$\begin{aligned} \det A(x) &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} & \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} \\ \frac{\beta_2}{3\kappa} e^{-3\kappa x} & 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \end{pmatrix}, \\ \det A(x) &= 1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}. \end{aligned}$$

Тепер розрахуємо визначники матриць  $A_1(x)$  і  $A_2(x)$

$$\det A_1(x) = \begin{pmatrix} \beta_1 e^{-2\kappa x} & \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} \\ \beta_2 e^{3\kappa x} & 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \end{pmatrix} = \beta_1 e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{6\kappa} e^{-4\kappa x}.$$

$$\det A_2(x) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} & \beta_1 e^{-2\kappa x} \\ \frac{\beta_2}{3\kappa} e^{-3\kappa x} & \beta_2 e^{-\kappa x} \end{pmatrix} = \beta_2 e^{-\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{12\kappa} e^{-5\kappa x}.$$

Тоді функції  $K_1(x)$  і  $K_2(x)$  будуть такими

$$K_1(x) = \frac{\det A_1(x)}{\det A(x)} = \frac{\beta_1 e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{6\kappa} e^{-4\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}},$$

$$K_2(x) = \frac{\det A_2(x)}{\det A(x)} = \frac{\beta_2 e^{-\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{12\kappa} e^{-5\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}}.$$

Функція  $K(x, y)$  матиме вигляд

$$\begin{aligned} K(x, y) &= K_1(x) e^{-2\kappa y} + K_2(x) e^{-\kappa y}, \\ K(x, y) &= \frac{\beta_1 e^{-2\kappa(x+y)} + \frac{\beta_1 \beta_2}{6\kappa} e^{-\kappa(4x+y)}}{1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}} \\ &+ \frac{\beta_2 e^{-\kappa(x+y)} + \frac{\beta_1 \beta_2}{12\kappa} e^{-\kappa(5x+y)}}{1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}}, \end{aligned}$$

а функція  $K(x, x)$  буде такою

$$K(x, x) = \frac{\beta_1 e^{-4\kappa x} + \beta_2 e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{12\kappa} e^{-6\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{4\kappa} e^{-4\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{72\kappa^2} e^{-6\kappa x}} \equiv K^{(2)}(x, x).$$

Прийнявши  $\beta_1 = 4\kappa$  і  $\beta_2 = 2\kappa$  одержимо для  $K^{(2)}(x, x)$

$$K^{(2)}(x, x) = \frac{2\kappa e^{-2\kappa x} + 4\kappa e^{-4\kappa x} + \frac{2}{3}\kappa e^{-6\kappa x}}{1 + e^{-2\kappa x} + e^{-4\kappa x} + \frac{1}{9}e^{-6\kappa x}}.$$

Графік функції  $K^{(2)}(x, x)$  має вигляд

Потенціал  $V^{(2)}(x)$  рівний

$$V^{(2)}(x) = -2 \frac{d}{dx} (K^{(2)}(x, x)) = -\frac{8e^{-2x} + 32e^{-4x} + \frac{16}{9}e^{-8x} + \frac{8}{9}e^{-10x}}{(1 + e^{-2x} + e^{-4x} + e^{-6x})^2}.$$

Потенціал побудований у пакеті Марплє за останньою формулою та при одночасному диференціюванні виразу для  $K^{(2)}(x, x)$  командою `plot(2*diff((2*exp(-2*x)+4*exp(-4*x)+(2/3)*exp(-6*x))/(1+exp(-2*x)+exp(-4*x)+(1/9)*exp(-6*x)),x), color=black);` має вигляд (Рис.11)

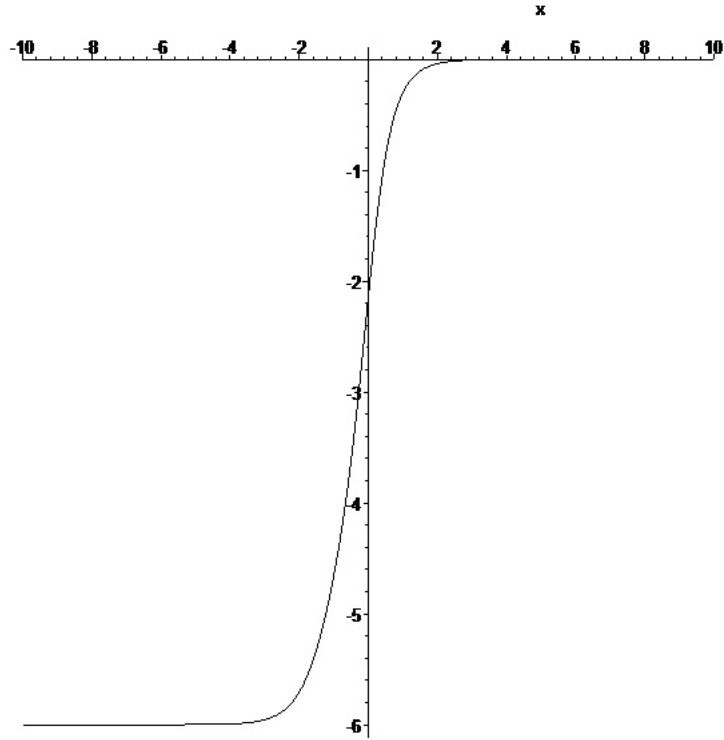


Рис. 10: Графік функції  $K^{(2)}(x, x)$ .

### 6.2.3 Задача 2 із $\kappa_1 = 1,5\kappa$ із двома рівнями.

Розглянемо задачу про реконструкцію потенціала рівні зв'язаних станів яких дають  $\kappa_1 = 1,5\kappa$ , а  $\kappa_2 = \kappa$ . У цьому випадку система рівнянь Гельфанда-Левитана-Марченка матиме вигляд

$$K_1(x) \left( 1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} \right) + K_2(x) \frac{\beta_1}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} = \beta_1 e^{-1,5\kappa x},$$

$$K_1(x) \frac{\beta_2}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} + K_2(x) \left( 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \right) = \beta_2 e^{-\kappa x}.$$

Визначник цієї системи рівнянь є таким

$$\det A(x) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} & \frac{\beta_1}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} \\ \frac{\beta_2}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} & 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \end{pmatrix} = 1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1\beta_2}{150\kappa^2} e^{-5\kappa x}.$$

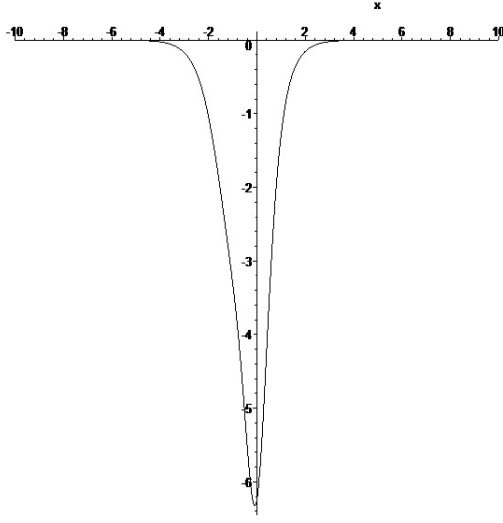


Рис. 11: Графік функції  $V^{(2)}(x)$ .

$A^{(1)}(x)$  і  $A^{(2)}(x)$  рівні

$$\det A_1(x) = \begin{pmatrix} \beta_1 e^{-1,5\kappa x} & \frac{\beta_1}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} \\ \beta_2 e^{-\kappa x} & 1 + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \end{pmatrix} = \beta_1 e^{-1,5\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{10\kappa} e^{-3,5\kappa x}.$$

$$\det A_2(x) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} & \beta_1 e^{-1,5\kappa x} \\ \frac{\beta_2}{2,5\kappa} e^{-2,5\kappa x} & \beta_2 e^{-\kappa x} \end{pmatrix} = \beta_2 e^{-\kappa x} - \frac{\beta_1 \beta_2}{15\kappa} e^{-4\kappa x}.$$

Тоді функції  $K_1(x)$  і  $K_2(x)$  будуть такими

$$K_1(x) = \frac{\det A_1(x)}{\det A(x)} = \frac{\beta_1 e^{-1,5\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{10\kappa} e^{-3,5\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{150\kappa^2} e^{-5\kappa x}},$$

$$K_2(x) = \frac{\det A_2(x)}{\det A(x)} = \frac{\beta_2 e^{-\kappa x} - \frac{\beta_1 \beta_2}{15\kappa} e^{-4\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{150\kappa^2} e^{-5\kappa x}}.$$

Тепер вираз для  $K^{(1,5)}(x, x)$  буде таким

$$K^{(1,5)}(x, x) = \frac{\beta_1 e^{-3\kappa x} + \beta_2 e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{30\kappa} e^{-5\kappa x}}{1 + \frac{\beta_1}{3\kappa} e^{-3\kappa x} + \frac{\beta_2}{2\kappa} e^{-2\kappa x} + \frac{\beta_1 \beta_2}{150\kappa^2} e^{-5\kappa x}},$$

а врахувавши, що  $\beta_1 = 3\kappa$ , а  $\beta_2 = 2\kappa$  одержимо

$$K^{(1,5)}(x, x) = \frac{2\kappa e^{-2\kappa x} + 3\kappa e^{-3\kappa x} + \frac{1}{5}\kappa e^{-5\kappa x}}{1 + e^{-2\kappa x} + e^{-3\kappa x} + \frac{1}{25}e^{-5\kappa x}}.$$

Графік функції  $K^{(1,5)}(x, x)$  має вигляд

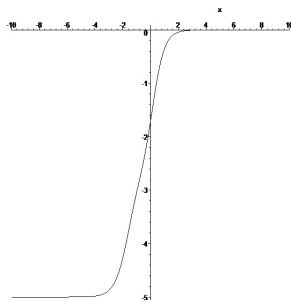


Рис. 12: Графік функції  $K^{(2)}(x, x)$ .

Потенціал  $V^{(1,5)}(x)$  побудований у пакеті Maple має вигляд (Рис.13)

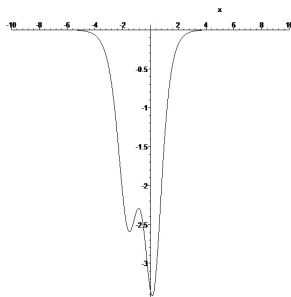


Рис. 13: Графік функції  $V^{(1,5)}(x)$ .

У загальному випадку безвідбивний потенціал залежить від  $2N$  параметрів  $\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_N, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N$ .

## Література

- [1] Case K. M., Кас М. A discrete version of the inverse scattering problem. J. Math. Phys. 14, 594 (1973).
- [2] Case K. M. The discrete inverse scattering problem in one dimension. J. Math.Phys. 15, 143 (1974).
- [3] Захарьев Б. Н., Сузько А. А. Потенциалы и квантовое рассеяние: Прямая и обратная задачи. М.: Энергоатомиздат, 1985. 224 с
- [4] Меркулова Н.Н., Михайлов М.Д. Раностные схемы для обыкновенных дифференциальных уравнений. Томск, 2014, 122 с.
- [5] Chen R., Xu Z., Sun L. Finite-difference scheme to solve Schredinger equations. Phys. Rev. E, v 47, № 56 19936 з 3799 - 3702.
- [6] Козулин А.С., Азарова Е.С., Сатанин А.М. Численное решение одномерной задачи рассеяния в вантовой механике: Последовательный и параллельный подходы. Практикум. - Нижегородский госуниверситет, Нижний Новгород 2017. - 35 с.

- [7] Серов В. В. Численные методы решения квантовомеханических задач. Саратов, Саратовский Государственный Университет им. Н.Г. Чернышевского, 2008, 39 с.
- [8] Pillai M., Goglio J., Walker T. G. Matrix Numerov method for solving Schredinger's equation. Am. J. Phys. 80, 1017 (2012)
- [9] Curt A. Moyer. Numerov extension of transparent boundary conditions for the Schredinger equation in one dimension. American Journal of Physics 72, 351 (2004).
- [10] Дей Е.А. Численное решение стационарного уравнения Шредингера обобщенным методом Нумерова. Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины, №6(75), 2012 , с.31 - 37.
- [11] Kay I., Moses H. E. Reflectionless Transmission through Dielectrics and Scattering Potentials. J. App. Phys., v. 27, № 12, 1956, p.1503 - 1508.
- [12] Thacker H. B., Quigg C., Rosner J. L. Inverse scattering problem for quarkonium systems. I. One-dimensional formalism and methodology. Phys. Rev. D, v 18 , № 11, 1978, p.274 - 286.
- [13] Шапиро Д.А. Конспект лекций по математическим методам физики. Ч III. Дополнительные главы. Новосибирск, НГУ, 2008, 82 с.
- [14] Теория солитонов: Метод обратной задачи. /Захаров В. Е., Манаков С. В., Новиков С. П., Питаевский Л. П. Под ред. С. П. Новикова.- М.: Наука, 1980, 319 с.