УДК.517.44

ОКРЕМІ РОЗВ'ЯЗКИ ОДНОРІДНИХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ У ВИГЛЯДІ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ РЯДІВ

К.В. АВДОНІН

Київський національний університет технологій та дизайну

У роботі запропоновано новий підхід для знаходження окремих розв'язків диференціальних або інтегральних рівнянь та їх систем. Наведені приклади його застосування.

Дослідження в галузі фізико-хімічних і технічних наук спираються на пошук розв'язків інтегральних та диференціальних рівнянь різного типу. Огляд існуючих теорій пошуку аналітичних розв'язків диференціальних та інтегральних рівнянь, що відповідають обраним задачам показує, що алгоритм їх пошуку, в більшості випадків, визначається граничними умовами. Найбільших успіхів на шляху створення узагальненого методу пошуку розв'язків досягла теорія функцій Гріна. В цій роботі пропонується новий шлях до його знаходження.

Об'єкти та методи дослідження

Якщо потрібно знайти розв'язок однорідного диференціального рівняння другого порядку, а саме:

$$\frac{d^2W}{dx^2} = f(x)W(x), \tag{1}$$

то функцію Гріна для нього шукають, яку запропоновано у роботі [1], спираючись на розв'язок рівняння Гельмгольця, а саме:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)W_0 = 0 \quad , \text{ де } k = const. \tag{2}$$

Найчастіше, два незалежних окремих розв'язки рівняння (2) вибирають такими:

$$W_{0,1}(x) = e^{-ikx} \quad , \quad W_{0,2}(x) = e^{+ikx} .$$

Функції $f(x)$ надають вигляду $f(x) = F(x) - k^2$ і, тоді, розв'язки рівняння (1) записують у вигляді таких інтегральних рівнянь типу Фредгольма:

$$W(x) = g(k)e^{\pm ikx} + \int_{-\infty}^{+\infty} G(k,x,y)F(y)W(y)\,dy , \tag{3}$$

де: $G(k,x,y) = \frac{1}{2ik}e^{ik|x-y|}$ – функція Гріна для даної задачі.

Але, наприклад, для тривимірного випадку рівняння (1) (перетвореного стаціонарного рівняння Шредінгера):

$$\Delta\varphi = f(\mathbf{r})\varphi , \tag{4}$$

знаходження функції Гріна набагато ускладнюється, хоч вона добре будується для неоднорідного рівняння, а саме у випадку однорідного рівняння потребує створення штучної неоднорідності. Об'єктами дослідження цієї роботи є рівняння типу (1), (4).

Постановка завдання

Головною метою роботи було знаходження частинних розв’язків диференціальних рівнянь та їх систем, що описують рух квантової частинки в зовнішньому потенціальному полі. Тобто, розглядаються рівняння та системи рівнянь, які випливають з рівнянь Шредінгера та Паулі для частинок у заданому полі.

1) Запишемо рівняння Паулі для частинки у зовнішньому полі таким чином:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\boldsymbol{\psi}+\left\{W\;\;\mathbf{r}\;\;-\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathbf{H}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right\}\boldsymbol{\psi}=E\boldsymbol{\psi}\quad . \tag{5}$$

Пошук його розв’язків, у випадку симетрії циліндричного типу, зводиться до знаходження радіальних складових хвильових функцій з системи таких двох лінійних однорідних рівнянь другого порядку:

$$\begin{cases}\dfrac{d^2\varphi_1}{dr^2}+p\;\;r\;\;\varphi_1=F\;\;r\;\;\varphi_2\\[2mm] \dfrac{d^2\varphi_2}{dr^2}+q\;\;r\;\;\varphi_2=F\;\;r\;\;\varphi_1\end{cases}\quad , \tag{6}$$

де $p\;\;r\;\;=\dfrac{m\;\;m-1}{r^2}+\dfrac{2\mu}{\hbar^2}\;\;E-W\;\;$; $F\;\;r\;\;=\dfrac{e}{c\hbar}H\;\;r\;\;$; $q\;\;r\;\;=\dfrac{m\;\;m+1}{r^2}+\dfrac{2\mu}{\hbar^2}\;\;E-W\;\;$.

2) Запишемо рівняння Шредінгера для $N-$частинок:

$$\left(-\frac{\hbar^2\Delta_j}{2\mu_j}+W\;\;x_{j\alpha}\;\;\right)\varphi\;\;x_{j\alpha}\;\;=E\varphi\;\;x_{j\alpha}\quad , \tag{7}$$

де $\alpha=$ 1, 2, 3; $j=$ 1, 2, ... , N .

Переходячи до нових координат $y_{j\alpha}=x_{j\alpha}\dfrac{\sqrt{2\mu_j}}{\hbar}$, можна записати рівняння (7) у $3N-$вимірному фазовому просторі, а саме:

$$-\Delta_N+\tilde{W}\;\;y_{j\alpha}\;\;\;\varphi\;\;y_{j\alpha}\;\;=E\varphi\;\;y_{j\alpha}\;\;,\text{ де: }\Delta_N=\sum_j\sum_\alpha\frac{\partial^2}{\partial y_{j\alpha}^2}\;. \tag{8}$$

Якщо ввести таке позначення: $\tilde{W}\;\;y_{j\alpha}\;\;-\tilde{W}\;\;0\;\;=u\;\;y_{j\alpha}\;\;$, $m^2=E-\tilde{W}\;\;0\;\;$, то рівняння (8) набуває вигляду:

$$\Delta_N+m^2\;\;\varphi\;\;y_{j\alpha}\;\;=u\;\;y_{j\alpha}\;\;\varphi\;\;y_{j\alpha}\quad . \tag{9}$$

Розв’язки одновимірних рівнянь та систем одновимірних рівнянь

Припустимо, що функція $\Phi\;\;x$ є результатом послідовних $k-$інтегрувань такого виду:

$$\Phi_k\;\;x\;\;=\int_0^x W_k\;\;t_1\;\;\int_0^{t_1}W_{k-1}\;\;t_2\;\;\int_0^{t_2}\ldots\int_0^{t_{k-1}}W_1\;\;t_k\;\;dt_k dt_{k-1}\ldots dt_1\,.$$

Якщо всі функції $W_n\;\;\xi$, де $n=1,2,\ldots,k$, мають розклад в ряд Тейлора, то узагальнюючи метод, викладений у роботі [5], отримаємо таке :

$$\Phi_k(x) = x^k \prod_{S=1}^{k}\left(W_S\left(xe^{\frac{d}{d\alpha_S}}\right)\right)\cdot\prod_{l=1}^{k}\left(\frac{1}{l+\sum\limits_{m=1}^{l}\alpha_m}\right)_{\alpha_S=0}, \qquad (10)$$

тоді частинним розв’язкам рівняння (1) можна надати такого операторного представлення:

$$W_1(x) = 1+\sum_{k=0}^{\infty}x^{2k+2}\prod_{m=0}^{k}\left(f\left(xe^{\frac{d}{d\alpha_m}}\right)\right)\prod_{S=0}^{k}\left\{\frac{1}{\left(\sum\limits_{l=0}^{S}\alpha_l+2S+1\right)\left(\sum\limits_{l=0}^{S}\alpha_l+2S+2\right)}\right\}, \qquad (11)$$

$$W_2(x) = x+\sum_{k=0}^{\infty}x^{2k+3}e^{\frac{d}{d\alpha_0}}\prod_{m=0}^{k}\left(f\left(xe^{\frac{d}{d\alpha_m}}\right)\right)\prod_{S=0}^{k}\left\{\frac{1}{\left(\sum\limits_{l=0}^{S}\alpha_l+2S+1\right)\left(\sum\limits_{l=0}^{S}\alpha_l+2S+2\right)}\right\}. \qquad (12)$$

Для окремих типів функцій $f(x)$ за допомогою співвідношень (11) та (12) можна одразу знаходити окремі розв’язки у вигляді степеневих рядів. Наприклад, візьмемо таку функцію: $f(x) = -x^n$, де $n \geq 0$, тоді розв’язки рівняння (1), як випливає з виразів (11), (12), мають вигляд:

$$W_1(x) = 1+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}x^{(k+1)(n+2)}}{\prod\limits_{S=0}^{k}\left(S(n+2)+n+1\right)\left(S(n+2)+n+2\right)}, \qquad (13)$$

$$W_2(x) = x+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}x^{(k+1)(n+2)+1}}{\prod\limits_{S=0}^{k}\left(S(n+2)+n+2\right)\left(S(n+2)+n+3\right)}. \qquad (14)$$

Припустимо,що функція $W(x)$ є розв’язком однорідного лінійного диференціального рівняння (1), а $f(x)$, $g(x)$ – задані функції, тоді окремі розв’язки однорідного диференціального рівняння мають такий вигляд:

$$\frac{d^2U(x)}{dx^2} = \left(f(x)+g(x)\right)U(x), \qquad (15)$$

а у вигляді функціональних рядів мають такий вигляд:

$$U_1 = W\cdot\left(1+\sum_{k=1}^{\infty}\int_a^x W^{-2}\int_a^{t_1}W^2 g\ldots\int_a^{t_{2k-2}}W^{-2}\int_a^{t_{2k-1}}W^2 g(t_{2k})\prod_{n=1}^{2k}dt_n\right), \qquad (16)$$

$$U_2 = W\left(Q+\sum_{k=1}^{\infty}\int_a^x W^{-2}\int_a^{t_1}W^2 g\ldots\int_a^{t_{2k-2}}W^{-2}\int_a^{t_{2k-1}}QW^2 g(t_{2k})\prod_{n=1}^{2k}dt_n\right), \qquad (17)$$

Де $Q(x) = \int\limits_a^x W^{-2}(t)\,dt$.

Використовуючи вирази (11) та (16) легко знайти окремий розв’язок рівняння (1) у випадку, коли: $f(x) = Ae^{\beta x} - a$. Він буде таким:

$$W_1(x) = e^{ix\sqrt{a}}\left(1+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{e^{ik\beta x}}{\beta^{2k}k!}\prod_{n=1}^{k}\left\{\frac{1}{n+\dfrac{2i\sqrt{a}}{\beta}}\right\}\right). \tag{18}$$

Частинні розв’язки рівняння Паулі

Припустимо, що функції $S_1(r)$, $S_2(r)$ - розв’язки таких двох незалежних лінійних однорідних диференціальних рівнянь другого порядку:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2S_1(r)}{dr^2}+p(r)S_1(r)=0 \\ \dfrac{d^2S_2(r)}{dr^2}+q(r)S_2(r)=0 \end{cases}; \tag{19}$$

тоді два окремі розв’язки системи двох лінійних однорідних рівнянь другого порядку (6), як випливає з співвідношень (11), (12) та (16), (17) будуть такими:

$$\varphi_1(r)=\sum_{j=1}^{4}C_jP_j(r) \quad ; \quad \varphi_2(r)=\sum_{j=1}^{4}C_jL_j(r), \tag{20}$$

де C_j – довільні сталі; $j=1,2,3,4$;

$$P_j(r)=S_1(r)\left\{A_j(r)+\sum_{k=1}^{\infty}\int_a^r S_1^{-2}(t_1)\int_a^{t_1}G(t_2)\int_a^{t_2}S_2^{-2}(t_3)\int_a^{t_3}G(t_4)\cdot\ldots\right.$$

$$\left.\ldots\int_a^{t_{4k-4}}S_1^{-2}(t_{4k-3})\int_a^{t_{4k-3}}G(t_{4k-2})\int_a^{t_{4k-2}}S_2^{-2}(t_{4k-1})\int_a^{t_{4k-1}}A_j(t_{4k})G(t_{4k})\prod_{n=1}^{4k}dt_n\right\};$$

$$L_j(r)=S_2(r)\left\{B_j(r)+\sum_{k=1}^{\infty}\int_a^x S_2^{-2}(t_1)\int_a^{t_1}G(t_2)\int_a^{t_2}S_1^{-2}(t_3)\int_a^{t_3}G(t_4)\cdot\ldots\right.$$

$$\left.\ldots\int_a^{t_{4k-4}}S_2^{-2}(t_{4k-3})\int_a^{t_{4k-3}}G(t_{4k-2})\int_a^{t_{4k-2}}S_1^{-2}(t_{4k-1})\int_a^{t_{4k-1}}B_j(t_{4k})G(t_{4k})\prod_{n=1}^{4k}dt_n\right\};$$

$$A_2(r)=\int_a^r S_1^{-2}(t)\,dt\ ;\ A_3(r)=\int_a^r S_1^{-2}(t_1)\int_a^{t_1}G(t_2)\,dt_2dt_1\ ;$$

$$A_4(r)=\int_a^r S_1^{-2}(t_1)\int_a^{t_1}G(t_2)\int_a^{t_2}S_2^{-2}(t_3)\,dt_3dt_2dt_1\ ;\ G(r)=S_1(r)F(r)S_2(r)\ ;\ A_1(r)=1;$$

$$B_1=1\ ;\ B_2(r)=\int_a^r S_2^{-2}(t)\,dt\,;\ B_3(r)=\int_a^r S_2^{-2}(t_1)\int_a^{t_1}G(t_2)\,dt_2dt_1\ ;$$

$$B_4(r)=\int_a^r S_2^{-2}(t_1)\int_a^{t_1} G(t_2)\int_a^{t_2} S_1^{-2}(t_3)\,dt_3dt_2dt_1\,;$$

Окремий розв'язок рівняння Шредінгера для системи частинок

*Р*озв'язок рівняння:

$$(\Delta_N+m^2)\,f_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m})=\prod_{S=1}^{3N}(y_S)^{n_S}\,, \tag{21}$$

можна представити у вигляді:

$$f_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m})=\frac{1}{(2\pi)^{3N}}\int_0^{2\pi}\prod_{S=1}^{3N}\exp(-in_S\alpha_S)\,Q_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m},\boldsymbol{\alpha})\,d\boldsymbol{\alpha}\,, \tag{22}$$

де

$$Q_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m},\boldsymbol{\alpha})=\frac{\exp\left[\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S y_S(n_S!)^{\frac{1}{n_S}}\exp(i\alpha_S)\right]}{\prod\limits_{S=1}^{3N}(\xi_S)^{n_S}\left(\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^2(n_S!)^{\frac{2}{n_S}}\exp(2i\alpha_S)+m^2\right)}\,, \tag{23}$$

Для доведення цього твердження знайдемо результат дії оператора (Δ_N+m^2) на функцію Q:

$$(\Delta_N+m^2)\,Q=\frac{\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^2(n_S!)^{\frac{2}{n_S}}\exp(2i\alpha_S)\exp\left[\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S y_S(n_S!)^{\frac{1}{n_S}}\exp(i\alpha_S)\right]}{\prod\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^{n_S}\left(\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^2(n_S!)^{\frac{2}{n_S}}\exp(2i\alpha_S)+m^2\right)}+$$

$$+\frac{m^2\exp\left[\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S y_S(n_S!)^{\frac{1}{n_S}}\exp(i\alpha_S)\right]}{\prod\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^{n_S}\left(\sum\limits_{S=1}^{3N}\xi_S^2(n_S!)^{\frac{2}{n_S}}\exp(2i\alpha_S)+m^2\right)}=\prod_{S=1}^{3N}\left\{\xi_S^{-n_S}\exp\left(\xi_S y_S(n_S!)^{\frac{1}{n_S}}\exp(i\alpha_S)\right)\right\}; \tag{24}$$

Розкладаючи експоненти у виразі (24) в ряд Тейлора маємо:

$$(\Delta_N+m^2)\,f(y_S)=$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{3N}}\prod_{S=1}^{3N}\left\{\xi_S^{-n_S}\sum_{k_S}\frac{y_S^{k_S}(n_S!)^{\frac{k_S}{n_S}}\xi_S^{k_S}}{k_S!}\int_0^{2\pi}\exp\left[i\alpha_S(k_S-n_S)\right]d\alpha_S\right\}=\prod_{S=1}^{3N}(y_S)^{n_S}\,.$$

Припустимо, що довільна функція $F(\mathbf{y})$ коректно розкладається в ряд Тейлора, а саме:

$$F(\mathbf{y})=\sum_{\mathbf{n}}A_{\mathbf{n}}\prod_{S=1}^{3N}y_S^{n_S}\,, \tag{25}$$

тоді, помножуючи обидві частини виразу (21) на коефіцієнти $A(n_{j\alpha})$ а підсумовуючи, одержимо таке:

$$(\Delta_N+m^2)\,\Phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m})=F(\mathbf{y})\,,\ \text{де: }\Phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m})=\sum_{\mathbf{n}}A_{\mathbf{n}}f_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m})\,. \tag{26}$$

Надамо функції $\Phi(\mathbf{y})$ іншого вигляду, а саме:

$$\Phi(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3N} \int_0^{2\pi} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \prod_{S=1}^{3N} \left(\lambda_S^{k_S} e^{-ik_S\beta_S}\right) \right\} \left\{ \sum_{\mathbf{n}} f_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m}) \prod_{S=1}^{3N} \left(\lambda_S^{-n_S} e^{in_S\beta_S}\right) \right\} d\boldsymbol{\beta} =$$

$$= \int_0^{2\pi} F\left(\lambda_S e^{-i\beta_S}\right) G(\mathbf{y},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\beta})\, d\boldsymbol{\beta}, \text{ де: } G(\mathbf{y},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m},\boldsymbol{\beta}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3N} \sum_{\mathbf{n}} f_{\mathbf{n}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m}) \prod_{S=1}^{3N} \left(\lambda_S^{-n_S} e^{in_S\beta_S}\right). \quad (27)$$

Якщо покласти: $F(\mathbf{y}) = u(\mathbf{y})\,\varphi(\mathbf{y})$, то з виразів (26), (27) можна отримати таке інтегральне рівняння для знаходження розв'язків рівняння (9):

$$\varphi(\mathbf{y},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m}) = \exp(i\mathbf{ym}) + \int_0^{2\pi} u\left(\boldsymbol{\lambda} e^{-i\boldsymbol{\beta}}\right) \varphi\left(\boldsymbol{\lambda} e^{-i\boldsymbol{\beta}},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m}\right) G(\mathbf{y},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi},\mathbf{m},\boldsymbol{\beta})\, d\boldsymbol{\beta}. \quad (28)$$

Результати та їх обговорення

Побудовані у вигляді функціональних рядів розв'язки (11), (12) та співвідношення (16), (17) дозволяють шукати в аналітичному вигляді хвильові функції частинок з одновимірного стаціонарного рівняння Шредінгера або радіальні складові хвильових функцій у тривимірному випадку, для окремих типів симетрії зовнішнього поля. Розв'язки (20) можна застосовувати для пошуку хвильової функції частинки в зовнішньому магнітному полі з рівняння Паулі. Отримане інтегральне рівняння (28) доволяє аналізувати енергетичний спектр та обчислювати хвильові фунції, які характеризують стан системи з багатьох частинок, шляхом ітерації знайденого інтегрального рівняння.

Висновки

Розроблений метод та отримані результати мають перспективу розвитку та практичне значення, яке полягає у тому, що їх можна застосовувати для пошуку загальних та окремих розв'язків багатовимірних лінійних диференціальних рівнянь другого порядку та їх систем в аналітичному вигляді або для дослідження асимптотики розв'язків, що є необхідною й важливою складовою частиною фундаментальних та прикладних досліджень.

ЛІТЕРАТУРА

1. Кравченко Л.П., Ментковський Ю.Л. Основи квантової механіки і статистики. – Миколаїв: МПІ, – 2006. – 236 с.
2. Авдонін К.В., Ментковський Ю.Л. Пошук розв'язків рівняння Паулі при радіально симетричній когерентно швингерівський взаємодії з речовиною // Науковий вісник Чернівецького національного університету. – 2006. вип. 303, – с.104 – 111.
3. Латышева Г.И. Дифференциальные уравнения с полиномиальными коэффициентами. – К.: Изд-во КГУ, – 1970. – 332 с.
4. Кузнецов Т.И., Ходан Е.Ю. Справочник по специальным функциям. – М.: Наука, – 1979. – 832 с.
5. Маслов В.П., Операторные методы – М., Наука, 1973. – 577 с.

Надійшла 25.11.2009