Письма в ЭЧАЯ. 2017. Т. 14, № 1(206). С. 40–57

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА. ТЕОРИЯ

ПРЕЦИЗИОННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С КУЛОНОВСКИМ И ЛИНЕЙНЫМ ЗАПИРАЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛАМИ В ИМПУЛЬСНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В. В. Андреев[1]

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель, Белоруссия

Показано, что уравнение Шредингера в импульсном представлении с линейным запирающим, кулоновским и корнельским потенциалами для состояний с нулевым орбитальным моментом может быть решено с высокой точностью (намного превосходящей другие методики) посредством специальных квадратурных формул для сингулярных интегралов.

It is shown that the Schrödinger equation in the momentum representation with the linear confining potential, Coulomb and Cornell potentials for states with zero orbital angular momentum can be solved with high accuracy (far superior to other methods) using special quadrature formulas for singular integrals.

PACS: 11.10.St; 02.60.Nm; 03.65.Ge; 12.39.Pn

ВВЕДЕНИЕ

Достоинства использования импульсного представления для решения физических задач (уравнений для связанных состояний, задач рассеяния и др.) давно привлекали внимание исследователей [1, 2]. В импульсном пространстве, в отличие от координатного, отпадает необходимость дополнительных построений, связанных с определением релятивистского оператора кинетической энергии $T(k) = \sqrt{k^2 + m_1^2} + \sqrt{k^2 + m_2^2}$. Также относительно несложно получить релятивистский потенциал взаимодействия с использованием соответствующей амплитуды упругого рассеяния частиц, составляющих систему [3], поскольку расчет изначально ведется в импульсном представлении, которое здесь возникает естественным образом.

Кроме того, при получении релятивистского обобщения потенциала взаимодействия в координатном пространстве $V(r)$ как фурье-образа амплитуды упругого рассеяния частиц, составляющих систему, возникают технические проблемы (расходимость интегралов, наличие нелокальных слагаемых). Все это влияет на точность расчетов характеристик связанных систем.

[1]E-mail: vik.andreev@rambler.ru

Однако проблема использования импульсного пространства осложняется тем, что даже потенциалы взаимодействия простейшего вида в импульсном представлении приводят к интегралам с особенностями. Поэтому точность решения для целого ряда задач (кулоновский, линейный запирающий потенциалы) была относительно невысокой (10^{-4}–10^{-6}) [4–7], хотя в координатном пространстве удается добиться более высокой точности $\sim 10^{-11}$–10^{-13} [8].

Проблема точности вычислений характеристик квантовых связанных систем носит не только академический характер. При изучении энергетических характеристик водородоподобных систем актуальным является прецизионный расчет различных поправок, так как экспериментальные измерения таких величин проводятся с высокой точностью ($\delta \sim 10^{-13}$) [9,10].

Таким образом, при вычислении характеристик квантовых связанных систем следует выделить задачу поиска новых методов расчетов и развитие математического аппарата, который позволил бы максимально упростить вычислительные схемы и добиться результатов с высокой степенью точности, необходимой для экспериментов.

Целью данной работы является разработка методов прецизионного расчета энергетических спектров уравнения Шредингера в импульсном представлении с кулоновским, линейным запирающим и корнельским потенциалами. В работе ограничимся случаем радиальных возбужденных состояний с орбитальным моментом относительного движения $\ell = 0$. Как будет показано, для данного варианта удается рассчитать энергетический спектр связанной системы с высокой точностью.

1. МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Уравнение Шредингера в импульсном представлении для центрально-симметричных потенциалов в координатном пространстве $V(r)$ после парциального разложения имеет вид

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_{n\ell}(k) + \int\limits_0^\infty V_\ell(k,k')\,\phi_{n\ell}(k')\,k'^2\,dk' = E_{n\ell}\phi_{n\ell}(k), \tag{1}$$

где $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ — приведенная масса; m_1, m_2 — массы конституэнтов связанной системы; $\mathbf{k}$ — импульс относительного движения ($|\mathbf{k}| = k$); $\phi_{n\ell}(k)$ — радиальная часть фурье-образа волновой функции; $V_\ell(k,k')$ — оператор l-й составляющей парциального разложения потенциала взаимодействия; E — энергия связи.

Однако описание связанных состояний в импульсном представлении усложняется необходимостью решения интегрального уравнения (1), содержащего сингулярные члены, тип которых определяется видом $V_\ell(k,k')$. Проиллюстрируем данное утверждение.

Кулоновский потенциал

$$V(r) = -\alpha/r \tag{2}$$

в импульсном представлении имеет вид

$$V_\ell(k,k') = -\frac{\alpha Q_\ell(y)}{\pi(kk')}, \tag{3}$$

где α — параметр потенциала.

В соотношении (3) параметр y — это комбинация импульсов

$$y = \frac{k^2 + {k'}^2}{2kk'}, \tag{4}$$

а функция $Q_\ell(y)$ — полином Лежандра 2-го рода:

$$Q_\ell(y) = P_\ell(y)\, Q_0(y) - w_{l-1}(y), \tag{5}$$

$$Q_0(y) = \frac{1}{2}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right|, \quad w_{l-1}(y) = \sum_{n=1}^{l} \frac{1}{n} P_{n-1}(y)\, P_{l-n}(y), \tag{6}$$

где $P_\ell(y)$ — полином Лежандра 1-го рода. Из (5) и (6) следует, что потенциал (3) имеет логарифмическую сингулярность в случае, если $k = k'$ $(y = 1)$.

Линейный запирающий потенциал с параметром σ:

$$V(r) = \sigma r, \tag{7}$$

в импульсном представлении запишется в виде

$$V_\ell(k, k') = \frac{\sigma Q'_\ell(y)}{\pi (kk')^2}. \tag{8}$$

С помощью (5) и (6) находим, что производная $Q'_\ell(y)$ в (8) определяется соотношением

$$Q'_\ell(y) = P'_\ell(y)\, Q_0(y) + P_\ell(y)\, Q'_0(y) - w'_{l-1}(y), \tag{9}$$

$$Q'_0(y) = \frac{1}{1-y^2} = -\left(\frac{2kk'}{k'+k}\right)^2 \frac{1}{(k'-k)^2}. \tag{10}$$

Как следует из (10), функция Q'_ℓ гиперсингулярная в случае, если $k = k'$, а следовательно, и сам потенциал $V_\ell(k, k')$ также является гиперсингулярным.

Численное решение интегрального уравнения (1) может быть сведено к задаче на собственные значения для матрицы, которая возникает при использовании квадратурных формул для интегралов, входящих в уравнение.

На первом этапе осуществляется переход от интервала интегрирования $[0, \infty]$ к «стандартному» $[-1, 1]$ с помощью замены переменных

$$\int_0^\infty f(k)\, dk = \int_{-1}^{1} f(k(t)) \frac{dk}{dt}\, dt. \tag{11}$$

Функция $k(t)$ удовлетворяет граничным условиям

$$k\,(t = -1) = 0, \quad k(t = 1) = \infty. \tag{12}$$

Среди различных возможностей в литературе чаще встречаются следующие варианты отображения области $[0, \infty]$ к «стандартной» $[-1, 1]$ [6, 7, 11–13]:

$$k(t) = \beta_0 \frac{1+t}{1-t}, \tag{13}$$

$$k(t) = \beta_0 \sqrt{\frac{1+t}{1-t}} \tag{14}$$

или

$$k(t) = -\beta_0 \ln \left| \frac{1-t}{2} \right|, \quad k(t) = \beta_0 \operatorname{tg} \left[\frac{\pi}{4}(1+t) \right], \tag{15}$$

где β_0 — некоторый параметр, имеющий размерность величины k. Он может быть использован для дополнительного регулирования скорости сходимости вычислительного процесса.

Стандартный подход основан на аппроксимации интеграла (11) посредством квадратурной формулы

$$\int\limits_0^\infty f(k)\, dk \approx \sum_{j=1}^N \tilde{\omega}_j f(k_j), \tag{16}$$

где множители $\tilde{\omega}_j$ связаны с табличными весовыми множителями ω_j для области $[-1, 1]$ соотношением $\tilde{\omega}_j = (dk/dt)_j\, \omega_j$, а величина N задает число узлов.

В итоге численное решение интегрального уравнения (1) может быть сведено к задаче на собственные значения для матрицы H_{ij}, которая возникает при использовании квадратурных формул вида (16) для интегралов:

$$\sum_{j=1}^N H(k_i, k_j)\, \phi(k_j) = \sum_{j=1}^N H_{ij}\phi_j = E^{(N)}\phi_i. \tag{17}$$

И если для $i \neq j$ задача расчета элементов H_{ij} для кулоновского и линейного запирающего потенциалов не является сложной, то при $i = j$ ($k = k'$) напрямую это сделать не удается вследствие наличия сингулярностей.

2. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ С СИНГУЛЯРНЫМИ ЯДРАМИ

2.1. Линейный запирающий потенциал. Рассмотрим методы решения уравнения с гиперсингулярным ядром с $\ell = 0$ на примере уравнения (1) с линейным запирающим потенциалом (8), т. е.

$$\left(E_{n0} - \frac{k^2}{2\mu}\right) \phi_{n0}(k) = \frac{\sigma}{\pi k^2} \int\limits_0^\infty Q_0'(y)\, \phi_{n0}(k')\, dk'. \tag{18}$$

После подстановки (10) в (18) получим в явном виде уравнение с гиперсингулярным ядром

$$\left(E_{n0} - \frac{k^2}{2\mu}\right) \phi_{n0}(k) = -\frac{4\sigma}{\pi} \int\limits_0^\infty \left(\frac{k'}{k'+k}\right)^2 \frac{1}{(k'-k)^2} \phi_{n0}(k')\, dk'. \tag{19}$$

Наиболее часто используемый метод получения решения состоит в «сокращении» сингулярности $\sim 1/(k-k')^2$ с помощью контрчлена (метод вычитания Ланде) [4,6,14–17]:

$$\int\limits_0^\infty dk\, Q_0'(y) = 0. \tag{20}$$

Тогда уравнение (19) после добавления (20) запишется в виде

$$\left(E_{n0} - \frac{k^2}{2\mu}\right)\phi_{n0}(k) = -\frac{4\sigma}{\pi}\int_0^\infty \left(\frac{k'}{k'+k}\right)^2 \frac{1}{(k'-k)^2}\left(\phi_0(k') - \phi_{n0}(k)\right)dk'. \tag{21}$$

Для расчета спектра функция $\phi_{n0}(k)$ может быть разложена по полному набору функций, например [6, 14],

$$g_i^A(k) = \frac{1}{(i/N)^2 + k^4}, \quad g_i^B(k) = \exp\left[-\frac{i^2k^2}{N}\right], \tag{22}$$

где N — максимальное число базисных функций, используемых при разложении, а $i = 1, \ldots, N$.

Другой вариант состоит в использовании квадратурных формул вида (16). В работе [6] для повышения эффективности решения предложен коррекционный метод, который включает дополнительную обработку гиперсингулярного слагаемого с целью полного сокращения сингулярности. В результате авторам [6] удалось повысить точность получения энергетического спектра с 10^{-3} (см. [6, 14]) до 10^{-6} для основного состояния ($n = 1$) и до 10^{-2}–10^{-3} для $n = 2, 3, 4$ при $N = 1400$.

В работе [7] коррекционный метод подвергнут критике и для повышения точности предложено преобразовать интегральное уравнение (19) в интегродифференциальное посредством соотношения

$$\int_0^\infty \frac{f(k,k')}{(k'-k)^2}\phi_{n0}(k)\,dk' = \int_0^\infty \frac{dk'}{(k'-k)}\frac{\partial}{\partial k'}\left[f(k,k')\phi_{n0}(k)\right], \tag{23}$$

полученного интегрированием по частям. При этом предполагается, что функция $f(k,k')$ не содержит особенностей при $k = k'$.

После использования соотношения (23) уравнение (19) принимает вид

$$\left(E_{n0} - \frac{k^2}{2\mu}\right)\phi_{n0}(k) = -\frac{4\sigma}{\pi}\int_0^\infty \frac{dk'}{(k'-k)}\left\{\frac{\partial\phi_{n0}(k')}{\partial k'} + \phi_{n0}(k')\frac{\partial}{\partial k'}\right\}\left(\frac{k'}{k'+k}\right)^2, \tag{24}$$

при этом для расчета производной от неизвестной функции $\phi_{n0}(k')$ после процедуры дискретизации с помощью квадратурных формул использовалось соотношение

$$\left\{\frac{\partial\phi(k)}{\partial k}\right\}_{k=k_i} = \sum_{j=1}^N D_{ij}\,\phi(k_j). \tag{25}$$

Элементы матрицы D_{ij} могут быть рассчитаны после разложения функции с помощью некоторого интерполяционного многочлена $G_i(t)$

$$\phi(k) \approx \sum_{i=1}^N G_i(k)\,\phi(k_i). \tag{26}$$

Данная методика позволила находить собственные значения E с точностью $\sim 10^{-6}$ при $N = 100$ для основного и радиально возбужденных состояний ($n = 1, \ldots, 4$).

2.2. Методы решения уравнения с ядром, имеющим логарифмическую сингулярность. Рассмотрим методы решения уравнения (1) с кулоновским потенциалом (3), т. е. с ядром, имеющим логарифмическую сингулярность

$$\left(E_{n\ell} - \frac{k^2}{2\mu}\right) \phi_{n\ell}(k) = -\frac{\alpha}{\pi k} \int_0^\infty Q_l(y)\, \phi_{n\ell}(k')\, k'\, dk'. \tag{27}$$

После подстановки (6) в (27) получим в явном виде уравнение

$$\left(E_{n\ell} - \frac{k^2}{2\mu}\right) \phi_{n\ell}(k) = -\frac{\alpha}{\pi k} \int_0^\infty P_\ell(y) \ln\left[\frac{k'+k}{k'-k}\right] k' \phi_{n\ell}(k')\, dk' + \\ + \frac{\alpha}{\pi k} \int_0^\infty w_{\ell-1}(y)\, k' \phi_{n\ell}(k')\, dk'. \tag{28}$$

В данном варианте, как и в случае с запирающим потенциалом, наиболее часто используемым методом является «сокращение» логарифмической сингулярности с помощью контрчлена [4, 6, 15, 16]

$$\int_0^\infty dk\, \frac{Q_0(y)}{k} = \frac{\pi^2}{2}. \tag{29}$$

Однако контрчлен (29) не совсем удобен для решения уравнения (27) при $\ell \neq 0$. Поэтому в работе [18] предложено вычитать слагаемое вида

$$S_\ell = \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{Q_\ell(y)}{P_\ell(y)} = \frac{\pi^2}{2} - \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{w_{\ell-1}(y)}{P_\ell(y)} = \frac{\pi^2}{2} - \mathcal{I}_\ell. \tag{30}$$

В соотношении (30) последний интеграл $\mathcal{I}_\ell$ предложено рассчитать для часто используемых в физических приложениях значений $\ell = 0, 1, 2, 3, \ldots, 10$. Так, например, $\mathcal{I}_0 = 0$, $\mathcal{I}_1 = 1$, $\mathcal{I}_2 = \sqrt{3/2}$ и $\mathcal{I}_4 = (8 + 5\sqrt{10})/18$ [18]. В работе [19] предлагается редуцировать $\mathcal{I}_\ell$ к интегралу вида

$$\mathcal{I}_\ell = 2\int_1^\infty \frac{dy}{y} \frac{w_{\ell-1}(y)}{P_\ell(y)\sqrt{y^2-1}} \sim \mathcal{I}_\ell^n = 2\int_1^\infty \frac{dy}{y} \frac{y^n}{P_\ell(y)\sqrt{y^2-1}}. \tag{31}$$

Интеграл $\mathcal{I}_\ell^n$ в [19] предлагается рассчитывать по формуле

$$\mathcal{I}_\ell^n = 2\sum_{k=1}^{\ell} \frac{(\xi_{k,\ell})^n}{P'_\ell(\xi_{k,\ell})} \frac{\arccos(-\xi_{k,\ell})}{\sqrt{1-\xi_{k,\ell}^2}}, \tag{32}$$

где $\xi_{k,\ell}$ — k-й нуль полинома Лежандра $P_\ell(y)$.

В данном исследовании предлагается новое обобщение контрчлена (29), максимально удобного для вычитания, позволяющее повысить точность решения по сравнению с вариантами (29) и (30):

$$\mathcal{C}_\ell = \int\limits_0^\infty dk \frac{Q_\ell(y)}{k}. \tag{33}$$

Используя интегральное представление для полинома $Q_\ell(y)$, после ряда преобразований получим аналитическое выражение для $\mathcal{C}_\ell$ в виде

$$\int\limits_0^\infty \frac{Q_\ell(y)}{k}\,dk = \left[\frac{(\ell-1)!!}{\ell!!}\right]^2 \begin{cases} \pi^2/2, & \ell = 2m, \quad m = 0,1,2\ldots, \\ 2, & \ell = 2m+1, \quad m = 0,1,2\ldots \end{cases} \tag{34}$$

В итоге уравнение (18) после добавления (34) запишется как

$$\left(E - \frac{k^2}{2\mu} + \frac{\alpha}{\pi}\mathcal{C}_\ell k\right)\phi_{n\ell}(k) = -\frac{\alpha}{\pi}\int\limits_0^\infty Q_l(y)\left(\frac{k'}{k}\phi_{n\ell}(k') - \frac{k}{k'}\phi_{n\ell}(k)\right)dk'. \tag{35}$$

Данная методика позволяет находить собственные значения $E_{n\ell}$ с точностью $\sim 10^{-6}$ для $\ell = 0$ и $\sim 10^{-5}$ для $\ell = 1$ при $N = 100$ для основного ($n = 1$) и радиально возбужденных состояний соответственно.

Как видим, максимальная возможная точность решения уравнения Шредингера в импульсном пространстве достигает $\sim 10^{-6}$ как для кулоновского, так и для линейного запирающего потенциалов, хотя в координатном пространстве удается добиться значительно высокой точности: $\sim 10^{-11}$–10^{-13} [8]. Поэтому требуются такие методы нахождения собственных значений, которые были бы сравнимы с точностью решений, получаемых в координатном пространстве.

В отличие от вышеупомянутых подходов, применяемых для решения уравнения Шредингера, главной особенностью разрабатываемого подхода, который должен повысить точность решения уравнения (1) с сингулярными потенциалами, является включение особенностей в весовые множители ω_i квадратурной формулы вида (16).

Данная идея включения особенностей в весовые множители не нова и при численном вычислении сингулярных интегралов активно используется [20–25 и др.]. В работе [26] такой подход был использован для решения уравнения Шредингера (1) с кулоновским потенциалом (логарифмическая сингулярность), что позволило повысить точность решения до $\sim 10^{-13}$–10^{-14}.

Далее рассмотрим общую методику получения таких весовых множителей с использованием интерполяционного многочлена

$$G_i(t) = \frac{P_N^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-\xi_{i,N})\,P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}, \tag{36}$$

где $\xi_{i,N}$ являются корнями многочлена Якоби

$$P_N^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N}) = 0 \quad (i = 1,2,\ldots,N). \tag{37}$$

В следующем разделе получим новые формулы для гиперсингулярных интегралов, а также расширим набор квадратурных формул для интегралов с логарифмической сингулярностью.

Из всех полиномов Якоби $P_N^{(\alpha,\beta)}(z)$ лучше всего брать полиномы с $\alpha, \beta = \pm 1/2$. Для них сходимость квадратур является максимальной по отношению к другим полиномам Якоби, кроме этого нули полиномов легко рассчитать (есть аналитические выражения), и многие интегралы для весовых множителей с сингулярностями даются относительно простыми формулами [23, 25, 27–29].

3. ПОСТРОЕНИЕ КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ ДЛЯ СИНГУЛЯРНЫХ ИНТЕГРАЛОВ

Получим квадратурную формулу для интеграла вида

$$I(z) = \int\limits_{-1}^{1} F(t)\, w(t)\, g(t, z)\, dt, \tag{38}$$

где $g(t, z)$ — функция, сингулярная при $t = z$; $F(t)$ и $w(t)$ — части ядра, которые не содержат сингулярностей для всех $-1 < t, z < 1$.

Для этого функция $F(t)$ в (38) с помощью интерполяционного многочлена (36) заменяется разложением

$$F(t) \approx \sum_{i,=1}^{N} G_i(t) F(\xi_{i,N}), \tag{39}$$

где $\xi_{i,N}$ являются корнями многочлена Якоби.

Подставляя разложение (39) в $I(z)$, получим, что квадратурная формула для интеграла принимает вид

$$I(z) \approx \sum_{i=1}^{N} \omega_i(z) F(\xi_{i,N}), \tag{40}$$

где

$$\omega_i(z) = \frac{1}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})} \int\limits_{-1}^{1} g\,(t, z)\, w(t) \frac{P_N^{(\alpha,\beta)}(t)}{t - \xi_{i,N}} dt. \tag{41}$$

Таким образом, вычисление (41) позволит найти весовые коэффициенты для квадратурной формулы (38), содержащей сингулярности. При этом важным моментом является получение аналитических выражений, поскольку только в этом случае удается повысить точность расчетов.

4. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ВИД ВЕСОВЫХ МНОЖИТЕЛЕЙ

Рассмотрим возможность аналитического вычисления весовых множителей для различных видов сингулярностей, т. е. в зависимости от вида функции $g(t, z)$.

4.1. Сингулярный интеграл Коши. Наиболее известным вариантом (38) в литературе является интеграл Коши

$$g(t,z)=\frac{1}{t-z},\quad -1<z<1.$$

Этот случай описан в большом количестве работ (см., например, [23, 25, 28]), в которых предлагаются различные варианты квадратурных формул. В этом случае можно получить формулы для весовых множителей (41) непосредственно вычислением интеграла

$$\omega_i^C(z)=\int\limits_{-1}^{1}\frac{w(t)}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}\frac{P_N^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-\xi_{i,N})(t-z)}dt. \tag{42}$$

С помощью тождества

$$\frac{1}{(t-\xi_{i,N})(t-z)}=\frac{1}{z-\xi_{i,N}}\left[\frac{1}{t-z}-\frac{1}{t-\xi_{i,N}}\right] \tag{43}$$

коэффициенты (42) приведем к виду

$$\omega_i^C(z)=\begin{cases}\dfrac{1}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}\dfrac{\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(z)-\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})}, & \text{если } z\neq\xi_{i,N},\\ \dfrac{\Pi_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}, & \text{если } z=\xi_{i,N},\end{cases} \tag{44}$$

где

$$\Pi_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\int\limits_{-1}^{1}w(t)\frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-z)}dt. \tag{45}$$

Для расчета коэффициентов $\omega_i^C(z)$ с высокой степенью точности необходимо рассчитать аналитически интеграл (45) для различных вариантов функции $w(t)$.

Наиболее известным является вариант $w(t)$ с весовой функцией полинома Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(t)$, т. е.

$$w(t)=w^{(\alpha,\beta)}(t)\equiv(1-t)^\alpha(1+t)^\beta.$$

Тогда для интеграла (45) имеем

$$\Pi_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\mathcal{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z),$$

где

$$\mathcal{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\int\limits_{-1}^{1}(1-t)^\alpha(1+t)^\beta\frac{P_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-z)}dt. \tag{46}$$

В самом общем случае для произвольных α и β функция $\mathcal{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z)$ связана с полиномами Якоби второго рода $Q_n^{(\alpha,\beta)}(z)$ соотношением

$$\mathcal{Q}_n^{(\alpha,\beta)}(z)=(-2)(z-1)^\alpha(z+1)^\beta Q_n^{(\alpha,\beta)}(z), \tag{47}$$

где

$$Q_n^{(\alpha,\beta)}(z) = 2^{\alpha+\beta+n}\frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(2n+\alpha+\beta+2)}\times$$
$$\times (z+1)^{-\beta}(z-1)^{-\alpha-n-1}{}_2F_1\left(n+1, n+\alpha+1; 2n+\alpha+\beta+2; \frac{2}{1-z}\right). \quad (48)$$

4.2. Гиперсингулярный вариант. Рассмотрим гиперсингулярный вариант интеграла (41), когда функция $g(t,z) = 1/(t-z)^2$.

Концепция расчета конечной части такого типа интегралов была впервые введена Адамаром (Hadamard J. Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations. Yale University Press, 1923) и развита в работах [27, 30, 31 и др.]. Конечная часть гиперсингулярного интеграла, обозначенная знаком «=», связана с интегралом Коши посредством уравнения [27]

$$\int\!\!\!\!\!\!= _{-1}^{1} \frac{w(t)F(t)}{(t-z)^2}\,dt = \frac{d}{dz}\left[\,\fint_{-1}^{1}\frac{w(t)F(t)}{t-z}\,dt\right], \quad -1 < z < 1. \quad (49)$$

Следовательно, весовые коэффициенты квадратурной формулы

$$\int_{-1}^{1}\frac{w(t)F(t)}{(t-z)^2}dt = \sum_{i=1}^{N}\omega_i^H(z)F(\xi_{i,N}) \quad (50)$$

связаны с коэффициентами (44) соотношением

$$\omega_i^H(z) = \frac{d}{dz}\left[\omega_i^C(z)\right]. \quad (51)$$

Тогда весовые коэффициенты для интеграла (50) можно рассчитать по формулам

$$\omega_i^H(z) = \begin{cases} \dfrac{1}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}\left\{\dfrac{\Pi_N'^{(\alpha,\beta)}(z)}{(z-\xi_{i,N})} - \dfrac{\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(z)-\Pi_N^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})^2}\right\}, & \text{если } z \neq \xi_{i,N}, \\ \dfrac{\Pi_N''^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}{2P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})}, & \text{если } z = \xi_{i,N}. \end{cases} \quad (52)$$

Отметим, что данная формула для гиперсингулярного интеграла получена впервые.

Для интеграла Коши ($g(t,z) = 1/(t-z)$) с $\alpha = -\beta = -1/2$ имеем

$$\Pi_n^{(-1/2,1/2)}(z) = \int_{-1}^{1}\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{V_n(t)}{(t-z)}dt = \pi W_n(z), \quad (53)$$

где $V_n(z)$ и $W_n(z)$ — полиномы Чебышева 3-го и 4-го рода соответственно [32] (см. п. 4.3).

Тогда квадратурная формула для гиперсингулярного интеграла имеет вид

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{F(t)}{(t-z)^2}dt \approx \sum_{i=1}^{N}\omega_i^H(z)F(\xi_{i,N}), \quad (54)$$

где

$$\omega_i^H(z) = \begin{cases} \dfrac{\pi}{V_N'(\xi_{i,N})} \left\{ \dfrac{W_N'(z)}{(z-\xi_{i,N})} - \dfrac{W_N(z)-W_N(\xi_{i,N})}{(z-\xi_{i,N})^2} \right\}, & \text{если } z \neq \xi_{i,N}, \\ \dfrac{\pi}{2} \dfrac{W_N''(\xi_{i,N})}{V_N'(\xi_{i,N})}, & \text{если } z = \xi_{i,N}. \end{cases} \tag{55}$$

Формула (55) для весовых коэффициентов позволяет рассчитать их с высокой точностью и, следовательно, может быть использована для решения уравнения Шредингера с линейным запирающим потенциалом в импульсном пространстве.

4.3. Логарифмическая сингулярность. Рассмотрим весовой коэффициент (41) для $\alpha, \beta = \pm 1/2$ с $w(t) = 1$ и

$$g(t,z) = Q_0(t,z) = \ln \left| \frac{1 - tz + \sqrt{(1-t^2)\,(1-z^2)}}{t-z} \right|, \tag{56}$$

т. е.

$$\omega_i^{Q_0}(z) = \frac{1}{P_n'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})} \int\limits_{-1}^{1} Q_0(t,z)\, \frac{P_N^{(\alpha,\beta)}(t)}{t-\xi_{i,N}}\, dt. \tag{57}$$

Аналитическое вычисление (57) можно проделать с помощью разложения для полиномов $P_N^{(\alpha,\beta)}(z)$ с $\alpha = \beta = \pm 1/2$:

$$\frac{K_N^{(\alpha,\beta)}(t) - K_N^{(\alpha,\beta)}(z)}{t-z} = 2 \sum_{j=0}^{N-1} U_{N-1-k}(z) K_j^{(\alpha,\beta)}(t) = 2 \sum_{j=0}^{N-1} K_{N-1-j}^{(\alpha,\beta)}(z) U_j(t), \tag{58}$$

где функция

$$K_N^{(\alpha,\beta)}(z) = \begin{cases} T_N(z), & \alpha = \ \beta = -1/2, \\ U_N(z), & \alpha = \ \beta = 1/2, \\ V_N(z), & \alpha = -\beta = -1/2, \\ W_N(z), & \alpha = -\beta = 1/2 \end{cases} \tag{59}$$

включает полиномы Чебышева 1–4-го родов (подробности об этих полиномах можно найти в [32]).

Нули полиномов Чебышева определяются соотношением

$$\xi_{i,N} = \cos\theta_{i,N} \quad (i = 1, \ldots, N). \tag{60}$$

Тригонометрические представления и выражения для $\theta_{i,N}$ представлены в табл. 1.

В частности для $\alpha = \beta = -1/2$ соотношение (58) приводит к разложению вида

$$\frac{T_N(t) - T_N(z)}{t-z} = 2 \sum_{k=0}^{N-1}{}' U_{N-1-k}(z) T_k(t) = 2 \sum_{k=0}^{N-1}{}'' T_{N-1-k}(z)\, U_k(t), \tag{61}$$

где символы $'$ и $''$ означают, что первое или последнее слагаемое в сумме делится пополам соответственно.

Таблица 1. **Соотношения для полиномов Чебышева**

Обозначение	Выражение	$\theta_{i,N}$
$T_N(x)$	$\cos\left[N\ \arccos(x)\right]$	$(i-1/2)\pi/N$
$U_N(x)$	$\sin\left[(N+1)\ \arccos(x)\right]/\sqrt{1-x^2}$	$i\pi/(N+1)$
$V_N(x)$	$\cos\left[(N+1/2)\ \arccos(x)\right]/\cos\left[\arccos(x)/2\right]$	$(2i-1)\pi/(2N+1)$
$W_N(x)$	$\sin\left[(N+1/2)\ \arccos(x)\right]/\sin\left[\arccos(x)/2\right]$	$(2i)\pi/(2N+1)$

Используя (58), соотношение (57) приведем к виду

$$\omega_i^{Q_0}(z) = \frac{2}{P_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})} \sum_{k=0}^{N-1} K_{N-1-k}^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N}) \int_{-1}^{1} Q_0(t,z)\, U_k(t)\, dt. \tag{62}$$

Интеграл в (62) вычисляется путем интегрирования по частям, т. е.

$$\int_{-1}^{1} Q_0(t,z) U_k(t)\, dt = \frac{\sqrt{1-z^2}}{k+1} \int_{-1}^{1} \frac{T_{k+1}(t)}{\sqrt{1-t^2}(t-z)}\, dt = \frac{\pi\sqrt{1-z^2}}{k+1} U_k(z). \tag{63}$$

В итоге квадратурная формула для интеграла с логарифмической сингулярностью вида (56)

$$\int_{-1}^{1} F(t)\, \ln\left|\frac{1-tz+\sqrt{(1-t^2)(1-z^2)}}{t-z}\right| dt \approx \sum_{i=1}^{N} \omega_i^{Q_0}(z) F(\xi_{i,N}) \tag{64}$$

содержит весовые коэффициенты

$$\omega_i^{Q_0}(z) = \frac{2\pi\sqrt{1-z^2}}{K_N'^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N})} \sum_{k=0}^{N-1} K_{N-1-k}^{(\alpha,\beta)}(\xi_{i,N}) \frac{U_k(z)}{k+1}. \tag{65}$$

5. РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО ЗАПИРАЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛА С $\ell = 0$

Уравнение Шредингера с линейным запирающим потенциалом

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_{n\ell}(k) + \frac{\sigma}{\pi k^2} \int_0^{\infty} Q_\ell'(y)\, \phi_{n\ell}(k')\, dk' = E_{n\ell}\, \phi_{n\ell}(k) \tag{66}$$

приведем к виду

$$\tilde{k}^2 \phi_{n\ell}(\tilde{k}) + \frac{1}{\pi \tilde{k}^2} \int_0^{\infty} Q_\ell'(y)\, \tilde{k}' \phi_{n\ell}(\tilde{k}')\, d\tilde{k}' = \varepsilon_{n\ell}\, \phi_{n\ell}(\tilde{k}) \tag{67}$$

с помощью замен

$$k = \beta\tilde{k}, \quad E = \frac{\beta^2}{2\mu}\varepsilon, \quad \beta = (2\mu\sigma)^{1/3}, \quad \phi_{n\ell}(\tilde{k}) = \beta^{3/2}\phi_{n\ell}(k). \tag{68}$$

Используя отображение

$$\tilde{k} = \beta_0\sqrt{\frac{1+z}{1-z}}, \quad \tilde{k}' = \beta_0\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}, \tag{69}$$

получим, что уравнение (67) преобразуется к виду

$$\frac{1}{\pi\beta_0}\left(\frac{1-z}{1+z}\right)\int\limits_{-1}^{1} Q'_\ell(y(t,z))\frac{\phi_{n\ell}(t)\,dt}{(1-t)\sqrt{1-t^2}} = \left(\varepsilon_{n\ell} - \beta_0^2\frac{1+z}{1-z}\right)\phi_{n\ell}(z). \tag{70}$$

Для случая $\ell = 0$ уравнение (70) после упрощений запишется следующим образом:

$$-\frac{1}{\pi\beta_0}(1-z)^2\int\limits_{-1}^{1}\phi_{n0}(t)\sqrt{\frac{1+t}{1-t}}\frac{dt}{(t-z)^2} = \left(\varepsilon_{n0} - \beta_0^2\frac{1+z}{1-z}\right)\phi_{n0}(z). \tag{71}$$

Таким образом, для запирающего потенциала имеем гиперсингулярное ядро $\sim 1/(t-z)^2$, и, следовательно, для численного решения необходимо использовать весовые коэффициенты (55), приведенные в п. 4.2. Функция $w(t)$ естественным образом выбирается в виде

$$w(t) = \sqrt{\frac{1+t}{1-t}}.$$

В итоге матрица для задачи на собственные значения принимает вид

$$H_{ij} = \left[\beta_0^2\delta_{ij}\left(\frac{1+\xi_{j,N}}{1-\xi_{j,N}}\right) - \frac{\omega_j^H(\xi_{i,N})}{\pi\beta_0}(1-\xi_{i,N})^2\right], \tag{72}$$

где $\xi_{i,N}$ $(z\to\xi_{i,N},\ t\to\xi_{j,N})$ — нули полинома $V_N(t)$, а матрица $\omega_j^H\,(\xi_{i,N})$ рассчитывается с помощью (55).

Для линейного запирающего потенциала при $\ell = 0$ известно, что

$$\varepsilon_{n0} = -z_n, \quad n = 1, 2, 3\ldots, \tag{73}$$

где z_n являются нулями функции Айри $\mathrm{Ai}(z)$. Поэтому имеется возможность сравнить результаты численных расчетов с матрицей (72) и точными значениями (см. табл. 2). В табл. 2 приведены значения относительной погрешности

$$\delta = \frac{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_n^{(N)}}{\varepsilon_{n0}}, \tag{74}$$

Таблица 2. **Относительная погрешность δ решения уравнения (72)** ($\beta_0 = 0{,}999992$)

N	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$
50	$3\cdot10^{-22}$	$4\cdot10^{-20}$	$3\cdot10^{-17}$	$3\cdot10^{-15}$	$8\cdot10^{-14}$	$2\cdot10^{-12}$
80	$5\cdot10^{-33}$	$2\cdot10^{-29}$	$1\cdot10^{-26}$	$3\cdot10^{-24}$	$4\cdot10^{-22}$	$3\cdot10^{-20}$
100	$2\cdot10^{-39}$	$1\cdot10^{-35}$	$1\cdot10^{-32}$	$4\cdot10^{-31}$	$5\cdot10^{-28}$	$6\cdot10^{-26}$
150	$4\cdot10^{-54}$	$8\cdot10^{-50}$	$5\cdot10^{-47}$	$1\cdot10^{-43}$	$6\cdot10^{-42}$	$6\cdot10^{-39}$

где $\varepsilon_n^{(N)}$ — энергетический спектр, полученный путем численного решения задачи на собственные значения для матрицы (72) при заданном числе узлов N. Вычисления проводились в системе Mathematica [33], при этом точность весовых коэффициентов и нулей выбиралась равной 90, чтобы определить возможную относительную погрешность решения.

6. РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ДЛЯ КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА С $\ell = 0$

Уравнение с кулоновским потенциалом

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_{n\ell}(k) - \frac{\alpha}{\pi k}\int\limits_0^\infty Q_\ell(y)k'\phi_{n\ell}(k')\,dk' = E_{n\ell}\phi_{n\ell}(k) \tag{75}$$

приведем к виду

$$\tilde{k}^2\phi_{n\ell}(\tilde{k}) - \frac{2}{\pi\tilde{k}}\int\limits_0^\infty Q_\ell(y)\tilde{k}'\phi_{n\ell}(\tilde{k}')\,d\tilde{k}' = \varepsilon_{n\ell}\phi_{n\ell}(\tilde{k}), \tag{76}$$

где

$$k = \beta\tilde{k}, \quad E_{n\ell} = \frac{\beta^2}{2\mu}\varepsilon_{n\ell}, \quad \phi_{n\ell}(\tilde{k}) = \beta^{3/2}\phi_{n\ell}(k), \quad \beta = \mu\alpha. \tag{77}$$

Используя отображение (69), получим, что уравнение (75) преобразуется к виду

$$\frac{2\beta_0}{\pi}\sqrt{\frac{1-z}{1+z}}\int\limits_{-1}^{1} Q_\ell(y(t,z))\frac{\phi_{n\ell}(t)\,dt}{(1-t)^2} = \left(\beta_0^2\frac{1+z}{1-z} - \varepsilon_{n\ell}\right)\phi_{n\ell}(z), \tag{78}$$

где

$$y(t,z) = \frac{1-tz}{\sqrt{1-t^2}\sqrt{1-z^2}}. \tag{79}$$

Тогда для $\ell = 0$ получим, что

$$\frac{2\beta_0}{\pi}\sqrt{\frac{1-z}{1+z}}\int\limits_{-1}^{1}\phi_{n0}(t)\,\ln\left|\frac{1-tz+\sqrt{(1-t^2)(1-z^2)}}{t-z}\right|\frac{dt}{(1-t)^2} = \\ = \left(\beta_0^2\frac{1+z}{1-z} - \varepsilon_{n0}\right)\phi_{n0}(z). \tag{80}$$

Рассмотрим численное решение уравнения (80) с помощью квадратурных формул. Как следует из вида уравнения, функция $w(t)$ для полиномов Якоби с $\alpha, \beta = \pm 1/2$ может быть выбрана в виде $w(t) = 1$, при этом параметры $z = \xi_{i,N}$ и $t = \xi_{j,N}$.

С помощью (65) интегральное уравнение (78) сводится к задаче на собственные значения

$$\sum_{j=1}^{N} H_{ij}\phi_{n0}(\xi_{j,N}) = \varepsilon_{n0}^{(N)}\phi_{n0}(\xi_{i,N}), \tag{81}$$

Таблица 3. **Относительная погрешность** δ **для полиномов** $V_n(t)$ **с** $w(t) = 1$

N	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$
50	$0 \cdot 10^{-90}$	$1 \cdot 10^{-40}$	$2 \cdot 10^{-21}$	$5 \cdot 10^{-12}$	$9 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-3}$
80	$0 \cdot 10^{-90}$	$1 \cdot 10^{-68}$	$5 \cdot 10^{-38}$	$1 \cdot 10^{-23}$	$5 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-9}$
100	$0 \cdot 10^{-90}$	$3 \cdot 10^{-87}$	$2 \cdot 10^{-49}$	$1 \cdot 10^{-31}$	$5 \cdot 10^{-21}$	$5 \cdot 10^{-14}$
150	$0 \cdot 10^{-90}$	$0 \cdot 10^{-90}$	$2 \cdot 10^{-78}$	$2 \cdot 10^{-52}$	$8 \cdot 10^{-36}$	$3 \cdot 10^{-26}$

Таблица 4. **Относительная погрешность** δ **для полиномов** $T_n(t)$ **с** $w(t) = 1$

N	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$
50	$0 \cdot 10^{-90}$	$8 \cdot 10^{-40}$	$1 \cdot 10^{-20}$	$1 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-3}$
80	$0 \cdot 10^{-90}$	$1 \cdot 10^{-67}$	$2 \cdot 10^{-37}$	$3 \cdot 10^{-23}$	$9 \cdot 10^{-15}$	$3 \cdot 10^{-9}$
100	$0 \cdot 10^{-90}$	$3 \cdot 10^{-86}$	$7 \cdot 10^{-49}$	$3 \cdot 10^{-31}$	$1 \cdot 10^{-20}$	$9 \cdot 10^{-14}$
150	$0 \cdot 10^{-90}$	$0 \cdot 10^{-90}$	$6 \cdot 10^{-78}$	$5 \cdot 10^{-52}$	$2 \cdot 10^{-36}$	$5 \cdot 10^{-26}$

где элементы матрицы H задаются формулой

$$H_{ij} = \beta_0 \left[\beta_0 \delta_{ij} \left(\frac{1 + \xi_{j,N}}{1 - \xi_{j,N}} \right) - \frac{2}{\pi} \frac{\omega_j^{Q_0}(\xi_{i,N})}{(1 - \xi_{j,N})^2} \sqrt{\frac{1 - \xi_{i,N}}{1 + \xi_{i,N}}} \right]. \tag{82}$$

Матрица $\omega_j^{Q_0}(\xi_{i,N})$ рассчитывается с помощью соотношения (65).

Проведем вычисления для двух наборов полиномов с $\alpha = \beta = -1/2$ (полиномы Чебышева 1-го рода $T_n(t)$) и с $\alpha = -1/2,\ \beta = 1/2$ (полиномы Чебышева 3-го рода $V_n(t)$).

В случае кулоновского потенциала известны точные собственные значения энергии, а именно, $\varepsilon_{n\ell} = -1/n^2$. В табл. 3 приведены значения относительной погрешности (74), полученные в результате численного решения в зависимости от числа узлов N. Решение уравнения (81) для полиномов Чебышева 1-го рода $T_n(t)$ дает аналогичные результаты (см. табл. 4).

Как следует из результатов, «почти» точная квадратурная формула для интеграла в уравнении Шредингера позволяет воспроизвести энергетический спектр с высокой степенью точности, намного превосходящей аналогичные вычисления [6, 7, 34].

7. РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ДЛЯ КОРНЕЛЬСКОГО ПОТЕНЦИАЛА С $\ell = 0$

Матрица H_{ij} для уравнения с корнельским потенциалом $V(r) = -\alpha/r + \sigma r$

$$\frac{k^2}{2\mu}\phi_\ell(k) - \frac{\alpha}{\pi k}\int\limits_0^\infty Q_\ell(y)\, k' \phi_\ell(k')\, dk' + \frac{\sigma}{\pi k^2}\int\limits_0^\infty Q'_\ell(y)\, \phi_\ell(k')\, dk' = E\phi_\ell(k) \tag{83}$$

с помощью (82) и (72) при $\ell = 0$ запишется в виде

$$H_{ij} = \beta_0^2 \delta_{ij} \left(\frac{1 + \xi_{j,N}}{1 - \xi_{j,N}} \right) - \frac{\omega_j^H(\xi_{i,N})}{\pi \beta_0}(1 - \xi_{i,N})^2 - \frac{\lambda \beta_0}{\pi} \frac{\omega_j^{Q_0}(\xi_{i,N})}{(1 - \xi_{j,N})^2} \sqrt{\frac{1 - \xi_{i,N}}{1 + \xi_{i,N}}}, \tag{84}$$

Таблица 5. **Величина δ для полиномов $V_N(t)$ с $\beta_0 = 0{,}99992$ и $\lambda = 1$**

N	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$
50	$4\cdot10^{-17}$	$8\cdot10^{-18}$	$1\cdot10^{-17}$	$1\cdot10^{-15}$	$1\cdot10^{-13}$	$4\cdot10^{-12}$
80	$5\cdot10^{-17}$	$1\cdot10^{-17}$	$6\cdot10^{-18}$	$4\cdot10^{-18}$	$3\cdot10^{-18}$	$3\cdot10^{-18}$
100	$4\cdot10^{-17}$	$1\cdot10^{-17}$	$6\cdot10^{-18}$	$4\cdot10^{-18}$	$3\cdot10^{-18}$	$3\cdot10^{-18}$
150	$4\cdot10^{-17}$	$1\cdot10^{-17}$	$5\cdot10^{-18}$	$4\cdot10^{-18}$	$2\cdot10^{-18}$	$2\cdot10^{-18}$

где

$$\lambda = \frac{\alpha}{(\sigma/(2\mu)^2)^{1/3}}. \tag{85}$$

В отличие от кулоновского и линейного запирающего потенциалов в данном случае точные аналитические решения отсутствуют. Поэтому численное решение в импульсном пространстве будем сравнивать с решением этого же уравнения в координатном пространстве.

Для решения уравнения в координатном пространстве используем вариационный метод решения с псевдокулоновскими пробными волновыми функциями [35]

$$\psi^C_{n\ell}(r,\beta) = N^C_{n\ell}(2\beta)^{3/2}\,(2\beta r)^\ell\,\mathrm{e}^{-\beta r}L^{2\ell+2}_n(2\beta r), \quad N^C_{n\ell} = \sqrt{\frac{n!}{(n+2\ell+2)!}}, \tag{86}$$

где $L^\ell_n(z)$ — полиномы Лагерра; числа $n, \ell \geqslant 0$. В работе [36] получены аналитические выражения для интегралов с функциями (86), возникающих в координатном пространстве. Это позволяет произвести вычисления с высокой степенью точности.

В табл. 5 представлены значения величины

$$\delta = \frac{\tilde{\varepsilon}_{n0} - \varepsilon^{(N)}_n}{\tilde{\varepsilon}_{n0}}, \tag{87}$$

где $\tilde{\varepsilon}_{n0}$ — собственные значения, полученные в координатном пространстве. Заметим, что численные расчеты с помощью (84) полностью совпадают с результатами [8], которые были проделаны с точностью 10^{-12}.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, новые квадратурные формулы (52) и (64), в которых сингулярности интегралов включены в весовые коэффициенты и «обработаны» аналитически, позволяют решать уравнение Шредингера с кулоновским, линейным запирающим и корнельским потенциалами для $\ell = 0$ в импульсном пространстве с высокой точностью. Точность расчетов на много порядков выше аналогичных вычислений в импульсном пространстве, проведенных в работах [6, 7, 15, 17, 34, 37].

Данная методика легко обобщается и для релятивистских уравнений, где потенциалы, как правило, получают в импульсном пространстве. Следовательно, разработанная методика получения энергетических спектров может быть использована для исследования и расчетов различных эффектов таких простейших квантовых систем, как водородоподобные атомы, а также и для кварковых связанных систем.

Заметим, однако, что методика, представленная в работе, дает прецизионные результаты только для варианта с $\ell = 0$. В случае, если $\ell > 0$, ядро уравнений (71) и (80) изменяется, что приводит к резкому уменьшению точности. Однако и в этом случае можно находить энергетический спектр с относительной точностью $\sim 10^{-15}$, но с помощью других квадратурных формул (что планируется показать в дальнейших работах).

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (Минск, Республика Белоруссия).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bete H. A., Salpeter E. E.* Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms. Berlin; Göttingen; Heidelberg: Springer-Verlag, 1957. P. 1242.
2. *Eyre D., Vary J. P.* Solving Momentum Space Integral Equations for Quarkonia Spectra with Confining Potentials // Phys. Rev. D. 1986. V. 34. P. 3467–3471.
3. *Lucha W., Rupprecht H., Schoberl F. F.* Relativistic Treatment of Fermion Anti-Fermion Bound States // Phys. Rev. D. 1991. V. 44. P. 242–249.
4. *Norbury J. W., Kahana D. E., Maung Maung K.* Confining Potential in Momentum Space // Can. J. Phys. 1992. V. 70. P. 86–89.
5. *Norbury J. W., Maung K. M., Kahana D. E.* Numerical Tests of the Landé Subtraction Method for the Coulomb Potential in Momentum Space // Phys. Rev. A. 1994. V. 50. P. 2075–2079.
6. *Tang A., Norbury J. W.* The Nyström Plus Correction Method for Solving Bound State Equations in Momentum Space // Phys. Rev. E. 2001. V. 63. P. 066703.
7. *Deloff A.* Quarkonium Bound-State Problem in Momentum Space Revisited // Ann. Phys. 2007. V. 322. P. 2315–2326.
8. *Kang D., Won E.* Precise Numerical Solutions of Potential Problems Using Crank–Nicholson Method // J. Comp. Phys. 2008. V. 227. P. 2970–2976.
9. *Udem T. et al.* Phase-Coherent Measurement of the Hydrogen $1S$–$2S$ Transition Frequency with an Optical Frequency Interval Divider Chain // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79, No. 14. P. 2646–2649.
10. *Liu W. et al.* High Precision Measurements of the Ground State Hyperfine Structure Interval of Muonium and of the Muon Magnetic Moment // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 711–714.
11. *Bielefeld S., Ihmels J., Pauli H.-C.* On Technically Solving an Effective QCD Hamiltonian. arXiv: hep-ph/9904241. 1999.
12. *Savkli C., Gross F.* Quark–Antiquark Bound States in the Relativistic Spectator Formalism // Phys. Rev. C. 2001. V. 63. P. 035208.
13. *Iersel M., van Burgh C. F. M., van der Bakker B. L. G.* Techniques for Solving Bound State Problems. arXiv: hep-ph/0010243. 2000.
14. *Norbury J. W., Kahana D. E., Maung K. M.* Confining Potential in Momentum Space // Can. J. Phys. 1992. V. 70, No. 1. P. 86–89.
15. *Hersbach H.* Relativistic Linear Potential in Momentum Space // Phys. Rev. D. 1993. V. 47. P. 3027–3033.
16. *Chen J.-K.* Extended Simpson's Rule for the Screened Cornell Potential in Momentum Space // Phys. Rev. D. 2012. V. 86, No. 3. P. 036013.
17. *Leitão S. et al.* Linear Confinement in Momentum Space: Singularity-Free Bound-State Equations // Phys. Rev. D. 2014. V. 90, No. 9. P. 096003.
18. *Kwon Y. R., Tabakin F.* Hadronic Atoms in Momentum Space // Phys. Rev. C. 1978. V. 18. P. 932–943.

19. *Ivanov I. A., Mitroy J.* Treatment of the Coulomb Singularity in Momentum Space Calculations // Comp. Phys. Commun. 2001. V. 134. P. 317–320.
20. *Chan Y.-S., Fannjiang A. C., Paulino G. H.* Integral Equations with Hypersingular Kernels — Theory and Applications to Fracture Mechanics // Intern. J. Engin. Science. 2003. V. 41, No. 7. P. 683–720.
21. *Bichi S. L., Eshkuvatov Z. K., Nik Long N. M. A.* An Automatic Quadrature Schemes and Error Estimates for Semibounded Weighted Hadamard Type Hypersingular Integrals // Abstract Appl. Analysis. 2014. V. 2014. P. 1–13.
22. *Chen Z., Zhou Y. F.* A New Method for Solving Hypersingular Integral Equations of the First Kind // Appl. Math. Lett. 2011. V. 24, No. 5. P. 636–641.
23. *Корнейчук А. А.* Квадратурные формулы для сингулярных интегралов // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1964. Т. 4 (дополнение к № 4). С. 64–74.
24. *Пыхтеев Г. Н.* О некоторых интерполяционных квадратурных формулах для вычисления интегралов типа Коши и сингулярных интегралов специального вида // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1971. Т. 11, № 6. С. 1586–1594.
25. *Шешко М. А.* О сходимости квадратурных процессов для сингулярного интеграла // Изв. вузов. Матем. 1976. № 12. С. 108–118.
26. *Deloff A.* Semi-Spectral Chebyshev Method in Quantum Mechanics // Ann. Phys. 2007. V. 322. P. 1373–1419.
27. *Kaya A. C., Erdogan F.* On the Solution of Integral Equations with Strongly Singular Kernels // Quart. Appl. Math. 1987. V. XLV. P. 105–122.
28. *Golberg M. A.* Numerical Solution of Integral Equations Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering. New York; London: Plenum Press, 1990. 436 p.
29. *Mason J. C., Venturino E.* A Chebyshev Polynomial Method for Line Integrals with Singularities // Adv. Comp. Math. 1999. V. 10, No. 2. P. 187–208.
30. *Hui C.-Y., Shia D.* Evaluations of Hypersingular Integrals Using Gaussian Quadrature // Intern. J. Numerical Methods in Engineering. 1999. V. 44, No. 2. P. 205–214.
31. *Kutt H. R.* On the Numerical Evaluation of Finite Part Integrals Involving an Algebraic Singularity. Pretoria: Nat. Res. Inst. for Math. Sciences, 1975.
32. *Mason J. C., Handscomb D. C.* Chebyshev Polynomials. Chapman & Hall/CRC, 2002. 335 p.
33. *Wolfram St.* The MATHEMATICA Book. Version 4. Cambridge Univ. Press: Addison-Wesley, 1999.
34. *Chen J. K.* Nyström Method for the Coulomb and Screened Coulomb Potentials // Few-Body Syst. 2013. V. 54, No. 11. P. 2081–2095.
35. *Fulcher L. P., Chen Z., Yeong K. C.* Energies of Quark–Anti-Quark Systems, the Cornell Potential, and the Spinless Salpeter Equation // Phys. Rev. D. 1993. V. 47. P. 4122–4132.
36. *Андреев В. В., Чеботарева Е. С.* Поиск критических значений параметра полурелятивистской кулоновской задачи // Пробл. физики, математики и техники. 2012. № 4(13). С. 7–9.
37. *Chen J. K.* Spectral Method for the Cornell and Screened Cornell Potentials in Momentum Space // Phys. Rev. D. 2013. V. 88. P. 076006; Erratum // Phys. Rev. D. 2014. V. 89. P. 099904.

Получено 28 января 2016 г.