СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р11 - 8701

Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев

ВЫЧИСЛЕНИЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ ФАЗОВЫХ УРАВНЕНИЙ В R -МАТРИЧНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

1975

P11 - 8701

Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Р.М.Ямалеев*

ВЫЧИСЛЕНИЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ ФАЗОВЫХ УРАВНЕНИЙ В R -МАТРИЧНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

* Лаборатория теоретической физики

Задаче о вычислении квазистационарных состояний в рамках R - матричной теории можно дать следующую формулировку /1/.

Допустим, что при r, бо́льших определенного расстояния b, взаимодействие отсутствует:

$$V = V(r)\,\theta(b-r)$$

$$\theta(r) = \begin{cases} 1 & r \geqslant 0 \\ 0 & r < 0 \end{cases} .$$

Квазистационарные состояния будем определять как решения уравнения Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2}(E_\lambda - V)\right] w_\lambda = 0 \quad (0 \le r \le b) \qquad (\mathrm{I})$$

с граничными условиями

$$w_\lambda(0) = 0 \qquad (2а)$$

$$\left(\frac{dw_\lambda}{w_\lambda\, dr}\right)_{r=b} = B\ . \qquad (2б)$$

Для численного решения уравнения (I) можно попытаться применить метод численного решения задач на собственные значения, развитый для стационарных задач /2/. Однако такой подход наталкивается на некоторые трудности.

Граничное условие (2б) содержит сингулярные точки при определенных значениях k и b. Это обстоятельство существенно затрудняет применение условия (2б) для численных расчетов, в частности, при больших осцилляциях функций $w_\lambda(k,r)$.

Вторая трудность связана с выбором корректного условия нормировки функции $w_\lambda(k,r)$.

В настоящей работе мы предлагаем довольно простой метод вычисления квазистационарных уровней энергий и волновых функций, исходя из фазового уравнения для R-матрицы. Этот подход близок по своей идее к одному из методов решения обратной задачи в рамках фазовых уравнений /3/. Однако вычисление квазистационарных состояний указанным методом, в отличие от обратной задачи, приводит к корректной задаче. С другой стороны, при этом удалось избежать вышеуказанных проблем нормировки $w_\lambda(k,r)$ и сингулярности граничного условия (2б).

Фазовое уравнение для R-матрицы

Решение уравнения Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2M}{\hbar^2}(E-V)\right]u=0\,,\qquad u(0)=0\,,$$

можно разложить в ряд по собственным функциям $w_\lambda(r)$

$$u=\sum_\lambda a_\lambda w_\lambda(r)\,,\qquad (0\le r\le b) \tag{3}$$

причем коэффициент разложения будет иметь вид

$$a_\lambda=\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{du}{dr}\right)_{r=b}\frac{w_\lambda(b)}{E_\lambda-E}\,. \tag{4}$$

Тогда формулу (3) можно преобразовать:

$$\mathcal{U}(k,r) = \left(\frac{\hbar^2}{2M}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{d\mathcal{U}}{dr}\right)_{r=b} \sum_{\lambda} \frac{\gamma_\lambda \cdot w_\lambda(r)}{E_\lambda - E}\ , \quad (0 \le r \le b) \tag{5}$$

Здесь $\gamma_\lambda = \left(\frac{\hbar^2}{2M}\right)^{\frac{1}{2}} w_\lambda(b)$. (6)

Во внешней области функцию $\mathcal{U}(k,r)$ в весьма общем случае можно представить в виде

$$\mathcal{U}(k,r) = \left(\frac{d\mathcal{U}}{dr}\right)_{r=b} \frac{1}{k}\left[\sin k(r-b) + Rk\cos k(r-b)\right], \tag{7}$$

где $R = \frac{1}{\left(\frac{d\mathcal{U}}{\mathcal{U}dr}\right)_{r=b}} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E}$. (8)

Исходя из формулы (7), так же как и для S -матрицы (см., например, /4/), можно получить фазовые уравнения для R -матрицы. С этой целью перепишем формулу (7) так, чтобы она была справедливой при любом r :

$$\mathcal{U}(k,r) = A(r)\left[\sin k(r-b) + R(r)k\cos k(r-b)\right], \quad (0 \le r < \infty), \tag{9}$$

где функции $A(r)$ и $R(r)$, соответственно, удовлетворяют уравнениям:

$$\frac{d}{dr}\left[R(r)k\right] = -\frac{V(r)}{k}\left[\sin k(r-b) + R(r)k\cos k(r-b)\right]^2$$

$$\frac{d}{dr}A(r) = -\frac{V(r)}{k}A(r)\left[\sin k(r-b)\cos\delta(r) + \cos k(r-b)\sin\delta(r)\right] \times \left[\sin\delta(r)\sin k(r-b) - \cos\delta(r)\cos k(r-b)\right], \tag{10}$$

а $\delta(r) = \operatorname{arctg}(Rk)$.

В более общем случае $L \neq 0$ достаточно произвести замену

$$\sin k(r-b) \to \mathcal{S}(r), \quad \cos k(r-b) \to \mathcal{C}(r), \tag{11}$$

где

$$\begin{gathered}\mathcal{S}_\ell(r) = \left[\frac{dF_\ell(kr)}{d(kr)}\right]_b G_\ell(kr) - \left[\frac{dG_\ell(kr)}{d(kr)}\right]_b F_\ell(kr) \\ \mathcal{C}_\ell(r) = \left[G_\ell(kb)F_\ell(kr) - F_\ell(kb)G_\ell(kr)\right],\end{gathered} \tag{12}$$

а функции $F_\ell(kr)$ и $G_\ell(kr)$ - регулярное и нерегулярное (при $r=0$) решения уравнения свободного движения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] V_\ell(kr) = 0. \tag{13}$$

При резонансных значениях энергии E_λ

$$R(b, E_\lambda) = \infty .$$

Это условие мы и будем применять для определения квазистационарных состояний. При этом нелинейное функциональное уравнение для определения $w_\lambda^\ell(kr)$ и E_λ будет иметь вид

$$\begin{gathered}k \cdot R(0,k) = \frac{F_\ell(kb)}{\left[\frac{d}{d(kr)} F_\ell(kr)\right]_{r=b}} \\ \frac{d}{dr}\left[R(r,k)\cdot k\right] = -\frac{V}{k}\left[\mathcal{S}_\ell(r) + R(r,k)\cdot k\,\mathcal{C}_\ell(r)\right]^2 \\ R(b,k) = \infty .\end{gathered} \tag{14}$$

Для удобства вычислений произведем замену

$$\operatorname{tg}\delta_\ell(r,k) = R(r)\cdot k .$$

Тогда окончательный вид уравнения для определения квазистационарных состояний запишется так:

$$\delta_\ell(0,\kappa) = \operatorname{arctg}\left\{\frac{F_\ell(\kappa b)}{\left[\frac{d}{d(\kappa\tau)}F_\ell(\kappa\tau)\right]_{\tau=b}}\right\}$$

$$\frac{d}{d\tau}\delta_\ell(\tau,\kappa) = -\frac{V(\tau)}{\kappa}\left[\mathcal{J}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]^2 \qquad (15)$$

$$\delta_\ell(b,\kappa) = (n+\tfrac{1}{2})\pi.$$

Решив уравнения (15), мы можем определить γ_λ и w_λ согласно формулам (6) и (9).

Метод решения

Для решения уравнений (15) применим непрерывный аналог метода Ньютона /3/. Согласно этому подходу, вводится непрерывный параметр t $(0 \le t < \infty)$, от которого зависят искомые величины в уравнении (15) $\delta \to \delta(t)$, $\kappa \to \kappa(t)$, а задача (15) заменяется эволюционным уравнением

$$v_\ell(0,\kappa) - \frac{d}{d\kappa}\operatorname{arctg}\left\{\frac{F_\ell(\kappa b)}{\left[\frac{d}{d(\kappa\tau)}F_\ell(\kappa\tau)\right]_{\tau=b}}\right\}\cdot\mu =$$

$$= -\left\{\delta_\ell(0,\kappa) - \operatorname{arctg}\left[\frac{F_\ell(\kappa b)}{\left[\frac{d}{d(\kappa\tau)}F_\ell(\kappa)\right]_{\tau=b}}\right]\right\}$$

$$\frac{d v_\ell(\tau,\kappa)}{d\tau} + V(\tau)\frac{d}{d\kappa}\left\{\frac{1}{\kappa}\left[\mathcal{J}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]^2\right\}\cdot\mu = \qquad (16)$$

$$-\left\{\frac{d}{d\tau}\delta_\ell(\tau,\kappa) + \frac{V(\tau)}{\kappa}\left[\mathcal{J}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]^2\right\}$$

$$v_\ell(b,\kappa) = -\left(\delta_\ell(b,\kappa) - (n+\tfrac{1}{2})\pi\right),$$

где

$$\vartheta_\ell\left(\tau,\kappa(t)\right)=\frac{d}{dt}\delta_\ell\left(\tau,\kappa(t)\right),\quad \mu=\frac{d}{dt}\kappa. \qquad (17)$$

Дискретизация эволюционной задачи

Дискретную аппроксимацию эволюционного уравнения (16) по параметру t можно реализовать на основе метода Эйлера. Полуось $0\le t<\infty$ разбивается узловыми точками t_i ($i = 0,1,2,\dots$) с переменным шагом τ_i .

$$t_{i+1}=\tau_i+t_i,\quad t_0=0.$$

В дальнейшем, для кратности, в обозначении величин, зависящих от t , будем использовать индекс i при $t=t_i$, опуская запись самого аргумента.

Выражения (17) заменим разностными аналогами

$$\begin{aligned}\kappa_{i+1}&=\kappa_i+\tau_i\mu_i,\\ \delta_{i+1}&=\delta_i+\tau_i\vartheta_i.\end{aligned} \qquad (18а)$$

Схему приближенного решения эволюционного уравнения (16) для задачи (15) методом Эйлера можно описать следующим образом. Предположим, что при $t=t_i$ значения κ_i и $\delta_i(\tau,\kappa)$ известны. Тогда мы приходим к рассмотрению однопараметрического семейства уравнений с параметрами μ_i относительно функций $\vartheta_i(\tau,\kappa)$, в которое транслируется исходная задача (15). Функцию $\vartheta_i(\tau,\kappa)$ можно представить в виде

$$\vartheta_i(\tau,\kappa)=\overset{(1)}{\vartheta_i}(\tau,\kappa)+\mu_i\overset{(2)}{\vartheta_i}(\tau,\kappa), \qquad (18б)$$

где функции $v_i^{(1)}(\tau,\kappa)$ и $v_i^{(2)}(\tau,\kappa)$ являются решениями задачи

$$v_i^{(1)}(0,\kappa) = -\left\{\delta_i(0,\kappa) - \frac{d}{d\kappa}\,\mathrm{arctg}\,\frac{F_\ell(\kappa b)}{\left[\frac{d}{d(\kappa\tau)}F_\ell(\kappa\tau)\right]_{\tau=b}}\right\} \tag{19а}$$

$$\frac{d}{d\tau}v_i^{(1)}(\tau,\kappa) + \frac{2V(\tau)}{\kappa}\left[\mathcal{S}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]\left[-\mathcal{S}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell\right]v_i^{(1)}(\tau,\kappa) =$$
$$= -\left\{\frac{d}{d\tau}\delta_i(\tau,\kappa) + \frac{V(\tau)}{\kappa}\left[\mathcal{S}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]^2\right\}$$

$$v_i^{(2)}(0,\kappa) = \frac{d}{d\kappa}\,\mathrm{arctg}\left\{\frac{F_\ell(\kappa b)}{\left[\frac{d}{d(\tau\kappa)}F_\ell(\kappa\tau)\right]_{\tau=b}}\right\}$$

$$\frac{d}{d\tau}v_i^{(2)}(\tau,\kappa) - \frac{V}{\kappa^2}\left[\mathcal{S}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]^2 + \frac{2V}{\kappa}\left[\mathcal{S}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell\right]\times$$
$$\times\left[-\mathcal{S}_\ell(\tau)\sin\delta_\ell + \mathcal{C}_\ell(\tau)\cos\delta_\ell\right]v_i^{(2)}(\tau,k) = 0 \tag{19б}$$

$$v_i^{(1)}(b,\kappa) + \mu_i v_i^{(2)}(b,\kappa) = -\left(\delta_\ell(b,\kappa) - (n+\tfrac{1}{2})\pi\right). \tag{20}$$

Решив уравнения (19а – 19б) и определив из условия (20) μ_i, можно определить функцию $v_i(\tau,\kappa)$. Следовательно, при заданных κ_i и $\delta_i(\tau,\kappa)$, функция $v_i(\tau,\kappa)$ полностью определена соотношениями (18б) и (19а–19б). Далее, пользуясь формулой (18а), можно вычислить при $t_i = t_{i+1}$ значения κ_{i+1} и $\delta_{i+1}(\tau,\kappa)$. Поскольку начальные значения κ_0 и $\delta_0(\tau,\kappa)$ при $t = t_0$ известны, процесс вычисления κ_i, $\delta_i(\tau,\kappa_i)$ с помощью формулы (18а)–(19б) полностью определен для всех i.

Выбор начальных собственных функций и энергий

При решении нелинейных задач физики с помощью непрерывного аналога метода Ньютона для построения пробных функций мы часто можем использовать уже имеющуюся информацию о приближенных решениях задачи. Подобную информацию можно получить различными способами в зависимости от содержания и постановки конкретной задачи. В данном случае для начального определения квазистационарных уровней энергии и волновых функций имеется несколько альтернативных подходов. Однако мы ограничимся рассмотрением одного, наиболее простого и, вместе с тем, эффективного способа нахождения начальных функций для нашей итерационной процедуры.

Суть метода заключается в приближенном определении фазы в зависимости от волнового числа K и потенциала $V(r)$ на основе известных решений для потенциала прямоугольной формы. Если, как показано на рис.I, потенциал разбить на прямоугольники с площадями, равными $V(r_i)h_i$, то ясно, что на каждом из таких участков волновая функция приобретает, соответственно, фазу $\delta_i(k)=\sqrt{k^2-V(r_i)}\,h_i$.

Тогда суммарная фаза примет вид

$$\delta_\Sigma = \sum_i \sqrt{k^2-V(r_i)}\,h_i$$

или в пределе $h_i \to 0$ получим

$$\delta(k) = \int_0^b \sqrt{k^2-V(r)}\,dr. \tag{21}$$

В случае произвольного L имеем:

$$\delta_\ell(k) = \operatorname{arctg}\left(\frac{F_\ell(P)}{\frac{d}{dP}F_\ell(P)}\right), \tag{22}$$

где $P = \int\limits_0^b \sqrt{k^2 - V(r)}\, dr$.

Соответствие между приближенными значениями k_λ, определенными из (2I)-(22), и точными, определенными из уравнения (I5), приведены в Табл.I.

Обсуждение результатов вычислений

При стремлении параметра диффузности α к нулю потенциал Саксона-Вудса

$$V(r) = \frac{V_0}{\left[1 + \exp\left\{\frac{(r-R_0)}{\alpha}\right\}\right]}$$

постепенно приближается к прямоугольной форме с шириной R_0 и глубиной V_0. В таблице 2 сравниваются уровни энергии прямоугольной ямы и потенциала Саксона-Вудса при α =0.0000I. Здесь же исследуется зависимость расположения уровней от параметра b. Из данных таблицы 2 видно, что,как для прямоугольной ямы, так и для ямы с диффузной границей, расположения уровней сильно зависит от параметра b. Это означает, что в реальном случае при описании экспериментальных данных в рамках формализма R -матрицы расположение уровней энергий квазистационарных состояний несет в себе определенную информацию о радиусах взаимодействия ядерных систем.

Таблица I.

n	$L = 0$		$L = I$	
	Точные K_λ	Приближенные K_λ	Точные K_λ	Приближенные K_λ
I.	0.62709	0.57312	I.6I257	I.6053I
2.	3.0I898	3.0I67I	3.97923	3.98234
3.	5.I6295	5.I6203	6.I4895	6.I4882
4.	7.27786	7.27766	8.278I3	8.27765

b = I,5 фм; V_0 = -30.0; α = 2.0; R_0 = I.0

Таблица 2

n	K_λ для прямоугольной ямы	K_λ для потенциала Саксона-Вудса
	$b = 0.475$	
0	3.08544	3.08938
I	9.84910	9.85023
	$b = 0.525$	
0	2.74530	2.76905
I	8.89665	8.90345
	$b = 3.0$	
0	0.51223	0.51177
I	I.54097	I.53992
2	2.57345	2.57294
3	3.63286	3.6325I
4	4.68708	4.6868I
5	5.73879	5.73858
6	6.78915	6.78897
7	7.83868	7.83852
8	8.88766	8.88753

$V_0 = -30.0; \ \alpha = 0.0000I; \ R_0 = 0.5 \quad L = 0$

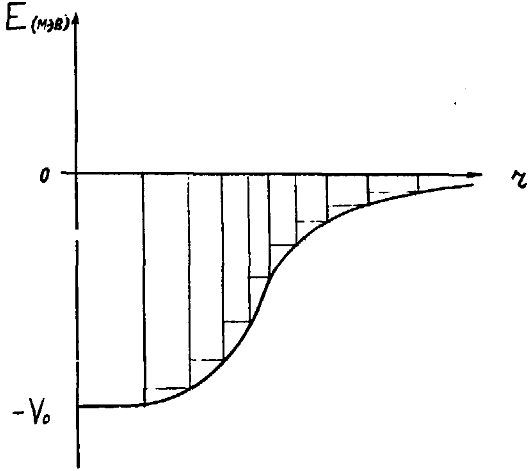

Рис.1

Л И Т Е Р А Т У Р А

I. Г.Брейт. Теория резонансных ядерных реакций. М., ИЛ, 1961.

2. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comput. Phys.13, (1973) 1.

3. Е.П.Жидков, Г.И.Макаренко, И.В.Пузынин. Непрерывный аналог метода Ньютона в нелинейных задачах физики. ЭЧАЯ, 4, I, I27 (I973).

4. В.В.Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, I968;

Ф.Калоджеро. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М., Мир, I972.

Рукопись поступила в издательский отдел
I7 марта I975 года.