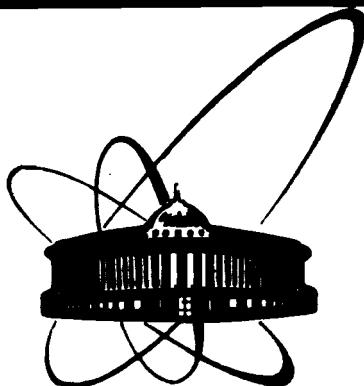


89-643



**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

Ж 306

P11-89-643

Т. Жанлав, И. В. Пузынин

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ  
С КОМПЛЕКСНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ**

**1989**

Рассмотрим задачу рассеяния с комплексным потенциалом

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \kappa^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V_{\text{эфф}} \right) u = 0, \quad (1)$$

$$|u| \sim r^{\ell+1}, \quad r \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$u \sim \sin \left( \kappa r - \frac{e\pi}{2} + \delta_\ell \right), \quad r \rightarrow \infty, \quad (3)$$

где  $V_{\text{эфф}} = V(r) + i W(r)$ .

Здесь функции  $V(r)$  и  $W(r)$  могут иметь особенность в точке  $r=0$  и исчезают при  $r \rightarrow \infty$ . Как известно<sup>/1/</sup>, мнимая добавка к потенциалу  $V(r)$  приводит к появлению мнимой части сдвига фазы  $\delta_\ell$ , т.е.

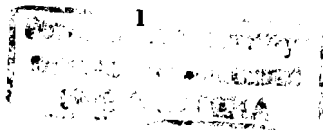
$$\delta_\ell = \delta_\ell^{(1)} + i \delta_\ell^{(2)}.$$

Задача состоит в нахождении фазы рассеяния  $\delta_\ell$  при заданных энергии столкновения  $\kappa^2$  и потенциале  $V_{\text{эфф}}$ . Отметим, что задача (1)-(3) часто встречается в теории ядерных реакций<sup>/1,2/</sup>, и разработка численных методов ее решения представляет большой интерес. В работе<sup>/3/</sup> были предложены метод сведения задачи рассеяния с действительным потенциалом к нелинейной краевой задаче и численный алгоритм ее решения. В данной работе рассматривается естественное обобщение результатов из<sup>/3/</sup> для задачи (1)-(3).

#### I. Переход к нелинейной краевой задаче

С учетом вида комплексного потенциала  $V_{\text{эфф}}$  и волновой функции  $u = u_1 + i u_2$  уравнение (1) распадается на систему двух уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \kappa^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V \right) u_1 + W u_2 &= 0, \\ \left( \frac{d^2}{dr^2} + \kappa^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V \right) u_2 - W u_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$



Из (2) ясно, что  $u_1$  и  $u_2$  стремятся к нулю при  $z \rightarrow 0$ . Их скорость стремления к нулю вблизи точки  $z=0$  можно установить следующим образом. Вблизи точки  $z=0$  положим

$$V \sim z^q \bar{v}_0, \quad W \sim z^{\bar{q}} \bar{w}_0,$$

где  $q, \bar{q}$  — целые числа, не меньше  $-1$ . Тогда решение  $u_1, u_2$  можно представить<sup>/4/</sup> в виде

$$u_1 \sim z^s (1 + a_1 z + \dots), \\ u_2 \sim z^t (1 + b_1 z + \dots).$$

Подставляя их в систему (4), легко получаем

$$s = t = \ell(\ell + 1).$$

Таким образом, имеем

$$u_1, u_2 \sim z^{\ell+1}, \quad z \rightarrow 0. \quad (5)$$

Далее, по вполне понятным соображениям мы включим в асимптотику (3) следующий ее член:

$$u \sim \sin(kz - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell) + \rho \cdot \cos(kz - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell), \quad z \rightarrow \infty, \quad (3')$$

где  $\rho = \ell(\ell + 1) / 2kz$ .

Согласно свойствам функции Риккати-Бесселя<sup>/5/</sup>, остаточный член в асимптотическом выражении (3') имеет порядок  $O(\rho^2)$ .

Таким образом, выделяя вещественную и мнимую части из асимптотики (3'), мы имеем

$$u_1 \sim ch \delta_\ell^{(2)} (\sin \beta_\ell + \rho \cos \beta_\ell), \quad (6)$$

$$u_2 \sim sh \delta_\ell^{(2)} (\cos \beta_\ell - \rho \sin \beta_\ell), \quad z \rightarrow \infty,$$

$$\beta_\ell = kz - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell^{(1)}.$$

Неизвестные величины  $\delta_\ell^{(1)}$  и  $\delta_\ell^{(2)}$  исключим последовательно из условия (6). Сначала производим исключение из (6) неизвестной  $\delta_\ell^{(2)}$ , в результате чего получаем

$$k d u_1 - u_1' = 0, \quad (7)$$

$$(k/d) u_2 + u_2' = 0, \quad z \rightarrow \infty,$$

где

$$d = \frac{\cos \beta_\ell - \rho \sin \beta_\ell}{\sin \beta_\ell + \rho \cos \beta_\ell}.$$

С другой стороны, из условия (6) также можно исключить  $\delta_\ell^{(1)}$ . В результате мы имеем

$$u_1'^2 + k^2 u_1^2 - k^2 ch^2 \delta_\ell^{(2)} = 0, \quad (8)$$

$$u_2'^2 + k^2 u_2^2 - k^2 sh^2 \delta_\ell^{(2)} = 0, \quad z \rightarrow \infty.$$

Отметим, что условия (7) и (8) являются независимыми друг от друга, хотя оба они следуют из одного и того же условия (6). В свою очередь, величины  $d$  и  $\delta_\ell^{(2)}$  исключаются соответственно из условий (7) и (8).

Таким образом, мы окончательно имеем

$$u_1'^2 + k^2 u_1^2 - (u_2'^2 + k^2 u_2^2) - k^2 = 0, \quad (9)$$

$$k^2 u_1 u_2 + u_1' u_2' = 0, \quad z \rightarrow \infty.$$

Отметим, что условия (7), (8) и (9), вытекающие из (6), имеют такую же точность, что и (6) или (3'). Итак, мы перешли от задачи (I)-(3) к нелинейной краевой задаче (4), (5), (9). Нелинейное условие (9) является обобщением для задачи рассеяния с комплексным потенциалом условия (4) в<sup>/3/</sup>.

## 2. Вычисление фазы рассеяния

Предположим, что нелинейная краевая задача (4), (5), (9) решена. Тогда, используя значение волновой функции  $u = (u_1, u_2)$  в достаточно удаленной точке  $z$ , можно найти фазу рассеяния. Для этого используются условия (6). Мы приведем одну из возможных формул:

$$\operatorname{tg} \delta_\ell^{(1)} = \frac{\operatorname{tg} \beta_\ell - \operatorname{tg}(kz - \frac{\ell\pi}{2})}{1 + \operatorname{tg} \beta_\ell \cdot \operatorname{tg}(kz - \frac{\ell\pi}{2})},$$

$$\operatorname{tg} \delta_\ell^{(2)} = \operatorname{tg} \left( \ln \frac{\sqrt{u_1'^2 + k^2 u_1^2} + \sqrt{u_2'^2 + k^2 u_2^2}}{k} \right), \quad (10)$$

$$\operatorname{tg} \beta_\ell = \frac{1 - \rho \bar{d}}{\bar{d} + \rho}; \quad \bar{d} = \frac{u_1'}{k u_1}, \quad z = R \rightarrow \infty.$$

При выводе формулы для  $\text{tg } \delta_{\ell}^{(2)}$  мы предполагали, что  $\delta_{\ell}^{(2)} \geq 0$ . Это, конечно, не ограничивает общности, так как если тройка  $\{V_{\text{эфф}}, u, \delta\}$  является решением задачи (I)-(3), то тройка  $\{V_{\text{эфф}}^*, u^*, \delta^*\}$  тоже будет решением задачи (I)-(3). Здесь \* - знак комплексной сопряженности.

### 3. Численное решение нелинейной краевой задачи

Запишем нелинейную краевую задачу (4), (5), (9) в виде функционального уравнения

$$\Phi(u) = 0, \quad (\text{II})$$

где

$$\Phi(u) = \begin{cases} \Phi_1(u) \equiv (A - WB)u, \\ \Phi_2(u) = u(0), \quad z=0, \\ \Phi_3(u) \equiv \begin{pmatrix} u_1'^2 + \kappa^2 u_1'^2 - (u_2'^2 + \kappa^2 u_2'^2) - \kappa^2 \\ \kappa^2 u_1 u_2 + u_1' u_2' \end{pmatrix}, \quad z=R \rightarrow \infty, \end{cases}$$

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dz^2} - \bar{V} & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dz^2} - \bar{V} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{V} = \kappa^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} - V(z), \quad u = (u_1, u_2)^T.$$

Как известно<sup>/6,7/</sup>, одним из эффективных методов решения нелинейной задачи является непрерывный аналог метода Ньютона, эффективность которого продемонстрирована в различных задачах. Согласно этому методу, с помощью введения непрерывного параметра  $0 \leq t < \infty$  рассматривается эволюционная задача Коши

$$\Phi'_u(u(t)) \frac{du(t)}{dt} = -\Phi(u(t)), \quad (\text{I2})$$

$$u(t=0) = u_0,$$

где  $\Phi'_u$  - производная Фреше оператора  $\Phi$ . При выполнении условия гладкости оператора  $\Phi$  в окрестности искомого изолированного решения  $u_*$  выполняется соотношение<sup>/6,7/</sup>

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|u(t) - u_*\| = 0. \quad (\text{I3})$$

В свою очередь задача (I2) численно решается, например, методом Эйлера на сетке  $\{t_n\}$  с узлами  $t_{n+1} = t_n + \tau_n \quad n=0, 1, \dots$

$$\Phi'_u(u_k) V_k = -\Phi(u_k), \quad (\text{I4})$$

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k V_k, \quad k=0, 1, \dots \quad (\text{I5})$$

Линейная дифференциальная задача (I4) численно решается с помощью какого-либо сеточного метода, имеющего точности  $O(h^\gamma)$ , где  $\gamma > 0$  - порядок точности схемы,  $h = \max h_i$  - шаги сетки  $\Delta_N$ , построенной на интервале  $[0, R]$ ,  $R$  - большое число. С целью получения решения с высокой точностью и упрощения вычислительного процесса мы применим модификацию непрерывного аналога метода Ньютона, которая подробно описана в<sup>/3/</sup> для одноканальной задачи рассеяния. Приведем здесь лишь окончательный вид итерационного процесса

$$\begin{cases} (A^{(2)} - WB)V_n = -(A^{(2)} - WB)u_n - (A^{(4)} - A^{(2)})(u_n + g_n V_{n-1}), \\ V_n = -u_n, \quad z=0, \\ u_{1n}' V_{1n}' + \kappa^2 u_{1n} V_{1n} - (u_{2n}' V_{2n}' + \kappa^2 u_{2n} V_{2n}) = d_{1n}, \\ \kappa^2 u_{2n} V_{1n} + u_{2n}' V_{1n}' + \kappa^2 u_{1n} V_{2n} + u_{1n}' V_{2n}' = d_{2n} \end{cases}, \quad z=R,$$

$$d_{1n} = (\kappa^2 + u_{2n}^2 + \kappa^2 u_{2n}'^2 - u_{1n}^2 - \kappa^2 u_{1n}'^2)/2, \quad d_{2n} = -\kappa^2 u_{1n} u_{2n} - u_{1n}' u_{2n}'$$

где  $g_n = 1 - e^{-\tau_n}$  - функция включения.

$$u_{n+1} = u_n + \tau_n V_n, \quad n=0, 1, \dots \quad (\text{I7})$$

$\tau_n$  - итерационный параметр, который выбирается из принципа уменьшения невязки<sup>/8/</sup>. Итерационные процессы (I6), (I7) продолжаются до выполнения неравенства

$$\|r_n\|_{C(n)} \leq \varepsilon, \quad (\text{I8})$$

$\varepsilon$  - заданное малое число и  $r_n$  - невязка уравнения, т.е.

$$r_n = (A^{(4)} - WB) u_n.$$

Очевидно, выбор  $R$  в (16), кроме поведения убывания потенциала  $V_{эфф}$ , зависит еще от величин  $l$  и  $k$ , поскольку в основе метода мы полагали, что

$$\rho = \frac{l(l+1)}{2kR} \ll 1. \quad (19)$$

#### 4. Численные эксперименты и обсуждение

С целью проверки метода рассматриваются несколько тестовых примеров с потенциалами:

$$V_{эфф} = -e^{-2z}/z - (0,5e^{-z} + e^{-2z}) - i(0,25e^{-4z} + 2e^{-6z}), \quad (20)$$

$$V_{эфф} = -e^{-2z}/z - \frac{4}{(z^2+2)^2} - i(e^{-1,5z} - e^{-2z})/z, \quad (21)$$

$$V_{эфф} = -2e^{-z}. \quad (22)$$

Таблицы 1 и 2 соответствуют потенциалам (20) и (21) (в круглых скобках указан десятичный порядок числа).

Таблица 1

k	l	Известные результаты <sup>/9/</sup>		Наши результаты (R=30, h=0,05)	
		$tg \delta_l^{(1)}$	$tg \delta_l^{(2)}$	$tg \delta_l^{(1)}$	$tg \delta_l^{(2)}$
I	0	0,670(0)	0,659(-1)	0,67108	0,4548(-1)
	1	0,162(0)	0,168(-2)	0,16195	0,1638(-2)
	2	0,553(-1)	0,630(-4)	0,5477(-1)	0,6260(-4)
	3	0,213(-1)	0,288(-5)	0,2631(-1)	0,2895(-5)
I,5	0	0,552(0)	0,579(-1)	0,55240	0,4435(-1)
	1	0,193(0)	0,397(-2)	0,19257	0,3829(-2)
	2	0,830(-1)	0,319(-3)	0,8668(-1)	0,3167(-3)
	3	0,426(-1)	0,293(-4)	0,4238(-1)	0,2933(-4)
2	0	0,472(0)	0,526(-1)	0,47246	0,4297(-1)
	1	0,200(0)	0,650(-2)	0,20021	0,6246(-2)
	2	0,103(0)	0,850(-3)	0,10382	0,8415(-3)
	3	0,582(-1)	0,121(-3)	0,5789(-1)	0,1205(-3)
3	0	0,372(0)	0,444(-1)	0,37180	0,3897(-1)
	1	0,193(0)	0,107(-1)	0,19263	0,1036(-1)
	2	0,117(0)	0,253(-2)	0,11659	0,2491(-2)
	3	0,756(-1)	0,610(-3)	0,7598(-1)	0,6067(-3)

Из таблицы 2 видно, что с увеличением  $l$  точность наших результатов уменьшается, поскольку для них величина  $\rho$  сравнительно большая. Например, при  $l=10$  имеем  $\rho \approx 0,2$ . Для того, чтобы улучшить результаты, необходимо увеличить  $R$ .

Таблица 2 (k=3)

R	l	Известные результаты <sup>/9/</sup>		Наши результаты (h=0,05)	
		$tg \delta_l^{(1)}$	$tg \delta_l^{(2)}$	$tg \delta_l^{(1)}$	$tg \delta_l^{(2)}$
30	0	0,401(0)	0,501(-1)	0,40112	0,4318(-1)
	1	0,230(0)	0,337(-1)	0,23078	0,3140(-1)
	2	0,149(0)	0,218(-1)	0,14900	0,2132(-1)
	3	0,985(-1)	0,137(-1)	0,9893(-1)	0,1355(-1)
	4	0,660(-1)	0,844(-2)	0,6587(-1)	0,8399(-2)
	5	0,452(-1)	0,515(-2)	0,4764(-1)	0,5143(-2)
90	6	0,317(-1)	0,313(-2)	0,3171(-1)	0,3122(-2)
	7	0,229(-1)	0,189(-2)	0,2309(-1)	0,1886(-2)
	8	0,169(-1)	0,114(-2)	0,1750(-1)	0,1137(-2)
	9	0,128(-1)	0,683(-3)	0,1414(-1)	0,6829(-3)
	10	0,985(-2)	0,410(-3)	0,1249(-1)	0,4104(-3)

Из таблиц 1 и 2 видно, что полученные численные результаты в общем хорошо согласуются с данными в работе<sup>/9/</sup>. Исключение составляет значение  $tg \delta_0^{(2)}$  при  $l=0$ . Это объясняется тем, что при малых  $l$  полученная система линейных алгебраических уравнений в схеме (16) может быть плохо обусловлена, и за счет этого происходит потеря точности. Об этом говорит таблица 3 для потенциала (20), и в этом случае необходима специальная организация вычислений.

$$tg \delta_l^{(1)}$$

Таблица 3 (k=1)

l	h=0,1	h/2	h/4	$\sigma$
0	0,66885828	0,67108304	0,67105235	3,90
1	0,16196416	0,16194756	0,16194528	7,28
2	0,054771462	0,054774558	0,054774759	15,40
3	0,026306992	0,026309546	0,026309707	15,86

Очевидно, что предлагаемый метод применим для задачи рассеяния с действительным потенциалом. Численные результаты для потенциала (22) приведены в таблице 4 и хорошо согласуются с результатами в<sup>/3/</sup>.

Таблица 4. Значения  $\operatorname{tg} \delta_0^{(1)}$

K	$h = 6\pi/400$	$h/2$	$h/4$	$\sigma$
1	0,98951754	0,98951768	0,98951768	-
2	0,48911457	0,48911928	0,48911958	15,70
3	0,32880828	0,32884069	0,32884273	15,88
4	0,24769971	0,24783076	0,24783897	15,96
5	0,19839949	0,19879096	0,19881550	15,95

где  $\sigma = \left| \frac{\operatorname{tg} \delta_0^{(1)}(h) - \operatorname{tg} \delta_0^{(1)}(h/2)}{\operatorname{tg} \delta_0^{(1)}(h/2) - \operatorname{tg} \delta_0^{(1)}(h/4)} \right|$ .

Аппроксимация задачи (16) осуществлялась методом сплайн-функций /10/ на равномерной сетке. Требовалось примерно 9-28 итераций для достижения заданной точности (18) с  $\varepsilon = 10^{-7} \sim 10^{-8}$ . В качестве начальной функции бралась синусоида  $u_0 = \sin kx$ .

Предлагаемый метод может быть эффективно применен для задачи рассеяния в тех случаях, когда в параметры рассеяния вносят вклад лишь несколько первых парциальных волн.

Литература

1. Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. - М.: Наука, 1988.
2. Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях. - М.: ИЛ, 1960.
3. Жанлав Т., Пузынин И.В., Ракитский А.В. ОИЯИ, РИ-88-823, Дубна, 1988.
4. Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. - М.: Мир, 1967.
5. Справочник по специальным функциям. - М., Наука, 1979.
6. Гавурин М.К. Изв. вузов. Математика, 1958, 5/6/, с.18.
7. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. - ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып. I, с.127.
8. Пузынин И.В. Автореферат докторской диссертации ОИЯИ, ИИ-12016, Дубна, 1978.
9. Staszewska G. J. Phys. B: At. Mol. Phys. 22. (1989) p.913-929.
10. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел  
II сентября 1989 года.

Жанлав Т., Пузынин И.В.

P11-89-643

Численное решение задачи рассеяния  
с комплексным потенциалом

Разработан численный метод решения задачи рассеяния для радиального уравнения Шредингера с комплексным потенциалом. Дана постановка этой задачи как нелинейной граничной задачи. Для численного решения последней применены аппроксимация методом сплайн-функций и итерационная схема обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Zhanlav T., Puzynin I.V.

P11-89-643

Numerical Solution to the Scattering  
Problem with Complex Potential

Numerical method for solving the scattering problem for the radial Schroedinger equation with complex potential is presented. The statement of this problem as a non-linear boundary value problem is given. In order to solve numerically the latter is approximated by the spline-function method and the iteration scheme of generalized continuous analog of Newton method is used.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989