сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р11-91-351

Т.Жанлав, И.В.Пузынин

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ ЭНЕРГИЙ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ

1991

Введение

Как известно, понятие резонанса или квазистационарного состояния в квантовой механике было введено первоначально для объяснения явления α-распада тяжелых ядер. Резонансное состояние характеризуется комплексным значением энергии $E=E_o-i\Gamma/2$ уравнения Шредингера, причем мнимая часть энергии дает вероятность распада /1/. В резонансном случае энергия E является особой точкой-полюсом на комплексной плоскости энергии матрицы рассеяния частицы на потенциале. Изучение резонансов и других процессов, описываемых непрерывным спектром, является актуальным не только в ядерной физике, но и других областях физики, в частности, в молекулярной, атомной и химической физике /2-7/.

В настоящее время существуют различные методы вычисления резонансных параметров, подробный обзор по ним дан в работе /2/. Трудность в вычислении параметров резонанса состоит в том, что волновая функция этого состояния экспоненциально возрастает по модулю с ростом r и не может рассматриваться как волновая функция в обычном смысле, поскольку она не интегрируема с квадратом, т.е.

$$\int_0^\infty u^2(r)\,dr \longrightarrow \infty \;.$$

Среди развитых методов вычисления резонансных состояний отметим следующие:

1. Метод комплексного поворота /2/.
2. Метод встречного интегрирования или метод Фокса-Гудвина /7/.
3. Метод связанных каналов /4/.

В методе комплексного поворота резонансную функцию преобразуют в интегрируемую с квадратом, и далее решается обычная задача на собственные значения для комплексного значения энергии. Несмотря на кажущуюся простоту, может возникнуть трудность при выборе угла поворота комплексной плоскости.

В работе /6/ метод связанных каналов используется в случае, когда ширина резонанса Γ много меньше, чем положение резонанса, т.е. $\Gamma \ll E_o$. Различные определения резонансов при выполнении последнего условия и границы их применимости рассмотрены в работе /5/. Детально разработана "Гамов-программа" /7/, реализующая метод встречного интегрирования от точек $r=0$ и $r=R\gg1$ со сшиванием искомого решения в некоторой промежуточной точки, выбор которой зависит от конкретной задачи. Точность этого алгоритма ухудшается с возрастанием величины Г.

Цель настоящей работы – решить задачу вычисления комплексных резонансных энергий как задачу на собственные значения. Рассмотрение такой постановки задачи представляет интерес для создания единого алгоритма вычисления параметров дискретного и непрерывного спектров и для многочисленных приложений /2-7/.

1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу потенциального рассеяния заряженных частиц /6-8/

$$Lu \equiv u''(r)+\left(k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-U_c(r)-U_N(r)\right)u(r)=0 \;, \tag{1.1}$$

$$u(r)=0, \quad r=0 \;, \tag{1.2}$$

$$u(r)\sim \sin\left(kr-\eta\ln 2kr-\frac{\ell\pi}{2}+\sigma_\ell+\delta\right) \;, \quad r\to\infty \;, \tag{1.3}$$

где $U_c(r)=\frac{2\eta k}{r}$ – дальнодействующий кулоновский потенциал,

$\sigma_\ell=\arg\Gamma(\ell+1+i\eta)$ – кулоновская фаза рассеяния.

Предположим, что потенциал $U_N(r)$ стремится к нулю быстрее, чем кулоновский потенциал при $r\to\infty$, т.е. имеет асимптотику

$$U_N(r) = \sum_{i=2}^{\infty} c_i/r^i \;. \tag{1.4}$$

Волновая функция, имеющая асимптотику (1.3), экспоненциально возрастает по модулю при $r\to\infty$, если

$$k=k_1+ik_2 \;, \quad k_2<0 \;. \tag{1.5}$$

Наша цель – сформулировать исходную задачу как задачу на собственные значения относительно неизвестной величины k на конечном интервале $(0, R)$, где $R\gg1$. Для этого достаточно найти однородное краевое условие на правом конце интервала $(0, R)$, используя асимптотику решения при $r\to\infty$. Рассмотрим два способа формирования граничного условия при $r\to\infty$.

1.1. При $r\to\infty$ волновую функцию $u(r)$ можно искать в виде

$$u = f_{on}\sin\alpha(r) + g_{on}\cos\alpha(r) \;, \tag{1.6}$$

$$\alpha(r)= kr-\eta\ln 2kr-\frac{\ell\pi}{2}+\sigma_\ell+\delta \;,$$

где

$$f_{on}(r)=1+\frac{a_1}{r}+\frac{a_2}{r^2}+\ldots+\frac{a_n}{r^n};\; g_{on}(r)=\sum_{j=1}^{n} b_j/r^j . \tag{I.7}$$

Найдем производные

$$u^{(j)}=f_{jn}(r)\sin\alpha(r)+g_{jn}(r)\cos\alpha(r)\;,\; j=1,2 \;, \tag{I.8}$$

где

$$f_{1n}(r)=f'_{on}(r)-\bar{k}\cdot g_{on}(r)\;,\quad g_{1n}(r)=g'_{on}(r)+\bar{k}\cdot f_{on}(r)\;,$$

$$f_{2n}(r)=f''_{on}(r)-2\bar{k}g'_{on}(r)-\bar{k}^2 f_{on}(r)-\frac{\eta}{r^2}g_{on}(r)\;,$$

$$g_{2n}(r)=g''_{on}(r)+2\bar{k}f'_{on}(r)-\bar{k}^2 g_{on}(r)+\frac{\eta}{r^2}f_{on}(r)\;,$$

$$\bar{k}=k-\frac{\eta}{r}\;.$$

Подставляя (I.6),(I.8) в (I.I) и учитывая асимптотику потенциала (I.4), можно определить коэффициенты a_i, b_i в (I.7) однозначно с помощью формул

$$b_j=\frac{a_{j-1}(\ell(\ell+1)+c_2+\eta^2-(j-1)j)+(2j-1)\eta b_{j-1}+\sum\limits_{m=c}^{j-2}c_{3+m}a_{j-2-m}}{2kj}\;,$$

$$a_j=\frac{b_{j-1}(j-1)j-c_2-\eta^2-\ell(\ell+1))+(2j-1)\eta a_{j-1}-\sum\limits_{m=c}^{j-3}c_{3+m}b_{j-2-m}}{2kj}\;, \tag{I.9}$$

$$j=1,2,\ldots,n\;,\quad a_o=1,\quad b_{-m}=0,\quad m\leq 0\;.$$

Суммы в выражениях (I.9) считаются равными нулю, если их верхние пределы меньше нуля.

При таком выборе коэффициентов (I.9) функция (I.6) удовлетворяет уравнению (I.I) с точностью до членов порядка $O((kr)^{-(n+2)})$, которыми можно пренебречь при больших n, если $|k|\cdot r>1$.
Одно из определений резонанса следует из теории рассеяния, и оно заключается в том, что энергия резонанса соответствует значению фазы, при котором принимает максимальное значение сечение $\sigma_\ell(E)$. Это значение фазы равно /1/

$$\delta=\frac{2n+1}{2}\pi\;. \tag{I.I0}$$

Если учесть это равенство, то из формул (I.6),(I.8) следует равенство

$$(-f_{on}\cos\beta+g_{on}\sin\beta)u'-(f_{1n}\cos\beta+g_{1n}\sin\beta)u=0, \tag{I.II}$$

где $\beta(r)=kr-\eta\cdot\ln 2kr-\frac{\ell\pi}{2}+\sigma_\ell$.
Представив f_{jn}, g_{jn}, u в виде

$$f_{jn}=f^{(1)}_{jn}+if^{(2)}_{jn}\;,\quad g_{jn}=g^{(1)}_{jn}+ig^{(2)}_{jn}\;,\quad j=0,1\;,\quad u=u_1+iu_2\;,$$

выделим вещественную и мнимую части уравнения (I.II). Тогда, с учетом $\lim\limits_{r\to\infty}\operatorname{th}k_2 r=-1$, получаем соотношения

$$u'_1(r)+\bar{A}_1(r)u_1+\bar{B}_1(r)u_2=0\;,$$
$$u'_2(r)+\bar{A}_1(r)u_2-\bar{B}_1(r)u_1=0,\quad r\to\infty, \tag{I.I2}$$

где

$$\bar{A}_1(r)=\frac{(f^{(1)}_{on}-g^{(2)}_{on})(f^{(1)}_{1n}+g^{(2)}_{1n})+(f^{(2)}_{1n}-g^{(1)}_{1n})(g^{(1)}_{on}-f^{(2)}_{on})}{\Delta}\;,$$

$$\bar{B}_1(r)=\frac{(f^{(2)}_{1n}-g^{(1)}_{1n})(g^{(2)}_{on}-f^{(1)}_{on})+(f^{(1)}_{1n}+g^{(2)}_{1n})(f^{(2)}_{on}+g^{(1)}_{on})}{\Delta}\;, \tag{I.I3}$$

$$\Delta=(f^{(1)}_{on}-g^{(2)}_{on})^2+(f^{(2)}_{on}+g^{(1)}_{on})^2\neq 0\;,\quad r\to\infty\;.$$

Соотношение (I.I2) можно рассматривать как краевое условие для функций u_1 и u_2, в котором коэффициенты $\bar{A}_1$ и $\bar{B}_1$, очевидно, зависят от неизвестных k_1, k_2, а также от числа членов n в разложениях (I.7).

I.2. Второй способ формирования граничного условия при $r\to\infty$ состоит в использовании метода дифференциальной прогонки /9/, который позволяет нам представить решение уравнения (I.I) в виде

$$u'_1+A_1(r)u_1+B_1(r)u_2=0\;,$$
$$u'_2+A_1(r)u_2-B_1(r)u_1=0\;, \tag{I.I4}$$

где

$$A_1(r) = \bar{a}_0 + \frac{\bar{a}_1}{r} + \frac{\bar{a}_2}{r^2} + \frac{\bar{a}_3}{r^3} \quad ,$$

$$B_1(r) = \bar{b}_0 + \frac{\bar{b}_1}{r} + \frac{\bar{b}_2}{r^2} + \frac{\bar{b}_3}{r^3} \quad . \qquad (I.15)$$

Легко проверить, что из уравнений (I.I4) следует уравнение (I.I) с точностью $O(r^{-4})$, если выбраны коэффициенты в (I.I5) следующим образом:

$$\bar{a}_0 = k_2,\quad \bar{b}_0 = k_1,\quad \bar{a}_1 = 0,\quad \bar{b}_1 = -\eta \ ,$$

$$\bar{a}_2 = \frac{k_1\eta + k_2 d_1}{2\tilde{k}} \ ,\quad b_2 = \frac{k_2\eta - k_1 d_1}{2\tilde{k}} \ ,$$

$$\bar{a}_3 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)(d_1 - \eta^2) - 2k_1k_2(1-d_1)\eta + 0{,}5k_2c_3}{2\tilde{k}^2} \ , \qquad (I.16)$$

$$\bar{b}_3 = \frac{2k_1k_2(d_1 + \eta^2) + (k_1^2 - k_2^2)(1-d_1)\eta - 0{,}5k_1c_3}{2\tilde{k}^2} \ ,$$

$$d_1 = \ell(\ell+1) + c_2 \ , \quad \tilde{k} = k_1^2 + k_2^2 \ .$$

Для того чтобы повысить точность вычисления, необходимо включить в (I.I5) следующие члены.

Итак, мы имеем граничное условие (I.I4) для волновых функций u_1 и u_2 при $r \to \infty$. Интересно, что при $n=2$ граничное условие (I.I2) с точностью $O(r^{-4})$ совпадает с условием (I.I4), и в пределе $r \to \infty$ они имеют вид

$$u_1' + k_2u_1 + k_1u_2 = 0 \ ,$$

$$u_2' + k_2u_2 - k_1u_1 = 0, \quad r \to \infty \ . \qquad (I.17)$$

Отметим, что второй способ получения граничного условия (I.I4) не связан с определением резонанса (I.I0). Условие (I.I4) получено как следствие уравнений (I.I) при $r \to \infty$, и поэтому методика может быть применена при формировании граничных условий для задач в дискретном и непрерывном спектрах.

2. Метод решения задачи

Нелинейную задачу (I.I),(I.2),(I.I4) можно решать либо с помощью непрерывного аналога метода Ньютона /I0-I2/, либо его модификации /I3,I4/, хорошо зарекомендовавших себя при решении различных нелинейных задач теоретической физики.

Чтобы применить метод к данной нелинейной задаче относительно неизвестных (k_1, k_2, u_1, u_2), необходимы еще два дополнительных условия, которые будут использованы для вычисления поправок относительно собственных значений k_1 , k_2 . Как известно, обычно для этой цели используется условие нормировки волновой функции. К сожалению, как отмечено выше, в резонансном состоянии она не нормируется в обычном смысле. В работе /I5/ впервые показано , что в качестве нормы волновой функции можно взять выражение

$$\lim_{\alpha \to 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} u^2(r)\,dr \ .$$

Пусть u и $\hat{u}$ – две собственные функции задачи (I.I)-(I.3), отвечающие различным собственным значениям k и $\hat{k}$. Определим внутреннее произведение элементов по формуле

$$\langle u,v \rangle = \lim_{\alpha \to 0+0} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} u(r)v(r)\,dr \ . \qquad (2.1)$$

В работе /I6/ с использованием идеи регуляризации по Зельдовичу показано, что $\langle u,\hat{u} \rangle = 0$, если $k \neq \hat{k}$,

$\langle u,u \rangle = 1$, если k – простое собственное значение.

Отметим также, что в работе /I6/ введено другое возможное внутреннее произведение с весом $\exp(-\alpha r)$.

Таким образом, задачу (I.I),(I.2),(I.I4) вместе с условием нормировки (2.I) можно рассматривать как нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(z) = 0 \qquad (2.2)$$

относительно $z = (k_1, k_2, u_1, u_2)$. Здесь функция φ имеет четыре компоненты:

$$\varphi(z) = \begin{pmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \\ \varphi_3(z) \\ \varphi_4(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Lu \equiv \left(\frac{d^2}{dr^2} + B(k_1,k_2,r)\right)Eu \ , & \\ \ell_1 u \equiv u(0) \ , & r=0 \ , \\ \ell_2 u \equiv \left(\frac{d}{dr} + A(k_1,k_2,r)\right)Eu \ , & r=R\gg 1 \ , \\ \langle u,u \rangle - 1 & \end{pmatrix}$$

где E – единичная матрица, а B и A - квадратные матрицы размерности 2x2, $u=(u_1,u_2)$.

Как видно из уравнений (I.1), элементы матрицы B определяются по формулам

$$B_{11} = B_{22} = k_1^2 - k_2^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U_N - \frac{2\eta k_1}{r},$$

$$B_{21} = -B_{12} = 2k_1k_2 - \frac{2\eta k_2}{r}.$$

Элементы матрицы A определяются в зависимости от выбора числа n в разложениях (I.7). Нелинейная задача (2.2) решается с помощью модификации непрерывного аналога метода Ньютона /I3,I4/ с применением метода дискретизации по пространственной переменной r кубическим сплайном. Этот алгоритм позволяет находить решение z^* с точностью $O(h^4)$ на равномерной сетке $r_n \in (0,R)$ при больших R.

3. Результаты численных экспериментов

В задачах ядерной физики при изучении прямых реакций передач большое значение имеют одночастичные волновые функции уравнения Шредингера со сферическим симметричным потенциалом Саксона-Вудса. В настоящее время этот потенциал получил наиболее широкое распространение при описании структуры и свойств ядер. С учетом спин-орбитального взаимодействия он имеет вид /I7/

$$U_N(r) = -V_o f(r) + \frac{\varkappa V_o}{r}\frac{df}{dr}\left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - 0.75\right), \qquad (3.I)$$

$$f(r) = \left[1+\exp\left(\frac{r-R_o}{a}\right)\right]^{-1}, \qquad R_o = r_o A^{1/3},$$

где J – полный момент.

В качестве примера рассмотрим реакцию упругого рассеяния нейтрона на ядре свинца ^{208}Pb $(A=208,\ z=82)$ /I8/. При этом параметры потенциала (3.I) имеют следующие значения /I8/: a =0.70 фм, r_o = I.27 фм, V_o = 44.4 МэВ, $\varkappa V_o$ = I6.5 МэВ.

В таблице I приведены результаты значений E_1 и $-E_2$ (МэВ) для различных состояний, а также результаты работы /I8/, полученные методом встречного интегрирования. Поскольку $E = k^2/c$, $c = 2m/\hbar^2$, то величины E_1 , E_2 вычисляются по формулам

$$E_1 = \frac{k_1^2 - k_2^2}{c}; \qquad E_2 = \frac{2k_1k_2}{c} = -\Gamma/2.$$

В численных расчетах внутреннее произведение (2.I) вычислялось по формуле Симпсона со значением малого параметра α = 0.0I. Параметры сетки выбраны $R=30$, $h=0.125$. Как видно из таблицы I, результаты находятся в хорошем согласии с результатами работы /I8/.

Таблица I

Состояния	E_1	$-E_2$	$E_1^{/18/}$	$-E_2^{/18/}$
$0j_{13/2}$	5,4I06	0,0095	5,4I	0,0I
$0k_{17/2}$	5,029I	0,00I2	5,03	0,00
$1h_{11/2}$	2,2509	0,0262	2,25	0,03
$1h_{9/2}$	5,4006	0,7I84	5,40	0,73
$1i_{13/2}$	7,6654	I,0552	7,66	I,04
$2f_{7/2}$	2,0948	0,8525	2,I0	0,87

Отметим, что предлагаемый алгоритм вычисления резонансных энергий применим также в случае дискретного спектра. В этом случае считается, что $k_1 \equiv 0$, $k = ik_2$. Тогда уравнение (I.I) принимает вид

$$u'' + \left(-k_2^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U_N\right)u = 0$$

и дополняется граничными условиями

$$u(0)=0, \quad r=0,$$
$$u' + k_2 u = 0, \quad r \to \infty,$$

причем последнее условие получается из (I.2I) при $r \to \infty$. Поскольку в этом случае волновая функция u интегрируема с квадратом, то скалярное произведение (2.I) определяется с $\alpha = 0$. Для данного примера дискретные собственные значения вычислены при различных состояниях и результаты полностью совпали с аналогичными результатами работы /I8/.

Заключение

На основании проведенных расчетов и их сравнения с аналогичными вычислениями, полученными различными способами, можно сделать вывод о том, что предложенный метод может быть успешно применен для нахождения резонансных состояний в задачах теории ядра. Преимущество метода, на наш взгляд, состоит в том, что он пригоден одновременно в дискретном и непрерывном спектрах и дает результаты с контролируемой точностью, которая может быть при необходимости повышена. Алгоритм удобен для реализации на ЭВМ. Кроме того, метод может быть применен для определения неизвестных параметров потенциала по заданным значениям фазы рассеяния.

Литература

I. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.

2. Ho Y.K. Phys. Rep. 1983 V.99. P.3.

3. Brandas E. et al. J. Math. Phys. 1985. V.26. P.2648.
Lefebvre R. J. Chem. Phys. 1990. V.92.P.1.

4. Банг Е., Гареев Ф.А. ЭЧАЯ, 1980, Т.II, с.8I3.

5. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-8884, Дубна, 1975.
Ponomarev L.I., Puzynin I.V., Pyzynina T.P. and Somov L.N. Annals of Phys. 1978. V.110. P.274.

6. Bang J., Gareev F.A., Pyzynin I.V. and Jamalejev R.M. Nucl. Phys. 1976. V.A261. P.59.

7. Verste T. et al. Comput. Phys. Commun.1982. V.27. P.309.

8. Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988.

9. Фадеев С.И. В кн.: Методы сплайн-функций (Вычислительные системы, вып.75). ИМ СО АН СССР, Новосибирск, 1978, с.80.

I0. Гавурин М.К. Изв.вузов. Серия математика, 1958, т.5, с.I8.

II. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, т.4, вып.I, с.I27.

I2. Виницкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. ЯФ, 1990, т.52, с.II76.

I3. Gocheva A.D. et al. Phys. Letters, 1985, v.153B, p.349.

I4. Жанлав Т., Пузынин И.В. Сообщения ОИЯИ, РII-9I-I00, Дубна, 199I; РII-90-2I3, Дубна, 1990.

I5. Зельдович Я.Б. ЖЭТФ, 1960, т.39, с.776.

I6. Berggren T. Nucl. Phys., 1968, v.A109, p.265;
Romo W.J. Nucl. Phys., 1968, v.A116, p.618 .

I7. Кадменский С.Г. и др. ЯФ, 197I, т.I4, с.II74.

I8. Vertse T. et al. Phys. Rev., 1988, v.C37, p.876.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 июля 1991 года.