сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4 - 12575

К.И.Иванов, М.П.Иванова

ФАЗОВЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

1979

P4 - 12575

Иванов К.И., Иванова М.П.

Фазовые уравнения для дальнодействующих сфероидальных потенциалов

Развивается метод фазовых функций для дальнодействующих сфероидальных потенциалов, убывающих на бесконечности не только как некоторая отрицательная степень радиус-вектора, но и как медленная произвольная такой степени. Рассматриваются фазовые уравнения с эффективными короткодействующими потенциалами, зависящими от энергии. В эти уравнения как базисные функции входят линейно независимые решения радиального сфероидального уравнения Шредингера. Поскольку эффективные потенциалы являются короткодействующими, то фазовые функции, удовлетворяющие фазовым уравнениям, имеют конечные значения на бесконечности. Показано, что через эти значения можно выразить конечные фазы, входящие в неограниченно возрастающие фазовые сдвиги парциальных волновых функций. Так как волновые функции свободного движения хорошо исследованы, то для нахождения решения фазовых уравнений с успехом можно использовать обычные математические методы - итерационные, вариационные, метод линеаризации, метод формальных рядов и другие.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

P4 - 12575

Ivanov K.I., Ivanova M.P.

Phase Equations for Long-Range Spheroidal Potentials

A variable phase method for long-range spheroidal potentials is developed, which decreases at infinity as some reverse powers and even slower ones. Phase equations with a short-range effective energy dependent potentials are considered. The basic functions in these equations satisfy the free radial Schrödinger equation with spheroidal potential. The phase functions which are the solutions of our phase equations are bounded at the infinity because of the short-range character of the effective potentials. By means of values of the phase functions at the infinity one can express the phase shifts. The phase equations are solved by iterative methods and by the formal series method.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

Хорошо известно,что в случае дальнодействующего потенциала решение обычного фазового уравнения /1,2/ с базисными функциями,являющимися решениями свободного радиального уравнения Шредингера, не имеет предела, если модуль радиус-вектора $\vec{r}$ стремится к бесконечности. Чтобы определить в случае дальнодействующих потенциалов конечную часть фазового сдвига волновой функции, можно потупить следующим образом /2/. Дальнодействующий потенциал записывается в виде суммы двух членов, один из которых является короткодействующим потенциалом. Используя в качестве базисных функций решения уравнения Шредингера с потенциалом, равным дальнодействующей компоненте данного потенциала, выводим новое фазовое уравнение. Искомую конечную часть фазового сдвига волновой функции легко можно найти, если мы сумеем вычислить значение на бесконечности фазовой функции, удовлетворяющей новому фазовому уравнению. Однако нахождение упомянутых базисных функций для большинства дальнодействующих потенциалов - весьма сложная математическая задача. Поэтому метод фазовых функций в таком виде практически мало используется.

В настоящей работе рассматриваются фазовые уравнения для широкого класса дальнодействующих сфероидальных потенциалов вида

$$U(\vec{r}) = \frac{v(\xi) + s(\eta)}{f^2(\xi^2 - \eta^2)}, \qquad /1/$$

где ξ , η , ϕ - вытянутые сфероидальные координаты - точки трехмерного векторного пространства R^3 /3/, а f - половина расстояния между фокусами сфероидальной системы координат.

В эти уравнения входят эффективные короткодействующие потенциалы и базисные функции, которые выражаются через вытянутые сфероидальные радиальные функции $R_{m\ell}(c;\xi)$ и $R^{(2)}_{m\ell}(c;\xi)$ /ℓ=0, 1, . . . , m=0,1, . . . , ℓ / первого и второго рода /3/. Решения рассматриваемых уравнений можно находить обычными математическими методами, поскольку функции $R_{m\ell}$ и $R^{(2)}_{m\ell}$ хорошо исследованы, а эффективные потенциалы являются короткодействующими. Фазы рассеяния выражаются непосредственно через пределы полученных решений при $\xi\to\infty$. Конечно, эти фазы можно определить и прямыми вычислительными методами, как это сделано для кулоновских сфероидальных потенциалов в работах /4,5/. Однако метод фазовых функций дает возможность получить кроме фаз еще и дополнительную информацию о процессе столкновения.

Метод фазовых функций для дальнодействующих сфероидальных потенциалов вида /1/ мы развиваем, исходя из модифицированных уравнений Липпмана-Швингера /6/. В основу вывода этих уравнений положена идея об асимптотическом компенсирующем операторе Z /6/. В работе /7/ доказано существование оператора Z для дальнодействующих потенциалов $U(r)\in L^2(R^3)+$ $+\ L^\infty(R^3)$, /8/ удовлетворяющих следующим условиям:

а/ Существует такое $R_0>1$, что $v(\xi)\in C^2([R_0,\infty))$.

б/ Существует число $M>0$ и функция $r(\xi)\in C^3(R^1_+\setminus\{0\})$, $(R^1_+=\{\xi|\xi\ge 0\})$,

$$r(0)=0,\quad r'(\xi)>0,\ (\xi>0),\quad M_0=\sup_{\xi\ge R_0}\frac{\xi r'(\xi)}{r(\xi)}<\infty,$$

$$\lim_{\xi\to\infty} r(\xi)=\infty,$$

такие, что

$$|V(\xi)|\le\frac{M}{r(\xi)},\qquad |V'(\xi)|\le\frac{Mr'(\xi)}{r^2(\xi)},\qquad |V'(\xi)|\le\frac{M}{\xi r(\xi)},$$

$$|V''(\xi)|\le\frac{Mr'(\xi)}{\xi r^2(\xi)},$$

где

$$V(\xi)=v(\xi)(\xi^2-1)^{-1};$$

в/ $s(\eta)\equiv\mathrm{const}$, $(-1\le\eta\le 1)$.

При этих условиях полный гамильтониан $H=H_0+U(r)$, $(H_0=-\Delta)$ - плотно определенный в $\mathcal{H}=L^2(R^3)$ оператор, и он самосопряжен на области определения оператора H_0. Можно показать также, что операторы $\Omega^*_\pm$, сопряженные с обобщенными волновыми операторами $\Omega_\pm$ /6,7/, выражаются на плотных $\mathrm{Ran}\,\Omega_\pm$ множествах через оператор Z. Тогда для векторов ψ из плотного $\mathcal{H}$ множества можно написать уравнения /6/

$$Z\psi^\pm=\psi+s\lim_{\epsilon\to 0+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{H_0-\lambda}{H_0-\lambda\mp i\epsilon}Z\,dP^H_\lambda\psi^\pm, \qquad /2/$$

где $\psi^\pm=\Omega_\pm\psi$ а P^H_ω - проекторнозначная мера оператора H. Эти уравнения будем использовать для вывода фазовых уравнений с базисными функциями, являющимися решениями свободного радиального сфероидального уравнения Шредингера.

Из /2/ получаем интегральное уравнение

$$u^\pm_{m\ell}(C;\xi+w(c;\xi))=u_{m\ell}(c;\xi)+$$

$$+\int_1^\infty G^\pm_{m\ell}(c;\xi,\xi')(H^{(\xi')}_{m\ell}-c^2)u^\pm_{m\ell}(c;\xi'+w(c;\xi'))d\xi', \qquad /3/$$

$$G^\pm_{m\ell}(c;\xi,\xi')=\mp\frac{1}{ic}u_{m\ell}(c;\xi_<)w^\pm_{m\ell}(c;\xi_>),$$

$$\xi_<=\min(\xi,\xi'),\qquad \xi_>=\max(\xi,\xi'),$$

$$u_{m\ell}(c;\xi)=c\sqrt{\xi^2-1}\,R_{m\ell}(c;\xi),\qquad w^\pm_{m\ell}=u_{m\ell}\pm iv_{m\ell}, \qquad /4/$$

$$v_{m\ell}(c;\xi)=c\sqrt{\xi^2-1}\,R^{(2)}_{m\ell}(c;\xi),$$

$$H^{(\xi)}_{m\ell}=-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\lambda^{(0)}_{m\ell}(c)}{\xi^2-1}+\frac{m^2-1}{(\xi^2-1)^2}, \qquad /5/$$

$$c=fk=f\sqrt{E}. \qquad /6/$$

В этих формулах E - энергия рассеивающейся частицы /ее масса $m_0=1/2$, $\hbar=1$/, $\lambda^{(0)}_{m\ell}$ - собственные значения, соответствующие вытянутым сфероидальным угловым функциям[3], функция w определена в работе[7], а $u^{\pm}_{m\ell}(c;\xi)$ - регулярные решения радиального сфероидального уравнения Шредингера с заданной асимптотикой на бесконечности. Асимптотика функции $u^{\pm}_{m\ell}$ определяется следующей асимптотической формулой

$$u^{\pm}_{m\ell}(c;\xi)_{\xi\to\infty} \simeq \pm\frac{i}{2}e^{\pm i\pi\ell/2}\{\exp[\mp i(\int\limits_{\xi_0(c)}^{\xi}\sqrt{c^2-V(x)}\,dx + c\xi_0(c))] - e^{\mp i\pi\ell/2}\exp[\pm i(2\delta_{m\ell}(c) + \int\limits_{\xi_0(c)}^{\xi}\sqrt{c^2-V(x)}\,dx + c\xi_0(c))]\},$$ /7/

в которой $\delta_{m\ell}(c)$ - вещественные фазы, а функция $\xi_0(c)$ определяется так, чтобы в интервале $\xi \geq \xi_0(c)$, $c^2-V(\xi)>0$[7]. Отметим, что в выражение для $\xi_0(c)$ входит аддитивная постоянная $\delta>0$, которую можно выбирать произвольным образом.

Относительно функций w отметим следующее. Для любого данного $c>0$ она тождественно равна нулю на интервале $1\leq\xi\leq\xi_0(c)-\delta/2$. На бесконечном интервале $\xi\geq\xi_0(c)+\delta_1$, где δ_1 - произвольное достаточно малое положительное число, функция w совпадает с решением $w_0(c,\xi)$ трансцендентного уравнения

$$\int\limits_{\xi_0(c)}^{\xi+w_0}\sqrt{c^2-V(x)}\,dx = c\xi - c\xi_0(c).$$ /8/

В интервале $\xi_0(c)-\delta/2\leq\xi\leq\xi_0+\delta_1$ функция w определяется так, чтобы в области $\omega_1=\{(c,\xi)|c>0,\ \xi\geq 1\}$ она была непрерывно дифференцируемой по c, три раза непрерывно дифференцируемой по ξ и

$$1+\partial w/\partial\xi>0.$$

Для многих потенциалов нетрудно определить функцию w, решая уравнение /8/.

Легко понять, что действие оператора $H^{(\xi')}_{m\ell}-c^2$ в /3/ эквивалентно действию некоторого эффективного потенциала

в который линейно входит оператор дифференцирования $\partial/\partial\xi$. Чтобы получить фазовые уравнения, в которых участвовал эффективный потенциал, являющийся оператором умножения, положим

$$u^{\pm}_{m\ell}(c;\xi+w)=\sqrt{1+w'_{\xi}}\,\{\frac{1}{2}w^{\pm}_{m\ell}(c;\xi)X^{m\ell}_1(c;\xi)+u_{m\ell}(c;\xi)X^{m\ell}_2(c;\xi)\},$$

$$\frac{1}{2}w^{\pm}_{m\ell}(c;\xi)\frac{\partial X^{m\ell}_1}{\partial\xi}+u_{m\ell}(c;\xi)\frac{\partial X^{m\ell}_2}{\partial\xi}=0.$$ /9/

Имея в виду свойства регулярных решений $u^{\pm}_{m\ell}$, можно показать, что функции $X^{m\ell}_{1,2}(c;\xi)$ имеют конечные пределы при $\xi\to 1$ и $\xi\to\infty$.

Из интегрального уравнения /3/ следует, что функции $X^{m\ell}_{1,2}$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{\partial}{\partial\xi}X^{m\ell}_{\alpha}(c;\xi)=\sum_{\beta=1}^{2}a^{m\ell}_{\alpha\beta}(c,\xi)X^{m\ell}_{\beta}(c;\xi),\quad(\alpha=1,2),$$ /10/

$$X^{m\ell}_1(c;1)=0,\quad X^{m\ell}_2(c;\xi)=O(1),\quad(\xi\to 1).$$ /11/

Функции $a^{m\ell}_{\alpha\beta}$, входящие в уравнения /10/, определяются следующими формулами:

$$a^{m\ell}_{11}=-a^{m\ell}_{22}=\frac{1}{ic}W^{eff}_{m\ell}(c;\xi)u_{m\ell}(c;\xi)w^{\pm}_{m\ell}(c;\xi),$$

$$a^{m\ell}_{12}=\frac{2}{ic}W^{eff}_{m\ell}(c;\xi)[u_{m\ell}(c;\xi)]^2,$$

$$a^{m\ell}_{21}=\frac{i}{2c}W^{eff}_{m\ell}(c;\xi)[w^{\pm}_{m\ell}(c;\xi)]^2,$$

$$W^{eff}_{m\ell}(c;\xi)=V^{(1)}_{m\ell}(c;\xi)-\frac{1}{2}\{\xi+w,\xi\},$$

$$V^{(1)}_{m\ell}(c;\xi) = V(\xi+w) + (2w'_{\xi} + w'^{2}_{\xi})[V(\xi+w) - c^2] +$$

$$+ (m^2-1)\{\frac{(1+w'_{\xi})^2}{[(\xi+w)^2-1]^2} - \frac{1}{(\xi^2-1)^2}\} +$$

$$+ \lambda^{(0)}_{m\ell}(c)\{\frac{(1+w'_{\xi})^2}{(\xi+w)^2-1} - \frac{1}{\xi^2-1}\}, \quad (w'_{\xi} = \frac{\partial w}{\partial \xi}), \qquad /12/$$

где символом $\{\xi + w, \xi\}$ обозначена производная Шварца функции $\xi + w$:

$$\{\xi+w,\xi\} = (1+w'_{\xi})^{-1}\frac{\partial^3 w}{\partial \xi^3} - \frac{3}{2}\left(\frac{w''_{\xi\xi}}{1+w'_{\xi}}\right)^2. \qquad /13/$$

Функцию /12/ будем рассматривать как эффективный потенциал. Для любого данного $c > 0$ он является короткодействующим и для него можно получить оценку

$$W^{eff}_{m\ell}(c;\xi) = O\left(\frac{1}{\xi^2 r(\xi^{1/4})}\right), \quad (\xi \to \infty). \qquad /14/$$

В некоторых случаях оценку /14/ можно улучшить.

Решения системы /10/, которые удовлетворяют условию /11/, будем называть регулярными решениями. Легко показать, что все регулярные решения системы /10/ являются линейно зависимыми. Любое ненулевое регулярное решение есть решение системы интегральных уравнений, вытекающей из /10/ и /11/, к которой применим итерационный метод. Исследуя систему интегральных уравнений для функции $X^{m\ell}_{1,2}$, можно доказать следующие формулы:

$$e^{2i\delta_{m\ell}(c)} = 1 + X^{m\ell}_1(c;\infty) =$$

$$= 1 + \frac{1}{ic}\int_1^{\infty} W^{eff}_{m\ell}(c;x)u_{m\ell}(c;x)\psi^{+}_{m\ell}(c;x)dx, \qquad /15/$$

$$X^{m\ell}_2(c;\infty) = 1, \qquad /16/$$

$$X^{m\ell}_1(c;\xi) = o((\xi-1)^m), \quad X^{m\ell}_2(c;\xi) = O(1), \quad (\xi \to 1), \qquad /17/$$

где

$$\psi_{m\ell}(c;\xi) = (1+w'_{\xi})^{1/2}\, u_{m\ell}(c;\xi + w(c;\xi)). \qquad /18/$$

Выражения /15/ и /16/ дают возможность определить фазы $\delta_{m\ell}(c)$, если найдено некоторое регулярное решение системы /10/. Через эти фазы непосредственно выражаются матричные элементы S-матрицы на энергетической поверхности в представлении, определяемом вытянутыми сфероидальными угловыми функциями[7]. Поскольку фазы $\delta_{m\ell}(c)$ определяются пределами функции регулярных решений системы /10/ при $\xi \to \infty$, то можно утверждать, что уравнения этой системы являются, по существу, фазовыми уравнениями для рассматриваемых дальнодействующих сфероидальных потенциалов.

Уравнения /10/ могут быть использованы для получения новых уравнений физических величин, являющихся функциями фаз $\delta_{m\ell}(c)$. Чтобы получить такие уравнения, возьмем произвольное ненулевое решение $x^{m\ell}_{\alpha}(c;\xi)$, $/\alpha = 1,2/$ системы /10/ и определим "амплитудную функцию"

$$A_{m\ell}(c,\xi) = \frac{1}{2i}\frac{x^{m\ell}_1(c;\xi)}{x^{m\ell}_2(c;\xi)}. \qquad /19/$$

Очевидно, эта функция не зависит от выбора регулярного решения, через которое она определяется. Нетрудно убедиться, что она удовлетворяет уравнению Риккати:

$$\frac{\partial A_{m\ell}}{\partial \xi} = -\frac{1}{c}W^{eff}_{m\ell}(u_{m\ell} + i w^{+}_{m\ell} A_{m\ell})^2, \qquad /20/$$

$$A_{m\ell}(c;\xi) = o((\xi-1)^m), \quad (\xi \to 1), \qquad /21/$$

коэффициенты которого выражаются через эффективный потенциал /12/ и решения $u_{m\ell}$ и $w^{+}_{m\ell}$ свободного радиального уравнения Шредингера в сфероидальных координатах. Решение задачи /20/-/21/ имеет конечный предел при $\xi \to \infty$, который дает парциальную амплитуду рассеяния $A_{m\ell}(c)$:

$$A_{m\ell}(c) = A_{m\ell}(c;\infty) = \frac{1}{2i}\left[e^{2i\delta_{m\ell}(c)} - 1\right]. \qquad /22/$$

Введем так называемую фазовую функцию $\delta_{m\ell}(c;\xi)$, определяемую следующим образом:

$$e^{2i\delta_{m\ell}(c;\xi)} = 1 + 2iA_{m\ell}(c;\xi), \qquad /23/$$

$$\delta_{m\ell}(c;1) = 0. \qquad /24/$$

Подставляя /23/ в /20/, получим дифференциальное уравнение для $\delta_{m\ell}(c;\xi)$

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\delta_{m\ell}(c;\xi) = -\frac{1}{c}W^{eff}_{m\ell}(c;\xi)\{u_{m\ell}(c;\xi)\cos\delta_{m\ell}(c;\xi) -$$

$$- v_{m\ell}(c;\xi)\sin\delta_{m\ell}(c;\xi)\}^2, \qquad /25/$$

являющееся фазовым уравнением с потенциалом $W^{eff}_{m\ell}$ и базисными функциями $u_{m\ell}$ и $v_{m\ell}$. Это уравнение можно использовать как основное уравнение метода фазовых функций в случае дальнодействующих потенциалов. Как следует из /22/ и /23/, асимптотика при $\xi \to \infty$ решения задачи /24/-/25/ непосредственно дает значение фазы $\delta_{m\ell}(c)$. Поведение эффективного потенциала на бесконечности гарантирует сходимость итерационного процесса, который можно было использовать для нахождения фазовой функции. Поскольку вытянутые радиальные сфероидальные функции хорошо исследованы, то для многих дальнодействующих потенциалов уравнения /20/ и /25/ можно решать численными методами. В случае малой константы связи удобным методом решения фазовых уравнений оказывается

метод формальных рядов [9]. С помощью этого метода можно определить значения c в комплексной плоскости, являющиеся особыми точками функции $A_{m\ell}(c)$.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность И.В.Комарову за внимание к работе и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. "Мир", М., 1972.*
2. *Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. "Наука", М., 1976.*
3. *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, "Наука", М., 1976.*
4. *Ponomarev L.I., Somov L.N., J.Comp.Phys., 1976, 20, p.183.*
5. *Абрамов Д.И. и др. ОИЯИ, Р4-11729, Дубна, 1978.*
6. *Masson D., Prugovečki E. J.Math.Phys., 1976, 17, p. 297.*
7. *Иванов К.И. ОИЯИ, Р4-12560, Дубна, 1979.*
8. *Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. "Мир", М., 1978.*
9. *Atanasov A.A., Ivanov K.I. Acta Phys.Pol., 1975, B6, p.129.*

Рукопись поступила в издательский отдел
22 июня 1979 года.