СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4-5678

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б.Н. Захарьев, Ю.И. Фенин

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ РЕАКЦИЙ ОБЩЕГО ТИПА И МОДЕЛЬ ОБОЛОЧЕК

1971

P4-5678

Б.Н. Захарьев, Ю.И. Фенин

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ РЕАКЦИЙ ОБЩЕГО ТИПА И МОДЕЛЬ ОБОЛОЧЕК

Захарьев Б.Н., Фенин Ю.И. Р4-5678

Последовательное описание реакций общего типа и модель оболочек

Предлагается метод описания реакций, в котором правильная постановка граничных условий задачи рассеяния сочетается с разложением волновой функции системы частиц по базису, обычно используемому в модели оболочек при изучении связанных состояний. Это позволяет значительно приблизить технику расчёта в задачах дискретного спектра к технике расчёта непрерывного спектра.

Сообщения Объединенного института ядерных исследований

Дубна, 1971

Zakhariev B.N., Fenin Yu.I. P4-5678

Description of the Reactions of General Type and the Shell Model

A method for description of reactions is suggested, in which a proper formulation of scattering problem boundary conditions is combined with the expansion of wave functions of the whole system in the set of basic functions usually exploited in the ordinary shell model (bound states of nuclei). This allows one to make considerably similar calculation techniques for the problems of discrete and continuous spectrum.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna, 1971

В в е д е н и е

Наиболее общий и корректный подход к описанию нерелятивистских квантовых процессов рассеяния в системе многих тел осуществляется с помощью методов сильной связи каналов (см. обзор[1]). В этом подходе оказывается возможным свести к минимуму количество феноменологических предположений. В последние годы в данной области теории были достигнуты значительные успехи в разработке алгоритмов расчёта самого общего типа (например, с перераспределением частиц, с развалом системы на несколько свободных фрагментов). Однако решение уравнения Шредингера для многих частиц (уравнения в частных производных) в задачах непрерывного спектра все еще остается значительно более сложной проблемой, чем описание структуры связанных состояний.

Хотя различные методы единой теории ядерных реакций[2,3] довольно близки используемому при изучении структуры ядер приему смешивания конфигураций, они требуют создания программ для ЭВМ совершенно другого типа, в которых нельзя непосредственно использовать накопленный опыт, технику расчёта матричных элементов и т.п. Поэтому еще широко используются методы, когда, например, по высоковозбужденным состояниям системы частиц в поле бесконечной осцилляторной ямы определяют характеристики ядерных реакций. В этом подходе волновая функция задачи рассеяния (отличная от нуля в неограниченной области) представляется в виде линейной комбинации осцилляторных функций - базисных элементов из полного набора $\{\phi_i\}$ в пространстве L квадратично-интегрируемых функций.

С одной стороны, это представляется совершенно непоследовательным, но в то же время фактом является то обстоятельство, что в формуле для амплитуды реакции (в канале a)

$$t_a = \int \Phi_a^- V_a \Psi \, d\tau , \qquad (1)$$

где Φ_a^- – свободная по относительному движению фрагментов волна в канале a $(H_{0a} - E)\Phi_a = 0)$; V_a – взаимодействие, не учтенное в $H_{0a} = H - V_a$; отличный от нуля вклад дает лишь часть Ψ, определенная в ограниченной области, где $\Phi_a V_a \neq 0$. Действительно, перекрытие функций Φ_a и V_a на больших расстояниях в конфигурационном пространстве стремится к нулю.

Этот факт как бы наталкивает нас на поиск Ψ в виде разложения по простым функциям из L_2. Ведь таким образом можно с любой степенью точности представить часть функции Ψ в ограниченной области. Но здесь перед нами встает непреодолимое на первый взгляд препятствие. Уравнение Шредингера в частных производных имеет бесконечное число линейно-независимых решений, если не фиксировать определенные асимптотические условия, – и пробная функция

$$\Psi^N = \sum_i^N c_i \, \phi_i^{L_2} \qquad (2)$$

с коэффициентами c, найденными из обычного требования

$$\int \phi_j^{L_2} (H - E) \sum_i^N c_i \, \phi_i^{L_2} = 0, \; (j = 1, \ldots, N), \qquad (3)$$

казалось бы, будет линейной комбинацией всех этих нефизических решений, в которую интересующее нас решение дает, вообще говоря, лишь малый вклад.

Общая теория дифференциальных уравнений в частных производных в неограниченных областях/4/ подсказывает некоторые пути выхода из такого положения. Ниже мы кратко остановимся на этих возможностях, а затем перейдем к основным положениям предлагаемого метода. Это целесообразно, поскольку вносит дополнительную ясность в представления о свойствах уравнения Шредингера, хотя и не дает вполне удовлетворяющего нас решения задачи.

Принцип предельного поглощения /4/

Выделим в Ψ падающую волну Φ_{0a} в канале a

$$\Psi = X_a + \Phi_{0a} . \tag{4}$$

Тогда уравнение Шредингера можно представить в форме

$$(H-E)X_a = J_a \equiv (E - H)\Phi_{0a} = -V_a \Phi_{0a} , \tag{5}$$

где неоднородные члены J_a - известные функции (источники). Если в уравнении (5) ввести малую мнимую добавку $\pm i\epsilon$:

$$(H \mp i\epsilon - E) X_a^{\epsilon} = J_a , \tag{5a}$$

то уравнение (5a) имеет уже единственное решение в L_2 , которое в пределе $\epsilon \to 0$ переходит в нужное физическое решение с расходящимися (сходящимися) волнами. Можно воспользоваться этим обстоятельством для приближенного решения задач рассеяния, если искать X_a^{ϵ} в виде (см. приложение):

$$X_a^{\epsilon, N} = \sum_{i}^{N} c_i^{(\epsilon)} \phi_i^{L_2} . \tag{6}$$

Принцип предельной амплитуды [4]

Рассмотрим уравнение для функции Ω, зависящей не только от координат, но и от времени t:

$$\frac{d^2}{dt^2}\Omega_a(t) + H\Omega_a(t) = J_a e^{ikt}, \quad k^2 = 2mE, \tag{7}$$

с начальным условием

$$\Omega_a(0) = 0, \quad \left(\frac{d\Omega_a}{dt}\right)_{t=0} = 0 . \tag{8}$$

Уравнения (7) и (8) однозначно определяют $\Omega(t)$. При $t \to \infty$ $\Omega_a(t) \to X_a e^{ikt}$, где X_a соответствует физическому решению. Для каждого фиксированного t функция Ω отлична от нуля в конечной области конфигурационного пространства (волна $\Omega(t)$ не успевает за конечный промежуток времени распространиться неограниченно далеко). Благодаря этому, можно приближенно искать $\Omega(t)$ в виде разложения:

$$\Omega^N(t) = \sum_i^N c_i(t)\phi_i^{L_2} . \tag{9}$$

Для коэффициентов $c_i(t)$ получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которую легко решить на ЭВМ. При достаточно большом t в интересующей нас области конфигурационного пространства устанавливается стационарный режим колебаний (по закону e^{ikt}). Выделяя эту временную зависимость, получаем интересующую нас функцию X_a, а следовательно, и Ψ_a (см. приложение).

Основные уравнения

Принципы предельной амплитуды и предельного поглощения позволяют в принципе строить решение X_a задачи рассеяния с помощью приближения к нему из класса L_2. Перейдем теперь к более эффективному способу такого построения.

Выше уже отмечалось, что уравнение Шредингера и эквивалентное ему уравнение (5) имеют бесконечное число решений, и это рассматривалось как препятствие на пути построения Ψ с помощью функций из L_2.

Хорошо известно, что при интегрировании обыкновенных дифференциальных уравнений (или их систем) используется полнота конечного набора линейно-независимых решений. Это позволяет из вспомогательных решений задачи с условиями на одном конце интервала, которые легко получить на ЭВМ, строить искомое решение с граничными условиями на обоих концах интервала интегрирования. Казалось бы, для дифференциальных уравнений в частных производных этот путь закрыт. Однако замечательным свойством уравнения Шредингера является то, что в классе нерастущих функций оно имеет лишь столько линейно-независимых решений, сколько открыто каналов в системе с данным значением полной энергии. В ряде задач их число строго конечно, в общем же случае оказывается, что в хорошем приближении можно ограничиться конечным числом открытых каналов (например, пренебречь высшими орбитальными моментами ℓ).

Благодаря этому, нам достаточно найти лишь нужное число линейно-независимых решений. Будем искать X_α в (5) в виде разложения

$$X_\alpha^N = \sum_i^N c_{\alpha i} \phi_i^{L_2} . \tag{10}$$

Коэффициенты $c_{\alpha i}$ определяем согласно обычной процедуре Галеркина:

$$\int d r\, \phi_j^{L_2}(H-E) \sum_i^N c_{\alpha i} \phi_i^{L_2} = -\int d r\, \phi_j^{L_2} V_\alpha \Phi_{0\alpha} \; ; \; j = 1,2,\dots,N . \tag{11}$$

Перепишем (11) в виде:

$$(\epsilon_j - E) c_{\alpha j} + \sum_i w_{ji} c_{\alpha i} = j_\alpha \equiv \langle \phi_j^{L_2} J_\alpha \rangle ; \; j = 1,2,\dots,N . \tag{11a}$$

Здесь ϵ_j – собственные значения модельного гамильтониана (например, для независимых частиц в поле осциллятора) $H_{мод} = T + V_{мод}$; $H_{мод}\phi_j = \epsilon_j \phi_j$. Матричные элементы w_{ji} определяются по формуле:

$$w_{ji} = \langle \phi_j, (V - V_{мод.})\phi_i \rangle . \tag{12}$$

Систему алгебраических уравнений (11а) можно еще представить в матричной форме:

$$M \vec{c}_{\alpha} = \vec{j}_{\alpha} . \tag{11б}$$

Основная вычислительная трудность решения системы заключается в расчёте матричных элементов w_{ji} и в оборачивании матрицы M. Но эта часть задачи почти в точности совпадает с процедурой, которую необходимо выполнить в случае задачи на связанные состояния в модели оболочек с учётом смешивания конфигураций[x]. После этого простым умножением M^{-1} на известные вектора $\vec{j}_{\alpha}$ получаем $\vec{c}_{\alpha}$, а, следовательно, и X_{α}. Таким образом, мы можем вычислить столько линейно-независимых решений уравнения Шредингера, сколько имеется открытых каналов (выделяя каждый раз падающую волну (см.[4]) в новом канале α). Волновую функцию Ψ интересующего нас процесса строим в виде линейной комбинации

$$\Psi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \Psi_{\alpha} . \tag{13}$$

Константы a_{α} определяются заданием амплитуд A_{α} при падающих волнах во всех открытых каналах:

$$A_{\alpha} = \frac{1}{k} \int \Phi_{\alpha}^{+} V_{\alpha} \sum_{\beta} a_{\beta} \Psi_{\beta} \, d\tau , \tag{14}$$

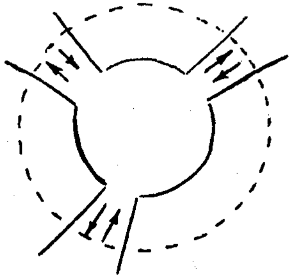
---

[x] Отличие состоит лишь в замене остаточных взаимодействий на $V - V_{мод}$ в w_{ji}.

где Φ_a^+ – свободная расходящаяся волна в парциальном канале a. Формулу (14) легко проверить, заменяя $V_a \Psi_\beta$ на $-(H_{0a}-E)\Psi_\beta$ и перебрасывая действие оператора $(E - H_{0a})$ налево.

Уравнения (14) представляют собой систему алгебраических уравнений для a_a. Решая (14) и подставляя a_a в (13), получаем Ψ, а по формуле (1) определяем парциальные амплитуды исследуемого процесса.

Можно пояснить предложенный метод решения задач рассеяния. Оказывается, вспомогательным решениям $\Psi_a(X_a)$ можно придать определенный физический смысл. Представление X_a в виде суммы функций ϕ_i, исчезающих на больших расстояниях, соответствует введению в гамильтониан системы бесконечных потенциальных стенок модельного среднего поля $V_{мод}$. Волна, порожденная источником J_a (который возникает благодаря выделенной в Ψ падающей волне Φ_{0a} в канале a), "бьется" в замкнутой области, схематически изображенной на рисунке.



Таким образом, X_a соответствует решению уравнения Шредингера с граничными условиями, отвечающими стоячим волнам во всех каналах: расходящиеся волны ударяются о потенциальные стенки (пунктирная линия) и полностью отражаются от них. Ситуация подобна задаче (3) на собственные значения, только теперь, благодаря неоднородности системы (11), решение существует при любых E выше порога упругого рассеяния[x].

---

x/ Кроме точек, соответствующих собственным значениям однородной системы, получающейся из (11) отбрасыванием j_a. Решение системы вблизи этих точек можно получить, решая вместо (11) соответствующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Вопрос о сингулярных точках решений рассматривался подробнее в /1/.

Комбинация решений Ψ_a в (13) позволяет уничтожить сходящиеся волны в тех каналах, где по условиям задачи их не должно быть.

При достаточном числе членов в разложении (10) результаты не должны зависеть от выбора модельного поля $V_{мод}$, поскольку его введение компенсируется соответствующим учётом смешивания конфигураций (см. (12)).

Определенное преимущество предлагаемого здесь метода по сравнению с методом выделения асимптотики[3] заключается в том, что используются разложения (10) по набору ортонормированных функций.

Это должно проявиться в том, что система (11) будет более устойчивой по отношению к погрешностям, в то время как в[3] использовался смешанный базис (не полностью ортонормированный), и это приводило к снижению точности численных расчётов - система уравнений хуже обусловлена (см.[5]).

Заключение

В данной работе проблема описания реакций общего типа (с перераспределением частиц и т.п.) решается иначе, чем в методе выделения асимптотик[3]. По новой методике не требуется выделять из Ψ асимптотики расходящихся волн с неизвестными амплитудами, вводить режущие факторы для исправления сингулярного поведения пробных функций на малых расстояниях. Это позволяет придавать больше физического смысла относительному весу модельных состояний, по которым производится разложение X_a в (10).

Представляет интерес сформулировать в дальнейшем этот метод (или его вариант) на основе вариационного принципа[6], а также рассмотреть вопрос о возможности его использования для получения границ для параметров рассеяния[7].

Определенный предел увеличения точности расчётов с использованием различных методов многоканальной связи устанавливается максимальной размерностью систем уравнений, которые можно решать на имеющихся ЭВМ, а также устойчивостью этих систем[5] по отношению к различным погрешностям, допускаемым в расчётах. Отметим, однако, что имеется возможность существенно продвинуться за указанный предел, используя комбинацию различных методов. В волновой функции, усредненной по различным методам, ошибки взаимно подавляются (если они некоррелированы в разных методах) по закону $1/\sqrt{N}$, где N – число независимых методов. Это подобно тому, как в радиотехнике можно добиться усиления полезного сигнала по сравнению с шумом, многократно передавая его и складывая сигналы при приеме (полезные сигналы когерентно складываются, а шумы в результате их случайного характера относительно ослабевают).

Приложение

1. При фиксированном N нельзя устремлять ϵ в (6) к нулю. Для каждого N существует оптимальная величина ϵ, при которой приближенное решение меньше всего отклоняется от искомого.

2. Не следует при фиксированном N в (9) неограниченно увеличивать интервал интегрирования системы, полученной по методу Галеркина из (7) и (9):

$$\int dr\,\phi_j^{L_2}\left\{\frac{d^2}{dt^2}+H\right\}\sum_i^N c_i(t)\phi_i^{L_2} = \int dr\,\phi_j^{L_2} J_a e^{ikt} \quad ; j=1,2,\dots,N.$$

Значение t не должно превышать время, за которое волна успевает распространиться в ту область, где $\phi_i^{L_2}$ $(i=1,\dots,N)$ недостаточно точно описывают искомое решение.

Авторы выражают благодарность В.Л. Шмонину, сотрудничество с которым стимулировало данное исследование, а также И.Ф. Амирханову, О. Лхагве, В.П. Пермякову, Я.А. Смородинскому, Р. Эрамжяну за полезное обсуждение результатов.

Литература

1. В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Пробл. физ. эл. част. и атомн. ядра, 2, №2, Москва, Атомиздат, 1971.
2. H. Feshbach. Ann.Phys. (N.Y.) 5, 357 (1958); 19, 287 (1962).
3. Т.Г. Ефименко, В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Ann. Phys., 47, 275 (1968).

4. Б.Р. Вайнберг. УМН, 31, вып. 3 (129), 115 (1966).
5. Б.Н. Захарьев, В.Л. Шмонин. Сообщение ОИЯИ, Р4-5168, Дубна, 1970.
6. Т.Г. Ефименко, Б.Н. Захарьев, О. Лхагва. Изв. АН СССР, 34, 1798 (1970).
7. Б.Н. Захарьев, О. Лхагва, С.А. Ниязгулов, Ю.И. Фенин. Сообщение ОИЯИ, Р4-5660, Дубна, 1971; Б.Н. Захарьев, В.П. Пермяков, Ю.И. Фенин. Сообщение ОИЯИ, Р4-5332, Дубна, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 марта 1971 года.