СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 6834

В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев, С.А.Ниязгулов,
Ю.И.Фенин

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ЭФФЕКТИВНЫЙ УЧЕТ ВИРТУАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

1972

Р4 - 6834

В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев, С.А.Ниязгулов,
Ю.И.Фенин

ЭФФЕКТИВНЫЙ УЧЕТ ВИРТУАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

При описании рассеяния в квантовых системах с числом частиц, большим двух, с помощью прямых методов /см. обзор /1/; эти методы называют еще "приближением сильной связи каналов" или "единой теорией реакций"/ среди прочих проблем возникают следующие.

1. Как выбрать базисный набор известных функций Φ_β, из которых строится волновая функция системы Ψ, так, чтобы он представлял собой <u>чисто дискретное</u> множество? То есть, чтобы <u>конечного</u> числа членов в разложении

$$\Psi = \sum_{\beta} F_\beta \Phi_\beta \qquad /1/$$

было /хотя бы в принципе/ достаточно для сколь угодно точной аппроксимации Ψ.

2. Как избавиться от требования, чрезвычайно ограничивающего свободу выбора базиса $\{\Psi\}$, чтобы функции Φ_β строго соответствовали краевым /асимптотическим/ условиям, накладываемым на решение Ψ уравнения Шредингера

$$(H - E)\Psi = 0 \qquad /2/$$

для конкретно рассматриваемой системы?

Данная работа касается указанных проблем.

Дальнейшие рассуждения удобно проводить на простом примере системы трех частиц.

Будем предполагать, что силы между частицами и энергия E системы выбраны таким образом, что возможно лишь упругое и неупругое рассеяние без перераспределения частиц.

Пусть частица 1 падает на потенциальную яму V, в которой в связанном состоянии находится частица 2 /см. рисунок/.

Гамильтониан системы имеет вид

$$H = -\frac{h^2}{2m_1}\Delta_{\bar{r}_1} - \frac{h^2}{2m_2}\Delta_{\bar{r}_2} + V(r_1) + V(r_2) + V_{12}(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|), \qquad /3/$$

где V_{12} - потенциал взаимодействия частиц 1 и 2.

Поскольку предполагается, что частица 2 не может покинуть потенциальную яму, волновая функция Ψ всей системы имеет неисчезающую асимптотику лишь при $r_1 \to \infty$:

$$\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)_{r_1 \to \infty} \approx e^{i\bar{k}_{a_0}\bar{r}_1}\Phi_{a_0}(r_2) + \sum_{a\ell m}{}' q_{\ell m}\frac{e^{ik_a r_1}}{r_1}Y_{\ell m}(\theta_1, \phi_1)\Phi_a(\bar{r}_2). \qquad /4/$$

Здесь $\Phi_a(\bar{r}_2)$- волновые функции мишени

$$h_2\Phi_a(\bar{r}_2) \equiv \{-\frac{h^2}{2m_2}\Delta_{\bar{r}_2} + V(r_2)\}\Phi_a(\bar{r}_2) = \epsilon_a\Phi_a(\bar{r}_2), \qquad /5/$$

$$k_a^2 = 2m_1(E - \epsilon_a),$$

а a - обозначает набор квантовых чисел, характеризующих состояния частицы 2 в яме $V(r_2)$.

Суммирование в /4/ ведется только по открытым каналам с $E > \epsilon_a$, чему соответствует штрих у знака Σ.

Один из способов решения /2/ для данной системы заключается в построении Ψ с помощью функций мишени Φ_a в виде комбинации типа /1/. Однако в набор $\{\Phi_a\}$ наряду с дискретными связанными состояниями входит и непрерывное множество состояний сплошного спектра. В результате, начиная с определенного приближения /когда в сумме /1/ учтены все связанные состояния мишени/, дальнейшее уточнение аппроксимации Ψ невозможно без учета в разложении Ψ наряду с суммой и интеграла по состояниям непрерывного спектра значений a:

$$\Psi = \sum_a F_a \Phi_a + \int da\, F_a \Phi_a . \qquad /6/$$

Но тогда задача сводится к нахождению континуума неизвестных коэффициентов F_a, что значительно труднее, чем искать конечное число коэффициентов разложения Ψ по чисто дискретному базису.

Для описания упругого рассеяния Ротенбергом /2/ было предложено использовать счетный набор штурмовских функций. Но этот метод не годился для неупругих процессов.

Ниже будет показано, как приближенная волновая функция $\Psi(\bar r_1, \bar r_2)$ системы может быть построена с помощью произвольного полного набора функций $\tilde{\tilde\Phi}_\beta(\bar r_2)$ в пространстве L_2 /квадратично интегрируемых функций/*.

$$\Psi^N(\bar r_1, \bar r_2) = \sum_{\beta LM}^{N} \tilde{\tilde F}^N_{\beta LM}(r_1)\frac{1}{r_1} Y_{LM}(\Omega_1)\tilde{\tilde\Phi}_\beta(\bar r_2) \equiv \sum_{\beta LM}^{N} \frac{\tilde{\tilde F}^N_{\beta LM}(r_1)}{r_1} \tilde{\tilde\Phi}_{\beta LM}(\Omega_1, \bar r_2). \qquad /7/$$

В качестве $\tilde{\tilde\Phi}_\beta(\bar r_2)$ можно, например, взять осцилляторные функции. Для коэффициентов $\tilde{\tilde F}_{\beta LM}$ получаем из /2/ систему обыкновенных дифференциальных уравнений /подставляя /7/ в /2/, умножая результат слева на $\tilde{\tilde\Phi}_{\beta LM}$ и интегрируя по Ω_1, $\bar r_2$ /:

$$\left[-\frac{1}{2m_1}\frac{d}{dr_1^2} + \frac{L(L+1)}{2m_1 r_1^2} - E\right]\tilde{\tilde F}^N_{\beta LM}(r_1) + \sum_{\beta' L' M'} V_{\beta LM\beta' L' M'}(r_1)\tilde{\tilde F}^N_{\beta' L' M'}(r_1) = 0, \qquad /8/$$

где

$$V_{\beta LM,\beta' L' M'}(r_1) = \langle \tilde{\tilde\Phi}_{\beta LM} | -\frac{h^2}{2m_2}\Delta_{\bar r_2} + V_1 + V_2 + V_{12} | \tilde{\tilde\Phi}_{\beta' L' M'} \rangle . \qquad /9/$$

Система /8/ по форме подобна уравнениям для связанных каналов при использовании в качестве базиса функций мишени Φ_a. Но в отличие от случая, когда Ψ строилась в виде /6/, теперь коэффициенты $\tilde{\tilde F}^N_{\beta LM}$ в /7/ и /8/ не имеют физического смысла функций каналов /чтобы подчеркнуть этот факт, мы ввели волну ≈ над $F^N_{\beta LM}$ /. С этим связана проблема задания граничных /асимптоти-

---

* Здесь N - общее число членов в суммах в /7/.

ческих/ условий на $\tilde{\tilde{F}}_{\beta LM}$ при $r_1' \to \infty$. Дело в том, что уравнения /8/ не расцепляются на асимптотике /как уравнения для связанных каналов/: элементы матрицы $V_{\beta LM \beta' L' M'}(r)$, осуществляющие зацепление уравнений в системе /8/, не исчезают на бесконечности. Правда, матрица /9/ становится при больших r_1 постоянной:

$$V_{\beta LM\beta' L' M'}(r_1)_{r_1 \to \infty} \to V^{\infty}_{\beta\beta'} = \langle \tilde{\tilde{\Phi}}_{\beta}(\bar{r}_2)| -\frac{h^2}{2m_2}\Delta \bar{r}_2 + V(r_2) | \tilde{\tilde{\Phi}}_{\beta'}(\bar{r}_2)\rangle = const, \qquad /10/$$

так что /8/ асимптотически переходит в систему обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и имеются методы решения таких систем с конечным числом уравнений /см., например, [3] /.

Матрица $V^{\infty}_{\beta\beta'}$, возникающая здесь, в задаче трех тел, является в то же время матрицей системы уравнений задачи на собственные значения частицы 2 в поле $V(r_2)$ при поиске приближенных функций мишени $\Phi^N_a(\bar{r}_2)$ в виде разложения по $\tilde{\tilde{\Phi}}_{\beta}(r_2)$:

$$\Phi^N_a(r_2) = \sum_{\beta}^{N} C^N_{a\beta} \tilde{\tilde{\Phi}}_{\beta}(\bar{r}_2). \qquad /11/$$

Действительно, подставляя /11/ в уравнение Шредингера /5/ для внутреннего состояния мишени, получаем для $C^N_{a\beta}$ по методу Ритца, учитывая ортонормированность функций $\tilde{\tilde{\Phi}}_{\beta}$:

$$\epsilon_a C^N_{a\beta} + \sum_{\beta}^{N} V^{\infty}_{\beta\beta'} C^N_{a\beta'} = 0, \qquad /12/$$

$$\left(\sum_a^N C^N_{a\beta} C^N_{a\beta'} = \delta_{\beta\beta'}; \quad \sum_{\beta}^N C^N_{a\beta} C^N_{a'\beta} = \delta_{aa'}\right).$$

Следовательно, корни характеристического уравнения

$$|(x^2 + E)\delta_{\beta\beta'} + V_{\beta\beta'}| = 0 \qquad /13/$$

для системы N дифференциальных уравнений, в которую переходит /8/ при $r_1 \to \infty$:

$$-\frac{h^2}{2m_1} \tilde{\tilde{F}}''^{N}_{\beta LM} - E \tilde{\tilde{F}}^N_{\beta LM} + \sum_{\beta'}^{N} V^{\infty}_{\beta\beta'} \tilde{\tilde{F}}^N_{\beta'} = 0, \qquad /14/$$

равны

$$ik_a = \pm i\sqrt{E - \epsilon_a^N} \qquad \text{для} \quad E > \epsilon_a^N ;$$
$$\kappa_a = \pm\sqrt{\epsilon_a^N - E} \qquad \text{для} \quad E < \epsilon_a^N , \qquad /15/$$

где ϵ_a^N - приближенные значения уровней мишени *.

Другим следствием совпадения матриц коэффициентов зацепления в /12/ и /14/ является то, что система /14/ диагонализуется с помощью преобразования, которому отвечает матрица, составленная из коэффициентов $C_{a\beta}$, образующих решения уравнений /12/.

Чтобы убедиться в этом, подставим

$$\tilde{\tilde{F}}^N_{\beta LM} = \sum_{a'}^{N} C^N_{a'\beta} F^N_{a'LM} \qquad /16/$$

в /14/ и воспользуемся /12/:

$$-\frac{h^2}{2m_1}\sum_{a'}^{N} C^N_{a\beta} F''^N_{a'LM} - \sum_{a'}^{N}(E - \epsilon^N_{a'})C^N_{a'\beta} F^N_{a'LM} = 0 . \qquad /17/$$

Умножим полученные уравнения на $C^N_{a\beta}$, просуммируем по β, учитывая, что $\sum_\beta C^N_{a\beta} C^N_{a'\beta} = \delta_{aa'}$:

$$-\frac{h^2}{2m_1} F''^N_{aLM}(r_1) - (E - \epsilon^N_a) F^N_{aLM}(r_1) = 0 . \qquad /18/$$

Таким образом, линейные комбинации

$$F^N_{aLM}(r_1)_{r_1 \to \infty} \approx \sum_{\beta}^{N} C^*_{\beta a} \tilde{\tilde{F}}^N_{\beta LM} \qquad /19/$$

являются решениями уравнений, получающихся после "диагонализации" /14/. Каждая из функций F^N_{aLM} отвечает только одной паре корней /15/ и имеет асимптотический вид:

---

* По методу Ритца приближенные значения ϵ^N_a получаются лежащими выше истинных: $\epsilon^N_a \geq \epsilon_a$. Поэтому, например, одна из неточностей описания процесса рассеяния с помощью системы /8/ состоит в том, что каналы открываются при несколько больших значениях энергии $E = \epsilon^N_a$, чем на самом деле.

Часть функций Φ^N_a отвечает собственным значениям $\epsilon^N_a > 0$, лежащим в области непрерывного спектра мишени.

$$F^N_{\alpha LM}(r_1)_{r\to\infty} \approx A_{\alpha LM}\, e^{-ik_\alpha r_1} + B_{\alpha LM}\, e^{ik_\alpha r_1} \quad \text{при} \quad E > \epsilon^N_\alpha, \qquad /20/$$

$$F^N_{\alpha LM}(r_1)_{r_1\to\infty} \approx A_{\alpha LM}\, e^{\kappa_\alpha r_1} + B_{\alpha LM}\, e^{-\kappa_\alpha r_1} \quad \text{при} \quad E < \epsilon^N_\alpha, \qquad /21/$$

т.е. $F^N_{\alpha LM}$ представляют собой функции каналов, соответствующих мишени в состояниях α. На эти $F^N_{\alpha LM}$ /линейные комбинации $\tilde{\tilde{F}}^N_{\beta LM}$ / и следует накладывать граничные условия конкретной физической задачи: нормировать падающие волны во входных каналах и требовать равенства нулю коэффициентов $A_{\alpha LM}$ во всех остальных /открытых и закрытых/. Если, например, входным является канал α_0,

$$\sum_\beta C^*_{\beta\alpha}\, \tilde{\tilde{F}}^N_{\alpha LM} = F^N_{\alpha LM}(r_1)_{r_1\to\infty} \approx \frac{1}{k_{\alpha_0}} \sin(k_{\alpha_0} r_1 - L\pi/2)\,\delta_{\alpha\alpha_0} + q_{\alpha LM} \exp(ik_\alpha r_1 - iL\pi/2) \quad \text{при} \quad E > \epsilon^N_\alpha, \qquad /22/$$

$$\sum_\beta C^*_{\beta\alpha}\, \tilde{\tilde{F}}^N_{\alpha LM} = F^N_{\alpha LM}(r_1)_{r_1\to\infty} \approx B_{\alpha LM} \exp(-\kappa_\alpha r_1) \quad \text{при} \quad E < \epsilon^N_\alpha .$$

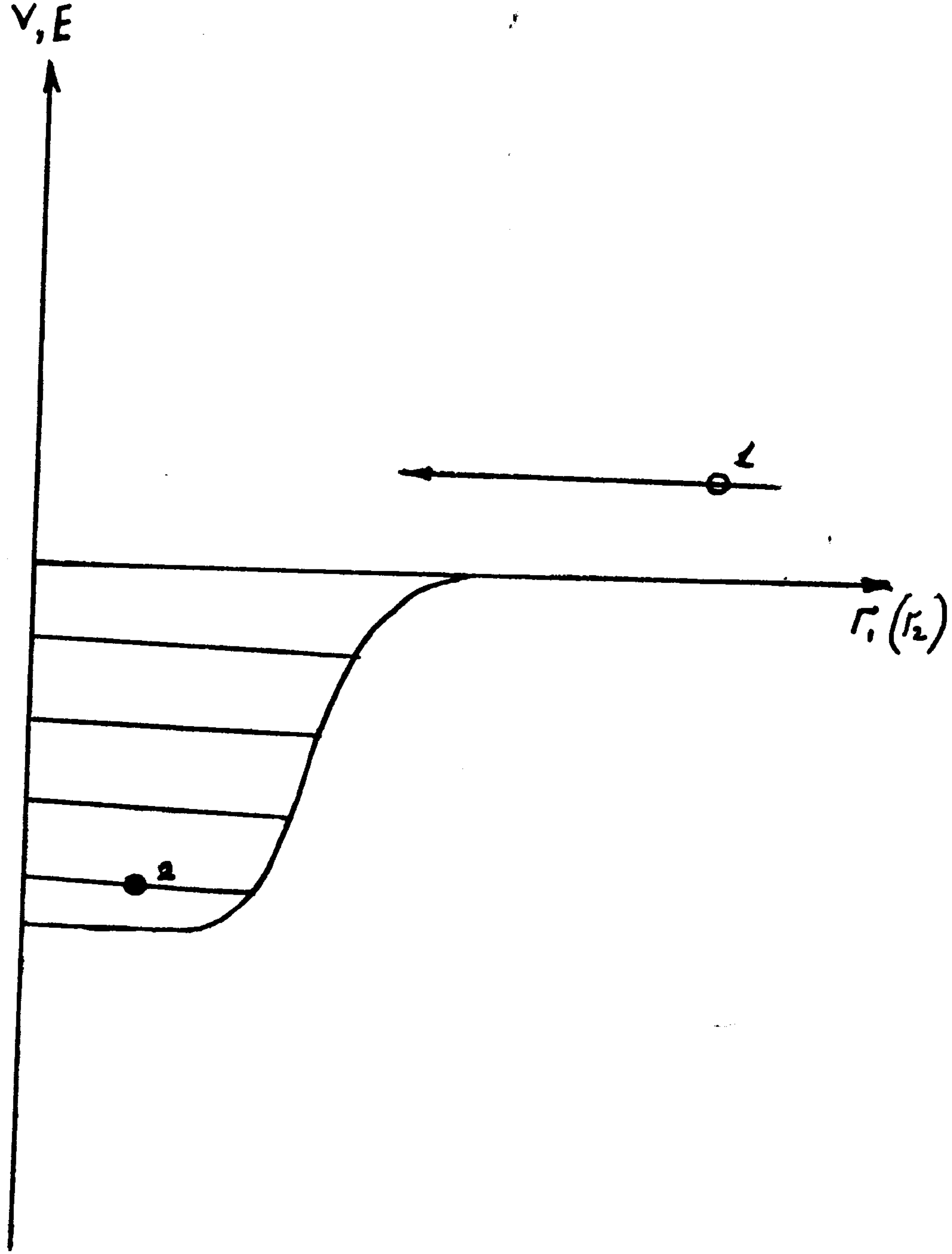
Итак, для определения Ψ^N нужно найти значения ϵ^N_α, решить систему /12/ и полученные константы $C_{\alpha\beta}$ использовать для задания граничных условий /22/ на $\tilde{\tilde{F}}^N_{\beta LM}$. С помощью /22/ можно стандартным путем найти коэффициенты комбинации, в которой входят в Ψ^N линейно независимые решения системы /8/, и амплитуды рассеяния $q_{\alpha LM}$.

Увеличение N соответствует одновременно уточнению аппроксимации связанных состояний $\Phi^N_\alpha(r_2)$ и более полному учету виртуальных возбуждений мишени в состояния непрерывного спектра.

Литература

1. *В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. ЭЧАЯ, 2, №2, 499 /1971/.*
2. *M.Rotenberg. Ann.Phys., 19, 292 (1962).*
3. *И.Н.Бронштейн, К.А.Семендяев. Справочник по математике, Москва, Наука , 1964.*

Рукопись поступила в издательский отдел
7 декабря 1972 года.


V, E
1
2
$r_1\ (r_2)$