ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4 - 7815

В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев,
С.А.Ниязгулов, А.А.Сузько

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА В R -МАТРИЧНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7815

В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев,
С.А.Ниязгулов, А.А.Сузько

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА В R -МАТРИЧНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Направлено в ТМФ

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о восстановлении сил ограниченного радиуса действия по данным рассеяния привлекает к себе особое внимание ввиду того, что в этом случае спектральные характеристики системы могут быть сведены к дискретному набору параметров [1–4]. В данной работе предлагается модификация формализма Гельфанда-Левитана, в котором в качестве таких параметров выступают привычные в ядерной физике величины: положения резонансов E_λ и их приведенные ширины γ_λ^2 /вместо функций Иоста в классическом подходе/. Развитый здесь метод позволяет, например, в обычном для приложений конечно-разностном приближении для уравнения Шредингера получить "точный" вариант обратной задачи, когда построение потенциала сводится к ограниченному числу алгебраических операций /выполнимых с любой степенью точности на ЭВМ/ [5].

Метод применим и к дальнодействующим силам с известным поведением при $r \geq a$, а также распространяется на системы, описываемые многоканальными уравнениями /в частности: к рассеянию частицы в поле, не обладающем сферической симметрией/.

Показано, как распространить на рассматриваемые здесь задачи результат [6] о восстановлении потенциала *по двум* спектрам, причем это удается сделать именно благодаря дискретности спектра в R -матричном формализме.

2. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА $V(r)$

Пусть $u_\lambda(r)$ решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\Psi_\ell+V(r)\Psi_\ell=E\Psi_\ell \qquad /1/$$

с $V(r\geq a)=0$, удовлетворяющее однородным краевым условиям /мы будем опускать индекс ℓ /

$$u_\lambda(0)=0\ ;\ u'_\lambda(a)/u_\lambda(a)=B/a\,, \qquad /2/$$

где B - произвольная константа. Такие решения существуют лишь при *дискретных* значениях энергии $E=E_\lambda$.

С помощью величин E_λ и $\gamma_\lambda\equiv\frac{\sqrt{2Ma}}{\hbar}u_\lambda(a)$ параметризуется *непрерывная* зависимость от энергии R-матрицы [7] /однозначно связанной с матрицей рассеяния $S(E)$/:

$$R(E)=\sum_\lambda\frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda-E}\,. \qquad /3/$$

Функции $u_\lambda(r)$ образуют <u>полный</u> ортонормированный набор - базис в пространстве квадратично-интегрируемых функций, заданных на интервале $0\leq r\leq a$:

$$\int_0^a u_\lambda(r)\,u_{\lambda'}(r)\,dr=\delta_{\lambda\lambda'}\,; \qquad /4/$$

$$\sum_\lambda u_\lambda(r)u_\lambda(r')=\delta(r-r'). \qquad /5/$$

Рассмотрим еще решения $\phi(r)$ уравнения Шредингера /1/ с неоднородными условиями в точке $r=a$:

$$\phi(a)=\frac{\hbar}{\sqrt{2Ma}}\,;\ \ \phi'(E,a)/\phi(E,a)=B/a. \qquad /6/$$

Благодаря тому, что логарифмические производные при $r=a$ для u_λ и ϕ совпадают /см. /2/ и /6//, эти функции при $E=E_\lambda$ отличаются друг от друга лишь постоянным множителем:

$$u_\lambda(r)=\phi(E_\lambda,r)\gamma_\lambda \qquad /7/$$

Это позволяет переписать соотношение полноты /5/, являющееся исходным в обратной задаче, в виде:

$$\sum_\lambda\phi(E_\lambda,r)\phi(E_\lambda,r')\gamma_\lambda^2\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\phi(E,r)\phi(E,r')\,d\rho(E)=\delta(r-r') \qquad /8/$$

где $\rho(E)$ - *спектральная* функция*:

$$\rho(E)=\sum_\lambda\theta(E-E_\lambda)\gamma_\lambda^2\ ;\ \ \theta(x)=\{0\ \text{при}\ x<0;1\ \text{при}\ x\geq0\}. \qquad /9/$$

Равенство /8/ можно рассматривать как условие *ортонормировки по мере* ρ функций ϕ /как функций энергетической /!/ переменной/. С учетом этого факта процесс построения решений ϕ уравнения Шредингера с взаимодействием по известным функциям свободного движения $\overset{\circ}{\phi}$ /являющихся решениями /1/ с $V(r)=0$ / представляет собой простую ортогонализацию $\overset{\circ}{\phi}$ по мере $\rho(E)$. По найденным же ϕ легко восстановить с помощью /2/ искомый потенциал $V(r)$. Покажем это.

С помощью функции $K(r,r')$, которую еще нужно определить, выразим ϕ через $\overset{\circ}{\phi}$, удовлетворяющие тем же граничным условиям /6/, что и ϕ так же, как это делается, например в [8]:

$$\phi(E,r)=\overset{\circ}{\phi}(E,r)+\int_r^a K(r,r')\overset{\circ}{\phi}(E,r')\,dr'. \qquad /10/$$

Построенные таким образом функции ϕ должны быть согласно /8/ ортогональны по мере $\rho(E)$. Этого можно добиться, определяя $K(r,r')$ из требования ρ-ортогональности $\phi(E,r)$ к функциям $\overset{\circ}{\phi}(E,r')$ при $r'>r$:

$$\int\phi(E,r)\overset{\circ}{\phi}(E,r')\,d\rho(E)=0 \qquad \text{при}\ \ r'>r. \qquad /11/$$

Используя /10/ и /11/, получаем интегральное уравнение для $K(r,r')$ /уравнение типа Гельфанда-Левитана/:

---

*Именно благодаря выбору граничных условий для $\phi(E,r)$ в форме /6/, спектральная функция здесь выражается через параметры R-матричной теории E_λ, γ_λ.

$$K(r,r')+Q(r,r')+\int_r^a K(r,r'')Q(r'',r')dr''=0, \qquad /12/$$

где функция Q задается параметрами $\{E_\lambda, \gamma^2_\lambda\}$/см. /9//

$$Q(r,r')=\int\sum_\lambda \overset{\circ}{\phi}(E_\lambda,r)\overset{\circ}{\phi}(E_\lambda,r')d(\rho(E)-\overset{\circ}{\rho}(E)). \qquad /13/$$

Связь искомого потенциала с K, определяемым из /12/, остается той же, что и в других подходах [8] *

$$V(r)=\left|-\frac{\hbar^2}{M}\frac{d}{dr}K(r,r)\right.. \qquad /14/$$

Предложенный формализм применим также к потенциалам, имеющим при $r \geq a$ известный "хвост". В этом случае только несколько модифицируется связь R-матрицы с матрицей рассеяния [5].

В зависимости от выбора величины константы B при задании граничных условий /2/, /6/ для $u_\lambda(r)$, $\phi(E,r)$ и $\overset{\circ}{\phi}(E,r)$ изменяются параметры $E_\lambda, \gamma^2_\lambda$. При этом оказывается возможным восстановить потенциал $V(r)$, исходя из информации *о двух* наборах собственных значений $\{E_{1\lambda}\}$ и $\{E_{2\lambda}\}$, отвечающих разным значениям B : B_1 и B_2 /см. приложение/.

3. ВОССТАНОВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ $||V_{\alpha\alpha'}(r)||$.

Многие задачи ядерной и атомной физики сводятся к решению т.н. многоканальной системы уравнений [9] :

$$-\frac{\hbar^2}{2M}F''_\alpha(r)+\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\ell_\alpha(\ell_\alpha+1)}{r^2}F_\alpha(r)+\sum_{\alpha'}V_{\alpha\alpha'}(r)F_{\alpha'}(r)= \qquad /15/$$
$$=(E-\epsilon_\alpha)F_\alpha(r),$$

в которой связь волновых функций каналов α осуществляется с помощью матрицы взаимодействия $||V_{\alpha\alpha'}(r)||$.

Пусть $V_{\alpha\alpha'}(r \geq a)=0$. . В качестве базисных функций обратной задачи выбираем решения системы /15/, удовлетворяющие условиям:

$$u_{\alpha\lambda}(0)=0; \quad u'_{\alpha\lambda}(a)/u_{\alpha\lambda}(a)=B_\alpha/a ; \qquad /16/$$

$$\sum_\alpha\int u_{\alpha\lambda}(r)u_{\alpha\lambda'}(r)dr=\delta_{\lambda\lambda'}; \qquad /17/$$

$$\sum_\lambda u_{\alpha\lambda}(r)u_{\alpha'\lambda}(r')=\delta_{\alpha\alpha'}\delta(r-r'), \qquad /18/$$

которые представляют собой матричные обобщения /2/, /4/ и /5/.

Дискретные собственные значения E_λ и приведенные ширины $\gamma_{\alpha\lambda}\equiv\frac{\sqrt{2Ma}}{\hbar}u_{\alpha\lambda}(a)$ определяют R-матрицу:

$$R_{\alpha\alpha'}(E)=\sum_\lambda\frac{\gamma_{\alpha\lambda}\gamma_{\alpha'\lambda}}{E_\lambda-E}. \qquad /19/$$

Роль вспомогательных решений ϕ в многоканальном случае играет матрица Ф решений системы /15/ с элементами $\phi_{\alpha\beta}(E,r)$, для которых на границе $r=a$ выполняются соотношения /см. /16//:

$$\phi_{\alpha\beta}(E,r)=\frac{\hbar}{\sqrt{2Ma}}\delta_{\alpha\beta}\ ;\ \phi'_{\alpha\beta}(E,r)=\frac{B_\alpha}{a}\phi_{\alpha\beta}(E,r). \qquad /20/$$

По аналогии с /7/, собственная *векторная* функция $u_{\alpha\lambda}(r)$ получается умножением *матрицы* $\Phi(E_\lambda,r)$ на *вектор* $\gamma_{\alpha\lambda}$:

$$u_{\alpha\lambda}(r)=\sum_\beta\phi_{\alpha\beta}(E_\lambda,r)\gamma_{\beta\lambda}. \qquad /21/$$

Спектральная функция $\rho(E)$ в многоканальной задаче является матрицей, образованной из двух векторов γ_λ :

---

* При выводе /14/ используется тот факт, что согласно /10/ /13/ и условиям /6/ для $\overset{\circ}{\phi}$:

$$\frac{\partial Q(r,r')}{\partial r}\Big|_{r=a}=\frac{B}{a}Q(a,r'),\quad \frac{\partial Q(r,r')}{\partial r'}\Big|_{r'=a}=\frac{B}{a}Q(r,a);$$

$$\frac{\partial K(r,r')}{\partial r}\Big|_{r=a}=\frac{B}{a}K(a,r');\quad \frac{\partial K(r,r')}{\partial r'}\Big|_{r'=a}=\frac{B}{a}K(r,a).$$

$$\rho_{\eta\kappa}(E) = \sum_{\lambda} \theta(E - E_{\lambda})\gamma_{\eta\lambda}\gamma_{\kappa\lambda} \qquad /22/$$

И согласно /18/, /21/, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\alpha\eta}(E,r)\, d\rho_{\eta\kappa}(E)\, \phi_{\kappa\beta}(E,r') \equiv \sum_{\lambda\eta\kappa} \phi_{\alpha\eta}(E_{\lambda},r)\gamma_{\eta\lambda}\gamma_{\kappa\lambda}\phi_{\kappa\beta}(r') =$$

$$= \delta(r - r')\delta_{\alpha\beta}. \qquad /23/$$

Вводя матрицу $K(r, r')$, связывающую Φ с матрицей $\mathring{\Phi}$ решений системы /15/ с $V_{\alpha\alpha'}(r) = 0$:

$$\phi_{\alpha\beta}(E,r) = \mathring{\phi}_{\alpha\beta}(E,r) + \sum_{\eta} \int_{r}^{a} K_{\alpha\eta}(r,r')\, \mathring{\phi}_{\eta\beta}(E,r')\, dr', \qquad /24/$$

получаем для ее элементов систему интегральных уравнений

$$K_{\alpha\beta}(r,r') + Q_{\alpha\beta}(r,r') + \int_{r}^{a} \sum_{\kappa} K_{\alpha\kappa}(r,r'')Q_{\kappa\beta}(r'',r')\, dr'', \qquad /25/$$

где

$$Q_{\alpha\beta}(r,r') = \int \mathring{\phi}_{\alpha\alpha}(r)\, d(\rho - \mathring{\rho})_{\alpha\beta}\, \mathring{\phi}_{\beta\beta}(r'). \qquad /26/$$

Искомая матрица взаимодействия $\| V_{\alpha\alpha'}(r) \|$ выражается через $K_{\alpha\beta}(r, r')$ с помощью соотношений:

$$V_{\alpha\alpha'}(r) = -\frac{h^2}{M}\frac{d}{dr} K_{\alpha\alpha'}(r,r). \qquad /27/$$

Уравнения /15/ обычно получаются при разложении волновой функции всей рассматриваемой системы Ψ по некоторому полному набору $\{\Phi_{\alpha}\}$:

$$\Psi = \sum_{\alpha} F_{\alpha}\Phi_{\alpha}. \qquad /28/$$

При этом $V_{\alpha\alpha'}(r)$ представляют собой матричные элементы исходного взаимодействия v по этим состояниям Φ_{α}:

$$V_{\alpha\alpha'}(r) = \langle \Phi_{\alpha} | v | \Phi_{\alpha'} \rangle. \qquad /29/$$

Если Φ_{α} известны, то по найденным выше $V_{\alpha\alpha'}$ можно восстановить v /4,5/:

$$v = \sum_{\alpha\alpha'} \Phi_{\alpha} V_{\alpha\alpha'}(r) \int \Phi_{\alpha'}\, d\tau, \qquad /30/$$

где интегрирование /как и в /29// производится по всем переменным функции $\Phi_{\alpha'}$.

Конкретным примером описанного выше формализма обратной задачи может служить восстановление сферически несимметричного потенциала $V(r, \theta, \phi)$ по параметрам $\{E_{\lambda}, \gamma^2_{\lambda\ell m}\}$ соответствующей R-матрицы рассеяния частицы в этом поле.

Непосредственным обобщением данного примера на *многочастичные* системы является построение n-частичного потенциала $V(\vec{\rho})$, где $\vec{\rho}$ представляет собой 3n-3-мерный радиус вектор, характеризующий положение n частиц в системе центра масс в *гиперсферических* переменных. В качестве Φ_{α} при этом служат гиперсферические функции $Y_K(\Omega_{\rho})$ /т.н. K-гармоники/, - являющиеся обобщением обычных сферических гармоник $Y_{\ell m}$ /см., например, /9/ /.

Выражаем благодарность И.В.Амирханову, В.М.Барсукову, О.Лхагва, В.А.Марченко, Я.А.Смородинскому, И.А.Чеканову за обсуждение вопросов, связанных с обратной задачей.

4. ПРИЛОЖЕНИЕ

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ПО ДВУМ СПЕКТРАМ

В разделе 2 было показано, как построить потенциал, если известны $\{E_{\lambda}, \gamma^2_{\lambda}\}$ при произвольном значении B в /2/.

Оказывается, величины γ^2_{λ}, отвечающие одному выбору константы $B = B_1$ в /2/, могут быть получены по собственным значениям $\{E_{1\lambda}\}$ и $\{E_{2\lambda}\}$ гамильтониана задачи при $B = B_1$ и $B = B_2$ /т.е. $V(r)$ можно восстановить, зная $\{E_{1\lambda}\}^1$ и $\{E_{2\mu}\}$/:

$$a\cdot\gamma^2_{1\lambda} = \frac{B_2 - B_1}{E_{2\lambda} - E_{1\lambda}} \prod_{\mu=0}^{\infty}{}' \frac{E_{1\mu} - E_{1\lambda}}{E_{2\mu} - E_{1\lambda}}. \qquad /\text{п.1}/$$

Убедиться в этом можно, преобразуя формализм, изложенный в работе [6].

Обозначим $\phi_1(E,r)$ и $\phi_2(E,r)$ решения /1/, удовлетворяющие граничным условиям /6/ с $B=B_1$ и $B=B_2$. Роль функций Φ_1 и Φ_2 из [6] будут играть $\phi_1(E,0)$ и $\phi_2(E,0)$.

Введем еще одно решение уравнения /1/:

$$f(E,r) = \phi_2(E,r) + m(E)\,\phi_1(E,r), \qquad /\text{п.2}/$$

где

$$m = -\frac{\Phi_2}{\Phi_1}. \qquad /\text{п.3}/$$

Используя /1/ и тот факт, что $\phi_1(E_{1\lambda},0)=0$, получим

$$(E-E_{1\lambda})\int_0^a f(E,r)\phi_1(E_{1\lambda},r)\,dr = \int_0^a [-f''(E,r)\phi_1(E_{1\lambda},r) +$$

$$+ f(E,r)\phi_1''(E_{1\lambda},r)]\,dr = f'(E,a)\phi_1(E_{1\lambda},a) - \qquad /\text{п.4}/$$

$$- f(E,a)\,\phi'(E_{1\lambda},a) = B_2 - B_1$$

Отсюда, при $E \to E_{1\lambda}$ /по правилу Лопиталя/:

$$\gamma^2_{1\lambda} = \int_0^a \phi_1^2(E_{1\lambda},r)\,dr = -\frac{(B_2-B_1)}{a}\,\frac{\Phi_1'(E_{1\lambda})}{\Phi_2(E_{1\lambda})}. \qquad /\text{п.5}/$$

Как и в [6], имеем

$$\Phi_1(E) = C_1 \prod_{\lambda=0}^{\infty}{}' \left(1-\frac{E}{E_{1\lambda}}\right);\quad \Phi_2(E) = C_2 \prod_{\lambda=0}^{\infty} \left(1-\frac{E}{E_{1\lambda}}\right) \qquad /\text{п.6}/$$

$$\frac{C_1}{C_2} \prod_{\lambda=0}^{\infty} E_{2\lambda}/E_{1\lambda} = 1.$$

Согласно /п.5/ и /п.6/, имеем /п.1/.

Литература

1. В.К.Мельников. УМН, 14, вып. 4, 121 /1959/.
2. T.Regge. Nuovo Cim., 9, 3 (1958).
3. J.L.Cook. Austral.J.Phys., 25, 167 (1972).
4. В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев, С.А.Ниязгулов, А.А.Сузько. Сообщения ОИЯИ, Р4-7349, Дубна, 1973.
5. Б.Н.Захарьев, С.А.Ниязгулов, А.С.Сузько. Сообщения ОИЯИ, Р4-7768, Дубна, 1974.
6. Б.М.Левитан, М.Г.Гасымов. УМН, 19, вып. 2,3 /1964/. Глава 2, §1.
7. А.Лейн, Р.Томас. Теория ядерных реакций при низких энергиях. М., ИЛ, 1960.
8. Л.Д.Фадеев. УМН, 14, вып. 4, 57 /1959/.
   Р.Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц, гл. 20, М., Мир, 1960.
9. В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния, М., Атомиздат, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 марта 1974 года.