объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P4-86-442

Б.Н.Захарьев, Х.Функе

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ НЕСФЕРИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ПО ДАННЫМ РАССЕЯНИЯ

Направлено в журнал "Physics Letters B"

1986

1. ВВЕДЕНИЕ

Фундаментальной проблемой во многих областях физики является определение потенциала взаимодействия V между частицами[1-3]. Но найти V по данным рассеяния S /без многократного решения уравнения Шредингера и подгонки S, варьируя V каким-либо методом "проб и ошибок"/ практически удавалось лишь в случае сферической симметрии $V(|\mathbf{r}|)$: по данным при фиксированном орбитальном моменте в подходе Гельфанда - Левитана - Марченко[1-3] или при фиксированном значении энергии в подходе Редже - Ньютона - Сабатье[1-3], модифицированном для поиска потенциала в ограниченной области Шайдом и др.[4]. Обсуждалась также возможность решения обратной задачи с исходными данными при $aE + b\ell(\ell+1) = $ $= \mathrm{const}$[5] /a и b - постоянные/.

С работ Кея и Мозеса[6] началось распространение методов обратной задачи на сферически-несимметричные и нелокальные силы. Фаддеев[7] и Ньютон [2] /см. также [8]/ развили теорию трехмерной обратной задачи для локальных потенциалов, но пока она не достигла стадии практического применения.

В данной работе продолжены исследования, начатые в [9], по развитию метода обратной задачи для сферически-несимметричных потенциалов, допускающих разделение переменных в уравнении Шредингера в сфероидальных и эллипсоидальных координатах[11-12].

В отличие от случая сферически-симметричных потенциалов, парциальные уравнения по отдельным сфероидальным переменным имеют не по одной константе разделения ($E = k^2, \ell(\ell+1)$, m), а комбинации "собственных значений" $k^2, \lambda_{\ell m}(k^2)$, m, которые в общем случае должны определяться при <u>совместном</u> решении уравнений с разными переменными. Например, $\lambda_{\ell m}$ оказывается зависящей от k^2 и от m и лишь в пределе сферической симметрии принимает целочисленные значения $\ell(\ell+1)$. Неизвестен аналог соотношения полноты /равенства Парсеваля/ парциальных функций по "радиальной"переменной - из-за этого нет /пока?../ и уравнений типа Гельфанда - Левитана - Марченко для обратной задачи с фиксированным значением ℓ - числа узлов волновой функции по угловым переменным. В парциальных уравнениях появляется не один центробежный барьер, а несколько.

Условие разделения переменных в сфероидальных координатах накладывает определенные ограничения на форму соответствующих потенциалов. Анализ таких форм показал, что в центре потенциальных ям могут быть нежелательные, с точки зрения физических приложений, подьемы, которые, правда, удается "спрятать" под барьер эффективного ядерного отталкивания из-за принципа Паули или убрать с помощью добавления простой угловой зависимости взаимодействия.

При наличии непрерывного спектра в сфероидальном поле можно предложить формализм обратной задачи при E фиксированной из области континуума по аналогии с методом Ньютона - Сабатье. Для задач чисто дискретного спектра /запирающие ямы/ неприменимыми оказываются как подход с $E = \text{const}$, так и с $\ell = \text{const}$, но зато было выяснено, что работает обобщение метода Хушияра - Разави [10] восстановления сил по спектральным параметрам в конечно-разностном приближении. Предлагается также вариант этого метода в рамках R-матричной теории рассеяния для сил конечного радиуса действия: определение потенциала по положениям R-матричных резонансов и их приведенным ширинам. Этот же подход годится и для потенциалов с трехосной деформацией при разделении переменных в эллипсоидальных координатах.

2. СФЕРОИДАЛЬНЫЕ КООРДИНАТЫ /СК/

Хорошо известно определение вытянутых /prolate ξ_p, η_p, ϕ/ и сплюснутых /oblate $\xi_{ob}, \eta_{ob}, \phi$/ СК [11,12]. Но для сопоставления со случаем сферической симметрии более удобен другой выбор СК: ρ, ∂, ϕ, подобных радиусу r и углам θ, ϕ. Для вытянутых СК

$$x = \rho_p \sin\partial_p \cos\phi, \quad 0 \le \rho_p \le \infty,$$

$$y = \rho_p \sin\partial_p \sin\phi, \quad 0 \le \partial_p \le \pi, \qquad /1/$$

$$z = \sqrt{\rho_p^2 + a^2}\cos\partial_p, \quad 0 \le \phi \le 2\pi.$$

С обычными СК ξ_p, η_p они связаны соотношениями $a^2(\xi_p^2 - 1) = \rho_p$ и $\eta_p = \cos\partial_p$, где 2a - расстояние между фокусами эллипсоида, описываемого $\rho_p = \text{const}$. В случае сплюснутых СК имеем соответственно

$$x = \sqrt{\rho_{ob}^2 + a^2}\sin\partial_{ob}\cos\phi, \quad 0 \le \rho_{ob} < \infty, \quad a\,\xi_{ob} = \rho_{ob},$$

$$y = \sqrt{\rho_{ob}^2 + a^2}\sin\partial_{ob}, \sin\phi, \quad 0 \le \partial_{ob} \le \pi, \quad \eta_{ob} = \cos\partial_{ob}. \qquad /2/$$

$$z = \rho_{ob}\cos\partial_{ob}, \qquad 0 \le \phi \le 2\pi,$$

3. РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В СК

Для потенциалов вида

$$u = \frac{u_1(\rho_p) + u_2(\partial_p)}{\rho_p^2 + a^2\sin^2\partial_p}, \qquad /3/$$

где u_1 и u_2 - произвольные функции, уравнение Шредингера

$$(\Delta + k^2 - u)\Psi = 0 \qquad /4/$$

допускает факторизацию волновой функции $\Psi = R(\rho)S(\partial)e^{\pm im\phi}$ и может быть сведено к обыкновенным дифференциальным уравнениям для отдельных компонент /используем $R(\rho_p) = [\rho_p^2(\rho_p^2 + a^2)]^{-1/4}v(\rho_p)$/.

В случае вытянутых СК

$$\frac{d^2v(\rho_p)}{d\rho_p^2} + [k^2 - \frac{u_1(\rho_p) + \lambda_{\ell m}}{\rho_p^2 + a^2} - \frac{a^2}{\rho_p^2(\rho_p^2 + a^2)}(m^2 + \frac{2\rho_p^2 - a^2}{4(\rho^2 + a^2)})]\,v(\rho_p) = 0, \qquad /5/$$

$$\frac{d^2S(\partial_p)}{\partial_p^2} + \cot\partial_p\frac{dS(\partial_p)}{d\partial_p} + [\lambda_{\ell m} - u_2(\partial_p) - k^2a^2\cos\partial_p - \frac{m^2}{\sin^2\partial_p}]\,S(\partial_p) = 0. \qquad /6/$$

Эквипотенциальные поверхности $u_1 = \text{const}$ представляют собой аксиально-симметричные эллипсоиды. Если энергия отвечает состояниям непрерывного спектра, собственные значения $\lambda(k^2)$ вычисляются непосредственно из /6/ - из условия разрешимости /6/ с соответствующими граничными условиями. При $a = 0$: $\lambda_{\ell m}(a = 0) = \ell(\ell + 1)$. При $k^2 < 0$ спектр дискретен, и k^2 и $\lambda_{\ell m}$ должны определяться из условия совместной разрешимости системы уравнений [5,6].

Аналогичные формулы получаются для сплюснутых СК. Для потенциалов вида

$$u = \frac{u_1(\rho_{ob}) + u_2(\partial_{ob})}{\rho_{ob}^2 + a^2\cos^2\partial_{ob}}. \qquad /7/$$

"радиальное"уравнение имеет вид: $(R(\rho_{ob}) = \frac{1}{\sqrt{\rho_{ob}^{r} + a^2}}v(\rho_{ob}))$:

$$\frac{d^2v(\rho_{ob})}{d\rho_{ob}^{r}} + [k^2 - \frac{u_1 + \lambda_{\ell m}}{\rho_{ob}^2 + a^2} + \frac{a^2(m^2 - 1)}{(\rho_{ob}^2 + a^2)^2}]\,v(\rho_{ob}) = 0. \qquad /8/$$

Специфика уравнений /5/, /8/ по сравнению со случаем сферической симметрии состоит в том, что в них имеется по два "центробежных барьера". Из них только один сингулярен при $\rho_p = 0$. Этому значению $\rho_p = 0$ соответствует при вытянутых СК целый отрезок, точки которого отличаются значениями ∂_p, а при сплюснутых СК: $\rho_{ob} = 0$ - диск /"монетка"/, точки которого характеризуются значениями ∂_{ob}, ϕ.

Рассмотрим вид потенциалов /3/, /7/, если выбрано $u_1(\rho)/\rho^2$ в форме гауссовой ямы

$$\frac{u_1(\rho)}{\rho^2} = V_0 \exp\{-(\rho/\overset{\circ}{\rho})^2\}, \quad V_0 < 0. \tag{9}$$

Потенциалы /3/, /7/ обращаются в нуль при $\rho = 0$, то есть дно у потенциальных ям получается не гладкое, а с подьемом в средней ее части. Один способ устранить этот центральный бугор - выбрать для вытянутой ямы добавочную угловую зависимость $u_2(\partial_p) = V_0 a^2 \sin^2\partial_p$ а для сплюснутой $u_2(\partial_{ob}) = V_0 a^2 \cos^2\partial_{ob}$. Для любых u_1 при этом получается $u(\rho = 0) = V_0$, а в уравнении по переменной ∂ это эквивалентно замене параметров: $\lambda \to \lambda - V_0 a^2$ и $k^2 \to k^2 - V_0$, так что процедура вычисления $\lambda_{\ell m}$ не изменяется по сравнению со случаем $u_2 = 0$. Однако отличная от нуля угловая часть приводит к появлению медленно /как $1/\rho^2$ / спадающей компоненты у потенциала. Правда, она несущественна для бесконечноглубоких запирающих ям.

Если же положить полный потенциал равным нулю при $\rho > r_0$, то разделение переменных возможно отдельно во внутренней области взаимодействия и во внешней области свободного движения. Рассеяние тогда можно описывать в рамках R-матричной теории.

4. МЕТОД НЬЮТОНА - САБАТЬЕ В СК

Этот метод был рассмотрен в [9] в вытянутых СК и по форме не отличался от случая сплюснутых СК. Нормируем "радиальную" составляющую волновой функции $R_{\ell m}(\rho)$, регулярную в нуле, выбором асимптотики (R - решение уравнения /5/ или /8/):

$$R_{\ell m}(\rho) \to \sin\left(k\rho - \frac{\pi(\ell + |m|)}{2} + \delta_{\ell m}\right). \tag{10}$$

Предполагаем существование уравнения Гельфанда - Левитана

$$K(\rho,\rho') + Q(\rho,\rho') + \int_0^\rho K(\rho,\rho'')\,Q(\rho'',\rho')\frac{d\rho''}{\rho''^2 + a^2}, \tag{11}$$

где

$$Q(\rho,\rho') = \sum_{\ell m} C_{\ell m}\, \overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho)\, \overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho'), \tag{12}$$

$$K(\rho,\rho') = -\sum_{\ell m} C_{\ell m}\, R_{\ell m}(\rho)\, \overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho'), \tag{13}$$

а $\overset{\circ}{R}$ - функции свободного движения. Для волновой функции R имеем

$$R_{\ell m}(\rho) = \overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho) + \int_0^\rho K(\rho,\rho')\,\overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho')\frac{d\rho'}{\rho'^2 + a^2},$$

$$R_{\ell m}(\rho) = \overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho) - \sum_{\ell' m'} C_{\ell' m'} R_{\ell' m'}(\rho)\, L_{\ell\ell' m m'}(\rho). \tag{14}$$

$$L_{\ell\ell' m m'}(\rho) = \int_0^\rho \overset{\circ}{R}_{\ell' m'}(\rho')\,\overset{\circ}{R}_{\ell m}(\rho')\frac{d\rho'}{\rho'^2 + a^2}.$$

Поскольку в обратной задаче известно асимптотическое поведение, то подставляя /10/ в /14/ при $\rho \to \infty$, получаем систему алгебраических уравнений для определения коэффициентов $C_{\ell m}$. Затем из /14/, но уже при произвольных ρ находим $R_{\ell m}(\rho)$, которая задает $K(\rho,\rho')$, диагональные значения этого ядра определяют потенциал

$$u_1(\rho) = -2\sqrt{\rho^2 + a^2}\,\frac{d}{d\rho}\,\frac{K(\rho,\rho)}{\sqrt{\rho^2 + a^2}}. \tag{15}$$

5. РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Для сферически-симметричного случая Хушияр и Разави [10] преобразовывали радиальную волновую функцию $R(r) = r^{\ell+1}\chi(r)$. Этим они добивались того, что уравнение принимало вид, удобный для решения обратной задачи в разностном приближении, к тому же $\chi \underset{r \to 0}{\to} 1$. Последнее обстоятельство представляется несущественным, и мы откажемся от него при обобщении метода [10] на случай деформированных потенциалов. Тогда можно подобно [10] использовать преобразования $R\ (\rho) = \rho^{\ell+1}\chi(\rho)$ или $R\ (\rho) = \rho^{m+1}\chi(\rho)$. Первый случай рассмотрен в [9]. Во втором - роль переменного параметра при восстановлении потенциала играет m вместо ℓ: сначала при самом большом значении $m = M = N-1$ находим $u_1(N)$ на краю области взаимодействия, затем при m, меньшем на единицу, решаем уравнение для χ в конечно-разностном приближении, двигаясь из области, где задана асимптотика волновой функции, углубляемся еще на шаг в область взаимодействия и определяем $u_1(N-1)$, после этого с $m = M-2$ проходим путь из области свободного движения через точки $N, N-1$, где потенциал уже найден, и вычисляем $u_1(N-2)$ и т.д. Все по схеме, аналогичной [9,10].

Разностное уравнение для $\chi_m(n)$:

$$\chi_m(n+1) = A_m(n)\chi_m(n) + C_m(n)\chi_m(n-1); \; C_m(n) = \frac{m+1-n}{m+1+n}; \qquad /16/$$

$$A_m(n) = m[2 - \Delta^2(k^2 - w_n)]/(m+1+n).$$

$$w_n = \frac{u_1(n)+\lambda}{\Delta^2 n^2 + a^2} - \frac{m(m+1)}{\Delta^2 n^2} + \frac{a^2}{\Delta^2 n^2(\Delta^2 n^2 + a^2)}\left(m^2 - \frac{2\Delta^2 n^2 - a^2}{4(\Delta^2 n^2 + a^2)}\right).$$

Принципиально важно обращение в нуль коэффициента $C_m(n)$ при каждом новом /уменьшенном на единицу/ значении m в нужном месте $n = n_m = m+1$. При каждом проходе-решении от больших значений ρ к меньшим с фиксированным m сначала двигаемся по области, где потенциал был определен раньше, затем достигаем точки, где $V(n_m)$ еще неизвестен, и здесь-то исчезновение $C_n(m)$ устраняет лишнюю неизвестную/функцию $\chi_m(n)$ в точке $n = n_m - 1$/, что позволяет выразить новое значение искомого потенциала.

В задачах, где исходными являются спектральные параметры дискретных уровней /бесконечно глубокие ямы, R-матричная теория рассеяния/, вместе с $m(\ell)$ нужно менять и значение энергии при новом проходе-решении. Это не мешает использовать указанную выше схему решения, хотя в оригинальной версии метода [10] возможность изменения энергии и не предусматривалась.

Если по условию задачи нужно найти и отличный от нуля потенциал u_2, то аналогичная процедура производится с угловым уравнением. Исходными данными при этом могут служить общие "собственные значения" $\lambda_{\ell m} k^2$ для обоих уравнений и значения функций R, S на краю области интегрирования /нормировачные параметры/.

Указанная выше модификация формализма [10] - изменение энергии в процессе решения и совместное решение нескольких уравнений - позволяет перейти к решению обратной задачи для потенциалов с трехосной деформацией, допускающих разделение переменных в эллипсоидальных координатах /ЭК/. Если в случае аксиальной симметрии уравнение по ϕ решалось независимо /константы разделения связывали лишь парциальные уравнения по ρ и ϑ/, то все три парциальных уравнения по ЭК должны решаться совместно. По схеме решения предыдущих задач можно и здесь найти потенциалы от трех переменных $u_1(\xi_1)$, $u_2(\xi_2)$, $u_3(\xi_3)$, как при фиксированной энергии из области непрерывного спектра, благодаря свободе выбора E из континуума, несмотря на связи, так и с переменными E в случае дискретного спектра.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Случаи разделения переменных при несферических потенциалах обогатили арсенал методов решения обратных задач и представляют интерес своими непривычными особенностями /связи уравнений через константы разделения, своеобразный вариант R-матричной теории/. Теперь нужно проверить практическую устойчивость численного решения по предложенным алгоритмам /см. также преобразование [13] $R(\rho) = f(\rho)\chi(\rho)$, обобщающее $R(\rho) = \rho^{\ell+1}\chi(\rho)$ /.

Авторы благодарны А.А.Сузько, В.Н.Пивоварчику, Н.Ф.Трусковой за полезные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Newton R. Scattering of Waves and Particles, 2-nd Ed. Springer, N.Y., 1982.
2. Шадан К., Сабатье П. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. "Мир", М., 1980.
3. Захарьев Б.Н., Сузько А.А. Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. Энергоатомиздат, М., 1985.
4. Münchow M., Scheid W. Phys.Rev.Lett., 1980, vol.44, p.1299; May K.E., Münchow M., Schied W. Phys.Lett., 1984, B141, p.1; Lipperheide R., Fidelday H. Z.Phys. 1981, vol.A301, p.81.
5. Захарьев Б.Н., Рудяк Б.В. ОИЯИ Р4-84-759, Дубна, 1984.
6. Kay T., Moses M.E. Nuovo Cim., 1961, 22, p.689.
7. Фаддеев Л.Д. В кн.: Современные проблемы математики. Изд-во ВИНИТИ, М., 1974, т.3, с.93.
8. Cheney M. J.Math.Phys. 25, 1984, p.94, 1449 and 2988.
9. Захарьев Б.Н., Сузько А.А., Пивоварчик В.Н. Изв.АН СССР сер.физ. 1985, 49, №11, с.2227; Захарьев Б.Н., Функе Х. Краткие сообщ.ОИЯИ №12-85, Дубна, 1985, с.35.
10. Hooshyar M.A., Razavy M. Can.J.Phys., 1981, vol.59, No.11, p.1627.
11. Морзе П.М., Фешбах Х. Методы теоретической физики, М.ИЛ, 1958; Flammer C. Spheroidal wave functions. Stanf.Univ. Press., Stanford, 1977.
12. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
13. Zakhariev B.N. JINR, E4-86-96, Dubna, 1986.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 июля 1986 года.

Захарьев Б.Н., Функе Х. Р4-86-442

Восстановление трехмерных несферических потенциалов по данным рассеяния

Обратная задача для аксиально-симметричных потенциалов, допускающих разделение переменных в уравнении Шредингера в сфероидальных координатах [9], распространяется на случай чисто дискретного спектра: R-матричную теорию рассеяния и запирающие бесконечно-глубокие ямы. Предлагается использовать тот же формализм и для восстановления потенциалов, для которых разделяются переменные в эллипсоидальных координатах /трехосные деформации/.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Zakhariev B.N., Funke H. P4-86-442

Inverse Scattering Problem for Deformed Three-Dimensional Potentials

The inverse problem for axial-deformed potentials which allow the separation of variables in the Schroedinger equation in spheroidal coordinates is formulated for a pure discrete spectrum; R-matrix scattering theory and confinement potential wells. The same formalism is suggested to apply for reconstructing potentials for which the variables are separated in ellipsoidal coordinates (three-axial deformation).

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986