

99/5

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



3540/2-76

13/1x-76

P4 - 9915

П-563

Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
КАК ЗАДАЧА НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

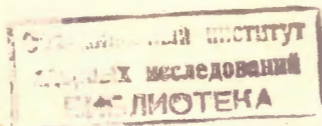
1976

P4 - 9915

Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
КАК ЗАДАЧА НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Направлено в "Annalen der Physik"



I. Введение

В данной работе предлагается метод решения квантовомеханической задачи рассеяния, основанный на представлении ее как задачи на собственные значения. К решению возникающей при этом задачи Штурма-Лиувилля применяется непрерывный аналог метода Ньютона^{/1/}, который можно отнести к методам квазилинеаризации и инвариантного погружения^{/2/}. Этот метод сводит решение задачи Штурма-Лиувилля к решению задачи Коши в некотором функциональном пространстве путем введения дополнительного непрерывного параметра t ($0 < t < \infty$). Метод успешно применялся при численном решении задач типа Штурма-Лиувилля для систем дифференциальных уравнений Шредингера^{/3/, /4/} и интегро-дифференциальных уравнений^{/5/}.

Предложенный метод иллюстрируется на примере двухканальной задачи рассеяния, которая содержит все типичные особенности многоканальных задач: рассеяние с открытыми каналами, рассеяние с учетом закрытого канала и резонансное рассеяние. Обобщение рассматриваемого метода на случай многоканальных задач не вызывает принципиальных трудностей. В качестве примера в работе приведены результаты численного решения задачи рассеяния на потенциалах, возникающих в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием, а также сравнение различных определений квазистационарного состояния, выполненное в рамках единого численного метода.

2. Задача рассеяния как задача на собственные

значения

Задача рассеяния обычно сводится к нахождению при заданном значении энергии $E (E > 0)$ нетривиальных решений системы дифференциальных уравнений Шредингера

$$\varphi^{(v)}(E, \chi_i) \equiv \left[\frac{d^2}{dR^2} + 2ME - \frac{L(L+1)}{R^2} - V_{ii}(R) \right] \chi_i(R) - \sum_{j \neq i} V_{ij}(R) \chi_j(R) = 0, \quad (I)$$

$$(i, j) = (1, \overline{N}), \quad 0 \leq R < \infty,$$

удовлетворяющих условию регулярности в особой точке $R = 0$

$$\varphi^{(N+i)}(E, \chi_i) \equiv \chi_i(0) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2)$$

Здесь $M > 0$ - эффективная масса, а $V_{ij}(R)$ - эффективные потенциалы с известным асимптотическим поведением:

$$R^2 V_{ij}(R) \rightarrow \text{const} \quad \text{при } R \rightarrow 0,$$

$$R^2 V_{ij}(R) \rightarrow 0 (i \neq j), \quad V_{ii}(R) \rightarrow \text{const} \quad \text{при } R \rightarrow \infty,$$

причем

$$V_{NN}(\infty) > V_{N-1, N-1}(\infty) > \dots > V_{22}(\infty) > V_{11}(\infty) = 0. \quad (3)$$

В N -канальной задаче рассеяния с S -открытыми каналами полный набор решений $\chi_i^{(v)}(R)$ представляет собой прямоугольную матрицу размерности $S \times N$, где номер компоненты вектор-столбца решений пробегает ряд значений $i = 1, 2, \dots, N$, а индекс решения $v = 1, 2, \dots, S$. Решение задачи рассеяния состоит в нахождении матрицы рассеяния \hat{S} , которую можно представить в виде

$$\hat{S} = (1 + i\hat{T})(1 - i\hat{T})^{-1}, \quad (4)$$

где

$$\hat{T} = \lim_{R \rightarrow \infty} \hat{T}(E, R). \quad (5)$$

Матрица $\hat{T}(E, R)$ определяется асимптотическим поведением решений $\chi_i^{(v)}(R)$ в открытых каналах реакции и связана с ними соотношением

$$\hat{\chi} \sim \hat{J}_L - \hat{n}_L \hat{T}(E, R), \quad (6)$$

где введены обозначения:

$$\hat{\chi} = \{ \chi_i^{(v)} \}, \quad i, v = 1, 2, \dots, S,$$

$$\hat{J}_L = \{ j_L(k_i R) \delta_{ij} \}, \quad \hat{n}_L = \{ n_L(k_i R) \delta_{ij} \} \quad - \text{диагональные}$$

матрицы, элементами которых являются функции Риккати-Бесселя, нормированные асимптотическими условиями^[6]

$$j_L(k_i R) \sim \frac{1}{\sqrt{k_i}} \sin(k_i R - \frac{L\pi}{2}), \quad n_L(k_i R) \sim -\frac{1}{\sqrt{k_i}} \cos(k_i R - \frac{L\pi}{2}). \quad (7)$$

В соответствии с соотношениями (6) и (7) асимптотика решений в открытых каналах реакции имеет вид:

$$\chi_i^{(v)} \sim A_i^{(v)} \sin(k_i R - \frac{L\pi}{2} + \delta_i^{(v)}), \quad (8)$$

причем:

$$\begin{aligned} \delta_i^{(v)} &= \delta_v(E) \delta_{iv} + \frac{\pi}{2} (1 - \delta_{iv}), \\ A_i^{(v)} &= \delta_{iv} + (1 - \delta_{iv}) \left(\frac{k_v}{k_i} \right)^{1/2} t_{iv} \cos \delta_v, \\ \delta_v &= \arctg t_{vv}, \end{aligned} \quad (9)$$

где t_{iv} - элемент T -матрицы (5), δ_{iv} - символ Кронекера, а импульсы k_i в каналах определяются соотношением

$$k_i = [2ME - V_{ii}(\infty)]^{1/2}. \quad (10)$$

Физически вектор-столбец $\chi_i^{(v)}(R)$, $i = \overline{1, N}$ соответствует задаче рассеяния, в которой в канале $i = \nu$ присутствуют как падающая, так и расходящаяся волны (нормированные на единичную амплитуду), а во всех остальных каналах $i \neq \nu \leq S$ - только расходящиеся волны.

В закрытых каналах $i > S$ асимптотика решений - экспоненциально затухающая:

$$\begin{aligned} \chi_i^{(v)}(R) &\sim \exp\{-\alpha_i R\}, \quad i = \overline{S+1, N}, \\ \alpha_i &= [\sqrt{V_{ii}(\infty)} - 2ME]^{1/2}. \end{aligned} \quad (II)$$

Специфика постановки задач рассеяния обусловила особенности методов их решения, которые, при всем их многообразии, (см., например, /7/) сводятся, в конечном итоге, к решению задачи Коши для системы (I) при заданном значении энергии E . Для этого, как правило, необходимо найти $2S^2$ линейно независимых решений системы (I), построить из них линейные комбинации, удовлетворяющие асимптотическим условиям (8) и, наконец, определить из них фазы рассеяния $\delta_\nu = \tilde{\delta}_\nu(E)$ и параметры смешивания $t_{\nu\sigma} = t_{\nu\sigma}(E)$.

Другой подход, получивший название метода фазовых функций, требует решения задачи Коши для системы нелинейных уравнений первого порядка, которым удовлетворяют матричные элементы $t_{ij}(E, R)$ /6/.

Однако при реализации этих методов в ряде случаев возникают вычислительные трудности, связанные с неустойчивостью решений в закрытых каналах, необходимостью аккуратно задавать начальные условия для волновых функций в окрестности особой точки $R=0$,

а также проводить все вычисления с высокой точностью, особенно в области резонансного изменения фаз рассеяния /7/. В задачах с потенциалами, заданными таблично, эти трудности усугубляются, и для их преодоления необходимо разрабатывать специальные алгоритмы (см., например, /8/).

В предлагаемом подходе задача рассеяния формулируется как задача на собственные значения относительно энергии E (собственное значение) и волновых функций $\chi_i^{(v)}(R)$ (собственные функции). Для постановки такой задачи необходимо задать значения фаз рассеяния $\tilde{\delta}_i^{(v)}$ в каждом из открытых каналов, что определяет асимптотику волновых функций $\chi_i^{(v)}(R)$ при заданном значении $R = R_{max}$ и тем самым фиксирует граничные условия (8), (II). Эти граничные условия вместе с системой уравнений (I) можно рассматривать как задачу Штурма-Лиувилля на отрезке $0 \leq R \leq R_{max}$.

Таким образом, по сравнению с традиционным подходом, в котором по заданному значению E определяются фазы рассеяния $\tilde{\delta}_\nu(E)$, в предлагаемой постановке необходимо решать обратную задачу: по заданному набору значений фаз рассеяния $\tilde{\delta}_\nu$ определить значение энергии $E = E(\tilde{\delta}_\nu)$, $\nu = \overline{1, S}$ и соответствующие волновые функции $\chi_i^{(v)}(R)$, $i = \overline{1, N}$. Следовательно, вместо функциональной зависимости $\tilde{\delta}_\nu = \tilde{\delta}_\nu(E)$, которую получают обычным методом, (Рис. 1а) в данном подходе мы получаем зависимость $E = E(\tilde{\delta}_\nu)$, $\nu = \overline{1, S}$ (Рис. 1б). Подчеркнем еще раз, что в такой постановке задача рассеяния ничем не отличается от задачи на собственные значения, и обе они могут быть решены одним и тем же способом.

3. Численный метод

Для реализации предлагаемого подхода в данной работе используется непрерывный аналог метода Ньютона и разработанная на его основе вычислительная схема CAMEN [3/,/4/. В этой схеме асимптотические условия (8), (II) при заданных значениях фаз рассеяния (9) в открытых каналах аппроксимируются в достаточно удаленной точке $R=R_{max}$ краевыми условиями

$$\varphi^{(2N+iv)}(E, f_i^{(v)}) \equiv \left[\frac{d}{dR} + f_i^{(v)}(E, R) \right] \chi_i^{(v)}(R) \Big|_{R=R_{max}} = 0, \quad (I2)$$

$i=1, N; v=1, S.$

Система (I) с граничными условиями (2), (I2) доопределяется условием нормировки волновых функций

$$\varphi^{(2N+S+1)}(E, f_i^{(v)}) \equiv S(E, f_i^{(v)}) = 0 \quad (I3)$$

в одном из каналов реакции, где S - нормирующий функционал. Согласно [9/, задача (I), (2), (I2), (I3) представляет нелинейное функциональное уравнение

$$\varphi(Z) = 0, \quad (I4)$$

где $Z = (E, f_i^{(v)}(R))$, а оператор $\varphi = \{ \varphi^{(m)}, m=1, N(S+2)+1 \}$.

Непрерывный аналог метода Ньютона сводит решение уравнения (I4) к решению задачи Коши

$$\varphi'(Z(t)) \frac{dZ(t)}{dt} = -\varphi(Z(t)), \quad (I5)$$

$0 \leq t < \infty, Z(0) = Z_0,$

где t - дополнительный непрерывный параметр погружения, от которого зависят компоненты элемента $Z(t) = (E(t), f_i^{(v)}(R, t))$, φ' - производная Фреше оператора φ , а Z_0 - начальное

приближение к искомому решению Z^* уравнения (I4). Известно [1/, что при выполнении условия гладкости оператора φ в окрестности искомого решения $Z^* = (E^*, f_i^{(v)*}(R))$ справедливо предельное соотношение:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \| Z^* - Z(t) \| = 0. \quad (I6)$$

Метод Эйлера [1/ решения задачи (I5) является полудискретным представлением рассматриваемого непрерывного процесса и аналогичен методу прямых для решения уравнений в частных производных [10/. При его применении полуплоскость $0 \leq R \leq R_{max}, 0 \leq t < \infty$ разбивается прямыми $t=t_k$ ($t_{k+1} = t_k + \tau_k, t_0 = 0, k=0, 1, 2, \dots$), параллельными оси OR (см. рис.2). Если на прямой $t=t_k$ известны функции $E_k = E(t_k)$ и $f_{ik}^{(v)}(R) = f_i^{(v)}(R, t_k)$, то для того, чтобы определить их на следующей прямой $t=t_{k+1}$, необходимо:

а) решить краевую задачу относительно функций $v_{ik}^{(v)}(R)$ на отрезке $0 \leq R \leq R_{max}$

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + 2ME - \frac{L(L+1)}{R^2} - V_i^{(v)}(R) \right] v_{ik}^{(v)}(R) - \sum_{j \neq i} V_{ij}^{(v)}(R) v_{jk}^{(v)}(R) = -2M f_{ik}^{(v)}(R),$$

$$v_{ik}^{(v)}(0) = 0, \left[\frac{d}{dR} + f_i^{(v)}(E_k, R) \right] v_{ik}^{(v)}(R) \Big|_{R=R_{max}} = - \frac{\partial}{\partial E} f_i^{(v)}(E_k, R) f_{ik}^{(v)}(R) \Big|_{R=R_{max}} \quad (I7)$$

б) вычислить значение параметра μ_k из соотношения

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial f_i^{(v)}} S(E_k, f_{ik}^{(v)}(R)) (\mu_k v_{ik}^{(v)}(R) - f_{ik}^{(v)}(R)) + \mu_k \frac{\partial}{\partial E} S(E_k, f_{ik}^{(v)}) = -S(E_k, f_{ik}^{(v)}), \quad (I8)$$

где S - нормирующий функционал (I3);

в) с помощью формул

$$E_{k+1} = E_k + \tau_k \mu_k, f_{i,k+1}^{(v)} = f_{ik}^{(v)}(1 - \tau_k) + \mu_k \tau_k v_{ik}^{(v)}, \quad (I9)$$

являющихся конечноразностной аппроксимацией дифференциальных соотношений

$$\frac{\partial}{\partial t} E(t) = \mu(t), \quad \frac{\partial}{\partial t} \chi_i^{(v)}(R, t) = \mu(t) v_i^{(v)}(R, t) - \chi_i^{(v)}(R, t), \quad (20)$$

определить искомые функции на прямой $t = t_{k+1}$. Если начальные условия $(E(0) = E_0, \chi_i^{(v)}(R, 0) = \chi_{i0}^{(v)}(R))$ заданы, то итерационный процесс (17)–(19) можно последовательно реализовать для $k = 0, 1, 2, \dots$ до достижения необходимой точности определения энергии и волновых функций. Сходимость данного процесса в смысле предельного соотношения (16) рассмотрена в работе [11]. Заметим, что надлежащим выбором динамического параметра τ_k [3; 14] процесс сходимости можно оптимизировать.

Таблица I и Рис. 3 иллюстрируют процесс сходимости рассмотренной итерационной процедуры для конкретной задачи рассеяния.

4. Вычислительные детали

Для эффективных потенциалов, имеющих при $R \rightarrow \infty$ асимптотику

$$V_i^-(R) = \sum_{n=2}^{\infty} c_n R^{-2n},$$

граничные условия (8), (11) можно уточнить, используя асимптотические разложения волновых функций

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_i^{(v)}(E, R) = & \left(1 + \sum_{n=1}^{n_1} d_n^{(v)} \zeta_i^{-2n} \right) \sin\left(\zeta_i - \frac{L_i \pi}{2} + \delta_i^{(v)}\right) + \\ & + \sum_{n=1}^{n_2} b_n^{(v)} \zeta_i^{-2n+1} \cos\left(\zeta_i - \frac{L_i \pi}{2} + \delta_i^{(v)}\right), \quad \zeta_i = k_i R, \end{aligned} \quad (21)$$

в открытых каналах [4] и

$$\tilde{\chi}_i^{(v)}(E, R) = \exp(-\alpha_i R) \sum_{n=0}^{n_3} \alpha_n^{(v)} R^{-n} \quad (22)$$

в закрытых каналах [3]. При этом граничные условия (12) позволяют исключить из рассмотрения асимптотические константы, которые зависят от нормировки волновых функций.

При учете закрытого канала используется нормировка волновой функции $\chi_i(R)$ в первом закрытом канале $i = S+1$ [3]

$$S = \int_0^{R_{max}} \chi_{S+1}^2(R) dR + c^2 \int_{R_{max}}^{\infty} \tilde{\chi}_{S+1}^2(E, R) dR - 1 = 0, \quad (23)$$

где $c = \chi_{S+1}(R_{max}) / \tilde{\chi}_{S+1}(E, R_{max})$, а функция $\tilde{\chi}_{S+1}$ определена формулой (22). В случае S открытых каналов вместо условия нормировки $A_v^{(v)} = 1$ волновые функции можно нормировать условием

$$S = \int_{R_{as}}^{R_{max}} [\chi_s^{(v)}(R) - \tilde{\chi}_s^{(v)}(E, R)]^2 dR = 0 \quad (24)$$

в последнем открытом канале. Здесь $0 < R_{as} < R_{max}$, а функция $\tilde{\chi}_s^{(v)}$ задана соотношением (21). Эта нормировка является приближением условия, из которого E и $\chi_i^{(v)}$ определяются как элементы, реализующие минимум функционала $\min_{E, \chi_i^{(v)}} \Phi(E, \chi_i^{(v)})$, где

$$\Phi(E, \chi_i^{(v)}) = \int_{R_{as}}^{\infty} [\chi_i^{(v)}(R) - \tilde{\chi}_i^{(v)}(E, R)]^2 dR. \quad (24a)$$

Как следует из формул (23), (24) и как показывает опыт вычислений, используемые нормировочные функционалы слабо зависят от параметров R_{as} и R_{max} , если $R_{max} > R_{as} \gg 1$. Условие нормировки (13) с нормирующими функционалами (23), (24) наряду с соотношением (12) можно рассматривать как интегральное граничное условие, выполняющее роль стабилизирующего функционала [12] в случае малых k_i и α_i , когда рассматриваемая задача вырождается. Введение нормировки (23), (24) позволяет успешно решать задачи рассеяния вблизи границы континуума, то есть в окрестности $k_i \approx 0, \alpha_i \approx 0$.

Если эффективные потенциалы $V_{ij}^-(R)$ системы (I) заданы на интервале $0 < R \leq R_{max}$ в виде таблиц, краевые задачи (I7) удобно решать численно с помощью метода конечных разностей на сетке узлов, включающей узлы таблиц. Соотношение (I8) аппроксимируется с помощью квадратурных формул того же порядка точности, что и конечноразностная аппроксимация граничных задач (I7). Точность вычислений зависит от значений R_{qs} и R_{max} , шага h разностной сетки и количества членов разложений n_1, n_2, n_3 в формулах (21), (22).

При учете членов порядка R^{-6} в асимптотике $V_{ij}^-(R)$ в разложениях (21), (22) имеет смысл рассматривать верхние пределы суммирования $n_1 = 3, n_2 = 4, n_3 = 6$. Численные исследования показывают, что при конечноразностной аппроксимации порядка $O(h^2)$ сходимость результатов квадратична относительно h , что согласуется с общими оценками для разностной задачи Штурма-Лиувилля^{/13/}. При выборе параметров вычислительной схемы $R_{max} = 40, R_{qs} = 20, h = 0,025$ обеспечена абсолютная точность вычислений как энергии, так и волновых функций $\sim 10^{-4}$.

5. Пример расчета: два открытых канала

В качестве иллюстрации особенностей и возможностей излагаемого метода рассмотрим двухканальную задачу рассеяния с эффективными потенциалами $V_{ij}^-(R)$, которые возникают в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием^{/14/}, и эффективной массой M , соответствующей процессу рассеяния мезона дейтерия на протонах $(d_{\mu} + p)$ ^{/15/}. В этом случае картина потенциалов $V_{ii}^-(R)$ схематически изображена на рис. 4, расщепление уровней в единицах

задачи (е.з.) $\Delta E = V_{22}^-(\infty) - V_{11}^-(\infty) = 0.027$ е.з. = 145,75 эВ, а матрица решений $\chi_i^{(v)}(R)$ при $R \rightarrow \infty$ принимает вид:

$$\begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} & \chi_1^{(2)} \\ \chi_2^{(1)} & \chi_2^{(2)} \end{pmatrix}_{R \rightarrow \infty} \sim \begin{pmatrix} j_L(k_1 R) & 0 \\ 0 & j_L(k_2 R) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} n_1(k_1 R) & 0 \\ 0 & n_2(k_2 R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Граничные условия (8) для решений, нормированных соотношением (9), имеют вид:

$$\begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} \\ \chi_2^{(1)} \end{pmatrix}_{R \rightarrow \infty} \sim \begin{pmatrix} \sin(k_1 R - \frac{L\pi}{2} + \delta_1) \\ A_2^{(1)} \sin(k_2 R - \frac{L\pi}{2} + \frac{\pi}{2}) \end{pmatrix}, \quad (26a)$$

$$\begin{pmatrix} \chi_1^{(2)} \\ \chi_2^{(2)} \end{pmatrix}_{R \rightarrow \infty} \sim \begin{pmatrix} A_1^{(2)} \sin(k_1 R - \frac{L\pi}{2} + \frac{\pi}{2}) \\ \sin(k_2 R - \frac{L\pi}{2} + \delta_2) \end{pmatrix}. \quad (26b)$$

В результате решения краевых задач (I), (2), (26a) и (I), (2), (26b) при различных значениях δ_1 и δ_2 получаем зависимости $E_v = E(\delta_v)$ и $A_i^{(v)} = A_i(\delta_v)$. Элементы T -матрицы связаны с найденными величинами соотношениями:

$$t_{11} = tg \delta_1, \quad t_{22} = tg \delta_2,$$

$$A_2^{(1)} = t_{21} \cos \delta_1 (k_1/k_2)^{1/2}, \quad A_1^{(2)} = t_{12} \cos \delta_2 (k_2/k_1)^{1/2}, \quad (27)$$

причем унитарность S -матрицы необходимо предполагает выполнение равенства $t_{12} = t_{21}$.

На рис.5 представлены зависимости $E_1 = E(\delta_1)$ и $E_2 = E(\delta_2)$, а также соответствующие им параметры смешивания

$$\varepsilon_2 = \text{arctg } t_{21} = \varepsilon_2(\delta_1) \quad \text{и} \quad \varepsilon_1 = \text{arctg } t_{12} = \varepsilon_1(\delta_2)$$

для случая рассеяния в состоянии с орбитальным моментом $L = 0$.

При наличии этих кривых задача рассеяния при заданном значении энергии рассеяния E решается простым геометрическим построением. Из рис.5 видно также выполнение условия $\varepsilon_1(\delta_2) = \varepsilon_2(\delta_1)$ при любом значении E .

В характерной точке $\delta_1 = \delta_2 = \frac{\pi}{2}$ имеет место равенство $\varepsilon_1(\frac{\pi}{2}) = \varepsilon_2(\frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{2}$, т.е. $t_{12} \rightarrow \infty, t_{21} \rightarrow \infty$.

Однако это не приводит к особенностям в решениях, поскольку произведение $t_{i\nu} \cos \delta_\nu$ остается при этом конечным, а соответствующие амплитуды в этой точке равны $A_i^{(\nu)} = (k_\nu/k_i)^{1/2}$.

Обобщение изложенной процедуры на случай S открытых каналов очевидно. В этом случае из решения S краевых задач $\nu = 1, 2, \dots, S$ для вектор-функций $\chi_i^{(\nu)}(R)$, $i = 1, 2, \dots, N$, удовлетворяющих граничным условиям (2), (8), находим S кривых $E_\nu = E(\delta_\nu)$ и S пучков параметров смешивания $t_{i\nu} = t_i(\delta_\nu)$, $\nu = 1, 2, \dots, S$. При фиксированном ν все кривые $t_i(\delta_\nu)$, $i = 1, 2, \dots, \nu - 1, \nu + 1, \dots, S$ каждого пучка зависят только от

одной переменной δ_ν . Тем самым оказывается возможным спроектировать многомерную задачу на плоскость и решить ее простым геометрическим построением, аналогичным изображенному на рис. 5. Задача облегчается тем, что значения фаз δ_ν заключены в пределах $-\frac{\pi}{2} \leq \delta_\nu \leq \frac{\pi}{2}$, поскольку граничные условия (8) не чувствительны к изменению фаз по модулю π .

Другой путь, не связанный с необходимостью нахождения кривых $E(\delta_\nu)$ и $t_i(\delta_\nu)$, состоит в одновременном решении S^2 краевых задач для функций $\chi_i^{(\nu)}(R)$ с граничными условиями (2), (8) и S условиями нормировки (9). Энергия рассеяния E и компоненты решений $\chi_i^{(\nu)}(R)$ (или, что то же, параметры $t_{i\nu}$) находятся при этом как собственное значение и собственные функции возникшей задачи Штурма-Лиувилля при заданном наборе значений фаз δ_ν . Естественно, что многомерная область определения переменных δ_ν , которая представляет интерес в каждом конкретном случае, должна быть заранее задана. (Это особенно удобно при поисках резонансов в многоканальных системах).

6. Сравнение различных определений резонанса в квантовой механике

Излагаемый метод позволяет в рамках единой вычислительной схемы сравнить различные определения резонанса в квантовой механике. В качестве исследуемой модели выбрана та же система потенциалов $V_{ij}(R)$, что и в п.5, но в состоянии рассеяния с орбитальным моментом $L = 2$, в котором существует широкий резонанс с энергией $E_0 \approx 10^{-2}$ и шириной $\Gamma \approx 6 \cdot 10^{-3}$ /4/ (все в единицах задачи (е.э.), т.е.э. = $5,4 \cdot 10^3$ эВ). Поскольку $E_0 < \Delta E$,

то рассматриваемая задача представляет собой задачу рассеяния с учетом закрытого канала. Варьируя значение M , можно менять глубину эффективных потенциалов $V_{ij}(R)$, а, следовательно, и значения E_0 и Γ .

Понятие резонанса (или квазистационарного состояния) в квантовой механике было введено первоначально для объяснения явления α -распада^{/16/}. В этом подходе комплексная энергия квазистационарного состояния характеризуется двумя параметрами: энергией E_0 и шириной резонанса Γ :

$$E = E_0 - i \frac{\Gamma}{2} \quad (28)$$

Другое определение следует из теории рассеяния, где под энергией резонанса E_0 понимают значение $E = E_0$, при котором сечение рассеяния $\sigma(E)$ максимально, а величина Γ принимается равной ширине кривой $\sigma(E)$ на половине ее высоты. Оба эти определения отражены в формуле Брейта-Вигнера

$$\sigma_L(E) \approx \frac{\pi}{k^2} (2L+1) \frac{\Gamma^2}{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}, \quad (29)$$

которая следует из общей формулы для сечения

$$\sigma_L(E) = \frac{4\pi}{k^2} (2L+1) \sin^2 \delta_L \quad (30)$$

в предположении, что фаза δ_L может быть представлена в виде

$$\delta_L = \delta_{pot}^L - \arctg \frac{\Gamma}{2(E-E_0)}, \quad (31)$$

причем $\delta_{pot}^L \ll \frac{\pi}{2}$ и плавно меняется в области $E \sim E_0$ на ширине Γ .

Оба определения резонансного состояния являются различными аппроксимациями более общего определения резонанса, как полюса амплитуды рассеяния в комплексной плоскости энергии при значении $E = E_0 - i \frac{\Gamma}{2}$, и совпадают в пределе $\Gamma \rightarrow 0$. Однако при попытке объединить эти определения при $\Gamma \neq 0$ возникают трудности, поскольку значения E_0 и Γ в формулах (28) и (29), вообще говоря, различны. Особенно сильно это различие проявляется для широких резонансов, т.е. тогда, когда не выполняется условие $\Gamma \ll 1$, $\Gamma \ll E$.

Иными словами, вопрос состоит в том, каким образом можно разумно распространить оба определения резонанса на случай не малых Γ и как в этом случае установить соответствие между E_0 и Γ в разных определениях.

Такая необходимость может возникнуть, например, в том случае, когда для уточнения характеристик резонансного состояния, определенного первоначально, как резонанс в сечении рассеяния, хотят применить теорию возмущений, развитую для вычисления параметров квазистационарного состояния (28)^{/16/}.

С вычислительной точки зрения удобнее иметь дело не с определениями (29) и (31), а непосредственно с волновыми функциями системы (I). Известно, что амплитуда $A(R)$ решения в области действия потенциалов $V_{ij}(R)$ превышает амплитуду решения при $R \rightarrow \infty$, и мера этого превышения определяется шириной резонанса. А именно: если решение $\chi_1(R)$ нормировать условием

$$\chi_1(R) \sim \sin(k_1 R - \frac{L\pi}{2} + \delta_L(E)), \quad (32)$$

то в области действия потенциала его можно представить в виде

$$\chi_1(R) = \left(\frac{k_1}{M\Gamma}\right)^{1/2} \mathcal{G}_1(R), \quad (33)$$

где $\varphi_1(R)$ удовлетворяет той же системе уравнений, что и $\chi_1(R)$ и условию нормировки^{/16/}

$$\int_0^{R_0} \varphi_1^2(R) dR = 1 \quad (34)$$

Отсюда следует определение для Γ :

$$\Gamma = \frac{k}{M} / \int_0^{R_0} \chi_1^2(R) dR. \quad (35)$$

Выбор точки R_0 в качестве предела интегрирования в значительной степени произволен. В дальнейшем мы определим ее как первый нуль решения $\chi_1(R)$ вне области действия потенциала $V_{11}(R)$ (см. Рис.6).

На рис.7 приведены графики $E = E(\delta_L)$ при различных значениях M . В самом грубом приближении значения E_0 и Γ определяются формулами

$$E_0 = E\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad \Gamma = 2 \left. \frac{\partial E}{\partial \delta} \right|_{\delta = \frac{\pi}{2}}. \quad (36)$$

Более точные значения следуют из формулы (30), если учесть выражение^{/17/}

$$\delta_{pot}^L \approx \frac{\pi \alpha k^2}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)}, \quad (37)$$

справедливое для потенциала $V_{11}(R)$ с асимптотикой $V_{11}(R) \sim dR^{-4}$ при малых импульсах $k = (2ME)^{1/2}$ (в нашем случае $M \approx 6,17-7,67$, $k = 0,35-0,08$, $\alpha = 9M/2$). Следует отметить, что величины E_0 и Γ , определенные из формул (29) и (31), также не совпадают между собой, хотя (29) является следствием (31), поскольку множитель k^{-2} в формуле для сечения (29) сдвигает максимум сечения, а следовательно, и значение E_0 , в сторону меньших значений, чем это следует из (31).

Из рис. 7 видно, что при больших ширинах Γ значения E_0 довольно сильно зависят от способа определения резонанса.

На рис.8 представлена функция $\Gamma = \Gamma(E_0)$, также иллюстрирующая это утверждение. Из этих рисунков видно, что грубое определение резонанса (36) достаточно разумно и во многих случаях может служить хорошим приближением.

Заключение

Предлагаемый метод позволяет получать функциональные зависимости нового типа для параметров матрицы рассеяния (типа изображенных на рис.5.), которые могут представить интерес как для целей практических расчетов, так и с точки зрения чисто теоретических исследований.

В частности, излагаемый подход к задачам рассеяния позволяет непосредственно определять параметры $t_{c\nu}$ матрицы реакции T без привлечения дополнительной процедуры их выделения на конечном этапе вычислений из условия удовлетворения граничным условиям (8), поскольку они с самого начала включены в рассмотрение.

В задачах рассеяния с учетом закрытого канала этот метод представляется более естественным, чем общепринятое, поскольку в нем открытые и закрытые каналы реакции равноправны и граничные условия в них задаются единообразно.

Особое преимущество излагаемого метода проявляется при описании процесса резонансного рассеяния, когда фаза рассеяния δ_ν меняется в широком интервале значений при изменении энергии рассеяния E в очень узком интервале вблизи резонансной энергии E_0 (см. рис. 7). В этом случае, задавая значение фазы δ_ν

с некоторым шагом, можно построить кривую $E = E(\delta_{\nu}^{\infty})$ и определить резонансную энергию устойчиво и с высокой точностью.

Наконец, вблизи границы континуума, где большинство известных методов решения задачи рассеяния неустойчиво, предлагаемая схема доказала свою эффективность как при решении задач рассеяния ($k_i \rightarrow 0$), так и при отыскании дискретных уровней энергии ($\varepsilon_i \rightarrow 0$) вплоть до значений энергии $|E| \sim 10^{-4} / 4$.

В заключение авторы выражают признательность М.П. Файману за сотрудничество и С.И. Веницкому за обсуждения.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 июня 1976 года.

Таблица I.

Сходимость итерационного процесса (I7)-(I9)

k	$E_k \cdot 10^{-2}$	Δ_k	τ_k
0	2,8718	146	0,050
4	2,8738	117	0,059
8	2,8771	87,5	0,077
12	2,8821	58,3	0,111
16	2,8856	29,2	0,200
19	2,8896	7,29	0,450
20	2,8911	$1,03 \cdot 10^{-4}$	0,999
21	2,8911	$1,97 \cdot 10^{-7}$	1,000

Приведенные значения величин E_k , Δ_k и τ_k соответствуют волновым функциям $f_{ik}(R)$, одна из которых, $f_{2k}(R)$, изображена на рис.6 для случая двух открытых каналов при значениях фаз $\delta_1^{\sim} = -1,1282$, $\delta_2^{\sim} = \frac{\pi}{2}$, $M = 6,169$, $L = 0$. При $h = 0,1$, $R_{max} = 40$ и $\tau_0 = 0,05$ процесс сходится на 21 итерации. Невязка Δ_k , характеризующая процесс сходимости, определяется формулой^{/3/}

$$\Delta_k = \max_{i,n} \left| h^{-2} \left[f_{ik}^{(v)}(R_n+h) - 2f_{ik}^{(v)}(R_n) + f_{ik}^{(v)}(R_n-h) \right] + 2ME_k \frac{L(L+1)}{R_n^2} - V_{ii}(R_n) f_{ik}^{(v)}(R_n) - \sum_{j \neq i} V_{ij}(R_n) f_{jk}^{(v)}(R_n) \right|,$$

$$R_{n+1} = R_n + h, \quad n = 1, \overline{m-1}, \quad R_1 = 0, \quad R_m = R_{max}.$$

Значения E_k приведены в единицах задачи me^4/h^2 , где эффективная масса $m = 198,4$ соответствует системе $d\mu + p$ /15/.

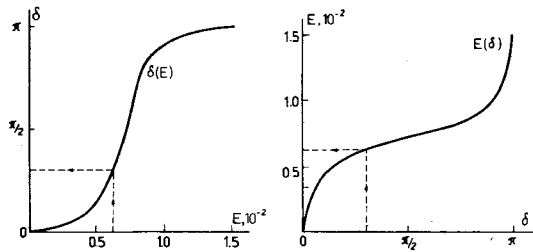


Рис. 1. а) Зависимость $\tilde{\delta}_v = \tilde{\delta}_v(E)$, которая следует из решения задачи Коши для уравнения (I).
 б) Зависимость $E = E(\tilde{\delta}_v)$, следующая из решения задачи Штурма-Лиувилля для уравнения (I).
 Приведенный пример соответствует случаю двухканальной задачи рассеяния с одним закрытым каналом при значениях $M=6,169, L=2$, с потенциалами $V_j(R)$, возникающими в задаче рассеяния $d\mu + p^{1/5}$.

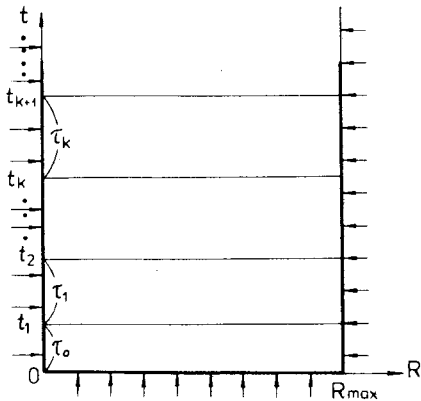


Рис. 2. Схема последовательной реализации итерационного процесса (I7)-(I9) в плоскости (R, t) .

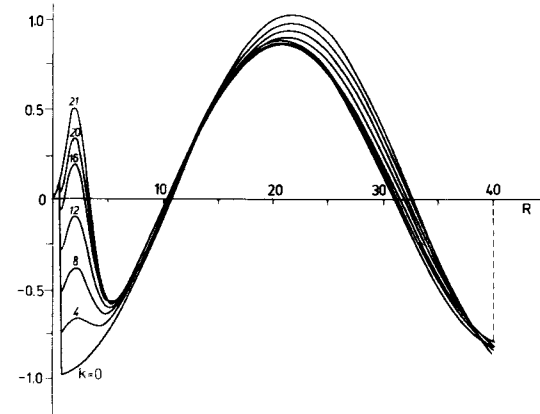


Рис. 3. Волновые функции $f_{2k}(R)$, соответствующие последовательным итерациям k , при решении двухканальной задачи рассеяния (1) в случае двух открытых каналов.

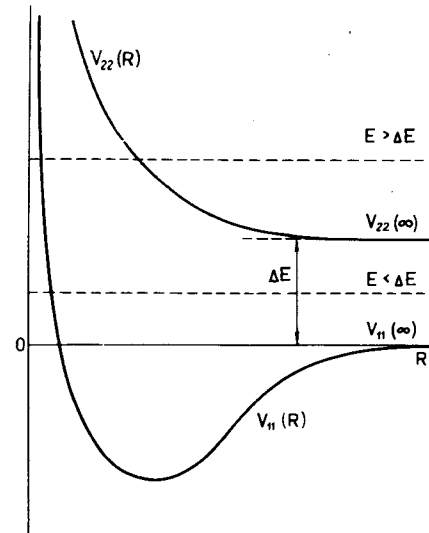


Рис. 4. Схема эффективных потенциалов двухканальной задачи рассеяния. Случай $E > V_{22}(\infty)$ соответствует двум открытым каналам, случай $V_{22}(\infty) > E > V_{11}(\infty)$ - закрытому каналу.

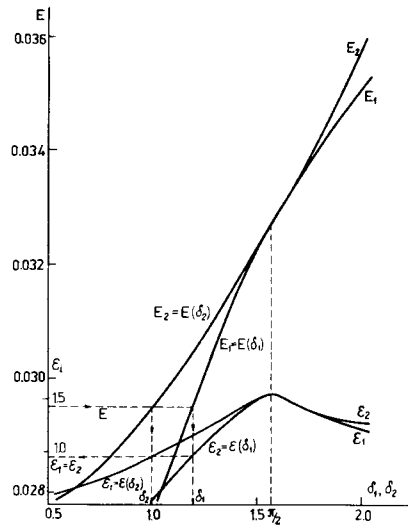


Рис. 5. Зависимости $E_1 = E(\delta_1)$ и $E_2 = E(\delta_2)$, $E_2 = E(\delta_1)$ и $E_1 = E(\delta_2)$ в двухканальной задаче рассеяния с двумя открытыми каналами. При заданной энергии E фазы δ_j и соответствующие им параметры смешивания $\epsilon_1 = \epsilon_2$ находятся простым геометрическим построением.

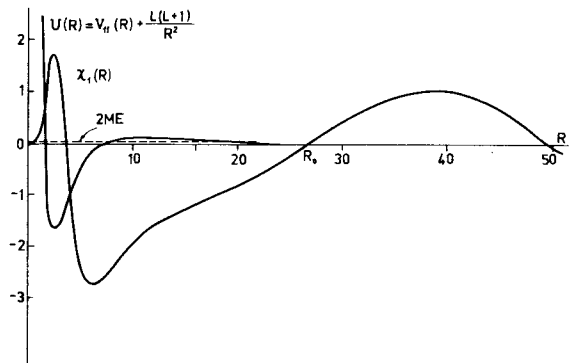


Рис. 6. Волновая функция $\chi_1(R)$, соответствующая резонансу в двухканальной задаче рассеяния $d_{\mu+p}$ в состоянии $E < \Delta E$ и орбитальным моментом $L = 2$. Зависимости $\delta_1 = \delta(E)$ и $E_1 = E(\delta_1)$ для этого случая изображены на рис. 1.

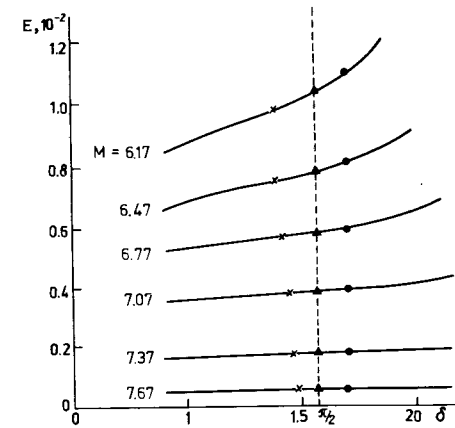


Рис. 7. Зависимости $E = E(\delta_1)$ в двухканальной задаче рассеяния при изменении эффективной массы M в системе уравнений (1).

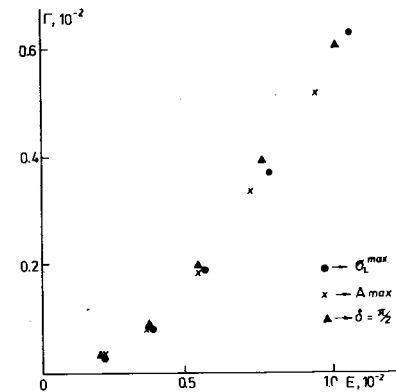


Рис. 8. Зависимость $\Gamma = \Gamma(E_0)$ при различных способах определения параметров резонанса $E = E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$. Точки \bullet отвечают определению (30), треугольники \blacktriangle - определению (35) и условию $A = A_{max}$, крестики \times - определению (36).

Литература

1. М.К.Гавурин. Изв.высш.учебн.завед., Математика, 5, 18, 1958;
Е.П.Жидков, Г.И.Макаренко, И.В.Пузынин. ЭЧАЯ, 4 (I), 127, 1973.
2. Р.Беллман, Р.Калаба. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи. Мир, М., 1968;
R.Bellman, R.Kalaba, G.M.Wing. J.Math.Phys., 1, 280, 1960;
R.Huss, R.Kalaba, R.Vasudevan. J.Math.Phys., 15, 1285, 1974.
3. L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comp.Phys.13,1,1973.
Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 65, 28, 1973;
Ф.А.Гареев, Г.Шульц, Р.М.Ямалеев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина,
И.Н.Кухтина. ЯФ, 22, II36, 1975.
4. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. ОИЯИ, P4-8884,
Дубна, 1975;
L.I.Ponomarev, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina. J.Comp.Phys, 21, 1976;
J.Bang, F.A.Gareev, I.V.Puzynin, R.M.Jamalejev. Nucl.Phys.,
A261, 1, 59, 1976.
5. Ф.А.Гареев, С.А.Гончаров, Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Б.Н.Хором-
ский, Р.М.Ямалеев. ОИЯИ, P4-875I, Дубна, 1975.
6. В.В.Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике.
Наука, М., 1976;
Ф.Калоджеро. Метод фазовых функций в теории потенциального
рассеяния. Мир, М., 1972.
7. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкно-
вений. Под редакцией Б.Олдера, С.Фернбаха и М.Ротенберга.
Мир, М., 1974.
8. М.П.Файфман, Препринт ОИЯИ, P4-9960, Дубна, 1976.
9. Л.В.Канторович. Усп.матем.наук. II, 99, 1956.

10. И.С.Березин, Н.П.Жидков. Методы вычислений, II, Физматгиз,
М., 1959.
11. Е.П.Жидков, И.В.Пузынин, Б.Н.Хоромский. ОИЯИ, P5-95I2,
Дубна, 1976.
12. А.Н.Тихонов, В.Я.Арсенин. Методы решения некорректных задач.
Наука, М., 1974.
13. А.А.Самарский. Введение в теорию разностных схем. Наука,
М., 1971.
14. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЯФ, 20, 576, 1974.
15. А.В.Матвеев, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман. ЖЭТФ, 68,
437, 1975.
16. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции
и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука,
М., 1971.