Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Зерарка, Н. Бенсалах, Д. Ханс, Обратная задача потенциального рассеяния и ее применение к системе Na–He, *ТМФ*, 2005, том 142, номер 3, 556–568

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1797>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.108.108

26 апреля 2023 г., 17:12:44

© 2005 г.

А. Зерарка*, Н. Бенсалах*, Дж. Ханс*

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ПОТЕНЦИАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ К СИСТЕМЕ НА–НЕ

Метод квазиклассического приближения использован в рамках обратной задачи рассеяния для восстановления потенциала вида $v = v_1 + v_2$, одна из компонент (v_1) которого предполагается известной априори. Введен вспомогательный потенциал с двумя регулируемыми параметрами и показано, что недостижимая область потенциала (т.е. та область, в которой потенциал нельзя восстановить используемым методом) может быть значительно сокращена. Превосходное совпадение между исходным потенциалом и результатами восстановления получено почти во всей области.

Ключевые слова: фазовый интеграл, фазовый сдвиг, обратная задача рассеяния.

1. ВВЕДЕНИЕ

На протяжении последних трех десятилетий значительное внимание уделялось разработке квазиклассических методов, в рамках которых был получен ряд физических величин. Можно отметить, что особое внимание к методу квазиклассического приближения в последние годы принесло большую пользу: в силу обширных возможностей применения в различных областях, от физики плазмы до теории элементарных частиц, метод стал основой для многочисленных работ.

Квазиклассическое приближение, или метод фазовых интегралов, является исключительно важным инструментом, который используется как в качестве удобного средства построения приближенных решений уравнения Шредингера, так и в качестве основы для понимания перехода к классическому пределу для квантовых систем. Условие применимости метода фазовых интегралов выполнено только в том случае, когда на любом участке, где наблюдается значительное изменение потенциала, волновая функция испытывает несколько осцилляций.

Построение потенциала взаимодействия на основе полученных из экспериментов по рассеянию структурных данных с использованием метода фазовых интегралов стало предметом большого количества исследований. Непротиворечивые результаты, относящиеся к физике жидкости и столкновений, подробно рассмотрены в работах [1].

*Département de Physique Théorique, Université Med Khider, Biskra, Algeria.
E-mail: azerarka@hotmail.com

В настоящей работе теория обратного рассеяния применяется для восстановления потенциала взаимодействия по сдвигу фазы как функции квантового числа l . Предполагается, что полный потенциал $v(r)$ имеет вид $v_1(r) + v_2(r)$, где первый член представляет взаимное притяжение Ван-дер-Ваальса [2], а второй член описывает электростатическое отталкивание электронов в атоме. Парциальный сдвиг фазы, соответствующий произвольному потенциалу, выводится аналитически, а полный парциальный сдвиг фазы $\delta(l)$ для потенциала $v(r)$ остается неизменным и всегда может быть вычислен аналитически в терминах слагаемого $v_2(r)$ и орбитального квантового числа l . Вычисления для построения искомого потенциала производятся путем включения двух регулируемых параметров в произвольный потенциал. Подходящий выбор этой пары параметров позволяет воспроизвести исходный потенциал во всем диапазоне.

В рамках совместного формализма обратного рассеяния и метода квазиклассического приближения обычная обратная задача была сведена к включению произвольного потенциала подходящего вида. Тем самым был предложен новый подход, а полученные соотношения были доказаны с помощью обычных вычислений. Полученные для четырех пар параметров данные показывают, что введение вспомогательного потенциала дает весьма обещающие результаты.

С другой стороны, для построения потенциалов по сдвигам фаз было предложено большое количество процедур, основанных на подборе параметров. Результаты этих работ описаны в книгах [3]. Существует несколько работ, связанных с определением потенциала по экспериментальным данным (см., например, [4]).

Данная статья организована следующим образом. В разделе 2 кратко рассмотрена постановка задачи рассеяния, которая при использовании некоторых положений, вытекающих из метода квазиклассического приближения, позволяет получить полный сдвиг фазы. В разделе 3 описываются стандартный подход и математическая конструкция, используемые для решения обратной задачи с помощью метода фазовых интегралов и техники преобразования Абеля, которая позволяет вывести формальные соотношения между вторым членом потенциала $v_2(r)$, его первым членом $v_1(r)$ и сдвигом фазы $\delta(l)$. Демонстрируется применение метода к системе, состоящей из атома щелочного металла и атома инертного газа (система Na–He). В разделе 4 формулируется обобщение стандартного подхода на основе введения в теорию произвольного потенциала. Раздел 5 содержит обсуждение и выводы.

В настоящей статье мы используем атомную систему единиц, если не оговорено иное.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Обратная процедура восстановления потенциала с помощью преобразования Абеля [5] формулируется в рамках квазиклассического приближения. Теория обратного рассеяния и метод фазовых интегралов совместно с адекватными физическими рассуждениями позволяют предложить эффективный подход для исследования неизвестного потенциала при фиксированной энергии.

Чтобы объяснить метод фазовых интегралов, рассмотрим задачу упругого рассеяния для системы с центрально-симметричным потенциалом $v(r) = v_1(r) + v_2(r)$. Урав-

нение Шредингера для l -й парциальной волны имеет вид

$$\Delta \Psi + K_1^2(r) \Psi = 2\mu v_2(r) \Psi, \quad (1)$$

где $K_1(r)$ – локальный классический импульс,

$$K_1^2(r) = \left[2\mu E_0 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2\mu v_1(r) \right], \quad (2)$$

μ – приведенная масса, E_0 – падающая энергия, постоянная Планка $\hbar$ взята равной единице. Обозначим через r_{01} классическую точку поворота, которая определяется из условия обращения в нуль локального классического момента, т.е. $K_1^2(r_{01}) = 0$.

Квазиклассическое решение [6], [7] может быть записано в виде

$$\Psi(r) = \frac{A}{\sqrt{K_1(r)}} \left[c^+(r) \exp \left[i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] - c^-(r) \exp \left[-i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] \right], \quad (3)$$

где A – постоянная,

$$S_1(r) = \int_{r_{01}}^r K_1(r_1) dr_1,$$

$c^\pm(r)$ – произвольные комплексные функции.

Налагая условие

$$\frac{dc^+(r)}{dr} \exp \left[i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] - \frac{dc^-(r)}{dr} \exp \left[-i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] = 0 \quad (4)$$

на неизвестные функции $c^\pm(r)$ и используя специальные условия справедливости квазиклассического приближения [7], можно показать, что эти функции должны удовлетворять системе сцепленных дифференциальных уравнений первого порядка, которые могут быть записаны в матричной форме:

$$\frac{dC}{dr} = i\mu \frac{v_2(r)}{K_1(r)} BC, \quad (5)$$

где матрицы C и B имеют вид

$$C = \begin{bmatrix} c^+(r) \\ c^-(r) \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & \exp \left[i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ \exp \left[-i \left(S_1(r) + \frac{\pi}{4} \right) \right] & -1 \end{bmatrix}.$$

Для того чтобы решить уравнение (5), полезно заметить, что $S_1(r)$ обычно является быстро возрастающей функцией переменной r . Это приводит к сильной осцилляции экспоненциального члена $e^{\pm i S_1(r)}$, так что можно использовать приближение

$$\int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} \exp \left[\pm i \left(S_1(r_1) + \frac{\pi}{4} \right) \right] dr_1 \ll \int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1, \quad (6)$$

что расщепляет уравнения (5). Поэтому

$$c^{\pm}(r) = c^{\pm}(r_{01}) \exp \left[\mp i \mu \int_{r_{01}}^r \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1 \right],$$

где $c^{\pm}(r_{01})$ – постоянные, которые должны определяться из начальных условий. Более того, если $\delta^{(1)}(l)$ представляет собой квазиклассический сдвиг фазы, соответствующий воздействию первого члена $v_1(r)$ в отсутствие второго, то из обычного выражения для S -матрицы

$$S(l) = e^{2i\delta(l)} = \frac{c^{+}(\infty)}{c^{-}(\infty)} e^{2i\delta^{(1)}(l)}$$

можно выделить полный сдвиг фазы для рассматриваемой системы в терминах орбитального квантового числа l :

$$\delta(l) = \delta^{(1)}(l) - \mu \int_{r_{01}}^{\infty} \frac{v_2(r_1)}{K_1(r_1)} dr_1. \quad (7)$$

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА $v_2(r)$: СТАНДАРТНЫЙ ПОДХОД

В этом разделе мы получим аналитическое выражение для потенциала $v_2(r)$ с помощью процедуры обращения, в которой используется преобразование Абеля [5]. Потенциал $v_2(r)$ будет выражен в виде интеграла, который может быть посчитан численно в рамках модели упругого рассеяния.

Удобно ввести следующие величины:

$$P(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} [\delta(l) - \delta^{(1)}(l)], \quad (8)$$

$$D(E_0, Y) = v_2(r) \frac{dr^2}{dY^2}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} Y^2(r) &= Y^2 = r^2(E_0 - v_1(r)), \\ Y^2(r_{01}) &= Y_{01}^2 = r_{01}^2(E_0 - v_1(r_{01})). \end{aligned} \quad (10)$$

Формула (2) может быть записана следующим образом:

$$K_1(r) = \sqrt{2\mu} \frac{1}{r} [Y^2 - Y_{01}^2]^{1/2}. \quad (11)$$

С учетом (7) соотношение (8) принимает вид

$$P(E_0, l) = \int_{Y_{01}}^{\infty} dY \frac{D(E_0, Y)Y}{\sqrt{Y^2 - Y_{01}^2}}. \quad (12)$$

Теперь можно умножить обе части равенства (12) на величину $2Y_{01}/\sqrt{Y_{01}^2 - t^2}$ и проинтегрировать по Y_{01} от t до ∞ , где t – некоторый произвольный параметр. Тогда, используя соотношение

$$\int_t^Y \frac{2Y_{01}}{\sqrt{(Y_{01}^2 - t^2)(Y^2 - Y_{01}^2)}} dY_{01} = \pi,$$

имеем

$$\int_t^\infty P(E_0, l) \frac{2Y_{01}}{\sqrt{Y_{01}^2 - t^2}} dY_{01} = \pi \int_t^\infty D(E_0, Y) Y dY. \quad (13)$$

Дифференцируя обе части полученного равенства по t и используя интегрирование по частям, получаем

$$D(E_0, Y) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{\sqrt{Y_{01}^2 - Y^2}} \frac{dP(E_0, l)}{dY_{01}} dY_{01}, \quad (14)$$

где t заменено на Y .

Нужно подчеркнуть, что этот результат интересен в том смысле, что существование и единственность решения обратной задачи в данном случае полностью гарантированы. Действительно, с одной стороны, можно показать, что интеграл в (14) всегда сходится, а с другой стороны, однозначность этого типа преобразования Абеля хорошо известна. Из формул (9), (10) и (14) следует окончательное аналитическое выражение для восстановления потенциала $v_2(r)$:

$$v_2(r) = D(E_0, Y) \left[E_0 - v_1(r) - \frac{r}{2} \frac{dv_1(r)}{dr} \right]. \quad (15)$$

Другими словами, при условии, что величины $v_1(r)$ и $\delta(l)$ известны, всегда можно получить $v_2(r)$ и, следовательно, $v(r)$. Для того чтобы вычислить величину $D(E_0, Y)$, на первом шаге мы получаем величину $P(E_0, l)$, используя приведенные в табл. 1 фазовые сдвиги, а затем, на втором шаге, строим величину $dP(E_0, l)/dY_{01}$ с помощью интерполяции. С вычислительной точки зрения, для того чтобы освободиться от сингулярности при $Y = Y_{01}$, удобно использовать преобразование Бака [8]: $l^2 - 2\mu Y^2 = z^2$, в результате которого интеграл (14) принимает вид

$$D(E_0, Y) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\exp[-0.36(\sqrt{z^2 + 2\mu Y^2} - 35)]}{\sqrt{z^2 + 2\mu Y^2}} dz. \quad (16)$$

Для интересующего нас потенциала Ван-дер-Ваальса $v_1(r)$ имеем окончательно

$$v_2(r) = D(E_0, Y) \left[E_0 - 2\frac{c_6}{r^6} \right]. \quad (17)$$

Приложение к системе Na–He. Случай упругого рассеяния между атомами гелия (He) и атомами щелочного металла натрия (Na) может быть численно исследован с использованием приведенных выше результатов. При рассеянии подобного рода потенциал $v_1(r)$ считается априори известным и равным $-c_6 r^{-6}$, где c_6 – константа Ван-дер-Ваальса [9], а относительно потенциала $v_2(r)$ предполагается, что он имеет вид $v_2(r) = Dr^\beta e^{-\alpha r}$, причем значения параметров D , β и α можно найти в работе [10].

На рис. 1 представлены результаты, полученные с помощью формулы (17), и исходная кривая $v_2(r) = Dr^\beta e^{-\alpha r}$ для сравнения. Отметим, что различие между кривыми вполне предсказуемо и связано с приближением (6), которое было использовано ранее,

ТАБЛИЦА 1

Значения величин r_{01} , $\delta(l)$ и $\delta^{(1)}(l)$
в зависимости от орбитального квантового числа l

l	r_{01} (a.e.)	$\delta^{(1)}(l)$	$\delta(l)$
0			−31.01
5			−23.88
10			−17.93
15			−13.03
20			−9.08
25			−6.00
30			−3.79
35	7.8	+1.40	−2.09
40	9.4	+0.623	−1.06
45	10.7	+0.332	−0.47
50	11.9	+0.193	−0.17
55			+0.019
60			+0.041

для того чтобы расцепить дифференциальные уравнения. С другой стороны, с помощью развитого метода нельзя построить потенциал во внутренней области $r < 7.80$, поскольку в рамках обычного метода фазовых интегралов она соответствует классически недопустимой области движения. В следующем разделе будет показано, что использование в аналитическом выражении для потенциала $v(r)$ подходяще выбранного дополнительного вспомогательного члена в ряде случаев может сделать достижимой значительную часть этой области.

4. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В предыдущем разделе потенциал $v_2(r)$ был вычислен с помощью квазиклассической теории обратного рассеяния и было показано, что внутренняя область ($r < 7.80$) является недостижимой, поскольку она соответствует классически недопустимой области движения. Для того чтобы преодолеть указанную трудность, всегда можно включить вспомогательный потенциал $v_{\text{aux}}(r)$, который не нарушает условия применимости квазиклассического приближения при фиксированной энергии.

Вводя некоторый произвольный потенциал $v_{\text{aux}}(r)$, можно переписать потенциал $v(r)$ в следующем новом виде:

$$v(r) = v_{\text{aux}}(r) + V_2(r), \quad (18)$$

Рис. 1. Потенциал $v_2(r)$. Сплошная линия – исходная формула, штриховая линия с квадратами – потенциал, восстановленный при помощи стандартного подхода.

где

$$V_2(r) = v_1(r) + v_2(r) - v_{\text{aux}}(r) \quad (19)$$

(индекс “aux” указывает на то обстоятельство, что мы используем вспомогательный потенциал). Преобразуем выписанные выше формулы, заменив $v_1(r)$ на $v_{\text{aux}}(r)$ и $v_2(r)$ на $V_2(r)$. Уравнение Шредингера примет вид

$$\Delta \Psi + K_{\text{aux}}^2(r) \Psi = 2\mu V_2(r) \Psi, \quad (20)$$

где

$$K_{\text{aux}}^2(r) = 2\mu \left(E_0 - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - v_{\text{aux}}(r) \right). \quad (21)$$

Используя специальные условия применимости метода фазовых интегралов, запишем $P_{\text{aux}}(E_0, l)$ как функцию сдвигов фаз:

$$P_{\text{aux}}(E_0, l) = -\sqrt{\frac{2}{\mu}} [\delta(l) - \delta_{\text{aux}}(l)], \quad (22)$$

$$D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) = -\frac{2}{\pi} \int_Y^\infty \frac{1}{\sqrt{Y_{01\text{aux}}^2 - Y_{\text{aux}}^2}} \frac{dP_{\text{aux}}(E_0, l)}{dY_{01\text{aux}}} dY_{01\text{aux}}, \quad (23)$$

$$D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) = V_2(r) \frac{dr^2}{dY_{\text{aux}}^2}. \quad (24)$$

Теперь потенциал $V_2(r)$ находится из формулы (24), а потенциал $v_2(r)$ – из формулы (19), и мы имеем

$$v_2(r) = D_{\text{aux}}(E_0, Y_{\text{aux}}) \left[E_0 - v_{\text{aux}}(r) - \frac{r}{2} \frac{dv_{\text{aux}}(r)}{dr} \right] - v_1(r) + v_{\text{aux}}(r). \quad (25)$$

В процессе вычислений величина $dP_{\text{aux}}(E_0, l)/dY_{01\text{aux}}$ получается из функции $P_{\text{aux}}(E_0, l)$ при помощи интерполяции. Интеграл (23) считается численно с помощью усовершенствованной версии программы, использующей библиотеки Фортрана, а выражение (25) позволяет восстановить искомый потенциал.

4.1. Парциальный сдвиг фазы для вспомогательного потенциала. Сдвиги фаз представляют собой удобное средство для выражения всей существенной информации, необходимой для описания рассеяния. Следовательно, сдвиги фаз $\delta(l)$ полностью описывают физическое поведение в задаче рассеяния.

Полные сдвиги фазы для центрально-симметричного потенциала можно рассмотреть с помощью метода переменной фазы [11]. Мы вычисляем фазовые сдвиги посредством стандартного подхода. Таким образом, если потенциал имеет компактный носитель и является кусочно-однородным, то можно также использовать более точное описание, в общих чертах намеченное в работе [12]. Наш произвольный потенциал не является потенциалом из описанного выше класса. Он имеет следующий вид:

$$v_{ab} = \frac{a}{r^2} + b,$$

где a и b – два регулируемых параметра, а нижний индекс “aux” заменен индексом ab . Аналогично [13] аналитическое выражение для сдвига фазы $\delta_{ab}(l)$ может быть получено в виде

$$\delta_{ab}(l) = \frac{\pi}{2} \left[\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu ab}{E_0}} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + 2\mu a} \right], \quad (26)$$

где использовано приближение Крамерса первого порядка (выражение $l(l+1)$ заменено на $(l + 1/2)^2$).

Вычисления интеграла $D_{ab}(E_0, Y)$ позволяет нам немедленно предложить два важных критерия выбора пары параметров потенциала $v_{ab}(r)$:

- 1) классически недопустимая область движения должна быть значительно уменьшена;
- 2) условие применимости квазиклассического приближения всегда должно выполняться.

4.2. Улучшение по отношению к стандартному случаю. Взаимодействие атомов щелочного металла и инертного газа в последнее десятилетие было предметом ряда как экспериментальных, так и теоретических исследований. Источником достоверной информации относительно таких потенциалов являются, например, дифференциальные оптические столкновения [14] и наблюдения, приводящие к измерению показателя преломления заданной атомной волны, которая распространяется в состоящей

из атомов инертного газа среде [15]. В предлагаемом примере мы сосредоточимся на рассмотрении упругого рассеяния в системе Na–He.

В качестве альтернативы мы можем на основе предыдущего рассмотрения определить более точные значения для второй части потенциала взаимодействия в системе “щелочной металл – инертный газ”. Аналитический способ восстановления потенциала определен. Нетрудно организовать процедуру непосредственного численного решения, варьируя пару параметров во вспомогательном потенциале до тех пор, пока удовлетворительное согласие с исходным потенциалом не будет достигнуто. Таким образом, главный результат данного раздела состоит в адекватном выборе двух значимых безразмерных параметров задачи a и b . При таком подходе условие применимости квазиклассического приближения всегда выполнено.

Полный сдвиг фазы для полного потенциала остается неизменным и может быть вычислен аналитически в терминах потенциала $v_2(r)$ и орбитального квантового числа l или просто выражен через экспериментальные данные.

Излишне напоминать, что пара параметров выбирается так, чтобы было выполнено условие применимости квазиклассического приближения:

$$\left| \frac{L_a}{[2\mu(E_0 - b)r^2 - L_a]^{3/2}} \right| \ll 1,$$

где $L_a = l^2 + l + 2a\mu$.

Зная сдвиги фаз для вспомогательного и полного потенциалов и пару параметров a и b , можно восстановить потенциал; как функция от r он имеет следующий вид:

$$v_2(r) = (E_0 - b)D_{ab}(E_0, Y) + \frac{c_6}{r^6} + \frac{a}{r^2} + b.$$

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ДАЛЬНЕЙШИЕ ЗАДАЧИ

Мы представили полный анализ задачи восстановления потенциала для не зависящего от времени уравнения Шредингера в рамках обратной задачи рассеяния. Сформулирован метод квазиклассического приближения, позволяющий включить произвольный потенциал.

Мы продемонстрировали преимущество совместного использования обратной задачи рассеяния и метода фазовых интегралов, показав, что введение подходящего вспомогательного потенциала позволяет без потери точности уменьшить недостижимую область (т.е. ту область, в которой восстановление потенциала используемым методом невозможно). Нижние границы области достижимости (для четырех пар параметров во вспомогательном потенциале) расположены на показательно малом расстоянии в окрестности точки $r = 0.19$. Именно, для значений пар параметров $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$, $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$, $\{a, b\}_3 = (2 \cdot 10^{-5}, 0.9 \cdot 10^{-3})$ и $\{a, b\}_4 = (-2 \cdot 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-5})$ полученные значения нижней границы области достижимости равны соответственно 0.197, 0.199, 0.208 и 0.478.

На рис. 2 представлены восстановленный (с использованием второй из рассматриваемых пар параметров) и исходный потенциалы как функции от r . Ясно, что получен

Рис. 2. Потенциал $v_2(r)$, $0 \leq r \leq 11$ (на вставке $0 \leq r \leq 1.25$). Сплошная линия – исходная формула; пунктирная линия – потенциал, восстановленный с использованием вспомогательного потенциала при значении пары параметров $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$. Нижняя граница области достижимости равна $r = 0.199$.

превосходный результат: кривые совпадают с высокой степенью точности. Однако небольшое различие между исходным потенциалом $v_2(r)$ и нашими вычислениями, основанными на потенциале, полученном с помощью обратной задачи рассеяния, все еще остается заметным вблизи максимума. Такого различия между кривыми можно было ожидать, оно связано с использованием приближения (6) для расщепления дифференциальных уравнений.

Для сравнения на рис. 3 представлены потенциалы $v_2(r)$, восстановленные с помощью обычного подхода и подхода со вспомогательным потенциалом (в данном случае использована первая пара параметров). Здесь можно отметить, по существу, два момента. Во-первых, обычный метод дает результат не во всем диапазоне, а результат, полученный с использованием вспомогательного потенциала, гораздо более полный. Во-вторых, включение свободных параметров a, b дает значительное улучшение процедуры восстановления потенциала. Однако относительная ошибка $(v_{2,\text{original}} - v_{2,\text{inverted}}) \times 100 / v_{2,\text{original}}$ приблизительно равна 0.04% на всех рисунках.

В табл. 2 представлены вычисленные для двух наиболее удачно выбранных пар параметров значения интеграла $D_{ab}(E_0, r)$ и точки поворота в зависимости от орбитального квантового числа l .

В дальнейшем мы надеемся повысить чувствительность стандартного решения, заменив потенциал взаимодействия Ван-дер-Ваальса на притягивающий потенциал ти-

Рис. 3. Потенциал $v_2(r)$. Сплошная линия – исходная формула; пунктирная линия – потенциал, восстановленный с использованием вспомогательного потенциала при значении пары параметров $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$ (наилучший способ выбора параметров); штриховая линия с квадратами – потенциал, восстановленный при помощи стандартного подхода. Нижняя граница области достижимости равна $r = 7.8$.

па нерелятивистского потенциала Юкавы со специальным отрицательным параметром, и извлечь более точную информацию относительно потенциалов рассеяния, для того чтобы достичь лучшего восстановления неизвестного потенциала в пределах заданной допустимой ошибки. Наша главная цель – воспроизвести неизвестный потенциал как можно более точно. Другие возможности, состоящие в модификации взаимодействия Ван-дер-Ваальса $V(r) = -c_6/r^6$, описаны в книгах [16] (с. 343) и [17] (с. 203).

Подведем итог. Мы представили привлекательный подход, который позволяет с высокой точностью вычислить искомый потенциал в области, находящейся далеко за пределами применимости обычного подхода. Результаты демонстрируют практическую эффективность предложенного подхода. Наконец, можно подчеркнуть, что этот подход носит общий характер и может быть обобщен и применен к очень широкой совокупности задач упругого рассеяния¹⁾.

¹⁾ В следующей, не завершенной в настоящий момент, работе мы применяем наш подход к очень надежным результатам эксперимента по рассеянию на криптоне (Kr). Таким образом, восстановленный потенциал сравнивается с потенциалом Ленарда–Джонса, в котором выбрана обычная для криптона параметризация, и с потенциалом Азиза–Сламана (относительно потенциалов Розена–Морса см. прекрасные работы [18]).

ТАБЛИЦА 2

Значения классических точек поворота r_{ab} ($K_{ab}(r_{ab}) = 0$) и интеграла $D_{ab}(E_0, r)$ в зависимости от орбитального квантового числа l для пар параметров $\{a, b\}_1 = (-0.0024, -0.0012)$ и $\{a, b\}_2 = (6.658 \cdot 10^{-5}, -3.0471 \cdot 10^{-4})$. Все величины приведены в атомных единицах

l	r_{ab}		$D_{ab}(E_0, r)$	
	$\{a, b\}_1$	$\{a, b\}_2$	$\{a, b\}_1$	$\{a, b\}_2$
0		0.19999		$-2.3566 \cdot 10^8$
5	0.19764	1.24169	$-1.6451 \cdot 10^8$	-4109.3
10	1.6258	2.35591	-526.41	-81.534
15	2.622	3.47191	-25.415	-3.1118
20	3.5685	4.58963	-0.84426	1.9936
25	4.4968	5.70774	1.6654	1.6725
30	5.4163	6.82603	1.5944	1.0107
35	6.3307	7.94444	1.2242	0.6117
40	7.2421	9.06292	0.9234	0.38492
45	8.1514	10.1815	0.72797	0.27275
50	9.0593	11.3000	0.61211	0.22103

Благодарности. Мы благодарны Дж.Н. Фостеру, А.Ф. Ардовицу и проф. Р.Д. Смиту за стимулирующие обсуждения и С. Абдалу за помощь в проведении численных расчетов. Эта работа была частично поддержана Academy of Sciences of the Constantine University (грант № D0701/01/04).

Список литературы

- [1] *M. Dzugutov, K.-E. Larsson, I. Ebbsjö.* Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 3609; *D. Levesque, J.-J. Weis, L. Reatto.* Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 451; *M. W. C. Dharma-wardana, G. C. Aers.* Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 1211; *L. Reatto, D. Levesque, J.-J. Weis.* Phys. Rev. A. 1986. V. 33. P. 3451; *M. C. Bellissent-Funel, P. Chieux, D. Levesque, J.-J. Weis.* Phys. Rev. A. 1989. V. 39. P. 6310; *G. Kahl, M. Kristufek.* Phys. Rev. E. 1994. V. 49. P. R3568; *G. Kahl, B. Bildstein, Y. Rosenfeld.* Phys. Rev. E. 1996. V. 54. P. 5391.
- [2] *J. Goodisman.* Diatomic Interaction Potential Theory. V.2. New York: Acad. Press, 1973; *A. Dalgarno.* New methods for calculating long-range intermolecular forces. In: Intermolecular Forces. (Adv. Chem. Phys. V. 12). Ed. J.O. Hirschfelder. New York: Wiley, 1967.
- [3] *K. Chadan, P. Sabatier.* Inverse Problems in Quantum Scattering Theory. New York: Springer, 1989; *Р. Ньютон.* Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969.
- [4] *R. Rydberg.* Z. Phys. 1932. V. 73. P. 376; *O. Klein.* Z. Phys. 1932. V. 76. P. 226; *A. L. G. Rees.* Proc. Phys. Soc. London. 1947. V. 59. P. 998; *J. A. Wheeler.* Analysis illuminating the connection between potential and bound states and scattering. In: Studies in Mathematical Physics. Essays in Honor of Valentine Bargmann. Eds. E.H. Lieb, B. Simon,

- A. S. Wightman. Princeton: Princeton Univ. Press, 1976. P. 351; *M. W. Cole, R. H. Good, Jr.* Phys. Rev. A. 1978. V. 18. P. 1085; *N. Froman, P. O. Froman.* Int. J. Quantum Chem. 1989. V. 35. P. 751.
- [5] *R. F. Cameron, S. McKee.* Internat J. Numer. Methods Eng. 1983. V. 19. P. 1527; *X. C. Cao.* On the JWKB approximation in the case of a multicomponent potential. ICTP Trieste International Report № IC/78/140 (unpublished); *W. H. Miller.* J. Chem. Phys. 1969. V. 51. P. 3631.
- [6] *Л. Шифф.* Квантовая механика. М.: Мир, 1959.
- [7] *P. O. Froman.* The JWKB Approximation. Amsterdam: North-Holland, 1965.
- [8] *U. Buck.* J. Chem. Phys. 1977. V. 54. P. 1923.
- [9] *G. D. Mahan.* J. Chem. Phys. 1969. V. 80. P. 2755.
- [10] *E. Roueff.* J. Phys. B. 1974. V. 7. P. 185.
- [11] *F. Calogero.* Variable Phase Approach to Potential Scattering. New York–London: Academic Press, 1967.
- [12] *R. Airapetyan, A. G. Ramm, A. B. Smirnova.* Phys. Lett. A. 1999. V. 254. P. 141.
- [13] *X. C. Cao, M. N. Tran.* JWKB approximation for the singular potential. Observatoire de Paris Meudon Internal Report № 22 (unpublished).
- [14] *J. Grosser, V. Hoffmann, F. Rebentrost.* J. Phys. B. 2000. V. 33. P. L577.
- [15] *J. Vigué.* Phys. Rev. A. 1995. V. 52. P. 3973.
- [16] *W. B. Russel, D. A. Saville, W. R. Schowalter.* Colloidal Dispersions. Cambridge: Camb. Univ. Press, 1989.
- [17] *J. Israelachvili.* Intermolecular and Surface Forces. 2nd ed. London–New York: Acad. Press, 1992.
- [18] *F. Bocchi, P. Chieux, R. Magli, L. Reatto, M. Tau.* Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 947; *J. Phys.: Condens. Matter.* 1993. V. 5. P. 4299; *J.-P. Hansen, I. R. McDonald.* Theory of Simple Liquids. 2nd ed. New York: Acad. Press, 1986; *R. A. Aziz, M. J. Slaman.* Mol. Phys. 1986. V. 58. P. 679; *N. Dalarsson.* Fiz. B. 1994. V. 3. P. 147.

Поступила в редакцию 10.XI.2003 г.,
после доработки 15.VI.2004 г.