Общероссийский математический портал

С. А. Зайцев, Трехдиагональная параметризация взаимодействия в дискретном подходе к проблеме рассеяния, *ТМФ*, 1998, том 115, номер 2, 263–274

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf871>

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: 35.173.219.149

26 апреля 2023 г., 14:44:43

© 1998 г.

С. А. Зайцев*

ТРЕХДИАГОНАЛЬНАЯ ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДИСКРЕТНОМ ПОДХОДЕ К ПРОБЛЕМЕ РАССЕЯНИЯ

Предложен метод построения сепарабельных потенциалов с осцилляторными формфакторами, если известны фаза рассеяния и дискретный спектр квантовой системы. Показано, что оптимальный выбор значения вариационного параметра $\hbar\omega$ позволяет минимизировать ранг потенциала.

1. ВВЕДЕНИЕ

Целью работы является построение на основе информации о дискретном спектре системы с короткодействием и фазе рассеяния $\delta_l(E)$ нелокального сепарабельного потенциала

$$\hat{V} = \hbar\omega \sum_{i,j=0}^{N-1} |\varphi_i^l\rangle V_{i,j} \langle \varphi_j^l|. \quad (1)$$

Потенциал задается симметричной $N \times N$ -матрицей с элементами $V_{i,j}$ и параметром $\hbar\omega$, которые используются в качестве формфакторов собственных функций гармонического осциллятора

$$|\varphi_n^l\rangle = (-1)^n \left(\frac{2n!}{\rho \Gamma(n+l+\frac{3}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} x^{l+1} e^{-\frac{x^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(x^2). \quad (2)$$

Здесь x – относительная координата в единицах осцилляторного радиуса $\rho = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$, μ – приведенная масса. Будем измерять энергию E в единицах $\hbar\omega$, т.е. $E = \hbar\omega\epsilon$, $\epsilon = q^2/2$, где q – канонически-сопряженный координате x безразмерный импульс.

Представление взаимодействия в форме (1) удобно при проведении расчетов в рамках модели оболочек, поскольку содержит матричные элементы взаимодействия в оболочечном базисе. Эффективность использования сепарабельного разложения (1) двух-

*Хабаровский государственный технический университет, Хабаровск, Россия

частичного взаимодействия в проблеме многих тел тем выше, чем меньшее число слагаемых оно содержит. Минимизация ранга N потенциала (1), как далее будет показано, возможна при оптимальном выборе вариационного параметра $\hbar\omega$ (если значение последнего заранее неизвестно из физических соображений).

Проблема существования решения обратной задачи рассеяния в классе потенциалов (1) здесь не обсуждается.

В данной статье используется так называемый метод J -матрицы [1–3] для решения задачи рассеяния на потенциале (1) ранга N . Ниже мы приведем необходимые для дальнейшего сведения об этом методе.

2. МЕТОД J -МАТРИЦЫ

Волновая функция $u_l(k, r)$ (решение уравнения Шредингера) представляется в виде разложения

$$u_l(k, r) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^l(q) |\varphi_n^l\rangle. \quad (3)$$

В результате уравнение Шредингера записывается в виде бесконечной системы линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложения $b_n^l(q)$. Использование осцилляторного базиса позволяет свести решение этой системы к решению задачи на собственные значения для $N \times N$ -матрицы $\mathbf{h}$ гамильтониана $\hat{h} = \hat{H}/\hbar\omega$. Эта матрица представляет собой сумму матрицы $\mathbf{V}$ оператора потенциальной энергии $\hat{V}/\hbar\omega$ (1) и трехдиагональной матрицы $\mathbf{T}$ оператора $\hat{T}/\hbar\omega$ кинетической энергии. Отличные от нуля элементы матрицы $\mathbf{T}$ определяются выражениями

$$\begin{aligned} T_{n,n}^l &= \frac{1}{2} \left(2n + l + \frac{3}{2} \right), \\ T_{n,n+1}^l &= T_{n+1,n}^l = -\frac{1}{2} \sqrt{(n+1) \left(n + l + \frac{3}{2} \right)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для искомых коэффициентов b_n^l имеем [1] следующее решение:

$$b_n^l(q) = \begin{cases} \mathcal{P}_{n,N-1}(\epsilon) T_{N-1,N}^l b_N^l(q), & n \leq N-1, \\ e^{i\delta_l(\epsilon)} \tilde{C}_{nl}(\epsilon), & n \geq N-1, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\tilde{C}_{nl}(\epsilon) = \cos \delta_l(\epsilon) S_{N,l}(q) + \sin \delta_l(\epsilon) C_{N,l}(q). \quad (6)$$

Функции

$$S_{n,l}(q) = \left(\frac{2n!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} q^{l+1} e^{-\frac{q^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(q^2), \quad (7)$$

$$C_{n,l}(q) = \left(\frac{2n!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{q^{-l} \Gamma(l+\frac{1}{2})}{\pi} e^{-\frac{q^2}{2}} F\left(-n-l-\frac{1}{2}, -l+\frac{1}{2}; q^2\right) \quad (8)$$

образуют фундаментальную систему решений дискретного аналога свободного уравнения Шредингера [1, 2].

В результате сшивки внутренних ($n \leq N-1$) и внешних ($n \geq N-1$) решений (5) получаются выражения для тангенса фазы рассеяния и S -матрицы [1, 2]

$$\operatorname{tg} \delta_l(E) = -\frac{S_{N-1,l}(q) - \mathcal{P}_{N-1,N-1}(\epsilon) T_{N-1,N} S_{N,l}(q)}{C_{N-1,l}(q) - \mathcal{P}_{N-1,N-1}(\epsilon) T_{N-1,N} C_{N,l}(q)}, \quad (9)$$

$$S_l(E) = \frac{C_{N-1,l}^{(-)}(q) - \mathcal{P}_{N-1,N-1}(\epsilon) T_{N-1,N} C_{N,l}^{(-)}(q)}{C_{N-1,l}^{(+)}(q) - \mathcal{P}_{N-1,N-1}(\epsilon) T_{N-1,N} C_{N,l}^{(+)}(q)}, \quad (10)$$

где $C_{n,l}^{(\pm)}(q) = C_{n,l}(q) \pm i S_{n,l}(q)$.

Из выражений (5), определяющих волновую функцию, а также из формул (9), (10) для фазы рассеяния и S -матрицы следует, что информация о потенциале системы содержится в элементах $\mathcal{P}_{ij}$ матрицы [1]:

$$\mathcal{P}_{i,j}(\epsilon) = ([\mathbf{I}\epsilon - \mathbf{h}]^{-1})_{i,j}, \quad (11)$$

где $\mathbf{I}$ — единичная матрица. При этом поведение фазы рассеяния и положение связанных состояний определяются элементом $\mathcal{P}_{N-1,N-1}$, который в дальнейшем будем обозначать как $\mathcal{P}_N$, т.е. $\mathcal{P}_N(\epsilon) \equiv \mathcal{P}_{N-1,N-1}(\epsilon)$. Ниже мы подробнее рассмотрим свойства функции $\mathcal{P}_N(\epsilon)$, следующие из ее определения, поскольку она оказывается единственной характеристикой метода, связывающей данные рассеяния и дискретный спектр системы с информацией об элементах V_{ij} матрицы потенциала (1).

3. ФАЗОВОЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Из определения (11) следует, что

$$\mathcal{P}_N(\epsilon) = \frac{\det[\mathbf{I}\epsilon - \bar{\mathbf{h}}]}{\det[\mathbf{I}\epsilon - \mathbf{h}]}, \quad (12)$$

где $\bar{\mathbf{h}}$ – главная $(N-1) \times (N-1)$ -подматрица матрицы $\mathbf{h}$ гамильтониана ($\bar{h}_{ij} = h_{ij}$, $i, j = \overline{0, N-2}$). Функция $\mathcal{P}_N$ инвариантна относительно ортогонального преобразования $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{Q}\mathbf{h}\mathbf{Q}^{-1}$ с матрицей $\mathbf{Q}$ вида

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} & & & 0 \\ & \boxed{\bar{\mathbf{Q}}} & & \vdots \\ & & & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

поскольку преобразование подобия оставляет неизменным характеристический многочлен матрицы, т.е. $\det|\mathbf{I}\epsilon - \mathbf{Q}\mathbf{h}\mathbf{Q}^{-1}| = \det|\mathbf{I}\epsilon - \mathbf{h}|$ и $\det|\mathbf{I}\epsilon - \bar{\mathbf{Q}}\bar{\mathbf{h}}\bar{\mathbf{Q}}^{-1}| = \det|\mathbf{I}\epsilon - \bar{\mathbf{h}}|$. В частном случае, когда $\mathbf{Q}$ совпадает с матрицей $\mathbf{P}$ преобразования Хаусхолдера [4], матрица $\tilde{\mathbf{h}} = \mathbf{P}\mathbf{h}\mathbf{P}^{-1}$ будет трехдиагональной,

$$\tilde{\mathbf{h}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \dots & \dots & \dots \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \dots & \dots \\ \dots & \beta_2 & \alpha_3 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \beta_{N-1} \\ \dots & \dots & \dots & \beta_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Из сказанного выше следует фазовая эквивалентность потенциалов (1) ранга N с фиксированным параметром $\hbar\omega$, симметричные матрицы $\mathbf{V}$ которых удовлетворяют соотношению

$$\mathbf{V} = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{h}}\mathbf{Q}^{-1} - \mathbf{T}, \quad (15)$$

где $\tilde{\mathbf{h}}$ – фиксированная симметричная трехдиагональная матрица, $\mathbf{Q}$ – произвольная ортогональная матрица вида (13). Действительно, соответствующие матрицы гамильтониана $\mathbf{h} = \mathbf{V} + \mathbf{T}$ оказываются связанными ортогональным преобразованием $\mathbf{h} = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{h}}\mathbf{Q}^{-1}$ и, следовательно, характеризуются единой функцией $\mathcal{P}_N$, полностью определяющей рассеяние в системе. В частном случае единичной матрицы $\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ для матрицы $\mathbf{V}$ введем обозначение $\tilde{\mathbf{V}}$: $\tilde{\mathbf{V}} = \tilde{\mathbf{h}} - \mathbf{T}$. Соответствующий определенной таким образом трехдиагональной матрице $\tilde{\mathbf{V}}$ потенциал (1) назовем базовым.

Легко получить выражение для функции $\mathcal{P}_N$ в виде непрерывной вещественной J -дроби:

$$\mathcal{P}_N(\epsilon) = \frac{1}{(\epsilon - \alpha_N) - \frac{\beta_{N-1}^2}{(\epsilon - \alpha_{N-1}) - \frac{\beta_{N-2}^2}{(\epsilon - \alpha_{N-2}) - \dots - \frac{\beta_1^2}{(\epsilon - \alpha_1)}}}}, \quad (16)$$

из которого следует инвариантность функции $\mathcal{P}_N$ относительно изменения знака недиагональных матричных элементов β_j . При построении матрицы $\tilde{\mathbf{V}}$, соответствующей параметризации (16) функции $\mathcal{P}_N$, будем полагать элементы β_j , $j = \overline{1, N-1}$, отрицательными. Такому выбору знака, как следует из (15), отвечают минимальные абсолютные значения недиагональных элементов матрицы базового потенциала $\tilde{\mathbf{V}}$.

Из вышесказанного следует, что элементы α_j , $j = \overline{1, N}$, и β_j , $j = \overline{1, N-1}$, трехдиагональной матрицы $\tilde{\mathbf{h}}$ (14) определяются собственными значениями матрицы гамильтониана $\mathbf{h}$ и ее главной подматрицы $\bar{\mathbf{h}}$ [5], которые обозначим как $\theta_j^{(N)}$, $j = \overline{1, N}$, и $\theta_j^{(N-1)}$, $j = \overline{1, N-1}$, соответственно. Собственные значения $\theta_j^{(N-1)}$, $\theta_j^{(N)}$ удовлетворяют теореме Коши [5] о разделении, т.е. для них справедливы неравенства

$$\theta_1^{(N)} < \theta_1^{(N-1)} < \theta_2^{(N)} < \dots < \theta_{N-1}^{(N-1)} < \theta_N^{(N)}. \quad (17)$$

Таким образом, представление функции $\mathcal{P}_N$ в виде дроби

$$\mathcal{P}_N(\epsilon) = \frac{\prod_{j=1}^{N-1} (\epsilon - \theta_j^{(N-1)})}{\prod_{j=1}^N (\epsilon - \theta_j^{(N)})}, \quad (18)$$

параметры $\theta_j^{(N-1)}$, $\theta_j^{(N)}$ которой удовлетворяют условию (17), однозначно (с точностью до знаков элементов β_j) определяет трехдиагональную матрицу $\tilde{\mathbf{h}}$ и, следовательно, матрицу $\tilde{\mathbf{V}}$ базового потенциала (1). Ниже мы обсудим метод получения функции $\mathcal{P}_N$ в виде (18) исходя из известных фазы рассеяния $\delta_l(E)$ и дискретного спектра системы.

4. ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Пусть для системы с короткодействием известны значения n_b энергий связанных состояний $E_\nu < 0$, $\nu = \overline{1, n_b}$, и поведение фазы рассеяния $\delta_l(E)$, $E \in [0, \infty)$. Построим матрицу $\tilde{\mathbf{V}}$ базового потенциала (1), описывающего поведение системы при заданных энергиях E_ν на некотором интервале $E \in [0, E_0]$, вне которого фаза $\delta_l(E)$ мала. Порядок N матрицы $\tilde{\mathbf{V}}$ должен быть минимальным.

4.1. Отсутствие связанных состояний. Зафиксируем некоторое значение параметра $\hbar\omega$ и определим на интервале $[0, \infty)$ функцию

$$\tilde{\mathcal{P}}_N(\epsilon) = \frac{1}{T_{N-1,N}^l} \frac{\tilde{C}_{N-1,l}(\epsilon)}{\tilde{C}_{N,l}(\epsilon)}. \quad (19)$$

Вид функции $\tilde{\mathcal{P}}_N(\epsilon)$ мы получили, решив с учетом (6) уравнение (9) относительно $\mathcal{P}_N(\epsilon)$.

Рассмотрим нули и особенности функции $\tilde{\mathcal{P}}_N(\epsilon)$, которые совпадают с нулями функций $\tilde{C}_{N-1,l}(\epsilon)$ и $\tilde{C}_{N,l}(\epsilon)$, соответственно. Можно показать, что для достаточно больших N корни $\tilde{\theta}_j^{(N-1)}$ функции $\tilde{C}_{N-1,l}(\epsilon)$ разделяют корни $\tilde{\theta}_j^{(N)}$ функции $\tilde{C}_{N,l}(\epsilon)$. Действительно, при больших N справедливо асимптотическое представление [2]

$$\begin{aligned} S_{N,l}(q) &\approx \frac{2}{\sqrt{\pi}(4N+2l+3)^{-1/4}} \sin\left(q\sqrt{4N+2l+3} - \frac{\pi l}{2}\right), \\ C_{N,l}(q) &\approx \frac{2}{\sqrt{\pi}(4N+2l+3)^{-1/4}} \cos\left(q\sqrt{4N+2l+3} - \frac{\pi l}{2}\right), \end{aligned} \quad (20)$$

откуда следует, что

$$\tilde{C}_{N,l}(\epsilon) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}(4N+2l+3)^{-1/4}} \sin\left(\sqrt{2(4N+2l+3)}\epsilon + \delta_l(\epsilon) - \frac{\pi l}{2}\right). \quad (21)$$

Аргумент синуса в (21)

$$f_N = \sqrt{2(4N+2l+3)}\epsilon + \delta_l(\epsilon) - \frac{\pi l}{2} \quad (22)$$

выбором достаточно большого N можно сделать монотонно возрастающей функцией ϵ , т.к. функция $\delta_l(\epsilon)$ ограничена вместе со своей производной. Таким образом, разделение корней функции $\tilde{C}_{N,l}(\epsilon)$ корнями функции $\tilde{C}_{N-1,l}(\epsilon)$ при достаточно больших N следует из асимптотического представления (21), поскольку в этом случае мы имеем

$$\frac{df_N}{d\epsilon} > \frac{df_{N-1}}{d\epsilon} > 0.$$

Функция $\tilde{\mathcal{P}}_N$ (для достаточно большого N , обеспечивающего разделение корней знаменателя $\tilde{C}_{N,l}$ корнями числителя $\tilde{C}_{N-1,l}$) задает поведение искомой функции $\mathcal{P}_N$ (18) на интервале $[0, \epsilon_0]$. Мы предлагаем следующий метод построения функции $\mathcal{P}_N$, который включает и способ выбора параметров N и $\hbar\omega$ в случае, если значение последнего не определено из физических соображений. Во-первых, потребуем, чтобы нули и особенности функции $\mathcal{P}_N$ на интервале $[0, \epsilon_0]$ совпадали с нулями и особенностями исходной функции $\tilde{\mathcal{P}}_N$, т.е. для максимального K такого, что $\tilde{\theta}_{K+1}^{(N)} < \epsilon_0$, положим $\theta_j^{(N-1)} = \tilde{\theta}_j^{(N-1)}$, $j = \overline{1, K}$, и $\theta_j^{(N)} = \tilde{\theta}_j^{(N)}$, $j = \overline{1, K+1}$.

Далее, если ввести функцию

$$y_M(\epsilon) = \tilde{\mathcal{P}}_N(\epsilon) \frac{\prod_{j=1}^{K+1} (\epsilon - \theta_j^{(N)})}{\prod_{j=1}^K (\epsilon - \theta_j^{(N-1)})}, \quad (23)$$

то задача вычисления недостающих $2M = 2(N - 1 - K)$ параметров $\theta_j^{(N-1)}$, $j = \overline{K+1, N-1}$, и $\theta_j^{(N)}$, $j = \overline{K+2, N}$, может быть сведена к проблеме аппроксимации, не имеющей особенностей и нулей на интервале $[0, \epsilon_0]$ функции $y_M(\epsilon)$ рациональной функцией $A_M(\epsilon)/B_M(\epsilon)$, где A_M, B_M – полиномы степени M . Дробь A_M/B_M строится по $2M$ узлам интерполяции $\epsilon_s \in [0, \epsilon_0]$, $s = \overline{1, 2M}$. Остаточный член есть [6]

$$R_M(\epsilon) = y_M(\epsilon) - \frac{A_M(\epsilon)}{B_M(\epsilon)} = \frac{\prod_{s=1}^{2M} (\epsilon - \epsilon_s)}{(2M)! B_M(\epsilon)} \frac{d^{2M}}{d\epsilon^{2M}} [y_M(\epsilon) B_M(\epsilon)]_{\epsilon=\xi}, \quad (24)$$

$$\xi \in [0, \epsilon_0].$$

Рациональная функция $A_M(\epsilon)/B_M(\epsilon)$ имеет несколько специфический по сравнению со стандартной аппроксимацией Паде [7] вид

$$\frac{A_M(\epsilon)}{B_M(\epsilon)} = \frac{\prod_{i=1}^M (\epsilon - \xi_i)}{\prod_{j=1}^M (\epsilon - \zeta_j)}. \quad (25)$$

Корни полиномов A_M и B_M , которые перемежаются и лежат вне интервала $[0, \epsilon_0]$,

$$\tilde{\theta}_{K+1}^{(N)} < \epsilon_0 < \xi_1 < \zeta_1 < \xi_2 < \dots < \xi_M < \zeta_M, \quad (26)$$

будут определять значения недостающих параметров $\theta_j^{(N-1)}$, $j = \overline{K+1, N-1}$, и $\theta_j^{(N)}$, $j = \overline{K+2, N}$, соответственно. Из соотношений (26) следует, что дробь $A_M(\epsilon)/B_M(\epsilon)$ ограничена, $0 < A_M/B_M < 1$, и монотонно убывает на интервале $[0, \epsilon_0]$.

Заметим, что, как следует из выражения (21), положение старших корней $\tilde{\theta}_j^{(N)} > \epsilon_0$ практически не зависит от выбора параметра $\hbar\omega$, поскольку в этой области фаза $\delta_l(\epsilon)$ по условию изменяется незначительно. Следовательно, увеличивая значение $\hbar\omega$ при фиксированном N , мы будем оставлять за пределами интервала $[0, \epsilon_0 \equiv E_0/\hbar\omega]$ все большее число корней $\tilde{\theta}_j^{(N)}$. При этом определенное выше число K будет уменьшаться, а число M увеличиваться. Одновременно с увеличением $\hbar\omega$ будем уменьшать N , оставляя M неизменным (и достаточным для малости остаточного члена (24)). С другой стороны, с увеличением $\hbar\omega$ будет возрастать и модуль производной $d\delta_l/d\epsilon$, так что при $\hbar\omega$, превышающем некоторое значение $\hbar\omega_0$, неравенства

$$\frac{df_N}{d\epsilon} > \frac{df_{N-1}}{d\epsilon} > 0,$$

а с ними и условие разделения корней окажутся нарушенными. Полученное в результате значение $\hbar\omega_0$, которому соответствует минимальное значение $N = \mathcal{N}$, обеспечивающее разделение корней и малость остаточного члена (24), и будет оптимальным значением параметра $\hbar\omega$.

4.2. Наличие связанных состояний. В J -матричных расчетах связанным состояниям соответствуют нули знаменателя выражения (10) (дискретного аналога функции Йоста) [2] на мнимой положительной полуоси плоскости импульсов, т.е. в точках $\varepsilon_\nu \equiv E_\nu/\hbar\omega < 0$ имеет место равенство

$$\mathcal{P}_N(\varepsilon_\nu) = \frac{1}{T_{N-1,N}^l} \frac{C_{N-1,l}^{(+)}(i\sqrt{-2\varepsilon_\nu})}{C_{N,l}^{(+)}(i\sqrt{-2\varepsilon_\nu})}. \quad (27)$$

Таким образом, при построении дроби $A_M(\epsilon)/B_M(\epsilon)$, аппроксимирующей определенную выше функцию $y_M(\epsilon)$ (23), необходимо n_b из $2M$ интерполяционных уравнений:

$$y_M(\epsilon_s) = \frac{A_M(\epsilon_s)}{B_M(\epsilon_s)}, \quad s = \overline{1, 2M}, \quad (28)$$

заменить уравнениями, следующими из (27). Далее, из определения функции $\mathcal{P}_N$ (12) следует, что при достаточно большом N среди собственных значений $\theta_j^{(N)}$ матрицы $\mathbf{h}$ гамильтониана имеется n_b отрицательных, т.е. $\vartheta_\nu^{(N)} \equiv \theta_\nu^{(N)} < 0$, $\nu = \overline{1, n_b}$. Потребуем, чтобы в искомой функции $\mathcal{P}_N$ для произвольного $N - 1 > n_b$ каждому связанному состоянию с энергией ε_ν соответствовал множитель $(\epsilon - \vartheta_\nu^{(N-1)})/(\epsilon - \vartheta_\nu^{(N)})$. При этом значения $\vartheta_\nu^{(N)}$, $\nu = \overline{1, n_b}$, $\vartheta_\nu^{(N-1)}$, $\nu = \overline{1, n_b}$, исчерпывают весь набор отрицательных параметров функции $\mathcal{P}_N$ и удовлетворяют неравенству

$$\varepsilon_\nu \leq \vartheta_\nu^{(N)} \leq \vartheta_\nu^{(N-1)}. \quad (29)$$

Рассмотрим случай одного связанного состояния с энергией $\varepsilon < 0$. Искомая дробь A_M/B_M является ограниченной функцией на интервале $[0, \epsilon_0]$: $0 < A_M/B_M < 1$. В силу соответствия связанному состоянию ε пары отрицательных чисел, удовлетворяющих неравенствам (29), эта функция возрастает в некоторой окрестности начала координат и, как следует из условия (26), достигнув максимума, убывает на остальной части интервала $[0, \epsilon_0]$. Таким образом, для вычисления $2M - 2$ положительных параметров дроби A_M/B_M следует задать узлы интерполяции ϵ_s , $s = \overline{1, 2M - 2}$, в области убывания аппроксимируемой функции $y_M(\epsilon)$. Одним из условий, определяющих отрицательные параметры $\vartheta^{(N)}$ и $\vartheta^{(N-1)}$, является уравнение (27). Задание второго условия в виде интерполяционного уравнения (28) с выбором единственного узла интерполяции из области роста функции $y_M(\epsilon)$ может оказаться неудовлетворительным. Вместо этого предлагается ввести подгоночный параметр $\Delta^{(N)} > 0$, задающий отклонение величины $\vartheta^{(N)}$ (отрицательного собственного значения $N \times N$ -матрицы $\mathbf{h}$ гамильтониана) от энергии связанного состояния ε : $\vartheta^{(N)} = \varepsilon + \Delta^{(N)}$. Параметр $\Delta^{(N)}$ подбирается так, чтобы описать поведение фазы рассеяния $\delta_l(E)$ для тех энергий, которые соответствуют области возрастания функции $y_M(\epsilon)$. Заметим, что величина параметра $\Delta^{(N)}$ мала по сравнению, например, с величиной $|\varepsilon|$.

Описанная схема легко обобщается на случай произвольного числа связанных состояний в системе.

5. ПРИМЕРЫ

Приведем два примера, иллюстрирующих работу предложенного выше метода.

В первом примере найден набор потенциалов (1), с помощью которых описывается поведение фазы s -волнового рассеяния на потенциале в виде сферически-симметричной прямоугольной ямы с барьером. Параметры потенциала таковы: $K_1 r_1 = 1.5$, $K_0(R - r_1) = 2$, $K_0 R = 4$, где r_1 – радиус ямы, R – суммарный радиус ямы и барьера, K_1 и K_0 определяют глубину ямы и высоту барьера, соответственно. Правая граница энергетического интервала E_0 задается максимальным значением kR , которое мы положили равным $k_0 R = 8$. Мы выполнили три шага описанной выше процедуры, на каждом из которых уменьшалось значение осцилляторного радиуса $\rho = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$. В результате была получена последовательность трехдиагональных матриц гамильтониана $\tilde{\mathbf{h}}$ убывающего порядка. Соответствующие им значения правой границы ϵ_0 , параметров $\theta_i^{(N)}$, $\theta_i^{(N-1)}$, диагональных элементов α_i и квадраты недиагональных элементов β_i^2 матрицы $\tilde{\mathbf{h}}$ приведены в таблице.

N	ρ	ϵ_0	i	$\theta_i^{(N)}$	$\theta_i^{(N-1)}$	α_i	β_i^2
7	$\frac{R}{2}$	8	1	0.294469	0.355801	1.123592	0.072558
			2	1.014190	1.078425	1.756444	1.788920
			3	1.381751	1.612258	3.225568	3.094274
			4	2.844279	3.459973	3.908374	4.916227
			5	4.795676	5.657184	5.018339	7.611871
			6	7.027255	8.809613	5.940938	10.026319
			7	10.385946		6.770311	
4	$\frac{R}{2\sqrt{2}}$	4	1	0.533752	0.558292	0.646099	0.117991
			2	1.071128	1.620795	2.406383	1.207603
			3	2.858038	3.826142	2.952748	3.174725
			4	5.415772		3.873461	
3	$\frac{R}{4}$	2	1	0.311388	0.369487	0.387976	0.128521
			2	1.593196	7.339104	7.320614	79.272364
			3	20.985069		15.181062	

В первых двух случаях фаза $\delta_0(E)$ на интервале $[0, \epsilon_0]$ практически совпадает с точной (изображенной на рис. 1 сплошной линией). В третьем случае имеет место откло-

Рис. 1

Рис. 2

нение фазы (штриховая линия на рис. 1) от точной. Данный пример показывает, что требование малости остаточного члена (24) может быть решающим при определении порядка N матрицы потенциала. Так, в последнем случае (в отличие от предыдущего) степени $M = 1$ полиномов A_M и B_M оказывается недостаточно для удовлетворительной аппроксимации функции y_M . Требуется переход к более высоким степеням M , а, следовательно, к большим порядкам N матрицы потенциала.

Рис. 3

Во втором примере построен потенциал, описывающий систему со связанным состоянием. Фаза $\delta_l(E)$ соответствует s -волновому рассеянию на потенциале в виде сферически-симметричной прямоугольной ямы, задаваемом параметром $K_0 R = 2$. Энергетическое положение связанного состояния, от которого не зависит поведение фазы рассеяния, задается здесь величиной $\kappa R = 0.638045$. Значения аргумента kR ограничены величиной $k_0 R = 4\sqrt{2}$. На рис. 2 представлены фазы рассеяния δ_0 , полученные для осцилляторного радиуса $\rho = R/2$ с потенциалом (1) ранга $N = 6$ при различных значениях подгоночного параметра $\Delta^{(N=6)}$: $\Delta^{(6)} = 0.005$ – штриховая линия; $\Delta^{(6)} = 0.023$ – пунктирная линия (почти сливающаяся со сплошной); $\Delta^{(6)} = 0.035$ – штрих-пунктирная линия. Точная фаза рассеяния изображена сплошной линией. Во всех трех случаях описывается энергия связанного состояния $\varepsilon = -\kappa^2 \rho^2 / 2 = -0.050888$. Вблизи начала координат зависимость поведения фазы рассеяния от величины $\Delta^{(N=6)}$ имеет непрерывный характер и значение параметра $\Delta^{(6)} = 0.023$, при котором фаза δ_0 удовлетворительно описывается, находится достаточно быстро. Соответствующие значения $\{\alpha\}$ и $\{\beta^2\}$ таковы: $\{\alpha\} = \{0.307119, 1.553502, 2.542595, 3.555276, 4.555499, 5.712626\}$, $\{\beta^2\} = \{0.317367, 1.006886, 2.359086, 4.063106, 6.576803\}$.

Преобразование (15), связывающее фазовоэквивалентные потенциалы, способно изменить первые $(N - 1)$ коэффициентов b_n^l разложения (3) волновой функции. Таким образом, от выбора матрицы преобразования $\mathbf{Q}$ (13) зависит поведение волновой функции $u_l(k, r)$ во внутренней области. Заметим, что базовый потенциал с точки зрения поведения волновой функции выбирается совершенно произвольно. Тем более интерес-

но, что волновая функция связанного состояния в базовом потенциале (изображенная на рис. 3 штриховой линией) оказывается довольно близкой к волновой функции связанного состояния в сферически-симметричной прямоугольной яме (сплошная линия на рис. 3).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагаемый метод может быть обобщен и на случай потенциала (1), формфакторы которого представляют собой ортогональные дополнения к так называемым штурмовским или лагерровским функциям [1]. Действительно, в наших рассуждениях мы опирались на J -матричные соотношения типа (9), (10), (12), которые основаны на трехдиагональности матрицы свободного гамильтониана в осцилляторном базисе (2). В лагерровском базисе матрица свободного гамильтониана также трехдиагональна [1], причем этим свойством обладает и матрица свободного кулоновского гамильтониана. Таким образом, можно сформулировать метод построения потенциалов (1) с лагерровскими формфакторами, который будет применим и для рассеяния заряженных частиц.

Автор признателен А. И. Мазуру и А. М. Широкову за стимулирующие обсуждения и помощь в работе.

Список литературы

- [1] *H. A. Yamani, L. Fishman.* J. Math. Phys. 1975. V. 16. № 2. P. 410.
- [2] *Yu. F. Smirnov, Yu. I. Nechaev.* Kinam. 1982. V. 4. P. 445.
- [3] *J. Revai, M. Sotona, J. Zofka.* J. Phys. G: Nucl. Phys. 1985. V. 11. № 4. P. 745.
- [4] *Дж. Х. Уилкинсон, С. Райнш.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976.
- [5] *Б. Парлетт.* Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М.: Мир, 1983.
- [6] *В. А. Скоробогатько.* Теория ветвящихся цепных дробей и ее применение в вычислительной математике. М.: Наука, 1983.
- [7] *Д. Бейкер, П. Грейвс-Моррис.* Аппроксимация Паде. М.: Мир, 1986.

Поступила в редакцию 15.X.1997 г.,
после доработки 10.XII.1997 г.