Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Гусев, С. И. Виноцкий, О. Чулуунбаатар,
В. Л. Дербов, А. Гуждж, П. М. Красовицкий, Метастабильные состояния составной системы при туннелировании через отталкивающие барьеры, *ТМФ*, 2016, том 186, номер 1, 27–50

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8981>

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: 3.95.254.165

26 апреля 2023 г., 12:45:59

© 2016 г. А. А. Гусев*, С. И. Виноцкий*, О. Чулуунбаатар*[†],
В. Л. Дербов[‡], А. Гуждж[§], П. М. Красовицкий[¶]

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ СОСТАВНОЙ СИСТЕМЫ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ ОТТАЛКИВАЮЩИЕ БАРЬЕРЫ

Для составной системы, состоящей из нескольких тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа рассмотрен метод решения задачи квантового туннелирования через отталкивающие потенциальные барьеры с использованием осцилляторного представления симметризованных координат. Эффективность предложенного подхода подтверждается расчетами комплексных значений энергии и анализом метастабильных состояний составных систем из трех, четырех и пяти тождественных частиц на прямой, приводящих к эффекту квантовой прозрачности отталкивающих барьеров.

Ключевые слова: квантовое туннелирование, система тождественных частиц, представление симметризованных координат, базис гармонического осциллятора, комплексные значения энергии, метастабильные состояния, квантовая прозрачность.

DOI: 10.4213/tmf8981

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение резонансных состояний в реакциях с легкими ядрами базируется на квантовой теории рассеяния для систем нескольких частиц [1], [2]. Более сложная задача – исследование резонансных состояний при рассеянии легких ядер на тяжелых ядрах мишени [3] – в первом приближении может рассматриваться как задача

Работа частично поддержана РФФИ (проекты № 14-01-00420 и 13-01-00668), программой Боголюбов–Инфельд и Министерством образования и науки республики Казахстан (грант 0333/ГФ4).

---

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: gooseff@jinr.ru

[†]Mongolian National University, Ulaanbaatar, Mongolia

[‡]Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия

[§]Maria Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

[¶]Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

туннелирования составной системы через отталкивающие барьеры. В работе [4] механизм квантовой прозрачности барьеров при тунеллировании связанной пары частиц или ионов интерпретируется как проявление метастабильных состояний составной системы “связанная пара + барьер”.

Отметим, что мнимая часть энергии метастабильного состояния (или ширина резонанса вероятности прохождения пары) описывается аналитически только в исключительном случае – в модели жесткой молекулы [5], поэтому для исследования подобного класса задач требуется применение и аналитических, и численных методов [6], [7]. Анализ механизма квантовой прозрачности системы n тождественных частиц представляет интерес как для ядерной и молекулярной физики, так и для физики полупроводниковых композитных наноструктур [8].

В настоящей работе для процесса туннелирования системы n тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа в поле отталкивающих барьерных потенциалов представлены формулировка его математической модели как краевой задачи для уравнения эллиптического типа, а также эффективные методы анализа ее решений. Спиновая часть волновой функции предполагается известной, поэтому рассматривается только пространственная часть волновой функции, которая должна быть симметричной или антисимметричной относительно перестановки n тождественных частиц в d -мерном евклидовом пространстве [9]. Исходная задача в $(n \times d)$ -мерном конфигурационном пространстве рассматривается в симметризованных координатах, в которых движение центра масс системы n тождественных частиц отделяется, как и в координатах Якоби, а относительные координаты связаны с ортогональным преобразованием Якоби [10].

Отметим, что идея введения симметризованных координат для системы четырех тождественных частиц была предложена еще полвека назад [11], однако до недавнего времени общий случай системы n тождественных частиц в литературе не рассматривался [12]. Напомним, что основной выигрыш от введения симметризованных координат по сравнению с традиционными координатами Якоби или кластерными координатами [13] состоит в обеспечении инвариантности задачи по отношению к перестановке n тождественных частиц. Это обстоятельство позволяет достаточно просто по сравнению с известными трудоемкими процедурами в координатах Якоби (см., например, работу [14]) конструировать не только базисные функции, симметричные или антисимметричные при перестановке $n - 1$ относительных (внутренних) координат, но и базисные функции, симметричные или антисимметричные при перестановке исходных n декартовых координат [15]. Будем называть разложение искомого решения задачи в базисе такого типа представлением симметризованных координат [10].

Для наглядности изложения мы ограничиваемся случаем одномерного евклидова пространства ($d = 1$). Решение краевой задачи для составной системы n тождественных частиц ищется в виде разложения по кластерным $(n - 1)$ -мерным осцилляторным базисным функциям [12], симметричным или антисимметричным при перестановках частиц, в представлении относительных симметризованных координат [10], [16], [17]. В этом представлении исходная задача редуцируется к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по переменной центра масс кластера с однородными условиями третьего рода. Мат-

рицы амплитуд прохождения и отражения и собственные функции задачи рассеяния по переменной центра масс при фиксированных вещественных значениях энергии непрерывного спектра вычисляются методом конечных элементов с помощью комплекса программ KANTBP 3.0 [18].

Эффективность подхода продемонстрирована на примере анализа решений задачи квантового туннелирования кластеров, состоящих из нескольких тождественных частиц на прямой с парными осцилляторными взаимодействиями, через узкие и высокие гауссовы отталкивающие барьеры, соизмеримые со средним размером налетающего кластера. Примеры расчетов для различных значениях параметров гауссова отталкивающего барьера, а также дальнегодействующего отталкивающего барьера, включая задачу каналирования, рассмотрены в работах [7], [10], [19]. Проведен анализ эффекта квантовой прозрачности, т. е. резонансного туннелирования через отталкивающие барьеры с коэффициентом прохождения, близким к единице, для кластера из нескольких тождественных частиц. Этот эффект обусловлен наличием барьерных метастабильных состояний, погруженных в непрерывный спектр, локализованных в окрестностях минимумов потенциальной энергии составной системы.

Для расчета метастабильных состояний с неизвестными комплексными собственными значениями энергии сформулирована краевая задача для вышеупомянутой системы уравнений на конечном интервале с однородными условиями третьего рода, зависящими от неизвестного собственного значения энергии. Построен соответствующий симметричный квадратичный функционал, необходимый для дискретизации задачи методом конечных элементов. В противоположность задаче рассеяния асимптотические решения для метастабильных состояний содержат только уходящие волны, которые рассматриваются на достаточно большом, но конечном интервале изменения пространственной переменной [2], [20], [21]. Расчет комплексных собственных значений и собственных функций метастабильных состояний выполнен итерационным методом ньютоновского типа [6] с помощью программы KANTBP 4.0. Для расчета энергий метастабильных состояний и их классификации (в зависимости от их числа и типа симметрии) применен алгоритм решения краевой задачи для эллиптического уравнения в n -мерной области специального типа на основе разложения решения по n -мерному осцилляторному базису в исходных декартовых координатах.

Предложенный подход ориентирован на анализ механизмов квантовой прозрачности потенциальных барьеров в процессах квантовой диффузии молекул, каналирования и туннелирования кластеров и ионов в кристаллах, полупроводниковых композитных наноструктурах, а также изучение и классификацию метастабильных состояний редкоземельных ядер с тетраэдральной и октаэдральной симметрией [22].

Структура работы следующая. В разделе 2 рассмотрена постановка задачи и ее редукция в симметризованных координатах. В разделе 3 построено осцилляторное представление в относительных симметризованных координатах. В разделе 4 выписаны уравнения метода связанных каналов по координате центра масс; дана формулировка вариационных функционалов, приведены результаты расчетов матриц амплитуд прохождения и отражения и комплексных собственных значений и собственных функций метастабильных состояний. В разделе 5 представлена классификация метастабильных состояний и анализ эффекта квантовой прозрачности.

2. СИММЕТРИЗОВАННЫЕ КООРДИНАТЫ

Рассмотрим систему n тождественных квантовых частиц с массой m и набором декартовых координат $\tilde{x}_i \in \mathbb{R}^d$ в d -мерном евклидовом пространстве, образующих вектор $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) \in \mathbb{R}^{n \times d}$ в $(n \times d)$ -мерном конфигурационном пространстве. Мы считаем, что частицы взаимодействуют посредством парных потенциалов $\tilde{V}^{\text{pair}}(\tilde{x}_{ij})$, зависящих от относительных координат $\tilde{x}_{ij} = \tilde{x}_i - \tilde{x}_j$ подобно потенциалу гармонического осциллятора

$$\tilde{V}^{\text{hosc}}(\tilde{x}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2}(\tilde{x}_{ij})^2$$

с частотой ω . Эти частицы образуют составную систему (кластер), которая туннелирует через отталкивающие потенциальные барьеры $\tilde{V}(\tilde{x}_i)$. Будем использовать безразмерные координаты $x_i = \tilde{x}_i/x_{\text{osc}}$, $x_{ij} = \tilde{x}_{ij}/x_{\text{osc}} = x_i - x_j$, энергии $E = \tilde{E}/E_{\text{osc}}$, барьерные потенциалы $V(x_i) = \tilde{V}(x_i x_{\text{osc}})/E_{\text{osc}}$ и потенциалы гармонического осциллятора

$$V^{\text{hosc}}(x_{ij}) = \frac{\tilde{V}^{\text{hosc}}(x_{ij} x_{\text{osc}})}{E_{\text{osc}}} = \frac{x_{ij}^2}{n},$$

заданные в осцилляторных единицах $x_{\text{osc}} = \sqrt{\hbar/(m\omega\sqrt{n})}$, и $E_{\text{osc}} = \hbar\omega\sqrt{n}/2$. Тогда уравнение Шредингера записывается как

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{(x_{ij})^2}{n} + U(\mathbf{x}) - E \right] \Psi(\mathbf{x}) = 0, \quad (1)$$

$$U(\mathbf{x}) = \sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} U^{\text{pair}}(x_{ij}) + \sum_{i=1}^n V(x_i),$$

где $U(\mathbf{x})$ – многомерный потенциальный барьер, $U^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{pair}}(x_{ij}) - V^{\text{hosc}}(x_{ij})$ есть неосцилляторная часть потенциала парного взаимодействия такая, что если $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, то $U^{\text{pair}}(x_{ij}) = 0$, и $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{n \times d}$.

Ниже мы используем одно из возможных определений симметризованных координат с помощью ортогональной и симметричной матрицы [16]:

$$\begin{pmatrix} \xi_0 \\ \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_{n-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & a_1 & a_0 & \dots & a_0 \\ 1 & a_0 & a_1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & a_0 \\ 1 & a_0 & \dots & a_0 & a_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $a_0 = 1/(1 - \sqrt{n})$, $a_1 = a_0 + \sqrt{n}$, $\xi_0 \in \mathbb{R}^d$ – координата центра масс системы, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_{n-1}) \in \mathbb{R}^{(n-1) \times d}$ – относительные координаты. Принимая во внимание соотношения $a_1 - a_0 = \sqrt{n}$, $a_0 - 1 = a_0\sqrt{n}$, мы можем выразить относительные

координаты $x_{ij} \equiv x_i - x_j$ пары частиц i и j только через $n - 1$ относительных симметризованных координат:

$$x_{ij} \equiv x_i - x_j = \xi_{i-1} - \xi_{j-1} \equiv \xi_{i-1,j-1}, \quad (3)$$

$$x_{i1} \equiv x_i - x_1 = \xi_{i-1} + a_0 \sum_{i'=1}^{n-1} \xi_{i'}, \quad i, j = 2, \dots, n. \quad (4)$$

В симметризованных координатах уравнение (1) принимает вид

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \xi_i^2 \right) + U(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) - E \right] \Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}; E) = 0, \\ & U(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} U^{\text{pair}}(x_{ij}(\boldsymbol{\xi})) + \sum_{i=1}^n V(x_i(\xi_0, \boldsymbol{\xi})). \end{aligned} \quad (5)$$

Это уравнение инвариантно относительно перестановок $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$, $i, j = 1, \dots, n - 1$, т. е. инвариантность уравнения (1) при перестановках $x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 1, \dots, n$, сохраняется, что значительно упрощает построение состояний, симметричных или антисимметричных относительно перестановок n частиц, по сравнению с координатами Якоби в системе центра масс [10], [11], [14], [15]. Однако из инвариантности уравнения (5) относительно перестановок $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$ не следует инвариантность уравнения (1) относительно перестановок $x_i \leftrightarrow x_j$, что и составляет суть проблемы построения трансляционно-инвариантных моделей легких ядер [23].

В рассмотренном ниже случае одномерного евклидова пространства ($d = 1$)

$$\xi_0 \in B = [\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}] \subset \mathbb{R}^1, \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{n-1},$$

и решения $\Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}; E) \in W_2^2(\Omega)$ уравнения (5) в области $\Omega = B \otimes \mathbb{R}^{n-1}$ подчиняются краевым условиям

$$\begin{aligned} & \lim_{|\boldsymbol{\xi}| \rightarrow \infty} \Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}; E) = 0, \quad \xi_0 \in [\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}], \\ & \mu_t \frac{\partial \Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}; E)}{\partial \xi_0} - \lambda_t \Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}; E) = 0, \quad \xi_0 = \xi_0^t, \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{n-1}, \end{aligned} \quad (6)$$

где индекс $t = \min, \max$, а μ_t – вещественные константы и $\lambda_t \equiv \lambda_t(\xi_0^t)$ – вещественные функции, зависящие от ξ_0^t , при условии $\mu_t^2 + \lambda_t^2 \neq 0$.

3. ОСЦИЛЛЯТОРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Ограничимся рассмотрением парных взаимодействий, заданных потенциалом гармонического осциллятора $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, в случае одномерного евклидова пространства ($d = 1$). Определим набор кластерных функций

$$\langle \boldsymbol{\xi} | j \rangle^{\text{S(A)}} \equiv \Phi_j^{\text{S(A)}}(\boldsymbol{\xi}) \in L_2(\mathbb{R}^{n-1}),$$

симметричных (S) или антисимметричных (A) относительно перестановок n тождественных частиц, и набор соответствующих значений энергии $\epsilon_j^{S(A)}$ как решения задачи на собственные значения для уравнения

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 - \epsilon_j^{S(A)}\right) \Phi_j^{S(A)}(\xi) = 0. \quad (7)$$

Решения $\Phi_j^{S(A)}(\xi)$ будем искать в виде линейных комбинаций известных функций $(n-1)$ -мерного гармонического осциллятора $\Phi_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}}(\xi) \in L_2(\mathbb{R}^{n-1})$:

$$\begin{aligned} \Phi_j^{S(A)}(\xi) &= \sum_{\{i_1, \dots, i_{n-1}\} \in \Delta_j} \alpha_{j[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{S(A)} \Phi_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}}(\xi), \\ \Phi_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}}(\xi) &= \prod_{k=1}^{n-1} \frac{e^{-\xi_k^2/2} H_{i_k}(\xi_k)}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^{i_k}} \sqrt{i_k!}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $H_{i_k}(\xi_k)$ – полиномы Эрмита [24], набор индексов $\Delta_j \equiv \{i_1, \dots, i_{n-1}\}$, принимающих натуральные значения, определен условием

$$\Delta_j = \left\{ i_1, \dots, i_{n-1} \left| 2 \sum_{k=1}^{n-1} i_k + n - 1 = \epsilon_j^{S(A)} \right. \right\}. \quad (9)$$

которое определяет принадлежность слою собственных функций $\Phi_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}}(\xi)$, отвечающих собственному значению $\epsilon_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}} \equiv \epsilon_f^{\text{osc}} = 2f + n - 1$, где $f = \sum_{k=1}^{n-1} i_k$, $(n-1)$ -мерного осциллятора, которое имеет кратность вырождения [25]

$$p = \frac{(n + f - 2)!}{f!(n - 2)!}.$$

Данное собственное значение выбирается равным искомому собственному значению энергии $\epsilon_j^{S(A)} = \epsilon_{[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{\text{osc}}$.

Неизвестные коэффициенты $\alpha_{j[i_1, \dots, i_{n-1}]}^{S(A)}$ разложения (8) для ортонормированных функций $\Phi_j^{S(A)}(\xi)$ и соответствующие собственные значения $\epsilon_j^{S(A)}$ и их кратность вырождения $p^{S(A)} \ll p$ были вычислены с использованием двухшагового алгоритма и программы из работы [16] следующим образом.

1. Собственные функции, симметричные или антисимметричные относительно перестановок $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$, $j = 1, \dots, n-1$ (см. соотношения (3)), генерировались стандартным методом [9]. Эти функции также соответственно симметричны или антисимметричны относительно перестановок $x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 2, \dots, n$, но не симметричны или не антисимметричны относительно перестановок $x_1 \leftrightarrow x_j$, $j = 2, \dots, n$.

2. Из собственных функций, построенных на предыдущем шаге, генерировался набор линейно независимых функций, симметричных (или антисимметричных) относительно перестановки $x_2 \leftrightarrow x_1$ (см. соотношения (4)), из которых с использованием процедуры Грама–Шмидта строился искомый ортонормированный базис (8).

В случае $n = 3$, $d = 1$ функции $\Phi_{k,m}^{S(A)}(\rho, \varphi, n) \in L_2(\mathbb{R}_+^1 \times S^1)$ выражаются в гиперсферических (полярных) координатах $\xi_1 = \rho \cos \varphi$, $\xi_2 = \rho \sin \varphi$ в аналитическом виде:

$$\Phi_{k,m}^{S(A)}(\rho, \varphi, n)|_{n=3} = R_{km}(\rho) Y_m^{S(A)}(3m(\varphi + \pi/12)),$$

$$R_{km}(\rho) = \sqrt{\frac{2k!}{(k+3m)!}} (\rho^2)^{3m/2} e^{-\rho^2/2} L_k^{3m}(\rho^2),$$

где $k = 0, 1, \dots$, а $L_k^{3m}(\rho^2)$ – обобщенные полиномы Лагерра [24], и классифицируются по неприводимым представлениям группы симметрии D_{3m} . Функции гиперугловой переменной φ имеют для S-состояний вид

$$Y_m^S(\varphi) = \frac{\cos \varphi}{\sqrt{(1 + \delta_{m0})\pi}}, \quad m = 0, 1, \dots,$$

а для A-состояний – вид

$$Y_m^A(\varphi) = \frac{\sin \varphi}{\sqrt{\pi}}, \quad m = 1, 2, \dots,$$

Соответствующие собственные значения энергии

$$\epsilon_{k,m}^{S(A)} = 2(2k + 3m + 1)$$

имеют кратность вырождения $p^{S(A)} = K + 1$, где значение K определяется из следующего условия: для энергии должно выполняться равенство $\epsilon_{k,m}^{S(A)} - \epsilon_{\text{ground}}^{S(A)} = 12K + K'$ при одном из значений $K' = 0, 4, 6, 8, 10, 14$; здесь $\epsilon_{\text{ground}}^S = 2$, $\epsilon_{\text{ground}}^A = 8$.

Для случая $n = 4$, $d = 1$ собственные значения энергии

$$\epsilon_{i_1, i_2, i_3}^{S(A)} = 2 \left(i_1 + i_2 + i_3 + \frac{3}{2} \right)$$

имеют кратность вырождения $p^{S(A)} = 3K^2 + (3 + K')K + K' + \delta_{0K'}$, где значения K и K' определяются из следующего условия: для энергии должно быть выполнено равенство $\epsilon_{i_1, i_2, i_3}^{S(A)} - \epsilon_{\text{ground}}^{S(A)} = 4(6K + K') + K''$ при одном из значений $K' = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ и $K'' = 0, 6$; здесь $\epsilon_{\text{ground}}^S = 3$, $\epsilon_{\text{ground}}^A = 15$. Индексы i_1, i_2, i_3 для S-состояний принимают значения

$$i_1 = 0, 1, \dots, \quad i_2 = i_1, i_1 + 2, \dots, \quad i_3 = i_2, i_2 + 2, \dots,$$

а для A-состояний – значения

$$i_1 = 0, 1, \dots, \quad i_2 = i_1 + 2, i_1 + 4, \dots, \quad i_3 = i_2 + 2, i_2 + 4, \dots$$

При этом S-состояния с четными значениями и A-состояния с нечетными значениями квантовых чисел i_1, i_2, i_3 имеют октаэдральную симметрию, тогда как A-состояния с четными значениями и S-состояния с нечетными значениями квантовых чисел i_1, i_2, i_3 имеют тетраэдральную симметрию [26].

4. МНОГОКАНАЛЬНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ

Ограничим наше рассмотрение случаем одномерного евклидова пространства. Асимптотическое решение $\Psi^{S(A)}(\xi_0, \xi) = \{\Psi_{i_0}^{S(A)}(\xi_0, \xi)\}_{i_0=1}^{N_0}$ уравнения (5), описывающее падающую и уходящие волны при $\xi_0^+ \rightarrow +\infty$ и $\xi_0^- \rightarrow -\infty$, в осцилляторном базисе $\Phi^{S(A)}(\xi) = \{\Phi_j^{S(A)}(\xi)\}_{j=1}^{j_{\max}}$ запишем в матричном виде $\Psi^{S(A)} = (\Phi^{S(A)})^T \mathbf{F}$, где индекс Т обозначает транспонирование матрицы.

Матричные решения $\mathbf{F}_v(\xi_0) = \mathbf{F}(\xi_0)$ описывают прохождение и отражение налетающей на барьер частицы и имеют асимптотическую форму “падающая плоская волна + уходящие волны”:

$$\mathbf{F}_v(\xi_0)|_{\xi_0 \rightarrow \pm\infty} = \begin{cases} \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) \mathbf{T}_v, & \xi_0 > 0, \\ \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) + \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) \mathbf{R}_v, & \xi_0 < 0, \end{cases} & v = \rightarrow, \\ \begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) + \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) \mathbf{R}_v, & \xi_0 > 0, \\ \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) \mathbf{T}_v, & \xi_0 < 0, \end{cases} & v = \leftarrow, \end{cases} \quad (10)$$

где матрицы $\mathbf{R}_v$ и $\mathbf{T}_v$ размера $N_0 \times N_0$ суть амплитуды прохождения и отражения, N_0 – число открытых каналов при фиксированной энергии $E > \epsilon_{i_0}^{S(A)}$ ($i_0 = 1, \dots, N_0$), индекс v принимает значения $\rightarrow$ или $\leftarrow$ и обозначает начальное направление налетающей слева или справа на барьер частицы. Ведущие члены асимптотики прямоугольной матричной функции $\mathbf{X}^{(\pm)}(z)$ при наличии дальнегодействующего отталкивающего кулоновского потенциального барьера имеют вид

$$\begin{aligned} X_{ji_0}^{(\pm)}(\xi_0) &\rightarrow p_{i_0}^{-1/2} \exp \left\{ \pm i \left(p_{i_0} \xi_0 - \frac{Z_{i_0}}{p_{i_0}} \ln(2p_{i_0} |\xi_0|) \right) \right\} \delta_{ji_0}, \\ p_{i_0} &= \sqrt{2E - \epsilon_{i_0}^{S(A)}}, \quad j = 1, \dots, j_{\max}, \quad i_0 = 1, \dots, N_0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $Z_{i_0} = Z_{i_0}^+$ при $\xi_0 > 0$ и $Z_{i_0} = Z_{i_0}^-$ при $\xi_0 < 0$, т. е. когда эффективные заряды находятся слева и справа от дальнегодействующего отталкивающего кулоновского потенциального барьера. Соответствующие расчеты для задачи туннелирования пары ионов ($n = 2$) через дальнегодействующий отталкивающий кулоновский барьер при $Z_{i_0}^\pm \neq 0$ представлены в работе [7]. Принимая во внимание ограниченный объем настоящей работы, в расчетах, приведенных ниже, ограничимся рассмотрением задачи туннелирования только через короткодействующие потенциальные барьеры, $Z_{i_0}^\pm = 0$.

Матрица-решение $\mathbf{F}_v(\xi_0, E)$ нормирована условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}_{v'}^\dagger(\xi_0, E') \mathbf{F}_v(\xi_0, E) d\xi_0 = 2\pi \delta(E' - E) \delta_{v'v} \mathbf{I}_{00}, \quad (12)$$

где $\mathbf{I}_{00}$ – единичная матрица размерностью $N_0 \times N_0$.

Уравнение (10) в матричной форме при $\xi_0^\pm \rightarrow \pm\infty$ принимает вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_{\rightarrow}(\xi_0^+) & \mathbf{F}_{\leftarrow}(\xi_0^+) \\ \mathbf{F}_{\rightarrow}(\xi_0^-) & \mathbf{F}_{\leftarrow}(\xi_0^-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0^+) \\ \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0^+) \\ \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{S}, \quad (13)$$

где $\mathbf{S}$ – унитарная и симметричная матрица рассеяния,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}, \quad (14)$$

составленная из амплитуд отраженных и прошедших волн $\mathbf{R}_v = \mathbf{R}_v(E)$ и $\mathbf{T}_v = \mathbf{T}_v(E)$ (матриц размера $N_o \times N_o$). Для этих матриц из свойства сохранения вронскиана на решениях следуют требуемые соотношения, обеспечивающие унитарность и симметричность матрицы $\mathbf{S}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\rightarrow}^\dagger \mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{R}_{\rightarrow}^\dagger \mathbf{R}_{\rightarrow} &= \mathbf{I}_{o_o} = \mathbf{T}_{\leftarrow}^\dagger \mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{R}_{\leftarrow}^\dagger \mathbf{R}_{\leftarrow}, \\ \mathbf{T}_{\rightarrow}^\dagger \mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{R}_{\rightarrow}^\dagger \mathbf{T}_{\leftarrow} &= \mathbf{0} = \mathbf{R}_{\leftarrow}^\dagger \mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{T}_{\leftarrow}^\dagger \mathbf{R}_{\rightarrow}, \\ \mathbf{T}_{\rightarrow}^T &= \mathbf{T}_{\leftarrow}, \quad \mathbf{R}_{\rightarrow}^T = \mathbf{R}_{\leftarrow}, \quad \mathbf{R}_{\leftarrow}^T = \mathbf{R}_{\rightarrow}. \end{aligned} \quad (15)$$

Матричные решения $\hat{\mathbf{F}}_v(\xi_0) = \hat{\mathbf{F}}(\xi_0)$, описывающие обратный по времени процесс туннелирования, имеют асимптотическую форму “сходящиеся волны + уходящая плоская волна”:

$$\hat{\mathbf{F}}_v(\xi_0)|_{\xi_0 \rightarrow \pm\infty} = \begin{cases} \begin{cases} \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) + \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) \hat{\mathbf{R}}_v^\dagger, & \xi_0 > 0, \\ \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) \hat{\mathbf{T}}_v^\dagger, & \xi_0 < 0, \end{cases} & v = \rightarrow, \\ \begin{cases} \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) \hat{\mathbf{T}}_v^\dagger, & \xi_0 > 0, \\ \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0) + \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0) \hat{\mathbf{R}}_v^\dagger, & \xi_0 < 0, \end{cases} & v = \leftarrow. \end{cases} \quad (16)$$

Заметим, что из равенства решений $\hat{\mathbf{F}}_{\rightarrow}^*(z) = \hat{\mathbf{F}}_{\leftarrow}(z)$, нормированных условием (12), следует с необходимостью связь между амплитудами

$$\hat{\mathbf{R}}_{\rightarrow} = \mathbf{R}_{\leftarrow}, \quad \hat{\mathbf{R}}_{\leftarrow} = \mathbf{R}_{\rightarrow}, \quad \hat{\mathbf{T}}_v = \mathbf{T}_v,$$

полученная в соотношении (15) из условия сохранения вронскиана. Поэтому ниже мы рассматриваем только решения $\mathbf{F}_v(z)$.

Решение задачи (5) в симметризованных координатах (2) будем искать в виде разложения

$$\Psi_{i_o}^{S(A)}(\xi_0, \xi) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^{S(A)}(\xi) \chi_{j i_o}^{S(A)}(\xi_0), \quad (17)$$

где $\chi_{j i_o}^{S(A)}(\xi_0)$ – элементы искомой матричной функции размера $j_{\max} \times N_o$, а $\Phi_j^{S(A)}(\xi)$ – кластерные базисные функции (8). В осцилляторном представлении (8) система связанных обыкновенных дифференциальных уравнений по переменной центра масс имеет вид

$$\sum_{j=1}^{j_{\max}} \left[\left(-\frac{d^2}{d\xi_0^2} - (E - \epsilon_i^{S(A)}) \right) \delta_{ij} + V_{ij}^{S(A)}(\xi_0) \right] \chi_{j i_o}^{S(A)}(\xi_0) = 0, \quad (18)$$

Рис. 1. Диагональные элементы V_{jj} (сплошные линии) и недиагональные элементы V_{j1} (штриховые линии) матрицы эффективных потенциалов частиц для S-состояний (а, б) и A-состояний (в, г) при $n = 3$ (а, в) и $n = 4$ (б, г); $\sigma = 0.1$.

где $V_{ij}^{S(A)}(\xi_0) = V_{ji}^{S(A)}(\xi_0)$ – элементы симметричной матрицы $\mathbf{V}^{S(A)}(\xi_0)$ эффективных потенциалов размера $j_{\max} \times j_{\max}$, которые задаются интегралами от суммы произведений барьерных потенциалов и базисных функций:

$$V_{ij}^{S(A)}(\xi_0) = \int \Phi_i^{S(A)}(\xi) \left(\sum_{k=1}^n V(x_k(\xi_0, \xi)) \right) \Phi_j^{S(A)}(\xi) d\xi. \quad (19)$$

Для гауссовых потенциалов $V(x_i) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp(-\frac{x_i^2}{\sigma^2})$ интегралы вычисляются в аналитическом виде; графики функций $V_{ij}(\xi_0)/\alpha$ представлены на рис. 1.

Усредняя краевые условия (6) по ортонормированному базису (8),

$$\int \Phi_i^{S(A)}(\xi) \left(\mu_t^{(i_0)} \frac{\partial \Psi_{i_0}(\xi_0, \xi)}{\partial \xi_0} - \lambda_t^{(i_0)} \Psi_{i_0}(\xi_0, \xi) \right) d\xi = 0, \quad \xi_0 = \xi_0^t, \quad (20)$$

получаем однородные краевые условия третьего рода для решений (18):

$$\mu_t^{(i_o)} \mathbf{I} \frac{d}{d\xi_0} \chi^{(i_o)}(\xi_0) - \lambda_t^{(i_o)} \chi^{(i_o)}(\xi_0) = 0, \quad \xi_0 = \xi_0^t, \quad (21)$$

где $t = \min, \max$.

Для задачи рассеяния, следуя работе [27], трансформируем условия (21) в краевые условия при $\xi_0 = \xi_0^t$:

$$\left. \frac{d\mathbf{F}(\xi_0)}{d\xi_0} \right|_{\xi_0=\xi_0^t} = \mathcal{R}(\xi_0^t) \mathbf{F}(\xi_0^t). \quad (22)$$

Здесь $\mathcal{R}(\xi)$ – неизвестная матричная функция размера $j_{\max} \times j_{\max}$, а

$$\mathbf{F}(\xi_0) = \{\chi^{(i_o)}(\xi_0)\}_{i_o=1}^{N_o} = \{\{\chi_{ji_o}(\xi_0)\}_{j=1}^{j_{\max}}\}_{i_o=1}^{N_o}$$

есть искомое матричное решение краевой задачи (18)–(22) с асимптотиками решений (13), (14) размера $j_{\max} \times N_o$ (при $j_{\max} \geq N_o$).

Решение задачи рассеяния при фиксированной энергии E для системы уравнений (18) с краевыми условиями (22) выполняется независимо для двух случаев. Первый соответствует направлению волны, падающей слева, $v = \Rightarrow$, $\xi_0 < 0$, а второй – справа, $v = \Leftarrow$, $\xi_0 > 0$. При этом используется тот факт, что матрицы $\mathcal{R}(\xi_0)$ при $\xi_0 = \xi_0^{\max} > 0$, $v = \Rightarrow$ или при $\xi_0 = \xi_0^{\min} < 0$, $v = \Leftarrow$ в силу (13) выражаются через набор известных линейно независимых асимптотических решений $\tilde{\mathbf{F}}_v(\xi_0)$ системы (18):

$$\mathcal{R}(\xi_0) = \frac{d\tilde{\mathbf{F}}_v(\xi_0)}{d\xi_0} (\tilde{\mathbf{F}}_v(\xi_0))^{-1}. \quad (23)$$

Для открытых каналов $\epsilon_{i_o}^{S(A)} < E$ этот набор составлен из линейно независимых асимптотических решений $\tilde{\mathbf{F}}_v(\xi_0) = \{\chi^{(i_o)}(\xi_0)\}_{i_o=1}^{j_{\max}}$ с компонентами

$$\chi^{(i_o)}(\xi_0) = (\tilde{\chi}_{1i_o}(\xi_0), \dots, \tilde{\chi}_{j_{\max}i_o}(\xi_0))^T$$

при $\xi_0 > 0$, $v = \Rightarrow$ или при $\xi_0 < 0$, $v = \Leftarrow$:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_{\Rightarrow}(\xi_0) &= \tilde{\mathbf{X}}^{(+)}(\xi_0), \quad \xi_0 > 0, & \tilde{\mathbf{F}}_{\Leftarrow}(\xi_0) &= \tilde{\mathbf{X}}^{(-)}(\xi_0), \quad \xi_0 < 0, \\ \tilde{X}_{ii_o}^{(\pm)}(\xi_0) &= X_{ii_o}^{(\pm)}(\xi_0), \quad i = 1, \dots, j_{\max}, \quad i_o = 1, \dots, N_o, \end{aligned} \quad (24)$$

где $X_{ii_o}^{(\pm)}(\xi_0)$ задаются выражением (11). Если при фиксированном значении энергии E есть закрытые каналы $\epsilon_{i_o}^{S(A)} > E$ с номерами $i_o = N_o + 1, \dots, j_{\max}$, то в набор (24) включаются дополнительные линейно независимые асимптотические функции $\tilde{X}_{ii_o}^{(+)}(\xi_0)$ при $\xi_0 > 0$ или $\tilde{X}_{ii_o}^{(-)}(\xi_0)$ при $\xi_0 < 0$, которые при наличии дальнего действующего отталкивающего кулоновского потенциального барьера имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{X}_{ii_o}^{(\pm)}(\xi_0) &\rightarrow q_{i_o}^{-1/2} \exp\left\{\mp\left(q_{i_o}\xi_0 + \frac{Z_j^\pm}{q_{i_o}} \ln(2q_{i_o}|z|)\right)\right\} \delta_{ii_o}, \\ q_{i_o} &= \sqrt{\epsilon_{i_o}^{S(A)} - E}, \quad i = 1, \dots, j_{\max}, \quad i_o = N_o + 1, \dots, j_{\max}. \end{aligned} \quad (25)$$

Для решения краевой задачи (18)–(22) применялся метод конечных элементов с использованием симметричного квадратичного функционала [27]–[29]

$$\begin{aligned} \Xi(\mathbf{F}, E, \xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}) = & \\ = \int_{\xi_0^{\min}}^{\xi_0^{\max}} & \left[\frac{d\mathbf{F}^T(\xi_0)}{d\xi_0} \frac{d\mathbf{F}(\xi_0)}{d\xi_0} + \mathbf{F}^T(\xi_0)V(\xi_0)\mathbf{F}(\xi_0) - E\mathbf{F}^T(\xi_0)\mathbf{F}(\xi_0) \right] d\xi_0 - \\ & - \mathbf{F}^T(\xi_0^{\max})\mathcal{R}(\xi_0^{\max})\mathbf{F}(\xi_0^{\max}) + \mathbf{F}^T(\xi_0^{\min})\mathcal{R}(\xi_0^{\min})\mathbf{F}(\xi_0^{\min}). \end{aligned} \quad (26)$$

Дискретизация искомого решения в классе функций $W_2^1(B)$ и редукция краевой задачи (18)–(22) к алгебраической задаче осуществлялась на конечноэлементной сетке $\Omega_h = (\xi_0^{\min}(N_{\text{el}})\xi_0^{\max})$ с шагом $h = (\xi_0^{\max} - \xi_0^{\min})/N_{\text{el}}$, где N_{el} – число лагранжевых элементов порядка k на интервале $(\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max})$, обеспечивающее требуемую точность приближенного решения порядка $O(h^{k+1})$ для собственной функции и порядка $O(h^{2k})$ для собственного значения [30].

Для задачи рассеяния при фиксированном вещественном значении энергии E собственные функции $\mathbf{F}(E, \xi_0)$ подчиняются краевым условиям третьего рода (22), а функция $\mathbf{F}^T(E, \xi_0)$ в функционале (26) заменяется эрмитово-сопряженной функцией $\mathbf{F}^\dagger(E, \xi_0)$ в соответствии с определением скалярного произведения (12). Асимптотические решения задачи рассеяния при $|\xi_0^{\max}| \leq |\xi_0| < \infty$ содержат падающую волну и неизвестные матрицы $\mathbf{T}(E)$ и $\mathbf{R}(E)$ амплитуд прошедшей и отраженной волн (13), (14), которые вычисляются совместно с приближенным численным решением $\mathbf{F}_h$ на сетке Ω_h и его матрицами логарифмических производных $\mathcal{R}(\xi_0^{\min}) = \mathcal{R}_\leftarrow(\xi_0^{\min})$ или $\mathcal{R}(\xi_0^{\max}) = \mathcal{R}_\rightarrow(\xi_0^{\max})$ в граничных точках интервала $(\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max})$. При этом матрица $\mathcal{R}(\xi_0^{\max}) = \mathcal{R}_\leftarrow(\xi_0^{\max})$ или $\mathcal{R}(\xi_0^{\min}) = \mathcal{R}_\rightarrow(\xi_0^{\min})$ вычисляется по формуле (23) и подставляется в функционал (26).

Дискретизация решений краевой задачи выполнялась на конечноэлементных сетках

$$\begin{aligned} \Omega_h &= (-10.5(800)10.5) \quad \text{при } n = 3, \\ \Omega_h &= (-12.8(976)12.8) \quad \text{при } n = 4, \\ \Omega_h &= (-14.0(1080)14.0) \quad \text{при } n = 5 \end{aligned}$$

с лагранжевыми элементами четвертого порядка ($k = 4$). Граничные точки интервала ξ_0^t выбирались в соответствии с требуемой точностью приближенного решения

$$\max_{i,j=1,\dots,j_{\max}} \left| \frac{V_{ij}(\xi_0^t)}{\alpha} \right| < 10^{-8}.$$

Число $j_{\max}$ кластерных базисных функций в разложении (17) и, соответственно, число уравнений в системе (18) при $n = 3, 4, 5$ выбиралось равным $j_{\max} = 21, 39, 37$ для S-состояний и при $n = 3, 4$ выбиралось равным $j_{\max} = 16, 15$ для A-состояний. Сходимость результатов по параметру $j_{\max}$, необходимая для достижения требуемой точности, была исследована ранее [17]. Результаты расчетов при $n = 3$ и $n = 4$ представлены на рис. 2. Резонансные значения энергии $E^{S(A)}$ и соответствующие максимальные значения коэффициента прохождения $|T_{11}^2|$ приведены в табл. 1 и 2, для $n = 5$ резонансные значения энергии E^S приведены в табл. 3.

Рис. 2. Зависимость от энергии E (в осцилляторных единицах) полной вероятности $|T|_{11}^2$ прохождения через отталкивающий гауссовый барьер при $\sigma = 0, 1$, $\alpha = 20$ для системы трех, $n = 3$ (а) и четырех, $n = 4$ (б) тождественных частиц в основном симметричном (сплошные линии) и антисимметричном (пунктирные линии) состояниях.

Для метастабильных состояний собственные функции подчиняются краевым условиям третьего рода (22), где матрицы $\mathcal{R}(\xi_0^t) = \text{diag}(\mathcal{R}(\xi_0^t))$ зависят от искомого комплексного собственного значения энергии $E \equiv E_m = \text{Re } E_m + i \text{Im } E_m$, $\text{Im } E_m < 0$, и задаются выражениями

$$\mathcal{R}_{i_o i_o}(\xi_0^{\max}) = \begin{cases} ip_m, & \text{Re } E_m \geq \epsilon_j^{S(A)}, \\ iq_m, & \text{Re } E_m < \epsilon_j^{S(A)}, \end{cases} \quad \mathcal{R}_{i_o i_o}(\xi_0^{\min}) = -\mathcal{R}_{i_o i_o}(\xi_0^{\max}), \quad (27)$$

$$p_m = \sqrt{E_m - \epsilon_{i_o}^{S(A)}}, \quad q_m = i\sqrt{\epsilon_{i_o}^{S(A)} - E_m},$$

поскольку асимптотические решения этой задачи содержат только уходящие волны в открытых каналах. В этом случае собственные функции подчиняются условиям ортогональности и нормировки:

$$(\mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'}) = (ip_m + ip_{m'}) \left[\int_{\xi_0^{\min}}^{\xi_0^{\max}} \mathbf{F}_m^T(\xi_0) \mathbf{F}_{m'}(\xi_0) d\xi_0 - \delta_{mm'} \right] + C_{mm'} = 0, \quad (28)$$

$$C_{mm'} = -\mathbf{F}_m^T(\xi_0^{\max}) \mathbf{F}_{m'}(\xi_0^{\max}) + \mathbf{F}_m^T(\xi_0^{\min}) \mathbf{F}_{m'}(\xi_0^{\min}).$$

Заметим, что условие ортогональности получается путем вычисления разности вариационных функционалов (26) с подстановкой в них собственных значений E_m , $E_{m'}$, собственных функций $\mathbf{F}_m(\xi_0)$, $\mathbf{F}_{m'}(\xi_0)$ и элементов матриц $\mathcal{R}(\xi_0^{\max})$, $\mathcal{R}(\xi_0^{\min})$ из формулы (27). При этом условие нормировки согласуется с результатами из книги [2].

При использовании метода внешнего комплексного скейлинга соотношение ортогональности и нормировки выбиралось в соответствии с работой [21]:

$$(\mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'})_C = \int_C \mathbf{F}_m^T(\xi_0) \mathbf{F}_{m'}(\xi_0) d\xi_0 - \delta_{mm'} = 0, \quad (29)$$

Таблица 1. Наборы первых резонансных значений энергии $E_l^{S(A)}$, при которых достигается максимум коэффициента прохождения $|T|_{11}^2$, собственных значений энергий $E_m^M = \text{Re } E_m^M + i \text{Im } E_m^M$ метастабильных состояний и их аппроксимаций E_l^{D21} для S- и A-состояний $n = 3$ частиц при $\sigma = 0.1$, $\alpha = 20$.

l	E_l^S	$ T _{11}^2$	m	E_m^M	E_l^{D21}
1	8.175	0.775	1	$8.175 - i5.1(-3)$	8.19
	8.306	0.737	2	$8.306 - i5.0(-3)$	
2	11.111	0.495	3	$11.110 - i5.6(-3)$	11.09
	11.229	0.476	4	$11.229 - i5.5(-3)$	
3	12.598	0.013	5	$12.598 - i6.4(-3)$	12.51
			6	$12.599 - i6.3(-3)$	
4	13.929	0.331	7	$13.929 - i4.5(-3)$	13.86
	14.003	0.328	8	$14.004 - i4.6(-3)$	
5	14.841	0.014	9	$14.841 - i3.5(-3)$	14.74
	14.877	0.008	10	$14.878 - i3.5(-3)$	
6	15.794	0.246	11	$15.788 - i6.0(-3)$	15.67
			12	$15.799 - i6.3(-3)$	
7	16.670	0.065	13	$16.666 - i2.9(-3)$	16.53
			14	$16.669 - i4.3(-3)$	
8	16.731	0.361	15	$16.730 - i7.0(-3)$	16.59
	16.77	0.404	16	$16.775 - i5.2(-3)$	
l	E_l^A	$ T _{11}^2$	m	E_m^M	E_l^{D21}
1	11.551	1.000	11	$11.551 - i1.8(-3)$	11.52
	11.610	1.000	12	$11.610 - i2.0(-3)$	
2	14.459	0.553	3	$14.459 - i2.9(-3)$	14.42
	14.564	0.480	4	$14.565 - i2.7(-3)$	
3	16.176	0.855	5	$16.176 - i4.7(-3)$	16.11
	16.254	0.824	6	$16.254 - i4.2(-3)$	

ТАБЛИЦА 2. То же, что и в таблице 1, но для $n = 4$ частиц.

l	E_l^S	$ T _{11}^2$	m	E_m^M	E_l^{D31}	E_l^{D22}
1	10.121	0.321	1	$10.119 - i4.0(-3)$	10.03	
			2	$10.123 - i4.0(-3)$		
2	11.896	0.349	3	$11.896 - i6.3(-5)$		11.76
3	12.713	0.538	4	$12.710 - i4.5(-3)$	12.60	
	12.717	0.538	5	$12.720 - i4.5(-3)$		
4	14.858	0.017	6	$14.857 - i4.3(-3)$	14.71	
			7	$14.859 - i4.3(-3)$		
5	15.188	0.476	8	$15.185 - i3.9(-3)$	15.04	
			9	$15.191 - i3.9(-3)$		
6	15.405	0.160	10	$15.405 - i1.4(-5)$		15.21
7	15.863	0.389	11	$15.863 - i5.3(-5)$		15.64
l	E_l^A	$ T _{11}^2$	m	E_m^M	E_l^{D31}	E_l^{D22}
1	19.224	0.177	1	$19.224 - i4.0(-4)$	19.03	
			2	$19.224 - i4.0(-4)$		
2	20.029	0.970	3	$20.029 - i3.3(-7)$		19.24

ТАБЛИЦА 3. То же, что и в таблице 1, но для $n = 5$ частиц.

l	E_l^S	$ T _{11}^2$	m	E_m^M	E_l^{D41}	E_l^{D32}
1	11.794	1.6(-4)	1	$11.794 - i1.3(-3)$	11.61	
			2	$11.794 - i1.3(-3)$		
2	4.166	0.014	3	$14.166 - i1.1(-3)$	13.94	
			4	$14.166 - i1.1(-3)$		
3	14.764	0.666	5	$14.764 - i6.6(-6)$		14.42
	14.774	0.666	6	$14.774 - i5.6(-6)$		
4	16.429	0.005	7	$16.429 - i3.3(-3)$	16.16	
			8	$16.429 - i3.3(-3)$		

где C – подходящий контур интегрирования в комплексной плоскости независимой переменной ξ_0 . При этом интегрирование по ξ_0 в вариационном функционале (26) выполнялось по тому же контуру C с продолжением в комплексную плоскость за пределы интервала интегрирования $[\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}]$, что обеспечивает затухание искомого решения с требуемой точностью. Дискретизация решений краевой задачи выполнялась на конечноэлементных сетках

$$\begin{aligned}\Omega_h &= (-10.5(150) - 3.5(300)3.5(150)10.5) \quad \text{при } n = 3, \\ \Omega_h &= (-12.8(220) - 4.2(440)4.2(220)12.8) \quad \text{при } n = 4, \\ \Omega_h &= (-15.0(250) - 5.0(500)5.0(250)14.0) \quad \text{при } n = 5\end{aligned}$$

с лагранжевыми элементами пятого порядка ($k = 5$). Алгебраическая задача на собственные значения решалась методом Ньютона с оптимальным выбором шага итерации [6], [31], [32], при этом использовалось полученное в результате дискретизации функционала (26) дополнительное условие $\Xi_h(\mathbf{F}_m, E_m, \xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}) = 0$, которое обеспечивает оценки сверху для приближенного собственного значения. Применение альтернативного условия $(\mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'}) = 0$ обеспечивает оценки снизу для приближенного собственного значения [6]. В качестве начального приближения использовались вещественные собственные значения и собственные функции, ортонормированные условием равенства нулю выражения, стоящего в квадратных скобках в правой части формулы (28). Эти данные были получены помощью программы KANTBP 3.0 в результате решения задачи на связанные состояния с функционалом (26) при $\mathcal{R}(\xi_0^t) = 0$ на сетках

$$\begin{aligned}\Omega_h &= (-3.5(300)3.5) \quad \text{при } n = 3, \\ \Omega_h &= (-4.2(440)4.2) \quad \text{при } n = 4, \\ \Omega_h &= (-5.0(500)5.0) \quad \text{при } n = 5.\end{aligned}$$

Результаты расчетов, выполненные с вариационным функционалом (26), (28), заданным как на интервале $[\xi_0^{\min}, \xi_0^{\max}]$, так на контуре C , для комплексных значений энергии метастабильных состояний $E_m^M \equiv E_m = \text{Re } E_m + i \text{Im } E_m$ при $n = 3$, $n = 4$ и $n = 5$ приведены в табл. 1–3.

Эти метастабильные состояния ответственны за резонансные значения энергии, соответствующие максимальным значениям коэффициента прохождения, т. е. за эффект квантовой прозрачности барьеров.

Видно, что положение пиков, представленных на рис. 2, количественно согласуется с $\text{Re } E$, а геометрическая полуширина пиков $|T|_{11}^2(E)$ согласуется по порядку величины с мнимой частью $\Gamma = -2 \text{Im } E$ комплексных собственных значений $E = \text{Re } E + i \text{Im } E$ метастабильных состояний.

5. КЛАССИФИКАЦИЯ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

Поскольку в качестве потенциальных барьеров $V(x_i)$, $i = 1, \dots, n$, выбираются узкие потенциальные барьеры в форме гауссова потенциала,

$$V(x_i) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x_i^2}{\sigma^2}},$$

для приближенного расчета вещественной части $E_l^D \approx \text{Re } E_m$ собственных значений энергии метастабильных S- или A-состояний ограничимся решением задачи (1) при $d = 1$, используя аппроксимацию потенциальных барьеров $V(x_i)$ бесконечно высокими непроницаемыми стенками.

В рамках данного подхода мы ищем приближенное решение в одной из потенциальных ям, т. е. пренебрегаем туннелированием через барьеры между ямами. Таким образом, мы не можем вычислить расщепление, присущее точным собственным значениям метастабильных S- или A-состояний. Тем не менее мы можем объяснить механизм их появления и дать их классификацию, которая является важной характеристикой спектра. Чтобы не загромождать обозначения, в данном разделе индексы S и A мы опускаем.

Для нахождения квадратично-интегрируемых решений $\Psi(\mathbf{x})$, которые локализованы в окрестности одного из $2^n - 2$ локальных минимумов многомерного барьера $U(x_1, \dots, x_n)$ из (1), ограничимся частичным решением задачи на собственные значения для уравнения (1) в n -мерной области Ω_t специального типа, т. е. нахождением набора собственных значений $E_1^D < E_2^D < \dots < E_{l_{\max}}^D$ и соответствующего набора собственных функций

$$\Psi_1^D(x_1, \dots, x_n), \Psi_2^D(x_1, \dots, x_n), \dots, \Psi_{l_{\max}}^D(x_1, \dots, x_n),$$

удовлетворяющих условию ортонормированности

$$\int_{\Omega_t} \Psi_l^D(x_1, \dots, x_n) \Psi_{l'}^D(x_1, \dots, x_n) d\Omega_t = \delta_{ll'}.$$

Эта задача решается в декартовых координатах $x_1, \dots, x_n$ в одной из $2^n - 2$ подобластей

$$\Omega_t = \{x_1, \dots, x_n \mid \sigma_i x_i > 0, i = 1, \dots, n\}, \quad \sigma_i = \pm 1,$$

с условиями Дирихле $\Psi^D(x_1, \dots, x_n)|_{\partial\Omega_t} = 0$ на внутренней $\partial\Omega_t^{\text{in}} = \cup_{i=1}^n \{x_i = 0\}$ и на внешней $\partial\Omega_t^{\text{out}}$ границах выбранной подобласти Ω_t . При этом значение $\sigma_i = -1$ или $\sigma_i = 1$ указывает местоположение i -й частицы на соответственно правой или на левой стороне барьера $V(x_i)$ по переменной x_i .

Решение $\Psi_l^D(\mathbf{x}) = \Psi_l^D(x_1, \dots, x_n) \in L_2(\bar{\Omega}_t)$ в области $\bar{\Omega}_t = \Omega_t \cup \partial\Omega_t^{\text{in}} \cup \partial\Omega_t^{\text{out}} \subset \mathbb{R}^n$ будем искать в виде разложения

$$\Psi_l^D(\mathbf{x}) = \sum_{j \in \Delta} \bar{\Phi}_j^D(\mathbf{x}) \Psi_{jl}^D, \quad (30)$$

где $\Psi^D = \{\Psi_{jl}^D\}$ – матрица неизвестных коэффициентов,

$$j \in \Delta = \left\{ i_1, \dots, i_n \left| \sum_{k=1}^n i_k \leq i^{\max}, \quad \frac{i_k + 1}{2} \in \mathbb{N} \text{ для } k = 1, \dots, n \right. \right\},$$

а функции $\bar{\Phi}_j^D(\mathbf{x}) \in L_2(\bar{\Omega}_t)$ образуют ортонормированный базис n -мерного осциллятора в области определения $\bar{\Omega}_t$:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_j^D(\mathbf{x}) &= \sum_{\{i_1, \dots, i_n\} \in \bar{\Delta}_j} \bar{\alpha}_{j[i_1, \dots, i_n]} \bar{\Phi}_{[i_1, i_2, \dots, i_n]}^{\text{osc}}(\mathbf{x}), \\ \bar{\Phi}_{[i_1, i_2, \dots, i_n]}^{\text{osc}}(\mathbf{x}) &= \prod_{k=1}^n \bar{\Phi}_{i_k}(x_k), \quad \bar{\Phi}_{i_k}(x_k) = \sqrt{2} \frac{e^{-x_k^2/2} H_{i_k}(x_k)}{\sqrt{4\pi} \sqrt{2^{i_k}} \sqrt{i_k!}}. \end{aligned} \quad (31)$$

Из условий Дирихле $\bar{\Phi}_{i_k}(x_k)|_{x_k=0} = 0$ на внутренних границах $\partial\Omega_t^{\text{in}}$ следует ограничение на функции $\bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$, а именно, их индексы i_k должны быть нечетными, при этом функции $\bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$ подчиняются условиям ортогональности и нормировки на полуоси $\sigma_i x_i \in \mathbb{R}_+^1$. Набор индексов $\bar{\Delta}_j \equiv \{i_1, \dots, i_n\}$, принимающих нечетные значения, определен условием

$$\bar{\Delta}_j = \left\{ i_1, \dots, i_n \left| 2 \sum_{k=1}^n i_k + n = \epsilon_j^D \right. \right\}$$

принадлежности к слою собственных функций $\bar{\Phi}_{[i_1, \dots, i_n]}^{\text{osc}}(\mathbf{x})$, соответствующих собственному значению n -мерного осциллятора, которое выбирается равным искомому собственному значению энергии $\epsilon_j^D = \epsilon_{[i_1, \dots, i_n]}^{\text{osc}}$.

Для вычисления собственных функций $\Psi_l^D(\mathbf{x})$, симметричных (антисимметричных) относительно перестановок частиц на всей области определения $\mathbb{R}^n$, необходимо и достаточно, чтобы функция $\Psi_l^D(\mathbf{x})$ в одной из ям была симметричной (антисимметричной) относительно перестановок координат x_i с одинаковыми σ_i . Базисные функции $\bar{\Phi}_j^D(\mathbf{x})$, удовлетворяющие этому условию, заданные линейной комбинацией (31) с коэффициентами $\bar{\alpha}_{j[i_1, \dots, i_n]}$, генерировались с помощью программы, реализующей стандартный метод [9].

В результате получаем алгебраическую задачу на собственные значения

$$\mathbf{D}\Psi^D = \Psi^D \mathbf{E}^D$$

с вещественной симметричной матрицей $\mathbf{D}$ размера $N_D \times N_D$. Эта задача решалась методом диагонализации с использованием подпрограмм `imtql2` и `tred2` из справочника [33]. В расчетах индексы i_k пробегали нечетные значения $1, 3, \dots, 21$, так что $i^{\text{max}} = 20 + n$, при этом для $n = 3$, $n = 4$ и $n = 5$ число строк (столбцов) N_D матрицы $\mathbf{D}$ не превышало 161, 336 и 489 соответственно.

При известном локальном решении $\Psi^D(\mathbf{x}) \equiv \Psi_l^{D(n-k)(k)}(\mathbf{x})$ в одной из подобластей $\bar{\Omega}_t$, когда k частиц находятся слева от барьера и $n - k$ частиц – справа от барьера, например при $\sigma_1 = \dots = \sigma_k = -1$, $\sigma_{k+1} = \dots = \sigma_n = 1$, т.е. для $\omega_t \equiv \sum_{i=1}^n \sigma_i = n - 2k$, решение $\Psi(\mathbf{x}) \in W_2^1(\bar{\Omega})$ во всей области $\bar{\Omega} = \bigcup_t \bar{\Omega}_t \subset \mathbb{R}^n$ вычислялось с использованием следующего трехшагового алгоритма и программы.

Шаг 1. Локальное решение, вычисленное в одной из подобластей $\bar{\Omega}_t$, продолжается во все подобласти $\bar{\Omega}_{t'}$, для которых $\omega_{t'} = \omega_t$ (когда k частиц находятся слева

от барьера, а $n - k$ частиц – справа) с использованием симметрии (антисимметрии) искомого решения относительно перестановок частиц ($x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 1, \dots, n$):

$$\Psi_l^{D(n-k)(k)}(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = \pm \Psi_l^{D(n-k)(k)}(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots)$$

(знак плюс берется для S-состояний, знак минус – для A-состояний).

ШАГ 2. Если $\omega_{t'} \neq 0$, то найденное на шаге 1 решение продолжается во все подобласти $\bar{\Omega}_{t''}$, для которых $\omega_{t''} = -\omega_t$ (когда $n - k$ частиц находятся слева от барьера, а k частиц – справа) с помощью инверсии координат. При этом получаются четные (gerade), $\Psi_l^{D(n-k)(k)}(-\mathbf{x}) = \Psi_l^{D(n-k)(k)}(\mathbf{x})$, или нечетные (ungerade), $\Psi_l^{D(n-k)(k)}(-\mathbf{x}) = -\Psi_l^{D(n-k)(k)}(\mathbf{x})$, решения.

ШАГ 3. В оставшихся $2^n - n!/(k!(n-k)!)\cdot(2-\delta_{0\omega_{t'}})$ подобластях искомое решение равно нулю.

В случае $n = 3$ имеются шесть одинаковых потенциальных ям. Симметрия относительно плоскости $\xi_0 = 0$, в которой локализованы барьеры, объясняет наличие дублетов (см. рис. 2), подобных парам четных (g) и нечетных (u) решений с экспоненциальным расщеплением для симметричных двухъямных молекулярных потенциалов. В отличие от случая $n = 2$, имеется одно дополнительное условие, связанное с наличием симметрии. Для построения решений, симметричных или антисимметричных относительно перестановок двух частиц по решениям в подобласти (октанте), ограниченной плоскостями парных ударов “12” и “13” (т.е. первая частица находится слева от барьера, $\sigma_1 = -1$, а вторая и третья частицы – справа, $\sigma_2 = \sigma_3 = 1$), необходимо и достаточно, чтобы собственная функция задачи была симметрична или антисимметрична относительно перестановки $x_2 \leftrightarrow x_3$. Другими словами, решения должны подчиняться различным краевым условиям при $x_2 = x_3$, а именно условию Неймана для S-состояний или условию Дирихле для A-состояний. Из этого следует, что энергетические уровни S- и A- состояний различны.

Например, первые три симметричные и первое антисимметричное решения задачи, соответствующие собственным значениям энергии из табл. 1, в указанном октанте имеют следующие лидирующие компоненты в разложении (30):

$$\begin{aligned}\Psi_{1;S}^{D21}(x_1, x_2, x_3) &\approx \bar{\Phi}_1(|x_1|)\bar{\Phi}_1(|x_2|)\bar{\Phi}_1(|x_3|), \\ \Psi_{2;S}^{D21}(x_1, x_2, x_3) &\approx \bar{\Phi}_1(|x_1|) \frac{\bar{\Phi}_1(|x_2|)\bar{\Phi}_3(|x_3|) + \bar{\Phi}_3(|x_2|)\bar{\Phi}_1(|x_3|)}{\sqrt{2}}, \\ \Psi_{3;S}^{D21}(x_1, x_2, x_3) &\approx \bar{\Phi}_3(|x_1|)\bar{\Phi}_1(|x_2|)\bar{\Phi}_1(|x_3|), \\ \Psi_{1;A}^{D21}(x_1, x_2, x_3) &\approx \bar{\Phi}_1(|x_1|) \frac{\bar{\Phi}_1(|x_2|)\bar{\Phi}_3(|x_3|) - \bar{\Phi}_3(|x_2|)\bar{\Phi}_1(|x_3|)}{\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

в области $x_1 < 0$, $x_2 > 0$, $x_3 > 0$. Продолжая каждое из этих решений в оставшиеся пять ям (октантов), после умножения на нормировочный множитель $1/\sqrt{6}$ получаем шесть симметричных (три четных и три нечетных) решений и два антисимметричных (одно четное и одно нечетное) решения. Таким образом, нижние уровни энергетического спектра S- и A-состояний образуют последовательности (g-u)-дублетов.

Рис. 3. Изоповерхности собственных функций S1-состояний (а, в), A1-состояний (б, г), g-состояний (а, б), u-состояний (в, г) трех тождественных частиц в декартовых координатах x_1, x_2, x_3 трехмерного конфигурационного пространства $\mathbb{R}^3$. Положительные и отрицательные значения функций маркированы темным и светлым тонами соответственно.

Изоповерхности собственных функций первых симметричного (S1) и антисимметричного (A1) дублетных (g-u)-состояний, соответствующие значениям энергии E_l^{D21} , приведенным в табл. 1, для трех тождественных частиц в декартовых координатах трехмерного конфигурационного пространства показаны на рис. 3. В представленной проекции плоскости парных соударений перпендикулярны плоскости рисунка и проходят через три прямые (проекции координатных осей), пересекающиеся в центре. Из рисунка видно, что в случае симметричных (антисимметричных) состояний частиц собственные функции симметричны (антисимметричны) относительно

Рис. 4. Плотности вероятности $|\chi_i(\xi_0)|^2$ компонент разложения (17) волновой функции по координате центра масс основного S-состояния кластера из четырех частиц при энергиях столкновения E , соответствующие первому, $E = 9.543$, $|T|_{11}^2 = 0.591$ (а), и второму, $E = 11.128$, $|T|_{11}^2 = 0.309$ (б), максимумам коэффициента прохождения. Параметры гауссова барьера выбраны как $\alpha = 10$ и $\sigma = 0.1$.

этих линий. Указанное выше (g-u)-вырождение энергетических уровней E_l^D симметричных (антисимметричных) состояний снимается при вычислении соответствующих комплексных значений энергии метастабильных состояний, представленных в табл. 1.

При $n = 4$ имеются 14 потенциальных ям. Шесть потенциальных ям в центре (обозначены символом D22) соответствуют случаю, когда две частицы расположены по одну сторону барьера и остальные две – на другой стороне. Остальные восемь ям (обозначены символом D31), которые расположены по краям центральной области, содержащей шесть ям, соответствуют случаю, когда одна частица находится по одну сторону от барьера и остальные три – на другой стороне. Поскольку яма D22 уже, чем D31, уровни энергий E_l^{D22} расположены выше соответствующих уровней E_l^{D31} (см. табл. 2). Пики, отвечающие локализации волновой функции в ямах D22, являются синглетными, поскольку в окрестности плоскости симметрии $\xi_0 = 0$ барьеров нет, за исключением начала координат. Две группы ям D31 аналогично случаю трех частиц $n = 3$ разделены барьерами, и в случае $n = 4$ имеются дублеты. Однако они не видны на рис. 2, поскольку расстояние между уровнями в дублете порядка их ширины, т. е. существенно меньше, чем для случая трех частиц. Это объясняется тем, что две группы ям D31 разделены двумя барьерами, а в случае трех частиц – одним барьером.

Как видно из табл. 2, для дублетных состояний D31 при $l = 2$ наблюдаются два максимума коэффициента прохождения, при этом локальный минимум $|T|_{11}^2$ расположен посередине между этими максимумами и его значение на несколько тысячных меньше. Для дублетных состояний D31 с $l = 1, 4, 5$, ширина уровней энергии которых примерно такая же, но сами уровни расположены ближе друг к другу, на-

блюдается один максимум коэффициента прохождения, который расположен точно посередине между вещественными частями комплексного значения энергии E_m^M . Заметим, что компоненты $\chi_{j1}^S(\xi_0)$ собственной функции $\Psi_1^S(\xi_0, \xi)$ из (17), соответствующей первому максимуму коэффициента прохождения (см. рис. 4) имеют минимумы в окрестности нуля, т.е. функция $\Psi_1^S(\xi_0, \xi)$ локализована в ямах D31, а компоненты собственной функции второго максимума локализованы в окрестности нуля, т.е. функция локализована в ямах D22. Подтверждение этому факту можно найти в последних столбцах табл. 2. Как и в случае $n = 3$, для состояний D31 указанное выше (g-u)-вырождение энергетических уровней E_l^D S- и A-состояний снимается при вычислении соответствующих комплексных значений энергии метастабильных состояний. Отметим, что ширина синглетных уровней D22 на порядок меньше, чем уровней D31, это связано с тем, что ямы D22 отделены от области свободного движения двумя барьерами.

Аналогично при $n = 5, 6, \dots$ имеются $2^n - 2$ потенциальных ям. При нечетных n мы наблюдаем группы $D(n-k)(k)$, $k = 1, \dots, (n-1)/2$, состоящие из $\frac{2n!}{k!(n-k)!}$ ям, разделенных барьерами, аналогично случаю $n = 3$. В этом случае присутствуют только дублетные состояния. Например, при $n = 5$ имеются четыре группы ям: пять ям D41 и десять ям D32, соответствующих случаю, когда одна или две частицы находятся слева от барьера, и две такие же группы, когда одна или две частицы находятся справа от барьера, т.е. аналогично случаю четырехъямного симметричного потенциала, в котором две центральные ямы отличаются от двух крайних ям. Например, для $n = 5$ (см. табл. 3) комплексные энергии дублетных состояний D41 расположены близко друг к другу (расстояния между ними порядка 10^{-4}), и максимумы коэффициента прохождения неразличимы, а для дублетных состояний D32 расстояние между уровнями больше их ширины, и наблюдаются двойные пики. При четных n , кроме групп $D(n-k)(k)$, $k = 1, \dots, (n-2)/2$, имеется группа из $n!/((n/2)!)^2$ ям, расположенных в окрестности начала координат, т.е. по $n/2$ частиц с каждой стороны барьера, которая будет давать синглетные состояния. При этом расстояние между комплексными значениями энергии в дублетах при фиксированном числе частиц кластера n с увеличением числа частиц k с одной стороны от барьера увеличивается, поскольку уменьшается число барьеров, разделяющих группы ям. Их ширина уменьшается, поскольку увеличивается число барьеров, отделяющих ямы от области “свободного” движения целого кластера из n частиц, и синглетные уровни имеют наименьшую ширину. В частности, из табл. 1–3 видно, что ширина уровней энергии дублетных состояний D21, D31, D41 при $n = 3, 4, 5$ соответственно, которые отделены от области свободного движения только одним барьером, примерно одинакова и составляет величину порядка 10^{-3} .

Как и следовало ожидать при $n = 3, 4, 5$ для рассматриваемых узкого и высокого барьеров аппроксимация непроницаемыми стенками дает оценку с погрешностью менее 2% для вычисленных резонансных энергий $E_l^{S(A)}$ и вещественной части энергии E_m^M метастабильных состояний, представленных в табл. 1–3.

Благодарности. Авторы благодарят С.Н. Ершова, Ф.М. Пенькова, И.В. Пузынина, А.К. Мотовилова и участников семинара “Малочастичные системы” Лаборатории теоретической физики ОИЯИ за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, М., 1985.
- [2] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopolsky, J. Horáček, *Theory of Resonances. Principles and Applications*, Reidel Texts in the Mathematical Sciences, **3**, Springer, Netherlands, 1989.
- [3] S. N. Ershov, B. V. Danilin, J. S. Vaagen, *Phys. Rev. C*, **64**:6 (2001), 064609, 23 pp.
- [4] Ф. М. Пеньков, *ЖЭТФ*, **118**:4 (2000), 806–815.
- [5] P. M. Krassovitskiy, F. M. Pen'kov, *J. Phys. B*, **47**:22 (2014), 225210, 5 pp., arXiv: 1412.3905.
- [6] И. В. Пузынин, Т. Л. Бояджиев, С. И. Виницкий, Е. В. Земляная, Т. П. Пузынина, О. Чулуунбаатар, *ЭЧАЯ*, **38**:1 (2007), 144–232.
- [7] A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V. P. Gerdt, V. A. Rostovtsev, “Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions”, *Computer Algebra in Scientific Computing* (Kassel, Germany, September 5–9, 2011), Lecture Notes in Computer Science, **6885**, eds. V. P. Gerdt, W. Koepf, E. W. Mayr, E. V. Vorozhtsov, Springer, Berlin, Heidelberg, 2011, 175–191.
- [8] J. G. Muga, J. P. Palao, B. Navarro, I. L. Egusquiza, *Phys. Rep.*, **395**:6 (2004), 357–426.
- [9] В. А. Фок, *УФН*, **93**:2 (1967), 342–361.
- [10] A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, L. L. Hai, V. L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy, *ЯФ*, **77**:3 (2014), 414–438.
- [11] P. Kramer, M. Moshinsky, *Nucl. Phys.*, **82**:2 (1966), 241–274.
- [12] M. Moshinsky, Yu. F. Smirnov, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics*, Contemporary Concepts in Physics, **9**, Harwood, Amsterdam, 1996.
- [13] К. Вильдермут, Я. Тан, *Единая теория ядра*, Мир, М., 1980.
- [14] A. Novoselsky, J. Katriel, *Ann. Phys.*, **196**:1 (1989), 135–149.
- [15] P. Kramer, T. Kramer, *Phys. Scr.*, **90**:7 (2015), 074014, arXiv: 1410.4768.
- [16] A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V. A. Rostovtsev, L. L. Hai, V. Derbov, A. Gozdz, E. Klimov, “Symbolic-numerical algorithm for generating cluster eigenfunctions: identical particles with pair oscillator interactions”, *Computer Algebra in Scientific Computing* (Berlin, Germany, September 9–13, 2013), Lecture Notes in Computer Science, **8136**, eds. V. P. Gerdt, W. Koepf, E. W. Mayr, E. V. Vorozhtsov, Berlin, 2013, 155–168.
- [17] A. A. Gusev, *Вестн. РУДН. Сер. Математика. Информатика. Физика*, 2014, № 1, 52–70.
- [18] A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich, *Comput. Phys. Commun.*, **185**:12 (2014), 3341–3343.
- [19] O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, V. L. Derbov, P. M. Krassovitskiy, S. I. Vinitsky, *ЯФ*, **72**:5 (2009), 811–821.
- [20] A. J. F. Siegert, *Phys. Rev.*, **56**:8 (1939), 750–752.
- [21] C. W. McCurdy, C. K. Stroud, *Comput. Phys. Commun.*, **63**:1–3 (1991), 323–330.
- [22] A. Dobrowolski, A. Gózdź, K. Mazurek, J. Dudek, *Internat. J. Modern Phys. E*, **20**:2 (2011), 500–506.
- [23] В. Г. Неудачин, Ю. Ф. Смирнов, *Нуклонные ассоциации в легких ядрах*, 1969.
- [24] М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, Наука, М., 1979.
- [25] G. A. Baker, Jr., *Phys. Rev.*, **103**:4 (1956), 1119–1120.
- [26] A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, A. Gózdź, V. L. Derbov, *Phys. Scr.*, **89**:5 (2014), 054011, 7 pp.

- [27] О. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, A. G. Abrashkevich, A. Amaya-Tapia, M. S. Kaschiev, S. Y. Larsen, S. I. Vinitisky, *Comput. Phys. Commun.*, **177**:6 (2007), 649–675.
- [28] Ю. Н. Демков, *Вариационные принципы в теории столкновений*, ГИФМЛ, М., 1958.
- [29] О. А. Ладыженская, *Краевые задачи математической физики*, Наука, М., 1973.
- [30] Г. Стренг, Г. Фикс, *Теория метода конечных элементов*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1973.
- [31] Т. Жанлав, Р. Мижиддорж, О. Чулуунбаатар, *Вестн. Тверск. гос. ун-та. Сер. Прикладная математика*, **2**:9 (2008), 27–37.
- [32] Т. Zhanlav, О. Chuluunbaatar, V. Ulziibayar, *Appl. Math. Comput.*, **236** (2014), 239–246.
- [33] Дж. Уилкинсон, Ц. Райнш, *Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра*, Машиностроение, М., 1976.