

P4-2012-101

В. В. Пупышев*

РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННОЙ КВАНТОВОЙ
ЧАСТИЦЫ ЦЕНТРАЛЬНЫМ
КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

*E-mail: pupyshev@theor.jinr.ru

Пупышев В. В.

P4-2012-101

Рассеяние медленной квантовой частицы
центральным короткодействующим потенциалом

В настоящей работе линейная версия метода фазовых функций в теории потенциального рассеяния дополняется новым асимптотическим методом. Этот метод предназначен для квантово-механического анализа и построения явных низкоэнергетических приближений парциальных фаз и радиальных компонент волновой функции рассеяния квантовой частицы центральным короткодействующим потенциалом. Построение всех низкоэнергетических приближений сводится к решению рекуррентной цепочки энергонезависимых систем, каждая из которых состоит из двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Особое внимание уделяется физической интерпретации всех используемых функций и оптимизации их численного анализа.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2012

Pupyshev V. V.

P4-2012-101

Scattering of a Slow Quantum Particle
by a Central Short-Range Potential

In the present work the linear version of the variable phase approach to the potential scattering is added by a new asymptotical method. This method is adopted for a quantum mechanical analysis and the construction of explicit low-energy approximations for the partial phase shifts and radial components of the wave function describing the scattering of a quantum particle by a central short-range potential. The construction of these approximations is reduced to the solution of the recurrence chain of energy independent systems, each system contains two linear first order differential equations. A special attention is paid to physical interpretation of all used functions and the optimization of their numerical analysis.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2012

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа является продолжением предыдущих исследований [1–7], основанных на методе фазовых функций [8, 9] в теории потенциального рассеяния [10, 11] и посвященных анализу низкоэнергетических особенностей столкновений двух квантовых частиц.

В [1, 2] предсказан нейтрон-нейтронный аналог известного в атомной физике эффекта Рамзауера. Этот аналог проявляется как глубокий минимум в сечении полного триплетного рассеяния двух нейтронов при энергии их столкновения, равной ~ 20 кэВ в системе центра масс. Эффект не зависит от модели нуклон-нуклонного взаимодействия и обусловлен взаимовоздействием короткодействующего ядерного потенциала и дальнедействующего взаимодействия магнитных моментов двух нейтронов.

В [3] предложено физически и математически корректное определение радиуса действия потенциала.

Объединение метода гипергармоник и линейной версии метода фазовых функций для систем нескольких незаряженных частиц с полной комплексной энергией предложено в [4]. В этой работе показано, что в системе трех нейтронов имеются искусственные резонансные состояния, порождаемые учетом граничных условий при конечных значениях гиперрадиуса и исчезающие в пределе его бесконечно больших значений.

Особенности низкоэнергетического рассеяния протона на протоне в триплетных состояниях выявлены в работе [5]. В ней доказано, что для корректной экстраполяции фаз рассеяния в область энергий ниже нескольких мегаэлектронвольт необходимо наряду с кулоновским и ядерным взаимодействиями учитывать взаимодействия магнитного момента протона с кулоновским полем и магнитным моментом другого протона.

В недавних работах [6, 7] исследовались упругое рассеяние протона на атоме водорода и протон-водородная реакция. Оба исследования выполнены в рамках одной и той же эффективно-двухчастичной модели. В этой модели полное взаимодействие протона, налетающего на атом водорода, и протона, являющегося ядром этого атома, считается суммой короткодействующего ядерного потенциала Рида [12] и дальнедействующего потенциала Томаса–Ферми [13], порожденного кулоновским взаимодействием электрона

с ядром атома водорода. В [6] дан квантово-механический анализ низкоэнергетических особенностей фазы и сечения упругого рассеяния протона на атоме водорода в случае нулевого полного углового момента и доказано, что вследствие дальнедействующей асимптотики потенциала Томаса–Ферми такое сечение при низких энергиях осциллирует, но имеет конечное число нулей. В [7] найдена явная низкоэнергетическая асимптотика сечения протон-водородной реакции с образованием дейтрона и доказано, что это сечение возрастает обратно пропорционально энергии столкновения протона с атомом водорода в ее нулевом пределе.

Объектом настоящего исследования является упругое рассеяние квантовой частицы неподвижным силовым центром, воздействующим на нее посредством центрального (сферически-симметричного) короткодействующего потенциала. Исследование основано на линейной версии метода фазовых функций. Наша главная цель заключается в создании нового метода, предназначенного для построения явных приближений радиальных волновых функций и парциальных фаз рассеяния такой частицы в состоянии с любым допустимым значением ее углового момента и в пределе малых положительных значений ее полной энергии.

Подробная постановка задачи, решаемой в настоящей работе, дается в разд. 1. Ключевыми для решения поставленной задачи являются свойства функции Риккати–Бесселя. Поэтому в разд. 2 приводятся необходимые нам представления этих функций и их произведений в виде, наиболее удобном как для качественного анализа, так и для вычислений. Так как предлагаемый способ решения основан на линейной версии метода фазовых функций, то необходимо напомнить ее формулировку. Этому посвящается разд. 3. Разд. 4 содержит только оригинальные результаты, в нем детально описывается предлагаемый метод построения и расчета низкоэнергетических приближений радиальных волновых функций и функции эффективного радиуса. Приложения предложенного метода поясняются в разд. 6 на примере рассеяния двух нуклонов, взаимодействующих посредством потенциала Рида с мягким кором в 1S_0 -, 1P_1 - и 1D_2 -состояниях. Основные результаты перечисляются в заключении.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположим, что квантовая частица p_1 имеет положительную, но конечную массу m_1 и движется в трехмерном координатном пространстве \mathcal{R}^3 в потенциальном поле V некоторого неподвижного силового центра. Выберем в этом пространстве такую правую декартову систему координат \mathcal{S}^3 с направляющими осями e_1 , e_2 и e_3 , начальная точка которой совпадает с силовым центром, а направляющий орт e_3 коллинеарен начальному волновому век-

тору \mathbf{k} частицы p_1 . При таком выборе две из трех сферических координат (r, θ, φ) радиуса-вектора \mathbf{r} , определяющего положение этой частицы в \mathcal{R}^3 , имеют прозрачный физический смысл: модуль r радиуса-вектора \mathbf{r} является расстоянием между частицей p_1 и силовым центром, а полярный угол θ равен углу между векторами \mathbf{k} и \mathbf{r} . Модуль k вектора \mathbf{k} называется волновым числом и связан с полной энергией E частицы p_1 равенством $E = (\hbar k)^2 / (2m_1)$, где \hbar — постоянная Планка.

Всюду далее волновой вектор k является параметром, принимающим любое положительное значение; значение $0, 1, \dots$ индекса ℓ считается фиксированным и конечным, где возможно, этот индекс опускается для краткости записи; с той же целью символы ρ и x_ℓ используются для обозначения безразмерного произведения kr и разности $\rho - \pi\ell/2$.

Сформулируем наши ограничения на потенциал V . Считаем, что потенциал V зависит только от расстояния r и удовлетворяет следующим условиям: в начальной точке $r = 0$ полуинтервала $r \geq 0$ произведение $r^2|V(r)|$ обращается в нуль; потенциал V принадлежит классу $\mathcal{C}^0(0, \infty)$ функций, непрерывных на интервале $0 < r < \infty$; в бесконечно удаленной точке $r = \infty$ произведение $r^n|V(r)|$ обращается в нуль при любом целом n . Запишем перечисленные выше условия в виде трех соотношений

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} r^2|V(r)| &= 0, \quad V(r) \in \mathcal{C}^0(0, \infty), \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^n|V(r)| &= 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1)$$

Теперь напомним известные в теории потенциального рассеяния [10, 11] определения и соотношения.

Потенциал $V(r)$, удовлетворяющий условиям (1), называется центральным короткодействующим потенциалом, слабосингулярным в начальной точке.

Волновая функция $\Psi(\mathbf{r}; \mathbf{k})$, описывающая упругое рассеяние квантовой частицы в \mathcal{R}^3 , определяется как регулярное (всюду ограниченное) решение трехмерного уравнения Шредингера с асимптотическим ($r \rightarrow \infty$) граничным условием в виде суммы плоской волны и сферической волны, умноженной на амплитуду рассеяния. Такое уравнение подстановкой

$$\Psi(\mathbf{r}; \mathbf{k}) = r^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} u_\ell(r; k) P_\ell(\cos \theta) \quad (2)$$

и последующим проецированием на полиномы Лежандра P_ℓ сводится к бесконечной по номеру $\ell = 0, 1, 2, \dots$ совокупности не связанных друг с другом одномерных уравнений Шредингера для искомым радиальных компонент u_ℓ :

$$[\partial_r^2 + k^2 - \ell(\ell+1)r^{-2} - V(r)] u_\ell(r; k) = 0, \quad r \geq 0. \quad (3)$$

Затем доказывается, что вследствие условий (1) компонента u_ℓ в пределе малых значений переменной r обращается в нуль как

$$u_\ell(r; k) \sim N(k) \frac{\rho^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}, \quad r \rightarrow 0, \quad (4)$$

а в пределе больших значений этой же переменной имеет осциллирующую асимптотику

$$u_\ell(r; k) \sim \sin[x_\ell + \delta_\ell(k)] = \sin(x_\ell) \cos \delta_\ell(k) + \cos(x_\ell) \sin \delta_\ell(k), \quad r \rightarrow \infty. \quad (5)$$

Функции $N(k)$ и $\delta_\ell(k)$ волнового числа k порождаются потенциалом V и называются парциальными нормировочным множителем и фазой рассеяния. Функция эффективного радиуса $K(k)$ определяется соотношением

$$K(k) \equiv k^{2\ell+1} \operatorname{ctg} \delta_\ell(k), \quad (6)$$

а парциальное сечение $\sigma_\ell(k)$ упругого рассеяния вычисляется по формулам

$$\sigma_\ell(k) \equiv \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) [\sin \delta_\ell(k)]^2 = 4\pi (2\ell+1) \frac{k^{4\ell}}{K^2(k) + k^{4\ell+2}}. \quad (7)$$

Пределом низких энергий или низкоэнергетическим пределом называется предел малых положительных значений волнового числа. В этом пределе волновое число k и полная энергия E принимают сколь угодно малые, но только положительные значения.

В рассматриваемом случае короткодействующего потенциала функция $K(k)$ является бесконечным рядом по четным степеням волнового числа и имеет низкоэнергетическую асимптотику

$$K(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} k^2 r_{\text{eff}} - k^4 r_{\text{eff}}^3 P + r_{\text{eff}}^5 Q k^6 + O(k^8), \quad k \rightarrow 0. \quad (8)$$

Коэффициенты a , r_{eff} , P этой асимптотики называются длиной рассеяния, эффективным радиусом и параметром формы. Слагаемым $r_{\text{eff}}^5 Q k^6$ принято пренебрегать, поэтому коэффициент Q не получил специального названия.

Зная четыре параметра a , r_{eff} , P и Q низкоэнергетического рассеяния, можно решить важную прикладную задачу, а именно, используя соотношения (6)–(8), построить явные низкоэнергетические приближения фазы δ_ℓ и сечения σ_ℓ в виде сумм, содержащих эти четыре параметра и целые степени волнового числа. Такие представления позволяют решить проблему экстраполяции парциальных фаз и сечений в область сверхнизких энергий, часто недоступную для экспериментальных исследований.

Постановка задачи, решаемой в настоящей работе, такова: во-первых, доказать, что при условиях (1) решение $u_\ell(r; k)$ задачи рассеяния (3)–(5)

представимо в виде бесконечного ряда по целым степеням k^{2n} волнового числа k и компонентам $u_{\ell n}(r)$; во-вторых, предложить экономичный метод вычисления этих компонент и коэффициентов a , r_{eff} , P и Q асимптотики (8) и, в-третьих, при изложении предлагаемого метода привести все формулы в той последовательности и том виде, в которых их использование для расчетов требует минимальных компьютерных ресурсов.

2. СВОЙСТВА ФУНКЦИЙ РИККАТИ–БЕССЕЛЯ

Анализ краевой задачи (3) – (5) начнем с самого простого случая выключенного потенциала. В этом случае функция V и фаза рассеяния $\delta_\ell(k)$ тождественно равны нулю; уравнение (3) заменой переменной r и функции $u_\ell(r; k)$, соответственно, на переменную $\rho = kr$ и функцию $z_\ell(\rho)$ сводится к известному в теории специальных функций [14] уравнению Риккати–Бесселя

$$[\partial_\rho^2 - \ell(\ell + 1)\rho^{-2} + 1]z_\ell(\rho) = 0, \quad (9)$$

а граничные условия (4) и (5) заменяются условиями

$$z_\ell(\rho) = O(\rho^{\ell+1}), \quad \rho \rightarrow 0; \quad z_\ell(\rho) \sim \sin(\rho - \pi\ell/2), \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (10)$$

Решением краевой задачи (9), (10) является регулярная функция Риккати–Бесселя $j_\ell(\rho)$. Следовательно, в рассмотренном случае искомая радиальная компонента $u_\ell(r; k)$ равна функции $j_\ell(\rho)$. В качестве второго линейно независимого решения уравнения(9) используем нерегулярную функцию Риккати–Бесселя $n_\ell(\rho)$.

Перечислим нужные нам известные свойства [14] функций j_ℓ и n_ℓ .

Эти функции выражаются через функции Бесселя $J_{\pm(\ell+1/2)}$ полуцелого порядка:

$$j_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi\rho}{2}} J_{\ell+1/2}(\rho), \quad n_\ell(\rho) = (-1)^{\ell+1} \sqrt{\frac{\pi\rho}{2}} J_{-\ell-1/2}(\rho). \quad (11)$$

Поэтому вронсиан $W(j_\ell, n_\ell)$ системы $\{j_\ell, n_\ell\}$ тождественно равен единице:

$$W(j_\ell, n_\ell) \equiv n_\ell(\rho) \partial_\rho j_\ell(\rho) - j_\ell(\rho) \partial_\rho n_\ell(\rho) \equiv 1, \quad \rho \geq 0, \quad (12)$$

а функции j_ℓ и n_ℓ являются суммами двух слагаемых: первое слагаемое — произведение функции $\sin \rho$ и конечной линейной комбинации числовых коэффициентов и обратных целых степеней аргумента ρ , а второе слагаемое — произведение функции $\cos \rho$ и другой линейной комбинации того же типа.

Например,

$$\begin{aligned}
j_0(\rho) &= \sin \rho, & n_0(\rho) &= -\cos \rho; \\
j_1(\rho) &= \frac{1}{\rho} \sin \rho - \cos \rho, & n_1(\rho) &= -\sin \rho - \frac{1}{\rho} \cos \rho; \\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^2} - 1\right) \sin \rho - \frac{3}{\rho} \cos \rho, & n_2(\rho) &= -\frac{3}{\rho^2} \sin \rho - \left(\frac{3}{\rho^2} - 1\right) \cos \rho.
\end{aligned}$$

Остальные функции j_ℓ и n_ℓ с номерами $\ell = 3, 4, \dots$ удобно вычислять последовательно в порядке возрастания их номера ℓ , используя рекуррентную формулу

$$z_{\ell+1}(\rho) = \frac{2\ell+1}{\rho} z_\ell(\rho) - z_{\ell-1}(\rho)$$

и полагая в ней $z_\nu = j_\nu$ или же $z_\nu = n_\nu$ при любом $\nu = \ell, \ell \pm 1$.

Функции j_ℓ и n_ℓ можно представить степенными рядами

$$\begin{aligned}
j_\ell(\rho) &= \frac{\rho^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^{2n}, \\
n_\ell(\rho) &= -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} \sum_{n=0}^{\infty} b_n \rho^{2n}, \quad \rho > 0,
\end{aligned} \tag{13}$$

где коэффициенты a_0 и b_0 равны единице, а все остальные коэффициенты a_n и b_n , $n = 1, 2, \dots$, определены формулами

$$\begin{aligned}
a_n &\equiv (-1)^n [2^n (n!) (2\ell+3)(2\ell+5) \dots (2\ell+2n+1)]^{-1}; \\
b_n &\equiv [2^n (n!) (2\ell-1)(2\ell-3) \dots (2\ell+1-2n)]^{-1}.
\end{aligned}$$

Поэтому верны рекуррентные по номеру $n = 0, 1, \dots$ соотношения

$$a_{n+1} = -\frac{a_n}{2(n+1)(2\ell+2n+3)}, \quad b_{n+1} = \frac{b_n}{2(n+1)(2\ell-1-2n)}. \tag{14}$$

В силу этих соотношений

$$\begin{aligned}
a_1 &= -[2(2\ell+3)]^{-1}, & a_2 &= [8(2\ell+3)(2\ell+5)]^{-1}, \\
a_3 &= -[48(2\ell+3)(2\ell+5)(2\ell+7)]^{-1}; \\
b_1 &= [2(2\ell-1)]^{-1}, & b_2 &= [8(2\ell-1)(2\ell-3)]^{-1}, \\
b_3 &= [48(2\ell-1)(2\ell-3)(2\ell-5)]^{-1}.
\end{aligned} \tag{15}$$

Приведем известные асимптотики рядов (13). В пределе малых значений аргумента ρ эти ряды имеют следующие равномерные относительно порядка ℓ асимптотики

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho) &= \frac{\rho^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} \left[\sum_{n=0}^{m<\infty} a_n \rho^{2n} + O(\rho^{2m+2}) \right], \quad \rho \rightarrow 0; \\ n_\ell(\rho) &= -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} \left[\sum_{n=0}^{m<\infty} b_n \rho^{2n} + O(\rho^{2m+2}) \right], \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (16)$$

В пределе больших по сравнению с порядком ℓ значений аргумента ρ асимптотики обсуждаемых рядов являются осциллирующими функциями:

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho) &= \sin x_\ell + O[\rho^{-1} \cos x_\ell], \\ n_\ell(\rho) &= -\cos x_\ell + O[\rho^{-1} \sin x_\ell], \quad \rho/\ell \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (17)$$

Теперь выведем оптимальные с вычислительной точки зрения представления произведения $j_\ell n_\ell$ и квадратов j_ℓ^2 , n_ℓ^2 функций Риккати–Бесселя в виде степенных рядов. Для этого используем справедливое при любых вещественных μ и ν представление [14]

$$J_\mu(\rho)J_\nu(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\rho}{2}\right)^{\mu+\nu+2n} \frac{(\mu+\nu+n+1)_n}{\Gamma(\mu+n+1)\Gamma(\nu+n+1)}, \quad \rho \geq 0, \quad (18)$$

и рассмотрим последовательно три случая: в первом случае положим $\mu = -\nu = \ell + 1/2$, во втором $-\mu, \nu = -\ell - 1/2$, а в третьем $-\mu, \nu = (\ell + 1/2)$. В каждом случае, используя связи (11), заменим в разложении (18) функции Бесселя соответствующими функциями Риккати–Бесселя, а все числовые коэффициенты приведем к несократимым дробям. В результате получим искомые представления

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho)n_\ell(\rho) &= -\frac{\rho}{2\ell+1} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \rho^{2n}, \quad j_\ell^2(\rho) = \left[\frac{\rho^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} \right]^2 \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \rho^{2n}, \\ n_\ell^2(\rho) &= \left[\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell} \right]^2 \sum_{n=0}^{\infty} \beta_n \rho^{2n}, \quad \rho > 0. \end{aligned} \quad (19)$$

В этих рядах коэффициенты α_0 , β_0 и γ_0 равны единице, при любом $n = 0, 1, \dots$ коэффициенты α_n задаются соотношениями

$$\alpha_n = (2\ell+1) \frac{(-2)^n (2\ell-2n-1)(2\ell-2n-3)\dots(3-2n)(1-2n)}{n! (2\ell+2n+1)!!}, \quad (20)$$

коэффициенты β_{2n} являются дробями

$$\beta_{2n} = \frac{(\ell - n)_n}{n!} [(2\ell - 1)(2\ell - 3) \dots (2\ell - 2n + 1)]^{-2} \times \\ \times [(2\ell - 2n - 1)(2\ell - 2n - 3) \dots (2\ell - 4n + 1)]^{-1},$$

коэффициенты γ_{2n} определяются равенствами

$$\gamma_{2n} = \frac{(\ell + n + 2)_n}{n!} [2\ell + 2n + 1)(2\ell + 2n - 1) \dots (2\ell + 3)]^{-2} \times \\ \times [(2\ell + 4n + 3)(2\ell + 4n + 1) \dots (2\ell + 2n + 3)]^{-1},$$

а коэффициенты β_{2n+1} и γ_{2n+1} вычисляются по формулам

$$\beta_{2n+1} = \frac{1}{2n+1} \frac{\ell - 2n}{(\ell - n)(2\ell - 4n - 1)} \beta_{2n}, \\ \gamma_{2n+1} = -\frac{1}{2n+1} \frac{\ell + 2n + 1}{(2\ell + 4n + 3)(\ell + n + 1)} \gamma_{2n}.$$

Благодаря перечисленным выше представлениям коэффициенты α , β_n и γ_{2n} подчиняются следующим рекуррентным по номеру $n = 0, 1, 2, \dots$ соотношениям:

$$\alpha_{n+1} = \frac{2}{n+1} \frac{2\ell + 1}{(2\ell + 2n + 3)(2\ell - 2n - 1)} \alpha_n, \\ \beta_{n+1} = \frac{2}{n+1} \frac{\ell - n}{(2\ell - n)(2\ell - 2n - 1)} \beta_n, \\ \gamma_{n+1} = -\frac{2}{n+1} \frac{\ell + n + 1}{(2\ell + 2n + 3)(2\ell + 2n + 2)} \gamma_n. \quad (21)$$

Вследствие этих соотношений

$$\alpha_1 = \frac{2}{(2\ell + 3)(2\ell - 1)}, \quad \alpha_2 = \frac{6}{(2\ell + 5)(4\ell^2 - 9)(2\ell - 1)}, \\ \alpha_3 = \frac{20}{(2\ell + 7)(4\ell^2 - 9)(4\ell^2 - 25)(2\ell - 1)}; \\ \beta_1 = \frac{1}{2\ell - 1}, \quad \beta_2 = \frac{\ell - 1}{(2\ell - 1)^2(2\ell - 3)}, \quad \beta_3 = \frac{\ell - 2}{3(2\ell - 1)^2(2\ell - 3)(2\ell - 5)}; \\ \gamma_1 = -\frac{1}{2\ell + 3}, \quad \gamma_2 = \frac{\ell + 2}{(2\ell + 3)^2(2\ell + 5)}, \quad \gamma_3 = -\frac{\ell + 3}{3(2\ell + 3)^2(2\ell + 5)(2\ell + 7)}. \quad (22)$$

Завершим настоящий раздел важным замечанием: оптимальные алгоритмы вычисления коэффициентов a_n, b_n и $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ рядов (13) и (19) основаны на соответствующих рекуррентных соотношениях (14) и (21) и реализуются как последовательное вычисление этих коэффициентов в порядке возрастания их номера n , начиная с $n = 0$.

3. ЛИНЕЙНАЯ ВЕРСИЯ МЕТОДА ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ

Сведем исходную задачу (3)–(5) к следующей системе двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \partial_r c(r; k) &= -k^{-1} V(r) [c(r; k) j_\ell(\rho) - s(r; k) n_\ell(\rho)] n_\ell(\rho), \\ \partial_r s(r; k) &= -k^{-1} V(r) [c(r; k) j_\ell(\rho) - s(r; k) n_\ell(\rho)] j_\ell(\rho), \quad r > 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Затем покажем, что искомые функций c и s подчиняются граничным условиям

$$c(r; k) = 1, \quad s(r; k) = 0, \quad r = 0. \quad (24)$$

Систему (23) можно получить, применив линейную версию метода фазовых функций двумя способами. Первый способ описан в монографии [8] и основан на интегральных представлениях функций c и s через функции j_ℓ, n_ℓ и u_ℓ . Второй способ известен в теории дифференциальных уравнений [15] как метод вариации постоянных коэффициентов. Реализуем этот метод.

Функции j_ℓ и n_ℓ используем в качестве известных решений уравнения (3) в случае выключенного потенциала V . Искомые функции c и s подчиним тождеству Лагранжа

$$j_\ell(\rho) \partial_r c(r; k) - n_\ell(\rho) \partial_r s(r; k) \equiv 0, \quad r \geq 0. \quad (25)$$

Заметим, что из этого тождества следуют два представления:

$$\partial_r s(r; k) = \frac{j_\ell(\rho)}{n_\ell(\rho)} \partial_r c(r; k), \quad \partial_r c(r; k) = \frac{n_\ell(\rho)}{j_\ell(\rho)} \partial_r s(r; k), \quad r \geq 0. \quad (26)$$

Решение u_ℓ задачи (3)–(5) будем искать в виде произведения нормировочного множителя N и вспомогательной функции U :

$$u_\ell(r; k) = N(k) U(r; k), \quad U(r; k) \equiv c(r; k) j_\ell(\rho) - s(r; k) n_\ell(\rho). \quad (27)$$

В уравнении (3) заменим функцию u_ℓ таким произведением. Используя уравнение Риккати–Бесселя (9) и тождество (25), сведем полученное соотношение к уравнению

$$\begin{aligned} \partial_r c(r; k) \partial_\rho j_\ell(\rho) - \partial_r s(r; k) \partial_\rho n_\ell(\rho) &= \\ &= k^{-1} V(r) [c(r; k) j_\ell(\rho) - s(r; k) n_\ell(\rho)]. \end{aligned} \quad (28)$$

Исключим из этого уравнения производную $\partial_r s$. Для этого применим первое из двух равенств (26). Полученное уравнение упростим, используя соотношение Вронского (12). В результате выведем первое из уравнений системы (23). Ее второе уравнение выводится аналогичным способом. Сначала с помощью второго из двух равенств (26) уравнение (28) сводится к уравнению, не содержащему производную $\partial_r c$. Затем показывается, что, благодаря соотношению Вронского (12), полученное уравнение является вторым уравнением системы (23).

Сделаем два важных замечания. Во-первых, выбор граничных условий (24) для компонент c и s не случаен: только при таких условиях произведение (27) имеет нужную асимптотику (4). Во-вторых, при ограничениях (1), наложенных на функцию V , задача Коши (23), (24) однозначно разрешима, компоненты c и s ее решения $\{c, s\}$ являются всюду ($r \geq 0$) непрерывно дифференцируемыми и, следовательно, ограниченными функциями. Это утверждение следует из известных [8] интегральных представлений компонент c и s через функции j_ℓ , n_ℓ и u_ℓ и однозначной разрешимости [10] задачи Шредингера (3)–(5) с условиями (1).

Теперь нетрудно определить множитель $N(k)$, функцию эффективного радиуса (6), парциальные фазу и сечение рассеяния (7) через компоненты c и s .

Сначала найдем асимптотику функции (27) в пределе $r \rightarrow \infty$. В этом пределе функции j_ℓ и n_ℓ имеют асимптотики (17), а компоненты c и s ограничены, поэтому

$$u_\ell(r; k) \sim N(k) c(r; k) \sin(x_\ell) + N(k) s(r; k) \cos(x_\ell), \quad r \rightarrow \infty.$$

Заметим, что полученная асимптотика совпадает с требуемой асимптотикой (5) тогда и только тогда, когда выполняются следующие два предельных соотношения:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} N(k) c(r; k) = \cos \delta_\ell(k), \quad \lim_{r \rightarrow \infty} N(k) s(r; k) = \sin \delta_\ell(k).$$

В силу этих соотношений тангенс фазы рассеяния $\delta_\ell(k)$ определяется формулами

$$\operatorname{tg} \delta_\ell(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} \operatorname{tg} \delta_\ell(r; k), \quad \operatorname{tg} \delta_\ell(r; k) \equiv s(r; k)/c(r; k), \quad (29)$$

а нормировочный множитель можно найти с точностью до знака, используя равенства

$$N(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} N(r; k), \quad N(r; k) \equiv \pm [c^2(r; k) + s^2(r; k)]^{-1/2}. \quad (30)$$

Для определенности выберем верхний знак. Используя соотношения (29), показываем, что функция эффективного радиуса (6) является пределом

$$K(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} K(r; k), \quad K(r; k) \equiv k^{2\ell+1} c(r; k)/s(r; k), \quad (31)$$

а парциальное сечение (7) можно вычислить как предел

$$\sigma_\ell(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} \sigma_\ell(r; k), \quad \sigma_\ell(r; k) \equiv \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \frac{s^2(r; k)}{c^2(r; k) + s^2(r; k)}. \quad (32)$$

Выявим физический смысл компонент $c(r; k)$, $s(r; k)$ и введенных выше функций $\text{tg } \delta_\ell(r; k)$, $N(r; k)$, $K(r; k)$ и $\sigma_\ell(r; k)$. Представление (27) означает, что при любом фиксированном значении аргумента r компоненты $c(r; k)$ и $s(r; k)$ являются амплитудами, с которыми функции Риккати–Бесселя содержатся в функции u_ℓ . Поэтому далее эти компоненты называются амплитудными функциями. В системе уравнений (23) положим потенциал $V(r)$ тождественно равным нулю при всех r , больших некоторого значения r_b , т. е. «обрежем» потенциал $V(r)$ в точке $r = r_b$. Тогда амплитудные функции $c(r; k)$, $s(r; k)$ при всех $r > r_b$, в том числе и при $r = \infty$, будут постоянными и равными их значениям в точке $r = r_b$. Поэтому значения функций $\text{tg } \delta_\ell(r; k)$, $N(r; k)$, $K(r; k)$ и $\sigma_\ell(r; k)$ в этой точке окажутся равными тангенсу фазы, нормировочному множителю, функции эффективного радиуса и парциальному сечению в исследуемом случае обрезанного потенциала. Точку r_b можно выбрать произвольным образом. Следовательно, значения обсуждаемых функции $\text{tg } \delta_\ell(r; k)$, $N(r; k)$, $K(r; k)$ и $\sigma_\ell(r; k)$ в любой фиксированной точке r имеют смысл тангенса фазы, нормировочного множителя, функции эффективного радиуса и парциального сечения для потенциала V , «обрезанного» в этой точке.

4. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

В пределе $k \rightarrow 0$ параметр $1/k$ системы (23) бесконечно возрастет. Поэтому ее численное интегрирование с приемлемой точностью становится сложной вычислительной проблемой. Используя решение $\{c, s\}$ этой системы и представления (27) и (31), нельзя найти явные низкоэнергетические приближения радиальной компоненты u_ℓ и функции эффективного радиуса K . По этим причинам для построения приближений такого типа требуются специальные методы. Один из них, по-видимому самый простой, предлагается ниже.

В системе уравнений (23) и в ее граничных условиях (24) заменим функции $j_\ell n_\ell$, j_ℓ^2 и n_ℓ^2 рядами (13), а амплитудные функции c и s представим в виде искомого разложения

$$c(r; k) = (2\ell - 1)!! \sum_{n=0}^{\infty} k^{2n} c_n(r), \quad s(r; k) = \frac{k^{2\ell+1}}{(2\ell + 1)!!} \sum_{n=0}^{\infty} k^{2n} s_n(r). \quad (33)$$

Получившиеся равенства запишем в виде бесконечных полиномов по четным степеням параметра k . Благодаря линейной независимости системы $\{k^{2n}\}_{n=0}^{\infty}$

степенных функций k^{2n} эти полиномы тождественно равны нулю тогда и только тогда, когда равны нулю все их «коэффициенты», зависящие лишь от переменной r . Применяв это правило, получаем рекуррентную по индексу n цепочку уравнений для компонент c_n и s_n

$$\begin{aligned}\partial_r c_n(r) &= \frac{rV(r)}{2\ell+1} \sum_{p+q=n} r^{2p} [\alpha_s c_q(r) + \beta_p r^{-2\ell-1} s_q(r)], \\ \partial_r s_n(r) &= -\frac{rV(r)}{2\ell+1} r^{2\ell+1} \sum_{p+q=n} r^{2p} [\gamma_p c_q(r) + \alpha_p r^{-2\ell-1} s_q(r)], \quad r > 0,\end{aligned}\tag{34}$$

и находим для этих компонент следующие граничные условия:

$$c_0(r) = 1, \quad c_{n+1}(r) = 0, \quad s_n(r) = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad r = 0.\tag{35}$$

Обсудим строение цепочки краевых задач Коши (34), (35). В отличие от исходной задачи (23), (24) эта цепочка не содержит волновое число k и поэтому называется энергонезависимой. Первая система (34) имеет номер $n = 0$ и является однородной. Каждая последующая система (34) с данным номером $n > 0$ является неоднородной, потому что правые части обеих ее уравнений содержат обе компоненты c_m и s_m решений $\{c_m, s_m\}$ всех предыдущих систем с номером $m = 0, 1, \dots, n-1$. Поясним этот факт более наглядно. Для этого, используя представления (22) коэффициентов α_n , β_n и γ_n , запишем четыре системы (34), $n = 0, 1, 2, 3$, в виде, оптимальном для их численного интегрирования. Для краткости записи аргумент r функций $V(r)$, $c_n(r)$ и $s_n(r)$ не указываем.

Итак, компоненты c_0 и s_0 подчиняются однородной системе уравнений

$$\partial_r c_0 = \frac{V}{2\ell+1} (rc_0 + r^{-2\ell} s_0), \quad \partial_r s_0 = -\frac{V}{2\ell+1} r^{2\ell+1} (rc_0 + r^{-2\ell} s_0),\tag{36}$$

а функции c_1 и s_1 удовлетворяют неоднородной системе уравнений

$$\begin{aligned}\partial_r c_1 &= \frac{V}{2\ell+1} \left[rc_1 + r^{-2\ell} s_1 + \frac{r^2}{2\ell-1} \left(\frac{2}{2\ell+3} rc_0 + r^{-2\ell} s_0 \right) \right], \\ \partial_r s_1 &= -\frac{V}{2\ell+1} r^{2\ell+1} \left[rc_1 + r^{-2\ell} s_1 - \frac{r^2}{2\ell+3} \left(rc_0 - \frac{2}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_0 \right) \right].\end{aligned}\tag{37}$$

Как видно, эта система содержит решение $\{c_0, s_0\}$ предыдущей системы (36).

Далее, функции c_2 и s_2 являются компонентами решения $\{c_2, s_2\}$ совокупности двух неоднородных уравнений: первое из них имеет вид

$$\begin{aligned}\partial_r c_2 &= \frac{V}{2\ell+1} \left\{ rc_2 + r^{-2\ell} s_2 + \frac{r^2}{2\ell-1} \left(\frac{2}{2\ell+3} rc_1 + r^{-2\ell} s_1 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{r^4}{(2\ell-1)(2\ell-3)} \left[\frac{6}{(2\ell+3)(2\ell+5)} rc_0 + \frac{\ell-1}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_0 \right] \right\},\end{aligned}\tag{38}$$

а вторым является уравнение

$$\begin{aligned} \partial_r s_2 = & -\frac{V}{2\ell+1} r^{2\ell+1} \left\{ rc_2 + r^{-2\ell} s_2 - \frac{r^2}{2\ell+3} \left(rc_1 - \frac{2}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_1 \right) + \right. \\ & \left. + \frac{r^4}{(2\ell+3)(2\ell+5)} \left[\frac{\ell+2}{2\ell+3} rc_0 + \frac{6}{(2\ell-1)(2\ell-3)} r^{-2\ell} s_0 \right] \right\}. \quad (39) \end{aligned}$$

Правые части этих уравнений содержат компоненты решений $\{c_0, s_0\}$ и $\{c_1, s_1\}$ обеих предыдущих систем: системы (36) и системы (37).

Система уравнений для функций $c_3(r)$ и $s_3(r)$ так же, как и упомянутые выше системы (37) и (38), (39), состоит из двух уравнений: уравнения

$$\begin{aligned} \partial_r c_3 = & \frac{V}{2\ell+1} \left\{ rc_3 + r^{-2\ell} s_3 + \frac{r^2}{2\ell-1} \left(\frac{2}{2\ell+3} rc_2 + r^{-2\ell} s_2 \right) \right. \\ & + \frac{r^4}{(2\ell-1)(2\ell-3)} \left[\frac{6}{(2\ell+3)(2\ell+5)} rc_1 + \frac{\ell-1}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_1 \right] + \\ & \left. + \frac{r^6}{(2\ell-1)(2\ell-3)(2\ell-5)} \left[\frac{20}{(2\ell+3)(2\ell+5)(2\ell+7)} rc_0 + \frac{1}{3} \frac{\ell-2}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_0 \right] \right\} \quad (40) \end{aligned}$$

и уравнения

$$\begin{aligned} \partial_r s_3 = & -\frac{V}{2\ell+1} r^{2\ell+1} \left\{ rc_3 + r^{-2\ell} s_3 - \frac{r^2}{2\ell+3} \left(rc_2 - \frac{2}{2\ell-1} r^{-2\ell} s_2 \right) + \right. \\ & + \frac{r^4}{(2\ell+3)(2\ell+5)} \left[\frac{\ell+2}{2\ell+3} rc_1 + \frac{6}{(2\ell-1)(2\ell-3)} r^{-2\ell} s_1 \right] + \\ & + \frac{r^6}{(2\ell+3)(2\ell+5)(2\ell+7)} \times \\ & \left. \times \left[-\frac{1}{3} \frac{\ell+3}{2\ell+3} rc_0 + \frac{20}{(2\ell-1)(2\ell-3)(2\ell-5)} r^{-2\ell} s_0 \right] \right\}. \quad (41) \end{aligned}$$

Правые части этих уравнений содержат компоненты решений $\{c_n, s_n\}$, $n = 0, 1, 2$, всех трех предыдущих систем (36)–(39).

Отметим, что при условиях (1) задача Коши (34), (35) однозначно разрешима, все компоненты ее решения $\{c_n, s_n\}_{n=0}^{\infty}$ являются всюду ($r \geq 0$) непрерывно дифференцируемыми и, следовательно, ограниченными функциями:

$$|c_n(r)| < \infty, \quad |s_n(r)| < \infty, \quad n = 0, 1, \dots, \quad r \geq 0. \quad (42)$$

Эти утверждения несложно доказать по индукции, используя при малых и больших значениях аргумента $0 \leq r \leq r_1$ и $r_2 \leq r < \infty$ метод последовательных приближений [16] и применив в промежуточной области $r_1 \leq r \leq r_2$

известную теорему Пеано [15]. Доказательство, выполненное по такой схеме для системы (36), дано в [7].

Теперь исследуем ряды (33). Представим эти ряды в виде разбиений на их конечные ($m < \infty$) подсуммы $c^{(m)}$, $s^{(m)}$ и остаточные члены ${}^{(m)}c$, ${}^{(m)}s$:

$$\begin{aligned} c(r; k) &= c^{(m)}(r; k) + {}^{(m)}c(r; k), & c^{(m)}(r; k) &\equiv \sum_{n=0}^m k^{2n} c_n(r); \\ s(r; k) &= s^{(m)}(r; k) + {}^{(m)}s(r; k), & s^{(m)}(r; k) &= k^{2\ell+1} \sum_{n=0}^m k^{2n} s_n(r). \end{aligned} \quad (43)$$

В задаче (23), (24) заменим функции j_ℓ , n_ℓ и c , s суммами (16) и (43). Затем, используя системы (34) с номерами $n \leq m$, приведем подобные слагаемые. В результате получим систему двух неоднородных дифференциальных уравнений первого порядка для функций ${}^{(m)}c$ и ${}^{(m)}s$, равных нулю в точке $r = 0$. Эту краевую задачу запишем в виде системы двух интегральных уравнений. Применив к такой системе метод последовательных приближений, убедимся в том, что, благодаря соотношениям (1) и (42), верны следующие равномерные относительно аргумента r асимптотические оценки

$$\begin{aligned} {}^{(m)}c(r; k) &= O(k^{2m+2}), & {}^{(m)}s(r; k) &= O(k^{2\ell+2m+3}), \\ m &= 0, 1 \dots; & r &\geq 0; & k &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (44)$$

Следовательно, любые конечные подсуммы $c^{(m)}(r; k)$ и $s^{(m)}(r; k)$ рядов (33) являются низкоэнергетическими ($k \rightarrow 0$) аппроксимациями функций $c(r; k)$ и $s(r; k)$ при любом значении их аргумента $r > 0$, в том числе и в точке $r = \infty$.

Перейдем к выводу и анализу низкоэнергетических приближений функций N , U , u_ℓ и K , порожденных разбиениями (43), (44).

Начнем с исследования строения нормировочного множителя $N(k)$. В определении (30) функции $N(r; k)$ заменим функции $c(r; k)$ и $s(r; k)$ их разбиениями (43), затем положим $r \rightarrow \infty$ и символами c_n и s_n обозначим предельные значения $c_n(\infty)$ и $s_n(\infty)$ компонент $c_n(r)$ и $s_n(r)$, $n \leq m$. В результате множитель $N(k)$ представится функцией аргумента $x = k^2$. Разложив ее в ряд Тейлора с центром в точке $x = 0$, получим

$$\begin{aligned} N(k) &= N^{(m)}(k) + O(k^{2m+2}), \\ N^{(m)}(k) &\equiv [(2\ell - 1)!! c_0]^{-1} \sum_{n=0}^m N_n k^{2n}, & k &\rightarrow 0, \end{aligned} \quad (45)$$

где $N_0 = 1$, а каждый коэффициент N_n , $n > 0$, является конечной суммой дробей, знаменатели которых — целые степени c_0^p , $p \leq 2n$, а числители выражаются через константы c_m и s_m с номерами $m \leq n$.

Например, в случае $\ell = 0$

$$\begin{aligned} N_1 &= -\frac{c_1}{c_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{s_0}{c_0} \right)^2, \\ N_2 &= \frac{3}{8} \left(\frac{s_0}{c_0} \right)^4 + \frac{3}{2} \left(\frac{s_0}{c_0} \right)^2 \frac{c_1}{c_0} - \frac{s_0}{c_0} \frac{s_1}{c_0} + \left(\frac{c_1}{c_0} \right)^2 - \frac{c_2}{c_0}, \end{aligned} \quad (46)$$

а, если $\ell > 0$, то

$$\begin{aligned} N_1 &= -\frac{c_1}{c_0}, \quad N_2 = \left(\frac{c_1}{c_0} \right)^2 - \frac{c_2}{c_0}, \\ N_3 &= 2 \frac{c_1}{c_0} \frac{c_2}{c_0} - \left(\frac{c_1}{c_0} \right)^3 - \frac{c_3}{c_0} - \frac{1}{18} \frac{s_0^2}{c_0^3} \delta_{\ell 1}. \end{aligned} \quad (47)$$

Положив $a \equiv -s_0/c_0$, перепишем приведенные выше равенства в виде наиболее экономичных с вычислительной точки зрения рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned} N_1 &= -\frac{c_1}{c_0} - \frac{1}{2} a^2, \quad N_2 = N_1^2 + a \left[\frac{a}{2} \left(\frac{a^2}{4} + \frac{c_1}{c_0} \right) - \frac{s_1}{c_0} \right] - \frac{c_2}{c_0}, \quad \ell = 0; \\ N_1 &= -\frac{c_1}{c_0}, \quad N_2 = N_1^2 - \frac{c_2}{c_0}, \\ N_3 &= N_1 [2N_2 - N_1^2 + c_3] - \frac{1}{18} \frac{a^2}{c_0} \delta_{\ell 1}, \quad \ell > 0. \end{aligned} \quad (48)$$

Представление (45) означает, что любая конечная сумма $N^{(m)}(k)$ является низкоэнергетическим приближением нормировочного множителя $N(k)$, а точность приближения $N(k) \approx N^{(m)}(k)$ по порядку величины равна $O(k^{2m+2})$.

Теперь исследуем функцию U . В ее определении (27) заменим функции j_ℓ , n_ℓ и c и s соответствующими разбиениями (16) и (43). Приведя подобные слагаемые, выводим следующее асимптотическое представление:

$$\begin{aligned} U(r; k) &= U^{(m)}(r; k) + O(\rho^{\ell+2m+3}), \\ U^{(m)}(r; k) &\equiv \frac{\rho^{\ell+1}}{2\ell+1} \sum_{n=0}^m k^{2n} U_n(r); \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (49)$$

Каждая компонента U_n этого представления является конечной суммой

$$U_n(r) = \sum_{p+q=n} r^{2p} [a_p c_q(r) + b_p r^{-2\ell-1} s_q(r)]. \quad (50)$$

Эта сумма содержит все четные степени аргумента r с показателями, не превышающими $2n$, коэффициенты a_p и b_p , заданные формулами (14), и функции c_q и s_q , $q = 0, 1, \dots, n$. Для примера приведем явные выражения компонент (50), $n = 0, 1, 2, 3$, в виде, наиболее удобном для их вычисления. С этой целью используем явные представления (15) коэффициентов a_n и b_n , а для краткости записи аргумент r функции $U_n(r)$, $c_n(r)$ и $s_n(r)$ не указываем. Компоненты U_0 и U_1 — суммы двух и четырех слагаемых:

$$\begin{aligned} U_0 &= c_0 + r^{-2\ell-1} s_0, \\ U_1 &= c_1 + r^{-2\ell-1} s_1 + \frac{r^2}{2} \left(-\frac{c_0}{2\ell+3} + r^{-2\ell-1} \frac{s_0}{2\ell-1} \right), \end{aligned} \quad (51)$$

компонента U_2 является суммой шести слагаемых:

$$\begin{aligned} U_2 &= c_2 + r^{-2\ell-1} s_2 + \frac{r^2}{2} \left(-\frac{c_1}{2\ell+3} + r^{-2\ell-1} \frac{s_1}{2\ell-1} \right) + \\ &+ \frac{r^4}{8} \left[\frac{c_0}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + r^{-2\ell-1} \frac{s_0}{(2\ell-1)(2\ell-3)} \right], \end{aligned} \quad (52)$$

а компонента U_3 определяется равенством

$$\begin{aligned} U_3 &= c_3 + r^{-2\ell-1} s_3 + \frac{r^2}{2} \left(-\frac{c_2}{2\ell+3} + r^{-2\ell-1} \frac{s_2}{2\ell-1} \right) + \\ &+ \frac{r^4}{8} \left[\frac{c_1}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + r^{-2\ell-1} \frac{s_1}{(2\ell-1)(2\ell-3)} \right] + \\ &+ \frac{r^6}{48} \left[-\frac{c_0}{(2\ell+3)(2\ell+5)(2\ell+7)} + r^{-2\ell-1} \frac{s_0}{(2\ell-1)(2\ell-3)(2\ell-5)} \right]. \end{aligned} \quad (53)$$

Согласно соотношениям (49) любая конечная сумма $U^{(m)}(r; k)$ является низкоэнергетическим приближением функции $U(r; k)$, но лишь в конечной области $0 \leq r \ll 1/k$ изменения ее аргумента r .

Теперь, когда доказаны разбиения (45) и (49), нетрудно вывести соответствующее представление функции u_ℓ , равной по определению (27) произведению NU . Перемножим эти разбиения и введем для краткости записи функции

$$u_{\ell n}(r) \equiv \sum_{p+q=n} N_p U_q(r), \quad n = 0, 1, \dots \quad (54)$$

Полученные соотношения запишем в виде

$$\begin{aligned} u_\ell(r; k) &= u^{(m)}(r; k) + O(\rho^{\ell+2m+3}), \\ u^{(m)}(r; k) &\equiv \frac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} c_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} k^{2n} u_{\ell n}(r); \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (55)$$

Следовательно, любая конечная сумма $u^{(m)}(r; k)$ является низкоэнергетическим приближением функции $u_\ell(r; k)$, но только в области конечных расстояний $0 \leq r \leq r_{max} \ll 1/k$ и в случае сколь угодно малого, но ненулевого волнового числа k .

Аналізу функции $K(r; k)$ уделим особое внимание. Предположим, что компонента $s_0(r)$ не имеет нулей в области $r > 0$. В определении (6) заменим функции c и s суммами (43). Согласно полученному таким образом представлению $K(r; k)$ является функцией двух аргументов: r и $x = k^2$. Разложив эту функцию в ряд Тейлора по аргументу x с центром в точке $x = 0$, получаем равномерную по аргументу r асимптотику

$$\begin{aligned} K(r; k) &= K^{(m)}(r; k) + O(k^{2m+2}), \\ K^{(m)}(r; k) &\equiv \tau \sum_{n=0}^m K_n(r) k^{2n}, \quad r > 0, \quad k \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (56)$$

В этой асимптотике

$$\tau \equiv (2\ell + 1) [(2\ell - 1)!!]^2,$$

каждая функция $K_n(r)$, $n \geq 0$, представляется конечной суммой дробей, знаменатели которых — целые степени $s_0^p(r)$, $p \leq 2n$, а числители выражаются через компоненты $c_m(r)$ и $s_m(r)$ с номерами $m \leq n$. Не указывая аргумент r функций $K_n(r)$, $c_m(r)$ и $s_m(r)$, приведем примеры таких представлений:

$$\begin{aligned} K_0 &= \frac{c_0}{s_0}, \quad K_1 = \left(c_1 - \frac{c_0}{s_0} s_1 \right) \frac{1}{s_0}, \\ K_2 &= \left[c_2 - \frac{c_0}{s_0} s_2 - \frac{s_1}{s_0} \left(c_1 - \frac{c_0}{s_0} s_1 \right) \right] \frac{1}{s_0}, \\ K_3 &= \left\{ c_3 - \frac{c_0}{s_0} s_3 - \frac{s_2}{s_0} \left(c_1 - \frac{c_0}{s_0} s_1 \right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{s_1}{s_0} \left[c_2 - \frac{c_0}{s_0} s_2 - \frac{s_1}{s_0} \left(c_1 - \frac{c_0}{s_0} s_1 \right) \right] \right\} \frac{1}{s_0}. \end{aligned} \quad (57)$$

Введем функции a , r_{eff} , P и Q аргумента r , положив

$$\begin{aligned} a(r) &\equiv -\frac{1}{\tau K_0(r)}, \quad r_{\text{eff}}(r) \equiv 2\tau K_1(r), \\ P(r) &\equiv -\tau \frac{K_2(r)}{r_{\text{eff}}^3(r)}, \quad Q(r) \equiv \tau \frac{K_3(r)}{r_{\text{eff}}^5(r)}. \end{aligned} \quad (58)$$

Используя равенства (57) и (58), представим асимптотику (56) в виде

$$K(r; k) = -\frac{1}{a(r)} + \frac{1}{2} r_{\text{eff}}(r) k^2 - r_{\text{eff}}^3(r) P(r) k^4 + r_{\text{eff}}^5(r) Q(r) k^6 + O(k^8),$$

$$r > 0, \quad k \rightarrow 0, \quad (59)$$

и получим следующие, наиболее экономичные с вычислительной точки зрения, представления функций (58). Приведем их, не указывая аргумент r компонент $c_m(r)$ и $s_m(r)$,

$$a(r) = -\tau \frac{s_0}{c_0}, \quad r_{\text{eff}}(r) = \frac{2}{s_0} \left[\tau c_1 + \frac{s_1}{a(r)} \right],$$

$$P(r) = -\frac{1}{s_0} \left[\tau c_2 + \frac{s_2}{a(r)} - \frac{s_1}{2} r_{\text{eff}}(r) \right] r_{\text{eff}}^{-3}(r), \quad (60)$$

$$Q(r) = \frac{1}{s_0} \left[\tau c_3 + \frac{s_3}{a(r)} - \frac{s_2}{2} r_{\text{eff}}(r) + s_1 r_{\text{eff}}^3(r) P(r) \right] r_{\text{eff}}^{-5}(r).$$

Как упоминалось выше, все функций K_n , а значит и функции a , r_{eff} , P и Q выражаются через конечное число компонент c_m и s_m , причем по предположению функция s_0 не обращается в нуль. Согласно неравенствам (42) все эти компоненты являются всюду ограниченными функциями. Следовательно, все функции K_n , a , r_{eff} , P и Q всюду ограничены, в том числе и в пределе $r \rightarrow \infty$. Поэтому и в асимптотике (59), и в равенствах (60) можно положить $r = \infty$. В результате получится следующее асимптотическое представление функции эффективного радиуса:

$$K(k) = K(\infty; k) = \tau \sum_{n=0}^{\infty} K_n(\infty) k^{2n} = -\frac{1}{a(\infty)} + \frac{1}{2} r_{\text{eff}}(\infty) k^2 -$$

$$- r_{\text{eff}}^3(\infty) P(\infty) k^4 + r_{\text{eff}}^5(\infty) Q(\infty) k^6 + O(k^8), \quad k \rightarrow 0. \quad (61)$$

Выявим физический смысл функций $a(r)$, $r_{\text{eff}}(r)$, $P(r)$ и $Q(r)$. Соотношения (8) и (61) определяют одну и ту же функцию $K(k)$. Следовательно, предельные значения $a(\infty)$, $r_{\text{eff}}(\infty)$, $P(\infty)$ и $Q(\infty)$ обсуждаемых функций являются соответственно длиной рассеяния a , эффективным радиусом r_{eff} , параметром формы P и коэффициентом Q . Далее, в случае потенциала V , «обрезанного» в некоторой точке $r = r_b$, значения функций $a(r)$, $r_{\text{eff}}(r)$, $P(r)$ и $Q(r)$ в точке $r = r_b$ совпадают с их соответствующими значениями в точке $r = \infty$. Поэтому в этом случае асимптотика (8) совпадает с асимптотикой (59), вычисленной в точке $r = r_b$. Следовательно, значения функций $a(r)$, $r_{\text{eff}}(r)$, $P(r)$ и $Q(r)$ в любой выбранной точке $r = r_b$ являются соответственно длиной рассеяния a , эффективным радиусом r_{eff} , параметром формы

P и коэффициентом Q в случае потенциала V , «обрезанного» в этой точке. Поэтому прозрачным физическим смыслом обладают и функции α , β , γ и λ , определенные как

$$\alpha(r) \equiv \frac{a(r)}{a(\infty)}, \quad \beta(r) \equiv \frac{r_{\text{eff}}(r)}{r_{\text{eff}}(\infty)}, \quad \gamma(r) \equiv \frac{P(r)}{P(\infty)}, \quad \lambda(r) \equiv \frac{Q(r)}{Q(\infty)}. \quad (62)$$

Действительно, в любой точке $r = r_b$ значения этих отношений являются относительными вкладами от воздействия потенциала $V(r)$ в выбранной области расстояний $0 \leq r \leq r_b$ в соответствующие коэффициенты a , r_{eff} , P и Q асимптотики (61).

Стоит отметить, что функция $a(r)$ и компоненты $K_n(r)$, $n = 1, 2$, асимптотики (56) являются решениями известных, но нелинейных краевых задач [9]. Например,

$$\tau \partial_r a(r) = \frac{V(r)}{2\ell + 1} r^{-2\ell} [r^{2\ell+1} - \tau a(r)]^2, \quad r > 0; \quad a(0) = 0. \quad (63)$$

Осталось исследовать особый случай, когда функция $s_0(r)$ имеет нуль в некоторой точке $r = b > 0$. Согласно определениям (60) в этой точке функция $a(r)$ обращается в нуль, функция $r_{\text{eff}}(r)$ имеет полюс второго порядка, а функции $P(r)$ и $Q(r)$ обладают нулями третьего и шестого порядков. Из-за указанных особенностей представление (59) функции $K(r; k)$ теряет смысл. В обсуждаемом случае старшим слагаемым низкоэнергетической асимптотики второго из разложений (33) становится слагаемое $k^{2\ell+3} s_1(b)$. Поэтому функция $K(b; k)$ аргумента k не ограничена в пределе $k \rightarrow 0$, но функция

$$\tilde{K}(r; k) \equiv k^{2\ell+3} \text{ctg } \delta_\ell(r; k) = k^{2\ell+3} c(r; k)/s(r; k) \quad (64)$$

в этом пределе при $r = b$ принимает конечное значение $c_0(b)/s_1(b) \neq 0$. Следовательно, если $s_0(b) = 0$, то функция $\tilde{K}(b; k)$ становится функцией эффективного радиуса в случае потенциала V , «обрезанного» в точке $r = b$. Эта функция имеет асимптотику

$$\begin{aligned} \tilde{K}(b; k) = & -\frac{1}{\tilde{a}(b)} + \frac{1}{2} \tilde{r}_{\text{eff}}(b) k^2 - \tilde{r}_{\text{eff}}^3(b) \tilde{P}(b) k^4 + \\ & + \tilde{r}_{\text{eff}}^5(b) Q(b) k^6 + O(k^8), \quad k \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (65)$$

коэффициенты \tilde{a} , \tilde{r}_{eff} , \tilde{P} и \tilde{Q} определяются формулами, которые получаются из соотношений (57) и (58) в результате замены $s_m \rightarrow s_{m+1}$, $m \geq 0$.

Завершим настоящий раздел двумя замечаниями. Поведение функций $r_{\text{eff}}(r)$ и $P(r)$ вблизи точки $r = b$, в которой функция $a(r)$ обращается в нуль, ранее исследовались в рамках нелинейной версии метода фазовых функций [9]. Определение (64) функции эффективного радиуса и ее асимптотика (65) в точке $r = b$ даны впервые.

5. ПРИЛОЖЕНИЯ ПРЕДЛОЖЕННОГО МЕТОДА

Физически важными приложениями предложенного метода являются вычисление параметров a , r_{eff} , P и Q низкоэнергетического рассеяния, анализ вкладов (62) и оценка радиуса действия g потенциала V .

Поясним эти приложения на примере низкоэнергетического рассеяния в системе двух нуклонов, взаимодействующих посредством потенциала Риды с мягким кором [12] в 1S_0 -, 1P_1 - и 1D_2 -состояниях с угловым моментом $\ell = 0, 1, 2$.

Радиальная волновая функция каждого такого состояния является решением u_ℓ задачи (3)–(5), в которой r — расстояние между нуклонами, k и ℓ — волновое число и угловой момент сталкивающихся нуклонов в системе их центра масс, а $V(r)$ — произведение потенциала Риды V^R и известной [12] константы $\hbar^2/m_N = 41,47\text{МэВ} \cdot \text{Фм}^2$, где m_N — средняя масса нуклона. Поэтому в этой системе параметры низкоэнергетического рассеяния двух нуклонов и вклады в эти параметры от потенциала V , включенного в выбранной области расстояний, определяются формулами (60) и (62). Содержащиеся в этих формулах функции c_n и s_n удовлетворяют системам уравнений (36)–(41).

Метод численного интегрирования систем такого типа, позволяющий выполнить расчет с наперед заданной точностью, подробно изложен в работе [7]. Все результаты вычислений, обсуждаемые в настоящем разделе, получены этим методом с шестизначной точностью. В качестве предельных значений $c_n(\infty)$ и $s_n(\infty)$, $n = 0, 1, 2, 3$, использовались соответствующие значения функций $c_n(r)$ и $s_n(r)$ в точке $r = r_{\text{max}} = 100 \text{ Фм}$.

Напомним, что в исследуемых трех ($\ell = 0, 1, 2$) квантовых состояниях потенциал Риды V^R является отталкивающим ($V^R(r) > 0$) в области $[0, r_\ell]$ сравнительно небольших расстояний и притягивающим ($V^R(r) < 0$) на бесконечном полуинтервале $r > r_\ell$, а расстояние r_ℓ , при котором потенциал Риды и обращается в нуль, зависит от ℓ следующим образом: $r_0 \approx 0,64 \text{ Фм}$, $r_1 \approx 1,56 \text{ Фм}$, $r_2 \approx 0,81 \text{ Фм}$. Зависимость потенциала Риды $V^R(r)$ от расстояния r поясняет рис. 1.

Теперь обсудим ожидаемые следствия свойств потенциала Риды. Согласно уравнению (63) производная $\partial_r a$ функции $a(r)$ имеет тот же знак, что и потенциал V . Поэтому функция $a(r)$ в некоторой области $0 < r < r_\ell$ принимает положительные значения, в точке $r = r_\ell$, в которой потенциал Риды равен нулю, достигает своего максимального значения и монотонно убывает при дальнейшем росте аргумента r на полуинтервале $r > r_\ell$. Если на этом полуинтервале потенциал Риды окажется достаточно сильным притягивающим потенциалом, то функция $a(r)$ изменит знак в некоторой точке $r = b_\ell$ и будет отрицательной в области $r > b_\ell$.

Наиболее важный результат наших вычислений заключается в том, что при любом $\ell = 0, 1, 2$ функции $s_0(r)$ и $a(r) \equiv -s_0(r)/c_0(r)$ обращаются

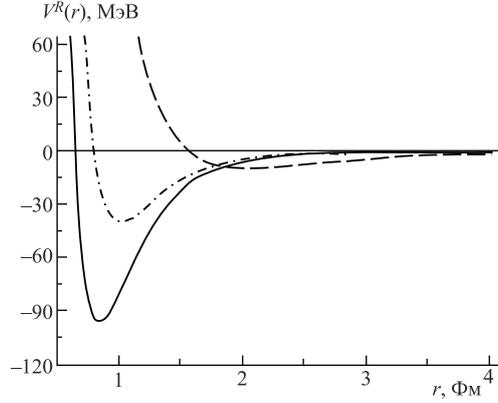


Рис. 1. Потенциал Риды $V^R(r)$ в 1S_0 -, 1P_1 - и 1D_2 -состояниях двух нуклонов с угловым моментом $\ell = 0, 1, 2$: сплошная кривая — $\ell = 0$, штриховая кривая — $\ell = 1$, штрихпунктирная кривая — $\ell = 2$; функция $V_{as}^R(r) \equiv 0$ — сплошная прямая линия

в нуль в соответствующей точке $r = b_\ell$, где $b_0 \approx 1,03$ Фм, $b_1 \approx 2,17$ Фм и $b_2 \approx 1,01$ Фм. Поэтому для потенциала Риды реализуется особый случай, исследованный в конце предыдущего раздела.

В табл.1 собраны вычисленные значения параметров низкоэнергетического рассеяния двух нуклонов в 1S_0 -, 1P_1 - и 1D_2 -состояниях с угловым моментом $\ell = 0, 1, 2$. Коэффициент Q вычислен впервые.

Таблица 1. Параметры a , r_{eff} , P и Q при $\ell = 0, 1, 2$ в соответствующих единицах $\text{Фм}^{2\ell+1}$, $\text{Фм}^{1-2\ell}$, $\text{Фм}^{4\ell}$ и $\text{Фм}^{8\ell}$

ℓ	a	r_{eff}	P	Q
0	-17,1489	2,8072	0,03124	0,03339
1	-4,92094	2,1362	-0,12577	0,12489
2	-1,70778	13,800	-0,00651	-0,00001

Рис. 2. иллюстрирует зависимость вычисленных вкладов (62) от расстояния r между сталкивающимися нуклонами и от их полного углового момента ℓ . Как видно, вклад $\alpha(r)$ принимает отрицательные и положительные значения соответственно при $r < b_\ell$ и $r > b_\ell$, а в случае $r = b_\ell$ равен нулю. Как и ожидалось, вклад $\beta(r)$ неограничен в точке $r = b_\ell$. Графики вкладов $\gamma(r)$ и $\lambda(r)$ подтверждают тот факт, что функции $P(r)$ и $Q(r)$ всюду принимают конечные значения, и иллюстрируют две особенности: наличие у этих функций нулей и локальных экстремумов в области $r > 5$ Фм.

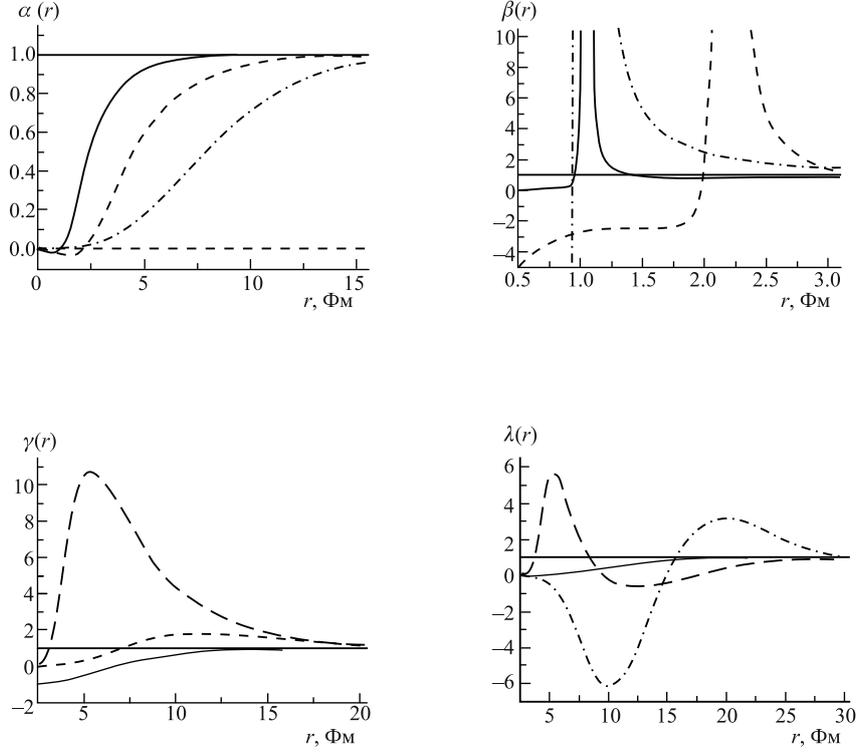


Рис. 2. Вклады (62) как функции расстояния r и углового момента ℓ : сплошная кривая — $\ell = 0$, штриховая кривая — $\ell = 1$, штрихпунктирная кривая — $\ell = 2$; функции $y(r) \equiv 1$ и $z(r) \equiv 0$ — соответственно сплошная и пунктирная прямые линии

Перейдем к оценкам радиуса действия потенциала Риды для каждого параметра низкоэнергетического рассеяния двух нуклонов. Следуя работе [3], определим такой радиус по отношению к функции $f(r) = a(r), r_{\text{эфф}}(r), P(r), Q(r)$ как нижнюю границу $g(f; \ell, \varepsilon)$ области расстояний $r \geq (f; \ell, \varepsilon)$, в которой при наперед заданных значениях углового момента ℓ и относительной точности $\varepsilon < 1$ расчета выполняются условия

$$\begin{aligned} |1 - f(r)/f(\infty)| &= \varepsilon, & r &= g(f; \ell, \varepsilon); \\ |1 - f(r)/f(\infty)| &< \varepsilon, & r &> g(f; \ell, \varepsilon). \end{aligned} \quad (66)$$

Эти условия означают, что относительная точность приближения $f(r) \approx f(\infty)$, равная ε , достигается в точке $r = g(f; \ell, \varepsilon)$, а при дальнейшем увеличении аргумента r относительная точность такого приближения улучшается.

Используя определения (62) относительных вкладов, условия (66) и рис. 2, можно оценить радиус действия $g(f; \ell, \varepsilon)$ потенциала Рида графическим способом.

Например, положив $\ell = 0$ и $\varepsilon = 0, 1$, для функции $f(r) = a(r)$ имеем

$$|1 - a(r)/a(\infty)| = |1 - \alpha(r)| = \varepsilon = 0, 1.$$

Следовательно, $|\alpha(r)| = 0,9$. Используя график функции $\alpha(r)$, изображенный сплошной кривой, получаем, что условие $|\alpha(r)| = 0,9$ выполняется при $r = g(a; 0, 0.1) \approx 4,6$ Фм.

Таблица 2. Радиус действия $g(f; \ell, \varepsilon)$ (Фм) потенциала Рида для параметров $f = a, r_{\text{эфф}}, P, Q$ при $\ell = 0, 1, 2$ и $\varepsilon = 0, 1$

ℓ	$g(a; \ell, \varepsilon)$	$g(r_{\text{эфф}}; \ell, \varepsilon)$	$g(P; \ell, \varepsilon)$	$g(Q; \ell, \varepsilon)$
0	4,62	4,25	13,2	16,1
1	8,49	12,3	21,1	25,4
2	13,4	14,6	22,6	29,2

Значения радиуса действия потенциалов Рида, более точные, чем графические оценки, и вычисленные по формулам (62) и (66), собраны в табл. 2. Как видно, радиус действия существенно зависит от углового момента ℓ и от параметра $f = a, r_{\text{эфф}}, P, Q$, по отношению к которому этот радиус определяется соотношениями (66).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Просуммируем основные результаты настоящей работы. Выведенные в разд. 2 разложения (19) произведения и квадратов функций Риккати–Бесселя дополняют теорию специальных функций [14] экономичными с вычислительной точки зрения представлениями (21) коэффициентов этих рядов. В разд. 3 подробно изложен альтернативный давно известному [8] вывод основных уравнений (23) и соотношений линейной версии метода фазовых функций в теории потенциального рассеяния. В разд. 4 эта версия дополнена новым асимптотическим методом. В этом методе ключевой является рекуррентная цепочка энергонезависимых систем (34): через компоненты ее решения формулами (48), (51)–(54) и (60) выражаются все функции и коэффициенты, содержащиеся в низкоэнергетических приближениях (8) и (55), $m \leq 3$, функции эффективного радиуса и радиальной компоненты волновой функции (2). Три физически важных приложения предложенного метода проиллюстрированы в разд. 5 вычислением и квантово-механическим анализом параметров (60) низкоэнергетического рассеяния в системе двух нуклонов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Pupyshev V. V., Solovtsova O. P.* // Phys. Lett. B. 1995. V. 354. P. 1.
2. *Пупышев В. В., Соловцова О. П.* // ЯФ. 1996. Т. 59. С. 1807.
3. *Pupyshev V. V., Solovtsova O. P.* // Intern. J. Mod. Phys. A. 1992. V. 7. P. 2713.
4. *Pupyshev V. V., Rakityansky S. A.* // Z. Phys. A. 1994. V. 348. P. 227.
5. *Пупышев В. В.* // ЖЭТФ. 2003. V. 124. P. 1222.
6. *Пупышев В. В.* Рассеяние протона атомом водорода в эффективно-двухчастичной модели. Препринт ОИЯИ Р4-2011-123. Дубна, 2011. Принято в ЯФ.
7. *Пупышев В. В.* Протон-водородная реакция в эффективно-двухчастичной модели. Препринт ОИЯИ Р4-2011-129. Дубна, 2011. Принято в ЯФ.
8. *Калоджеро Ф.* Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. Пер. с англ. М.: Мир, 1972.
9. *Бабилов В. В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976.
10. *Де Альфаро В., Редже Т.* Потенциальное рассеяние. Пер. с англ. М.: Мир, 1966.
11. *Тейлор Дж.* Теория рассеяния. Пер. с англ. М.: Мир, 1975.
12. *Браун Дж. Е., Джексон А. Д.* Нуклон-нуклонные взаимодействия. Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1979.
13. *Ферми Э.* Научные труды / Под общей редакцией Б. Понтекорво, М.: Наука, 1971. Т. 1.
14. *Абарамовиц М., Стигун И.* Справочник по специальным функциям. Пер. с англ. М.: Наука, 1979.
15. *Сансоне Дж.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. Пер. с франц. М.: Изд-во иностр. лит., 1953, Т. 1.
16. *Колмогоров А. Н., Фомин С. В.* Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.

Получено 7 сентября 2012 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 09.10.2012.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,69. Уч.-изд. л. 2,06. Тираж 280 экз. Заказ № 57796.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/