

Непрерывный спектр лёгких атомных ядер остаётся интересной и важной проблемой, уже много лет привлекающей внимание теоретиков и экспериментаторов. Объяснение тому простое. Эти ядра, как правило, имеют лишь небольшое число состояний дискретного спектра. Подавляющее число их возбуждённых состояний находится в непрерывном спектре.

Принципиальные трудности, возникающие при исследовании непрерывного спектра, были преодолены сотрудниками нашего отдела. Однако задачи постепенно усложняются и требуется развитие новых подходов, упрощающих использование уже найденных приёмов и создающих условия для изучения всё более сложных ядерных систем.

Тем, кто хотел бы участвовать в исследовании непрерывного спектра лёгких ядер, предлагается несколько задач, решение которых помогло бы проникнуть в "тайны" метода, предложенного сотрудниками отдела структуры атомных ядер. В задачах, представленных далее, максимально упрощаются реальные условия, но так, что принципиальные особенности ядерных систем сохраняются.

Мы будем рассматривать одномерное уравнение Шредингера с потенциальной энергией притяжения гауссовского типа:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \exp(-\alpha x^2) \right\} \Psi(x) = E \Psi(x); \quad \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} = \hat{T}, \quad -\exp(-\alpha x^2) = V(\hat{x}).$$

Вместо того, чтобы решать дифференциальное для волновой функции $\Psi(x)$ уравнение, мы представим эту функцию в виде ряда - разложения по полиномам Эрмита

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(x), \quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

и сведём задачу к системе алгебраических уравнений для коэффициентов разложения C_n .

Вопросы:

1. Найти матричные элементы оператора кинетической энергии

$$\langle n | \hat{T} | \tilde{n} \rangle .$$

Ответ:

В единицах

$$\frac{\hbar^2}{mr_0^2},$$

где r_0 - осцилляторный радиус,

$$\langle 2n | \hat{T} | 2\tilde{n} - 2 \rangle = -\frac{\sqrt{2n(2n-1)}}{4}, \quad \langle 2n | \hat{T} | 2\tilde{n} \rangle = n + \frac{1}{4},$$

$$\langle 2n | \hat{T} | 2\tilde{n} + 2 \rangle = -\frac{\sqrt{(2n+2)(2n+1)}}{4}.$$

2. С помощью производящей функции для полиномов Эрмита найти матричные элементы оператора потенциальной энергии

$$\langle 2n | \hat{V}(x) | 2\tilde{n} \rangle .$$

Ответ:

$$\langle 2n | \hat{V}(x) | 2\tilde{n} \rangle = V_0 z^{1/2} (-1+z)^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!}} {}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{z}{1-z} \right)^2 \right\},$$

где

$$\frac{1}{z} = 1 + \frac{r_0^2}{b_0^2},$$

r_0 - осцилляторная длина, а b_0 - радиус гауссовского потенциала.

3. Объяснить, как выводится система уравнений

$$\sum_{\tilde{n}}^{\infty} \langle n | \hat{H} | \tilde{n} \rangle C_{\tilde{n}} = EC_n, \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

4. Показать, что при $n \gg 1$ уравнения для коэффициентов C_{2n} упрощаются

и принимают вид

$$\frac{4n+1}{4} (C_{2n-2} - 2C_{2n} + C_{2n+2}) - \frac{1}{2} (C_{2n+2} - C_{2n-2}) - \frac{1}{4} \frac{1}{4n+1} C_{2n} + 2EC_{2n} = 0.$$

5. Проследить за тем, как последнее уравнение становится дифференциальным уравнением второго порядка

$$\left(\frac{4n+1}{4} \frac{d^2}{dn^2} - \frac{d}{dn} - \frac{1}{4} \frac{1}{4n+1} + 2E \right) C(n) = 0,$$

и показать, что решениями этого уравнения являются функции Бесселя и Неймана - $J_{1/2}(\sqrt{2E(4n+1)})$ и $N_{1/2}(\sqrt{2E(4n+1)})$.

Результат этого анализа - явный вид коэффициентов $C(n)$ при больших значениях n .

6. Уравнение Шредингера в координатном представлении

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \exp(-\alpha x^2) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x)$$

по мере увеличения $|x|$ упрощается и с точностью до экспоненциально малых величин становится волновым уравнением свободного движения

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x).$$

В дискретном представлении (иногда его называют энергетическим представлением) в силу принципа соответствия между дискретным и континуальным представлениями должно происходить то же самое и потому в пределе больших значений n следует ожидать предельный переход от уравнений

$$\sum_{\tilde{n}}^{\infty} \langle n | \hat{H} | \tilde{n} \rangle C_{\tilde{n}} = EC_n$$

к уравнениям

$$\sum_{\tilde{n}}^{\infty} \langle n | \hat{T} | \tilde{n} \rangle C_{\tilde{n}} = EC_n.$$

Используя полноту базиса полиномов Эрмита и поведение полиномов Эрмита при $n \gg 1$, показать, что этот предельный переход справедлив также с точностью до экспоненциально малых величин, если только осцилляторная длина много меньше радиуса взаимодействия нуклонов.

Для решения последней задачи уместно использовать следующие формулы.

Во-первых, условие полноты.

$$\sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} \psi_{2\tilde{n}}(x)\psi_{2\tilde{n}}(x') = \frac{1}{2}\delta(x-x');$$

Во-вторых, волновую функцию свободного движения.

$$\Psi(x) = \sin \sqrt{2Ex} + \tan \delta \cos \sqrt{2Ex}.$$

Наконец, предельное соотношение при $n \gg 1$.

$$\psi_{2n}(x) = \psi_{2n}|x|^{1/2} \frac{1}{|x|^{1/2}} \rightarrow \delta(|x| - \sqrt{4n+1}) \frac{1}{\sqrt[4]{4n+1}}.$$

$$\langle 2n|V|2\tilde{n} \rangle = \int \psi_{2n}(x)V(x)\psi_{2\tilde{n}}dx.$$

$$\frac{1}{2} \int \psi_{2n}(x)V(x)\Psi(x)dx = \frac{1}{2} \int \psi_{2n}(x)|x|^{1/2} \frac{1}{|x|^{1/2}} V(x)\Psi(x)dx =$$

$$= \int \delta(\sqrt{4n+1} - |x|) \frac{1}{|x|^{1/2}} V(x)\Psi(x)dx =$$

$$= \int \delta(\sqrt{4n+1} - x) V(x) dx \left\{ \frac{\sin \sqrt{2E}\sqrt{4n+1}}{\sqrt[4]{4n+1}} + \operatorname{tg} \delta \frac{\cos \sqrt{2E}\sqrt{4n+1}}{\sqrt[4]{4n+1}} \right\}$$

$$V(x) = \exp\left(-\frac{r_0^2}{b_0^2}x^2\right); \quad \psi_{2n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}\sqrt{\pi}} H_{2n}(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Все предложенные упражнения могут научить тех, кто хотел бы научиться, сводить поставленную задачу к максимально простой, сохранив её главное содержание в условиях, когда выводы становятся прозрачными и понятными даже для "человека с улицы".

Дополнительные вопросы и замечания.

1. Производящая функция для полиномов Эрмита:

$$\frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}Rx - \frac{R^2}{2}\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n \frac{1}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Эта производящая функция каждому из полиномов Эрмита

$$\frac{1}{\sqrt{2^n n!}\sqrt{\pi}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

ставит в соответствие его образ

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} R^n, \quad R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\eta),$$

определённый в пространстве Фока-Баргманна. Показать, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{n!} R^n S^n \exp(-RS) \frac{d\xi d\eta}{2\pi} = 1, \quad S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - i\eta).$$

В таком случае обычно говорят, что интегрирование выполняется с мерой Баргманна. Несомненно, образ проще оригинала, а его замечательная особенность состоит в том, что он является целой аналитической функцией комплексной переменной R .

Производящую функцию можно рассматривать в качестве ядра интегрального преобразования, осуществляющего переход от координатного представления к представлению Фока-Баргманна. В свою очередь ядром обратного преобразования, восстанавливающего оригинал по его образу, является выражение

$$\frac{1}{\pi^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}Sx - \frac{S^2}{2} \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} S^n \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp \left(-\frac{x^2}{2} \right).$$

Нередко это ядро, как и ядро перехода от оригинала к изображению, называют модифицированной орбиталью Блоха-Бринка.

Чтобы привыкнуть к гипергеометрической функции и проверить расчёты, проводимые с ней, можно использовать упрощение, возможное в случае, когда $z = 1/2$, а

$$\left(\frac{z}{1-z} \right)^2 = 1.$$

В этом случае

$${}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{z}{1-z} \right)^2 \right\} = {}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; 1 \right\} = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(n + \tilde{n} + 1/2)}{\gamma(n + 1/2)\Gamma(\tilde{n} + 1/2)}.$$

Тогда для $z = 1/2$ справедливо такое выражение

$$\langle 2n|\hat{V}|2\tilde{n}\rangle = V_0 1\sqrt{2} \left(-\frac{1}{2}\right)^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!} \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(n+\tilde{n}+1/2)}{\gamma(n+1/2)\Gamma(\tilde{n}+1/2)}}.$$

И новое выражение и старое должны дать одинаковое значение матричного элемента, если $z = 1/2$.

Некоторые общие положения, касающиеся представления Фока-Баргманна.

Собственная функция оператора координаты \hat{x} в представлении Фока-Баргманна:

$$\Psi_x(R) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}Rx - \frac{R^2}{2}\right\}.$$

Она же является производящей функцией для ортонормированного базиса одномерного гармонического осциллятора в координатном представлении, т.е.

$$\Psi_x(R) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Оператор координаты

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial R} + R\right).$$

Собственная функция оператора импульса \hat{k} в том же представлении:

$$\Psi_k(R) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left\{-\frac{k^2}{2} + i\sqrt{2}Rk + \frac{R^2}{2}\right\}.$$

В то же время она является производящей функцией для ортонормированного базиса одномерного гармонического осциллятора в импульсном представлении:

$$\Psi_k(R) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n \frac{i^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Оператор импульса

$$\hat{k} = -i \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial R} - R \right).$$

Убедиться в том, что

$$\hat{x}\Psi_x(R) = x\Psi_x(R); \quad \hat{k}\Psi_k(R) = k\Psi_k(R).$$

Как нормированы функции $\Psi_x(R)$ и $\Psi_k(R)$? Показать, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{x'}(S) \Psi_x(R) \exp(-RS) \frac{d\xi d\eta}{2\pi} = \delta(x - x');$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'}(S) \Psi_k(R) \exp(-RS) \frac{d\xi d\eta}{2\pi} = \delta(k - k').$$

Производящий матричный элемент для парциальных матричных элементов оператора потенциальной энергии гауссовского взаимодействия в координатном представлении.

$$\Psi_x(S) \hat{V}(x) \Psi_x(R) = V_0 \frac{1}{\pi^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{z} x^2 + \sqrt{2}(R+S)x - \frac{R^2}{2} - \frac{S^2}{2} \right\}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_x(S) \hat{V} \Psi_x(R) dx = V_0 z^{1/2} \exp \left\{ zRS - \frac{1-z}{2}(R^2 + S^2) \right\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} V_0 z^{1/2} (-1+z)^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!}} {}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{z}{1-z} \right)^2 \right\} \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} R^{2n} \frac{1}{\sqrt{(2\tilde{n})!}} S^{2\tilde{n}} + \dots; \quad \frac{1}{z} = 1 + \frac{r_0^2}{b_0^2}.
\end{aligned}$$

Потенциал Гаусса в импульсном представлении:

$$\hat{V}(k) = V_0 \frac{b_0}{\sqrt{2r_0}} \exp \left\{ -\frac{b_0^2}{4r_0^2} k^2 \right\}; \quad \frac{1}{\bar{z}} = 1 + \frac{b_0^2}{4r_0^2}.$$

Производящий матричный элемент для парциальных матричных элементов оператора потенциальной энергии гауссовского взаимодействия в импульсном представлении.

$$\Psi_k(S) \hat{V}(k) \Psi_k(R) = V_0 \frac{1}{\pi^{1/2}} \frac{b_0}{\sqrt{2r_0}} \exp \left\{ -\frac{1}{\bar{z}} k^2 + i\sqrt{2}(R-S)k + \frac{R^2}{2} + \frac{S^2}{2} \right\}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(S) \hat{V}(k) \Psi_k(R) dx = V_0 2^{1/2} \sqrt{1-\bar{z}} \exp \left\{ \bar{z} \bar{R} \bar{S} - \frac{1-\bar{z}}{2} (\bar{R}^2 + \bar{S}^2) \right\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} V_0 \sqrt{1-\bar{z}} 2^{1/2} (-1+\bar{z})^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!}} {}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{\bar{z}}{1-\bar{z}} \right)^2 \right\} \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n} \frac{1}{\sqrt{(2\tilde{n})!}} \bar{S}^{2\tilde{n}} + \dots; \quad \bar{R} = iR; \quad \bar{S} = -iS.
\end{aligned}$$

Конечно,

$$\langle 2n | \hat{V}(k) | 2\tilde{n} \rangle = V_0 \sqrt{1-\bar{z}} 2^{1/2} (-1+\bar{z})^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!}} \times$$

$$\times {}_2F_1 \left\{ -n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{\bar{z}}{1-\bar{z}} \right)^2 \right\}.$$

Заслуживает внимания частный случай, когда

$$\bar{z} = \frac{1}{2}$$

и существенно упрощается гипергеометрическая функция. Её аргумент тогда становится равным единице.

Теперь матричные элементы оператора кинетической энергии:

$$\begin{aligned} \hat{T}(k) \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n} &= -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{R}} - \bar{R} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n} = \\ &= -\frac{2n(2n-1)}{4} \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n-2} + \left(n + \frac{1}{4} \right) \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n} - \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \bar{R}^{2n+2}. \\ \langle 2n | \hat{T}(k) | 2n-2 \rangle &= -\frac{\sqrt{2n(2n-1)}}{4}; \quad \langle 2n | \hat{T}(k) | 2n \rangle = n + \frac{1}{4}; \\ \langle 2n | \hat{T}(k) | 2n+2 \rangle &= -\frac{\sqrt{(2n+2)(2n+1)}}{4}. \end{aligned}$$

Список литературы

- [1] Filippov G.F., "On taking into account correct asymptotic behavior in the oscillator-basis expansion" Sov.J.Nucl.Phys. **33**, 488-489 (1981)

- [2] Filippov G.F. et al., Few-Body Systems **33**,173 (2003)
- [3] Filippov G.F., Lashko Yu.A., Phys. Rev. C 70 (2004) 064001
- [4] Moshinsky M., Smirnov Yu.F. The Harmonic Oscillator in Modern
Physics

Contemporary Concepts in Physics.