

УДК 539.12.01
PACS number(s): 21.45.Bc

ПРО ВУЗЛИ ХВИЛЬНОЇ ФУНКЦІЇ ДЕЙТРОНА

І. Гайсак, В. Жаба

*Ужгородський національний університет
кафедра теоретичної фізики
вул. Волошина, 54, 88000 Ужгород, Україна
e-mail: viktorzh@meta.ua*

У рамках потенціальної моделі детально проаналізовано структуру радіальної хвильової функції дейтрона. Показано, що фізичне рішення крайової задачі можна побудувати із двох незалежних рішень зв'язаної системи рівнянь Шредінгера, асимптотика яких визначається повним моментом системи та характером поведінки тензорного потенціалу на початку координат. Наявність такої обумовленості асимптотики від виду тензорного потенціалу суттєво відрізняє задачу із зв'язаними каналами від задачі з одиничним рівнянням Шредінгера. Продемонстровано, що правильне визначення асимптотики хвильової функції може спричинювати генерацію надлишкових вузлів. У науковій літературі є публікації, в яких хвильова функція дейтрона має один або два вузли.

Ключові слова: потенціальна модель, зв'язані канали, дейтрон, метод Рунге–Кутта, вузли функції.

У потенціальній моделі дейтрон описують системою двох зв'язаних рівнянь Шредінгера, що відповідають двом радіальним компонентам хвильової функції $u(r)$ та $w(r)$ для орбітальних моментів $L=0$ та $L=2$. У певних працях одна [1] (Боннський потенціал), або обидві [2] (Московський потенціал) компоненти хвильової функції мають вузли поблизу початку координат. На рис. 1 і 2 наведено відповідні хвильові функції для так званих Бонського та Московського потенціалів. Але така поведінка хвильової функції суперечить загальній математичній теоремі про число вузлів власних функцій крайових задач [3]. Основному стану системи відповідає функція без вузлів в середині інтервалу крайової задачі. Наявність вузлів у хвильових функціях основного (і єдиного) стану дейтрона може свідчити про існування певних неузгодженостей у реалізації чисельних алгоритмів, які застосовуються в подібних завданнях. Зазвичай, у наукових публікаціях опускається багато подробиць щодо конкретної реалізації того чи іншого алгоритму. Тому неможливо вказати на точну причину некоректності отриманих рішень.

У нашій статті ми аналізуємо відмінність побудови рішень задач квантової механіки, що зводяться до системи зв'язаних рівнянь Шредінгера від задач з одиничним рівнянням Шредінгера і вказуємо на можливу причину появи надлишкових вузлів хвильової функції дейтрона.

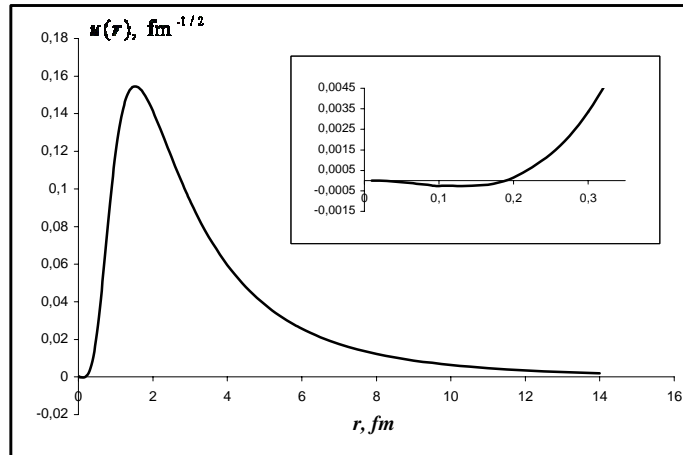


Рис. 1. Хвильова функція дейтрона Боннського потенціалу [1]

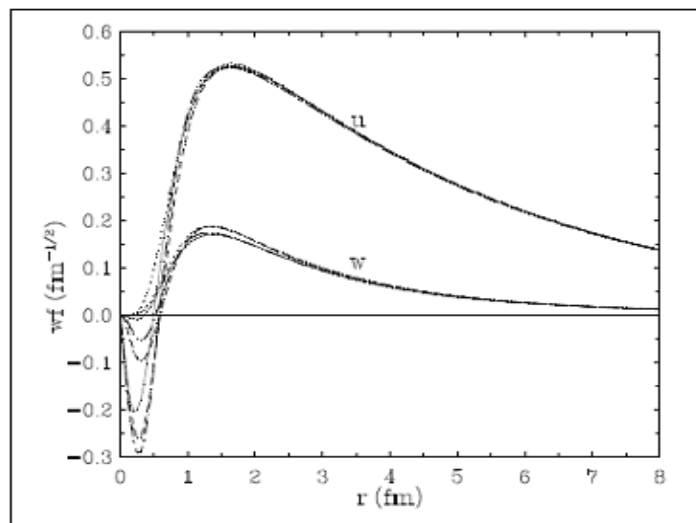


Рис. 2. Хвильові функції дейтрона Московського потенціалу [2]

Наведемо добре відому схему побудови рішення радіального рівняння Шредінгера (див., наприклад, [4]). Рівняння

$$v'' + \left(k^2 - \frac{L(L+1)}{r^2} - U(r) \right) \cdot v = 0, \quad (1)$$

можна шукати у виді ряду Тейлора

$$v(r) = r^s \cdot (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots), \quad (2)$$

де s визначається із квадратного характеристичного рівняння і набуває значення $s = (L+1, -L)$, якщо потенціал задовольняє умову

$$U(r) \sim \frac{1}{r^\varepsilon}, \quad \varepsilon < 2. \quad (3)$$

Оскільки хвильова функція повинна задовольняти крайові умови:

$$v(0) = v(\infty) = 0, \quad (4)$$

тому із двох незалежних рішень рівняння (1)

$$v_1(r) \sim r^{L+1}, \quad v_2(r) \sim r^{-L},$$

тільки перше рішення береться для побудови вирішення крайової задачі (1), (4).

Дейтрон (повний момент $J=1$, сумарний спин нуклонів $S=1$) описують двокомпонентною хвильовою функцією [5]

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} \mathfrak{Y}_{101}^M(\theta, \varphi) + \frac{w(r)}{r} \mathfrak{Y}_{121}^M(\theta, \varphi), \quad (5)$$

де $\mathfrak{Y}_{LS}^M(\theta, \varphi)$ – спин-орбітальна складова, $u(r)$ – радіальна функція для орбітального моменту $L=0$, $w(r)$ – радіальна функція для орбітального моменту $L=2$.

Загалом потенціал NN – взаємодії має структуру:

$$U(r) = U_c(r) + U_{nc}(r), \quad (6)$$

де $U_c(r)$ – центральна частина потенціалу, $U_{nc}(r)$ – нецентральна частина потенціалу.

До складу потенціалу $U_{nc}(r)$ входять такі нецентральні члени: $U_T(r) \cdot \vec{S}_{12}$ – тензорний;

$U_{SS}(r) \cdot (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2)$ – спин-спіновий;

$U_{LS}(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}) + U_{LS}(r) \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}_-)$ – спин-орбітальний.

У рівнянні Шредінгера для хвильової функції (5) з потенціалом (6) є системою зв'язаних рівнянь для радіальних функцій u і w

$$\begin{cases} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(k^2 - U_1(r)\right) \cdot u(r) = \sqrt{8} \cdot U_T(r) \cdot w(r) \\ \frac{d^2 w}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{6}{r^2} - U_2(r)\right) \cdot w(r) = \sqrt{8} \cdot U_T(r) \cdot u(r) \end{cases}, \quad (7)$$

де U_1 – потенціал каналу $L=0$, U_2 – потенціал каналу $L=2$, U_T – тензорна компонента NN-взаємодії.

На радіальні функції накладаються звичайні крайові умови:

$$\begin{aligned} u(0) = 0, \quad u(\infty) = 0, \\ w(0) = 0, \quad w(\infty) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Накладемо на потенціали умови аналогічні (3)

$$\begin{aligned} U_{1,2}(r) &\sim \frac{1}{r^\varepsilon} && \varepsilon < 2 \\ U_T(r) &\sim \frac{1}{r^n} && n < 2. \end{aligned} \quad (9)$$

Систему двох рівнянь другого порядку (7) зручно звести до одного рівняння четвертого порядку і аналогічно (2) шукати рішення у вигляді

$$\begin{aligned} u(r) &= r^s \cdot (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots) \\ s &= (J + 4 - n, J, 1 - J, 1 - J - n) \end{aligned} \quad (10)$$

Характеристичне рівняння має чотири рішення

$$\begin{aligned} u(r) &= r^s \cdot (a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots) \\ s &= (J + 4 - n, J, 1 - J, 1 - J - n) \end{aligned} \quad (11)$$

Зазначимо, що у випадку зв'язаних каналів незалежні розв'язки визначаються не лише моментом системи J , але і зв'язуючим потенціалом (параметр n).

Знаходячи функцію w із першого рівняння системи (7) згідно (10) і (11), отримаємо чотири незалежні розв'язки

$$\left(\begin{matrix} u_1(r) \sim r^{J+4-n} \\ w_1(r) \sim r^{J+2} \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} u_2(r) \sim r^J \\ w_2(r) \sim r^{J+2-n} \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} u_3(r) \sim r^{1-J} \\ w_3(r) \sim r^{3-J-n} \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} u_4(r) \sim r^{1-J-n} \\ w_4(r) \sim r^{-1-J} \end{matrix} \right). \quad (12)$$

Перші два розв'язки регулярні в нулі і задовольняють першу крайову умову (8). Повний розв'язок системи, що задовольняє другу крайову умову (8), є суперпозицією перших двох незалежних розв'язків:

$$u(r) = Au_1(r) + Bu_2(r),$$

$$w(r) = Aw_1(r) + Bw_2(r).$$

Так, у випадку $J=1, n=1$ матимемо

$$u_1(r) \sim r^4, \quad w_1(r) \sim r^3,$$

$$u_2(r) \sim r, \quad w_2(r) \sim r^2,$$

тобто $u(r) \sim r, w(r) \sim r^2$.

Отже, асимптотика компонент рішення системи рівнянь вже не визначається орбітальним числом L , як у випадку з розв'язками рівняння Шредінгера, а зумовлено повним орбітальним моментом J і тензорним потенціалом, який забезпечує зв'язування рівнянь Шредінгера в систему (7). Тобто, у випадку зв'язаних каналів твердження "S-хвиля має асимптотику r , а D-хвиля r^2 " не завжди може бути слушним.

Задача на розсіяння така ж, як і задачі на зв'язані стани (7), (8) із невеликими замінами, а саме, заміною в (7) $k^2 \rightarrow -k^2$ і заміною крайових умов на

$$\begin{aligned} u(0) &= 0 & u(r \rightarrow \infty) &\rightarrow \sin(kr + \delta_0) \\ w(0) &= 0 & w(r \rightarrow \infty) &\rightarrow \sin(kr - \pi + \delta_2) \end{aligned}$$

Все, що належить до незалежних розв'язків та їх асимптотика, збігається з (12).

Розглядаючи задачу нейтрон-протонного розсіяння у триплетному стані ми користувалися потенціалом Ріда ($J=1, n=-1$) [6] і отримали таку асимптотику двох розв'язків, регулярних в нулі

$$\begin{aligned} u_1(r) &= r^6 (a_0 + a_1 r + \dots) \\ w_1(r) &= r^3 (b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + \dots) \\ u_2(r) &= r (c_0 + c_1 r + c_2 r^2 + c_3 r^3 + c_4 r^4 + c_5 r^5 + c_6 r^6 + \dots) \\ w_2(r) &= r^3 (d_0 + d_1 r + \dots) \end{aligned} \quad (13)$$

Коефіцієнти a_i, b_i, c_i та d_i визначаються через параметри потенціалів.

Ми знаходили чисельні рішення системи рівнянь (7) методом Рунге–Кутта четвертого порядку [7]. Оскільки деякі потенціали сингулярні в нулі, формули (13) використовуються для обчислення невизначеностей типу $\frac{0}{0}$. У налагодженні програми було допущено помилкові формули для коефіцієнтів функцій (13), що призвело до дуже швидкої осциляції функції u_2 (рис. 3).

Виправивши помилки, одержуємо “розумну” поведінку радіальної функції (рис. 4).

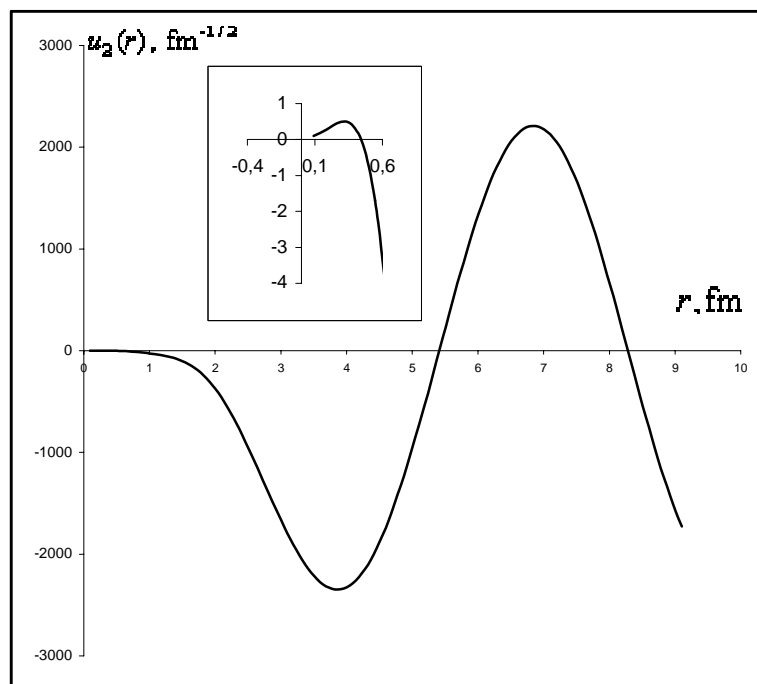


Рис. 3. Хвильова функція з неправильними крайовими умовами

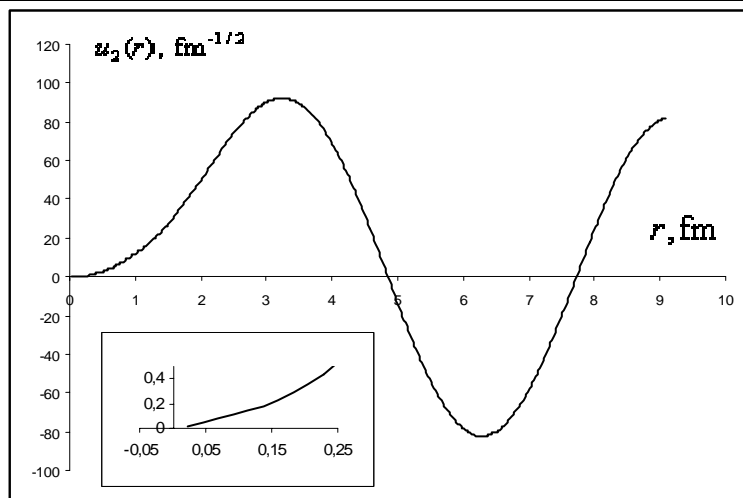


Рис. 4. Хвильова функція з коректними крайовими умовами

Різницю в чисельних значеннях коефіцієнтів, що спричиняють таку поведінку, наведено нижче.

Правильне задання параметрів асимптотики хвильових функцій:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 1 \\
 a_1 &= -2,869 \\
 b_0 &= -0,263 \\
 b_1 &= 0 \\
 b_2 &= 0,3484 \\
 c_0 &= 1 \\
 c_1 &= 0 \\
 c_2 &= 20,8 \\
 c_3 &= -28,29 \\
 c_4 &= 106,4 \\
 c_5 &= 0 \\
 d_0 &= -58,77 \\
 d_1 &= -19,01
 \end{aligned}$$

Неправильне задання параметрів асимптотики хвильових функцій:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 1 \\
 a_1 &= -2,85 \\
 b_0 &= -0,03287 \\
 b_1 &= 0 \\
 b_2 &= -0,4153 \\
 c_0 &= 1 \\
 c_1 &= 0 \\
 c_2 &= 20,8 \\
 c_3 &= -28,29 \\
 c_4 &= 106,4 \\
 c_5 &= 0 \\
 d_0 &= -7,347 \\
 d_1 &= -152,1
 \end{aligned}$$

На звершення ще раз зазначимо, що в задачах на зв'язані канали асимптотики радіальних функцій залежать від виду зв'язуючого потенціалу і можуть не відповідати асимптотиці функцій задачі з одиничним рівнянням Шредінгера. Відповідно, вибрані неправильні асимптотики радіальних каналних функцій можуть генерувати надлишкові вузли.

1. *Machleidt R.* The high-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential (CD-Bonn) // *Phys. Rev.* 2001. Vol. C63. 024001 p.
2. *Kukulin V., Pomerantsev V., Faessler Amand et al.* Moscow-type NN-potentials and three-nucleon bound states // *Phys. Rev.* 1998. Vol. C57. 535 p.
3. *Курант Р., Гильберт Д.* Методы математической физики. М: Госиздат, 1951.
4. *Вакарчук І. О.* Квантова механіка. Львів: ЛДУ ім. І.Франка, 1998. 616 с.
5. *Бу Та- Ю, Омур Такаши.* Квантовая теория рассеяния. М.: Наука, 1969.
6. *Stoks V.G.J., Klomp R.A.M., Terheggen C.P.F. et al.* Construction of high quality NN potential models // *Phys. Rev.* 1994. Vol. C49. P. 2950–2962.
7. *Schmid E.W., Spitz G., Losch W.* Theoretical Physics on the Personal Computer. Springer Verlag, 1990.

ON THE NODS OF THE DEUTERON WAVE FUNCTION

I. Haysak, V. Zhaba

*Uzhgorod National University, Department of Theoretical Physics
Voloshyna Str., 54, UA-88000 Uzhgorod, Ukraine*

The detailed analysis of structure of the deuteron wave function in the frame of potential model is realized. It is shown that the physical solution of the two point boundary problem can be build by two independent function of the system of two Schoedinger equations. The asymptotic behavior of this function is caused by total momentum of the system and asymptotic behavior of tensor potential in the origin. This dependency of the asymptotic from tensor potential distinguishes the problem with coupled channels from single Schroedinger equation problem. It is shown that input of incorrect asymptotic of wave function could generate additional nodds of the solution. But some publications contain results where wave function of the deuteron has additional nodds near the origin.

Key words: potential model, coupled channels, deuteron, Runge-Kutta method, nodds.

ОБ УЗЛАХ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ДЕЙТРОНА

І. Гайсак, В. Жаб

*Ужгородський національний університет
кафедра теоретическої фізики
ул. Волошина, 54, 88000 Ужгород, Україна*

В рамках потенціальної моделі детально проаналізована структура радіальної хвальної функції дейтрона. Показано, що фізическе рішення крайової задачі можна побудувати із двох незалежних рішень зв'язаної системи рівнянь Шредингера, асимптотика котрих визначається повним моментом системи і характером поведіння тензорного потенціала в началі координат. Наявність такої обумовленості асимптотики від виду тензорного потенціала суттєво відрізняє задачу зв'язаними каналами від задачі з єдиничним рівнянням Шредингера. Продемонстриовано, що некорректне визначення асимптотики хвальної функції

может вызывать генерацию избыточных узлов. В научной литературе есть публикации, в которых волновая функция дейтрона имеет один или два узла.

Ключевые слова: потенциальная модель, связанные каналы, дейтрон, метод Рунге–Кутты, узлы функции.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2008

Прийнята до друку 20.07.2009