

Литература

1. Келдыш Л.В. // ЖЭТФ. 1964. **47**. С. 1945.
2. Переломов А.М., Попов В.С., Терентьев М.В. // ЖЭТФ. 1966. **50**. С. 1393; **51**. С. 309.
3. Никишов А.И., Ритус В.И. // ЖЭТФ. 1966. **50**. С. 255.
4. Никишов А.И., Ритус В.И. // Тр. ФИАН. 1979. **111**. С. 84; **168**. С. 232.
5. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Атом в сильном световом поле. М.: Атомиздат, 1978.
6. Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.П. Теория многофотонных процессов в атомах. М.: Атомиздат, 1978.
7. Попов В.С., Карнаков Б.М., Мур В.Д. // ЖЭТФ. 1998. **113**. С. 1579.
8. Мур В.Д., Попов В.С., Карнаков Б.М. // ЖЭТФ. 1999. **115**. С. 521.
9. Крайнов В.П., Преображенский М.А. // ЖЭТФ. 1993. **103**. С. 1142.
10. Манаков Н.Л., Фролов М.В., Борка Б., Старасе А.Ф. // Письма в ЖЭТФ. 2000. **52**. С. 426.
11. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. // УФН. 1998. **168**. С. 531.
12. Кадышевский В.Г., Родионов В.Н. // ТМФ. 2000. **125**. С. 432.
13. Redmond P.J. // J. Math. Phys. 1965. **6**. P. 1163.
14. Тернов И.М., Халилов В.Р., Родионов В.Н. Взаимодействие заряженных частиц с сильным электромагнитным полем. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982.
15. Родионов В.Н. // ЖЭТФ. 1998. **113**. С. 21.
16. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеивание, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.
17. Друкарев Г.Ф., Монозон Б.С. // ЖЭТФ. 1971. **61**. С. 956.
18. Боголюбов Н.Н., Медведев Б.В., Поливанов М.К. // Вопросы теории дисперсионных отношений. М.: Физматлит, 1958.
19. Родионов В.Н., Мандель А.М. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 3. С. 25 (Moscow University Phys. Bull. 2001. No. 3. P. 28).
20. Мигдал А.Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М.: Наука, 1978.
21. Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М. // Письма в ЖЭТФ. 2002. **75**. С. 435.

Поступила в редакцию
27.02.02

УДК 539.19+539.2

РАСПАД КВАНТОВЫХ СИСТЕМ СО МНОГИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО ИК ИЗЛУЧЕНИЯ

В. В. Комаров, А. М. Попова, И. О. Стурейко, Х. Нейманн*)

(НИИЯФ)

E-mail: stureiko@mail.ru

Рассматриваются квантовые системы, содержащие подструктуры из упорядоченных одинаковых составляющих, которые можно представить квантовыми осцилляторами с двумя энергетическими уровнями. Показано, что коллективное колебательное возбуждение составляющих указанных подструктур приводит к сверхбыстрому транспорту энергии колебаний внутри квантовой системы и к ее распаду. Получено аналитическое выражение для скорости распада квантовой системы со многими степенями свободы в ИК поле. Показано, что процесс распада рассматриваемых систем во внешних полях резонансно зависит от интенсивности поля и от числа тождественных степеней свободы, т. е. числа тождественных составляющих подструктуры.

Введение

В последнее время наблюдается интенсивное исследование многочастичных нерелятивистских систем, таких, как кластеры, J -агрегаты, полиатомные молекулы. Интерес к этим объектам обусловлен тем, что их энергетические свойства, транспорт внутренней энергии и оптические свойства отличаются как от аналогичных свойств систем из нескольких частиц, так и от свойств твердого тела.

В ряде экспериментов было показано, что интенсивность спонтанной эмиссии радиации облученных J -агрегатов пропорциональна квадрату числа их

тождественных составляющих. Кроме того, время суперрадиационного процесса дезактивации J -агрегата оказалось в N раз меньше, чем время распада одной составляющей его молекулы [1–3]. Для объяснения нелинейных оптических эффектов была предложена теория когерентного электронного возбуждения одинаковых N составляющих квантовой системы под действием внешней радиации, если линейные размеры системы оказывались существенно меньше длины волн излучения [4].

В настоящей работе предлагается теоретический метод анализа нестатистических, сверхбыстрых процессов фрагментации под действием ИК-радиации

*) Philipps Universität Marburg, Marburg/Lahn, Germany.

многочастичных нерелятивистских квантовых систем, содержащих линейные подструктуры упорядоченных одинаковых компонент, которые имеют свойства взаимодействующих вибраторов. Присутствие в рассматриваемых системах подструктур указанного вида позволяет применить для анализа их вибрационного энергетического спектра теорию коллективных колебательных состояний. Целью данного исследования было развитие модели, позволяющей на единой основе объяснить, во-первых, возбуждение в многочастичной системе многих независимых когерентных коллективных колебательных состояний под действием внешней ИК-радиации и, во-вторых, быстрый (фемтосекундный) транспорт внутренней энергии этих колебаний, сопровождающийся фрагментацией квантовой системы.

Теоретическая модель

Рассматривается многочастичная квантовая система вида одномерного кристалла, в узлах которого расположено N одинаковых, имеющих нулевой средний заряд электрических диполей, определенных дипольным моментом: $\mathbf{d}_i = \frac{eD_0}{r_0} \mathbf{r}_i$. Здесь r_i и r_0 — переменная и равновесная длины диполя соответственно, eD_0 — величина дипольного момента. Предполагается, что диполь можно аппроксимировать моделью квантового осциллятора, имеющего только основное и первое возбужденное вибрационные состояния с энергиями ε_0 и ε_1 соответственно. Расстояние a между диполями в системе таково, что существенным оказывается только слабое диполь-дипольное взаимодействие между двумя соседними осцилляторами. Матричный элемент этого взаимодействия отличен от нуля при условии, что один из взаимодействующих осцилляторов находится в возбужденном состоянии. Предполагается также, что волновые функции осцилляторов в основном и в первом возбужденном колебательных состояниях имеют вид

$$\varphi_0(r_i) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_0} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r_i^2}{2\alpha_0^2}\right),$$

$$\varphi_1(r_i) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha_0} \sqrt{\pi}} \left(\frac{r_i}{\alpha_0}\right) \exp\left(-\frac{r_i^2}{2\alpha_0^2}\right).$$

Здесь r_i — длина диполя, а $\alpha_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_{01}}}$, μ — приведенная масса диполя, ω_{01} — собственная частота диполя. Для тождественных осцилляторов функции $\varphi_0(r_i)$ и $\varphi_1(r_i)$ не зависят от номера i . Определим волновую функцию квантовой системы, состоящей из N осцилляторов, находящихся в основном состоянии, в виде

$$\Psi_N^0(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \varphi_0(r_i).$$

Если один из N диполей-осцилляторов, номера n , окажется в возбужденном состоянии $\varphi_1(r_n)$,

то волновая функция всей системы может быть представлена в виде

$$\Phi^1(m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \exp\{imna\} \Psi_n^1(r_1, r_2, \dots, r_N),$$

где $\Psi_n^1(r_1, r_2, \dots, r_N) = \varphi_1(r_n) \prod_{i=1, i \neq n}^N \varphi_0(r_i)$.

Здесь $\exp\{imna\}$ — собственные значения оператора трансляции, а величина m принимает значения

$$m = \sum_i \frac{2\pi}{Na} v_i; \quad -\frac{N}{2} \leq v_i \leq \frac{N}{2}. \quad (1)$$

Энергия коллективного колебательного возбуждения линейной системы, состоящей из N осцилляторов в состоянии $\Phi^1(m)$, определяется выражением

$$E(m) = \varepsilon_1 - \varepsilon_0 + E_{tr}(m),$$

$$E_{tr}(m) = \left\langle \Phi^1(m) \left| \sum_{i,j, i \neq j} V_{ij} \right| \Phi^1(m) \right\rangle, \quad (2)$$

где $E_{01} = (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) = \hbar\omega_{01}$, величина $E_{tr}(m)$ определяет энергию, необходимую для передачи колебательного возбуждения от одного осциллятора к другому. Суммирование в (2) ведется по всем номерам осцилляторов $i \neq j$, расположенных на расстоянии a друг от друга.

Потенциал диполь-дипольного взаимодействия имеет вид

$$V_{ij} = \frac{(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) |\mathbf{r}_{ij}|^2 - 3(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{|\mathbf{r}_{ij}|^5}.$$

Здесь \mathbf{d}_i и \mathbf{d}_j — векторы дипольных моментов осцилляторов i и j соответственно. При учете взаимодействия только между соседними диполями $|\mathbf{r}_{ij}| = a$ этот вектор направлен от центра масс осциллятора i к центру масс осциллятора j .

Как правило, первое возбужденное состояние осциллятора является затухающим, тогда энергия этого состояния является комплексной величиной вида $\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 - i\Gamma/2$, где $\Gamma/2$ — полуширина возбужденного уровня. Вычисленная величина энергии трансляции $\tilde{E}_{tr}(m)$ в этом случае оказывается также комплексной:

$$\tilde{E}_{ex}(m) = E_{01} - i\frac{\Gamma}{2} + (\text{Re } E_{tr}(m) - i \text{Im } E_{tr}(m)).$$

Поскольку величина m определяется соотношением (1), то $\text{Re } E_{tr}(m)$ представляет собой полосу из N значений. При этом минимальные значения реальной энергии коллективного колебательного состояния должны определяться соответственно:

$$E_- = (E_{01} - \text{Re } E_{tr}(0)) - i \left(\frac{\Gamma}{2} - \text{Im } E_{tr}(0) \right).$$

В дальнейшем нас будут интересовать коллективные вибрационные возбужденные состояния с

$E_{\text{ex}} = \text{Re } E_- = \hbar\omega_-$, так как они имеют наименьшее время жизни: $\tau_{\text{ex}} = \tau_- = 1/[\Gamma/2 - \text{Im } E_{\text{tr}}(0)]$. Ширина уровня с энергией E_{ex} равна $\Gamma_{\text{ex}} = \Gamma/2 - \text{Im } E_{\text{tr}}(0)$.

Расстояние Δ между уровнями E_{ex} и следующим за ним равно: $\Delta = \text{Re } E_{\text{tr}}(0) \cos \frac{\pi}{N}$.

Отсюда неравенство $\Delta/\Gamma_{\text{ex}} < 1$ означает, что динамическое уширение уровней энергии состояния E_{ex} допускает когерентное возбуждение N осцилляторов, внешним полем имеющим резонансную частоту ω_{ex} , если выполняется неравенство

$$\frac{c}{\omega_{\text{ex}}(aN)} < 1.$$

Если время τ_R действия внешнего периодического поля с частотой ω_{ex} меньше или равно τ_{ex} , то в системе N линейно упорядоченных квантовых осцилляторов возможно без потери энергии возбуждение нескольких K коллективных колебательных состояний. Это означает, что в системе происходит аккумулярование энергии $E(K) = KE_{\text{ex}}$.

Следует отметить, что целая часть (C) отношения $(\tau_R/\tau_{\text{tr}})$ определяет число возбуждений одного осциллятора в течение времени τ_R . Отсюда в накоплении энергии коллективных колебательных возбуждений эффективно участвует $N_{\text{eff}} = CN$ диполей.

Вероятность возбуждения K состояний может быть найдена на основе экспоненциальной формулы Бернулли

$$P_{N_{\text{eff}}}^K = \frac{1}{\sqrt{2\pi N_{\text{eff}} P_{01} (1 - P_{01})}} \exp \left\{ -\frac{(K - N_{\text{eff}} P_{01})^2}{2N_{\text{eff}} P_{01} (1 - P_{01})} \right\},$$

где P_{01} — вероятность возбуждения одного коллективного колебательного состояния в течение времени τ_R . В рамках первого приближения теории возмущений можно определить волновую функцию системы K возбужденных осцилляторов в виде

$$\Psi_N^{\text{ex}} = \prod_{i=1}^K (P_{01} \varphi_1(r_i) + (1 - P_{01}) \varphi_0(r_i)). \quad (3)$$

Энергия, аккумулярованная в результате этих возбуждений, — величина $E(K)$.

Если в линейную систему периодически упорядоченных тождественных осцилляторов включен осциллятор с собственной частотой $\omega_{01}^t = \hbar(E_1^t - E_0^t) \neq \omega_{01}$ и значением дипольного момента $eD_t \neq eD_0$, то такой осциллятор может служить ловушкой накопленной колебательной энергии $E(K)$ в системе. Если энергия $E(K)$ превышает значение E_d , равное энергии связи осциллятора-ловушки, то может произойти его диссоциация. Определим дипольный момент ловушки \mathbf{d}_t в виде $\mathbf{d}_t = eD_t \mathbf{R}_t / R_0$, где R_0 и R_t — средняя и переменная длины связи-ловушки соответственно.

Волновую функцию K когерентно возбужденных осцилляторов и осциллятора-ловушки в основном

состоянии представим в виде

$$\Psi_{(K+t)}^{\text{ex}} = \exp \left\{ -\frac{i [K(\varepsilon_0 - E_{\text{ex}}) + \varepsilon_0^t] t}{\hbar} \right\} \times \Psi_K^{\text{ex}}(r_1, \dots, r_K) \Psi_t^0(R), \quad (4)$$

где $\Psi_t^0(R)$ — волновая функция осциллятора-ловушки вида

$$\Psi_t^0(R) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_t \sqrt{\pi}}} \exp \left\{ -\frac{R^2}{2\alpha_t} \right\},$$

где $\alpha_t = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu_t \omega_{01}^t}}$ и μ_t — приведенная масса осциллятора-ловушки.

Передача энергии $E(K)$ осуществляется за счет диполь-дипольного взаимодействия осцилляторов i из цепи и осциллятора-ловушки. Определим это взаимодействие соотношением

$$V_{it}(R_{it}) = \frac{(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_t)}{R_{it}^3} - 3 \frac{(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{n}_i)(\mathbf{d}_t \cdot \mathbf{n}_i)}{R_{it}^5}, \quad \mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{R}_{it}}{|\mathbf{R}_{it}|}, \quad (5)$$

где R_{it} — расстояние между центрами масс осцилляторов i и осциллятора-ловушки. Обозначим расстояние от центра масс ближайшего к ловушке осциллятора i до центра масс осциллятора-ловушки через b .

Тогда если τ_d , время разрыва связи-ловушки в результате поглощения ею колебательной энергии ($KE_{\text{ex}} \geq E_d$, существенно меньше τ_{tr} , то можно считать, что девозбуждение всех осцилляторов системы происходит за счет взаимодействия их дипольных моментов с дипольным моментом связи-ловушки при $R_{i,t} = b$. При этом вектор \mathbf{n}_i совпадает с вектором $\mathbf{R}_{i't}$, где i' — номер осциллятора линейной подструктуры, центр масс которой располагается на расстоянии b от центра масс осциллятора-ловушки.

Отсюда выражение для вероятности фрагментации рассматриваемой квантовой системы в единицу времени может быть представлено в виде

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \left(\prod_{i=1}^N [a\varphi_0(r_i) + b\varphi_1(r_i)] \right) \Psi_t^{(0)}(R) \right\rangle \times \sum_{i=1}^K V_{i't}(b) \left| \prod_{i=1}^N [\varphi_0(r_i)] \Psi_k(R) \right\rangle \right|^2 \times \int \delta(KE_{\text{ex}} - E_d - E_n) dk. \quad (6)$$

Подстановка функций (3), (4) и (5) в (6) приводит к формуле

$$P(E_k) = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\frac{e^2 D_0 D_t}{r_0 R_0^t b^3} \right]^2 (M_1 M_2)^2 \times \int \delta(E_{\text{ex}} - E_d - E_k) \Phi(\Theta_{it}^l) dk. \quad (7)$$

Здесь $\Phi(\Theta_{it}^l) = \cos \Theta_i^x \cos \Theta_t^x + \cos \Theta_i^y \cos \Theta_t^y - 2 \cos \Theta_i^z \cos \Theta_t^z$, где $\Theta_i^x, \Theta_i^y, \Theta_i^z, \Theta_t^x, \Theta_t^y, \Theta_t^z$ — углы

векторов \mathbf{d}_i и \mathbf{d}_t относительно осей в системе координат, где ось OZ совпадает с направлением $\mathbf{R}_{i't}$.

Величины M_1 и M_2 в (7) заданы интегралами вида

$$M_1 = \int \left(\prod_{i=1}^K [\varphi_0(r_i) + \varphi_1(r_i)] \right) \left(\sum_{i=1}^K r_i \right) \times \left(\prod_{i=1}^K \varphi_0(r_i) \right) d\tau = ab^{N-1} M_{01},$$

$$M_2 = \sqrt{\frac{2}{\alpha_t \pi \sqrt{\pi}}} \int_0^\infty \exp \left\{ -\frac{R_t^2}{2\alpha_t^2} \right\} R \sin kR = \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} k^2 \alpha_t^5 \exp \left\{ -k^2 \alpha_t^2 \right\} \right]^{1/2}.$$

Если $P_{01} < 1$, то с точностью до членов $(P_{01})^2$ вероятность $P(E_k)$ принимает вид

$$P(k) = \frac{2\sqrt{\pi} m}{\hbar^2} P_{01} \left[2e^2 \frac{D_0}{r_0} \frac{D_0^t}{R_t} \frac{1}{b^3} M_{01} K \right]^2 \times k^2 \alpha_t^5 \exp \left\{ -k^2 \alpha_t^2 \right\}.$$

Соответственно скорость фрагментации указанной системы имеет вид функции

$$P_f(k) = P_{N_{\text{эф}}}^K P(k), \quad (8)$$

где $E_k = NE_{\text{ex}} - E_d$.

Выводы и заключения

Анализ полученного аналитического выражения для функции $P_f(k)$ позволяет сделать следующие важные заключения о скорости фрагментации многочастичной системы с N колебательными степенями свободы под действием ИК-радиации.

Во-первых, функция $P_f(k)$ зависит как K^2 от числа колебательно возбужденных компонент, составляющих упорядоченную подструктуру квантовой системы. Однако это число должно быть ограничено сверху условием когерентности их возбуждения.

Во-вторых, распад квантовой системы происходит за счет диссоциации компонент, не входящих в упорядоченную подструктуру. Энергия, при которой функция $P_f(k)$ имеет резонанс, определяет количество возбужденных в подструктуре тождественных вибраторов.

В-третьих, вероятность $P_f(k)$ имеет резонансную зависимость от функции вероятности возбуждения одного осциллятора P_{01} при фиксированных значениях эффективного числа вибраторов в подсистеме и числа возбужденных вибраторов. Поскольку функция P_{01} является линейной функцией от плотности потока радиации, то и функция вероятности $P_f(k)$ зависит резонансно от плотности потока радиации.

Для демонстрации полученных результатов нами были проведены расчеты функции $P_f(k)$ в зависимо-

сти от разных комбинаций параметров. В качестве многочастичной системы для расчетов была взята молекула n -алкана $(\text{CH}_2)_n \text{CH}_3$. Рассматривалась ее диссоциация с разрывом связи $(\text{C}-\text{CH}_3)$, имеющей энергию диссоциации $E_d = 2.35$ эВ [5], под действием ИК излучения с частотой $\omega_R = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$.

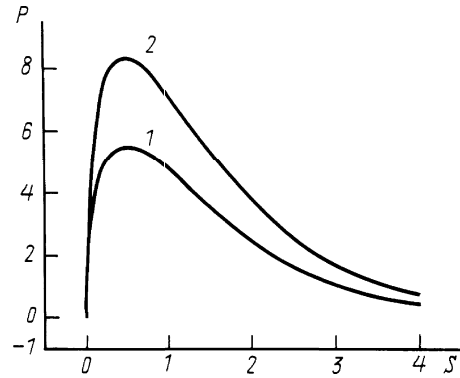


Рис. 1. Функции $P_f(k)$, рассчитанные на основании формулы (8) для разрыва связи $(\text{C}-\text{CH}_3)$ в молекуле $(\text{CH}_2)_n \text{CH}_3$ в зависимости от энергии E_k фрагмента (CH_3) в единицах $s = E_k/(\hbar\omega_B)$ при фиксированных параметрах $N = 105$, $K = 35$, $P_{01} = 0.3$ (кривая 1) и $N = 150$, $K = 50$, $P_{01} = 0.3$ (кривая 2)

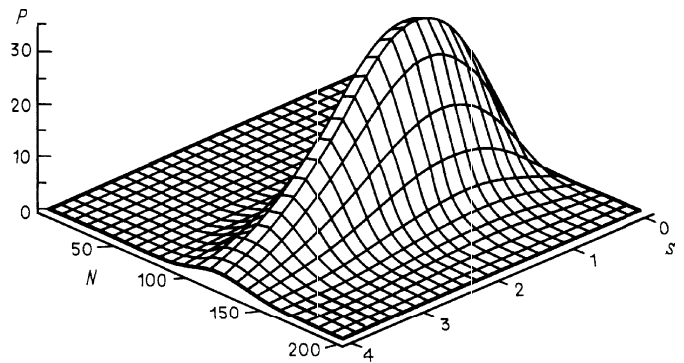


Рис. 2. Значения функции $P_f(k)$, рассчитанные на основании формулы (8) для разрыва связи $(\text{C}-\text{CH}_3)$ в молекуле $(\text{CH}_2)_n \text{CH}_3$ в зависимости от параметров $s = E_k/(\hbar\omega_B)$ и N при фиксированных $K = 35$ и $P_{01} = 0.3$

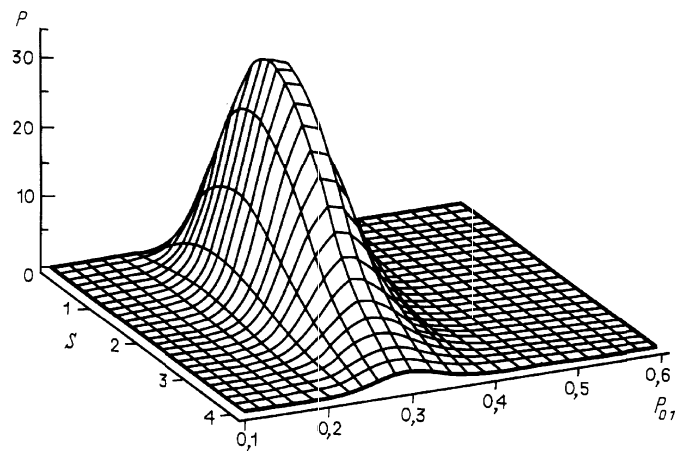


Рис. 3. Значения функции $P_f(k)$, рассчитанные на основании формулы (8) для разрыва связи $(\text{C}-\text{CH}_3)$ в молекуле $(\text{CH}_2)_n \text{CH}_3$ в зависимости от параметров $s = E_k/(\hbar\omega_B)$ и P_{01} при фиксированных $K = 35$ и $N = 120$

Указанная частота соответствует ω_{ex} в подструктуре $(\text{CH}_2)_n$ [6]. Расчеты проводились на основе формулы (8), для чего были взяты следующие параметры, характерные для связи (C–H): $\mu = 6 \cdot 10^{-24}$ г, $D_0/r_0 = 1$, $(M_{01})^2 = 6 \cdot 10^{-19}$ см², и параметры $\mu = 6 \cdot 10^{-24}$ г, $D_0/r_0 = 0.3$, $\omega_B = 2.5 \cdot 10^{14}$ с⁻¹, $\alpha_f^2 = 2 \cdot 10^{-19}$ см², $b = 1.5 \cdot 10^{-8}$ см для связи (C–CH₃).

Результаты расчетов вероятности диссоциации связи (C–CH₃) в единицу времени или скорости процесса фрагментации в зависимости от энергии E_k образовавшегося фрагмента (CH₃), взятой в относительных единицах $s = E_k/(\hbar\omega_B)$, представлены на рис. 1. Для расчета были взяты следующие параметры: $N = 105$, $K = 35$, $P_{01} = 0.3$ (кривая 1) и $N = 150$, $K = 50$, $P_{01} = 0.3$ (кривая 2).

Как видно из рисунка, рассматриваемая функция $P_f(k)$ имеет резонансное поведение. Резонансное поведение функции $P_f(k)$ в зависимости от N и

E_k при фиксированных K и P_{01} , а также от E_k и P_{01} при фиксированных K и N представлено на рис. 2 и 3.

Литература

1. *Abella D., Kurnit N.A., Hartmann S.R.* // Phys. Rev. 1966. **141**. P. 391.
2. *Goncalves A.M.P., Tallet A., Lefebvre R.* // Phys. Rev. 1969. **188**. P. 576.
3. *Grad J., Hernandez G., Mukamel S.* // Phys. Rev. 1988. **A37**. P. 3835.
4. *Mukamel S.* // Ann. Rev. Phys. Chem. 2000. **51**. P. 691.
5. *Radzig A.A., Smirnov B.M.* // Data on Atoms, Molecules and Ions. Berlin: Springer-Verlag, 1995.
6. *Nakanishi K.* // Infrared Absorption Spectroscopy. San Francisco; Tokyo, 1962.

Поступила в редакцию
11.03.02

УДК 530.145.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ЯДЕРНО-КУЛОНОВСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

О. С. Павлова, А. Р. Френкин

(кафедра теоретической физики; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

E-mail: th180@phys.msu.su

Методом интегральных преобразований, связанным с исследованием лапласовских образов волновых функций, находится дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера с произвольным потенциалом притяжения. В матричных элементах характеристического уравнения, представленных в виде формального разложения по обратным степеням энергии, произведено суммирование рядов. На примерах обобщенного потенциала Юкавы и экранированного кулоновского потенциала продемонстрированы возможности метода, который с успехом может быть использован и для других потенциалов.

В статьях [1, 2] был разработан операторный вариант метода интегральных преобразований [3], позволяющий сравнительно просто определять дискретный спектр радиального уравнения Шрёдингера (УШ) с произвольным потенциалом притяжения. Настоящая работа является продолжением наших исследований в данной области и содержит подробные вычисления на ЭВМ энергетического спектра УШ с типичными ядерно-кулоновскими потенциалами: обобщенным потенциалом Юкавы и экранированным кулоновским, широко используемыми в ядерной и атомной физике.

Будем рассматривать радиальное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\Psi - V(r)\Psi + E\Psi = 0 \quad (1)$$

($\hbar = 2m = 1$, $l = 0, 1, 2, \dots$ — орбитальное квантовое число) с потенциалом притяжения

$$V(r) = V(r/a) = \sum_{N=-1}^{\infty} b_N \left(\frac{r}{a}\right)^N, \quad a > 0, \quad (2)$$

убывающим на бесконечности и имеющим кулоновскую особенность $b_{-1}a/r$ при $r = 0$.

Как показано в работе [2], дискретный спектр энергий E_p ($p = 0, \dots, p_{\text{max}}$) уравнения (1) определяется из характеристического уравнения

$$\det ||\mathcal{B}_{nk} - (n + \delta)\delta_{nk}|| = 0, \quad n, k = 0, 1, \dots, \quad (3)$$

где

$$\mathcal{B}_{nk} = -b_{-1}a^2x\delta_{nk} + a^2 \sum_{N=0}^{\infty} b_N \beta_{nk}(N)x^{N+2},$$