

Модель туннелирования кластеров через отталкивающие барьеры в представлении симметризованных координат

А. А. Гусев

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980*

Представлены формулировка математической модели для системы A тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа в поле отталкивающих барьерных потенциалов в виде краевой задачи для системы уравнений эллиптического типа в новых симметризованных координатах, эффективные методы, алгоритмы и комплексы программ для анализа её решений. Рассмотрена редукция задачи для кластера из A тождественных частиц к подсистемам «(одна частица) + (кластер из $(A - 1)$ частиц)» и «(кластер из A_{b_1} частиц) + (кластер из A_{b_2} частиц)». Решение краевой задачи для кластера из A тождественных частиц ищется в виде разложения по кластерным $(A - 1)$ -мерным осцилляторным базисным функциям, симметричным или антисимметричным относительно перестановки A тождественных частиц — в представлении симметризованных координат [Гусев А.А. // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика.» — 2013. — № 3, С. 52–67]. Задача редуцируется к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с \mathbf{R} -матричными условиями третьего рода в методе сильной связи каналов. Матрицы амплитуд прохождения и отражения и собственные функции непрерывного спектра задачи рассеяния по переменной центра масс вычисляются с помощью комплекса программ KANTBP 3.0. Эффективность подхода продемонстрирована анализом решений задачи квантового туннелирования кластеров, состоящих из нескольких тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа, через отталкивающие барьеры в s -волновом приближении. Проведён анализ эффекта прозрачности, т. е. резонансного туннелирования кластера из нескольких тождественных частиц через отталкивающие барьеры, который обусловлен наличием квазистационарных состояний, погруженных в непрерывный спектр. Для расчёта положений энергий квазистационарных состояний и их классификации разработан алгоритм решения краевой задачи для эллиптического уравнения в A -мерной области специального типа на основе разложения решения по A -мерному осцилляторному базису. Разработанный подход и комплекс программ ориентирован на анализ квантовой диффузии молекул, каналирования и туннелирования кластеров и ионов в кристаллах, а также тетраэдральной и октаэдральной симметрии ядер.

Ключевые слова: кластерные модели, модели ядерных реакций и методы, модели связанных каналов, квантовое туннелирование.

1. Введение

Механизм квантового туннелирования пары связанных частиц через отталкивающие барьеры [1], привлекает внимание как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения в связи с задачами приповерхностной диффузии молекул [2, 3], фрагментации нейтроноизбыточных лёгких ядер [4–7], так и туннелирования тяжёлых ионов через многомерные барьеры [8–10]. В общей формулировке задачи рассеяния и каналирования для ионов разной массы эталонная модель с дальнедействующими потенциалами предложена в [11, 12]. Обобщение двухчастичной модели на случай системы A тождественных частиц имеет важное

Статья поступила в редакцию 26 ноября 2013 г.

Автор благодарит проф. А. Амайя-Тапию, С.И. Веницкого, В.П. Гердта, А. Гоздза, С.Н. Ершова, Г.П. Камунтавичуса, П.М. Красовицкого, Ф.М. Пенькова, Г.С. Погосяна, В.В. Пупышева, Л.А. Севастьянова и О. Чулуунбаатара за полезные обсуждения и сотрудничество. Работа поддержана грантами РФФИ 14-01-00420, 13-01-00668 и программой Боголюбов–Инфельд.

значение для описания квантовой диффузии молекул, каналирования и туннелирования кластеров и ионов в кристаллах, а также тетраэдральной и октаэдральной симметрии ядер [13, 14].

Цель работы — представить подходящую формулировку модели для системы тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа в поле отталкивающих барьерных потенциалов в виде краевой задачи для уравнения эллиптического типа и эффективные методы, алгоритмы и комплексы программ анализа её решений.

Дана формулировка модели туннелирования составной квантовой системы A тождественных частиц, взаимодействующих короткодействующими потенциалами осцилляторного типа через отталкивающие барьеры, в виде краевой задачи для эллиптического уравнения в частных производных. Спиновая часть волновой функции предполагается известной, поэтому рассматривается только пространственную часть волновой функции, которая должна быть симметричной или антисимметричной относительно перестановки A тождественных частиц [15, 16]. Исходная формулировка модели в лабораторной системе координат редуцирована в новых симметризованных координатах [17] к задаче туннелирования составной системы с внутренними степенями свободы, описываемыми в базисе $(A - 1) \times d$ -мерного гармонического осциллятора, и внешними степенями свободы, описываемыми движением центра масс составной системы A частиц в d -мерном евклидовом пространстве. Для наглядности изложения ограничиваемся s -волновым приближением [1], соответствующим случаю одномерного евклидова пространства ($d = 1$).

Отметим, что основной выигрыш при введении симметризованных координат по сравнению с традиционными якобиевскими координатами или кластерными координатами [6, 7] состоит в обеспечении инвариантности гамильтониана по отношению к перестановке A тождественных частиц. Это обстоятельство позволяет конструировать не только базисные функции симметричные (s) или антисимметричные (a) при перестановке $(A - 1)$ относительных (внутренних) координат, но и базисные функции, симметричные (S) или антисимметричные (A) при перестановке исходных A декартовых координат. Будем называть разложение искомого решения задачи в базисе такого типа представлением симметризованных координат (ПСК) [17].

Решение задачи ищем в виде разложения по базисным функциям в ПСК с неизвестными коэффициентами — матричными функциями, зависящими от переменной центра масс. В результате исходная задача сводится к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по переменной центра масс решения с \mathbf{R} -матричными условиями третьего рода в методе сильной связи каналов, используя обычные асимптотические граничные условия решений в виде «падающая плоская волна и расходящиеся от центра волны», содержащие неизвестные матрицы амплитуд прохождения и отражения. Анализируются эффект квантовой прозрачности, который проявляется как немонотонная зависимость коэффициента прохождения от энергии столкновения при резонансных энергиях, соответствующих барьерным квазистационарным состояниям кластера в зависимости от числа частиц и типа их симметрии. Для расчёта положений энергий квазистационарных состояний и их классификации разработан алгоритм решения краевой задачи для эллиптического уравнения в A -мерной области специального типа на основе разложения решения по A -мерному осцилляторному базису.

Структура работы следующая. В разделе 2 представлена постановка задачи в новых симметризованных координатах. В разделе 3 дано определение ПСК — полного набора решений задачи на собственные значения во внутренних $(A - 1)$ симметризованных координатах, симметричных (или антисимметричных) относительно перестановки A частиц, которые даются линейной комбинацией собственных функций $(A - 1)$ -мерного осциллятора. Приведены выражения для кластерных функций, собственных значений и кратности вырождения при $A = 3, 4$

в одномерном евклидовом пространстве ($d = 1$). В разделе 4 дана формулировка краевой задачи для уравнений метода связанных каналов в форме Галёркина, используя ПСК. В разделе 5 представлен анализ результатов численного эксперимента по резонансному туннелированию кластера в s -волновом приближении в зависимости от числа частиц и типа их симметрии. В разделе 6 даны описание алгоритма расчёта квазистационарных состояний и их классификация. В заключении обсуждаются результаты и перспективы применения развитого подхода.

2. Постановка задачи

Задача туннелирования A тождественных квантовых частиц с массой m и набором декартовых координат $x_i \in \mathbf{R}^d$ в d -мерном евклидовом пространстве, рассматриваемых как компоненты вектора $\tilde{\mathbf{x}} = \{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_A\} \in \mathbf{R}^{A \times d}$ в $A \times d$ -мерном конфигурационном пространстве, связанных потенциалом парного взаимодействия $\tilde{V}^{\text{pair}}(\tilde{x}_{ij})$ по относительным координатам $\tilde{x}_{ij} = \tilde{x}_i - \tilde{x}_j$, подобным потенциалу гармонического осциллятора $\tilde{V}^{\text{hosc}}(\tilde{x}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2}(\tilde{x}_{ij})^2$ с частотой ω , через отталкивающие барьеры $\tilde{V}(\tilde{x}_i)$, описывается уравнением Шрёдингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_i^2} + \sum_{i,j=1;i < j}^A \tilde{V}^{\text{pair}}(\tilde{x}_{ij}) + \sum_{i=1}^A \tilde{V}(\tilde{x}_i) - \tilde{E} \right] \tilde{\Psi}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_A) = 0,$$

где \tilde{E} — полная энергия системы A частиц, $\tilde{P}^2 = 2m\tilde{E}/\hbar^2$, \tilde{P} — полный импульс системы A частиц. Используя осцилляторные единицы $x_{\text{osc}} = \sqrt{\hbar/(m\omega\sqrt{A})}$, $p_{\text{osc}} = \sqrt{(m\omega\sqrt{A})/\hbar} = x_{\text{osc}}^{-1}$, $E_{\text{osc}} = \hbar\omega\sqrt{A}/2$ и вводя безразмерные переменные $x_i = \tilde{x}_i/x_{\text{osc}}$, $x_{ij} = \tilde{x}_{ij}/x_{\text{osc}} = x_i - x_j$, $E = \tilde{E}/E_{\text{osc}} = P^2$, $P = \tilde{P}/p_{\text{osc}} = \tilde{P}x_{\text{osc}}$, $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = \tilde{V}^{\text{pair}}(x_{ij}x_{\text{osc}})/E_{\text{osc}}$, $V^{\text{hosc}}(x_{ij}) = \tilde{V}^{\text{hosc}}(x_{ij}x_{\text{osc}})/E_{\text{osc}} = \frac{1}{A}(x_{ij})^2$, $V(x_i) = \tilde{V}(x_ix_{\text{osc}})/E_{\text{osc}}$, перепишем исходное уравнение в виде

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

$$U(\mathbf{x}) = \sum_{i,j=1;i < j}^A U^{\text{pair}}(x_{ij}) + \sum_{i=1}^A V(x_i),$$

где $U^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{pair}}(x_{ij}) - V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, т.е., если $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, то $U^{\text{pair}}(x_{ij}) = 0$.

Наша цель — найти решения $\Psi(\mathbf{x} = \Psi(x_1, \dots, x_A))$ уравнения (1), полностью симметричные (или антисимметричные) относительно операций перестановок A частиц, принадлежащим группе перестановок S_A . Под перестановками частиц, как обычно, подразумеваем перестановки соответствующих декартовых координат $x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 1, \dots, A$.

Преобразование от декартовых координат x_i к одному из возможных наборов симметризованных координат ξ_i имеет вид $\xi = \mathbf{C}x$, где \mathbf{C} — симметричная ортогональная матрица $\mathbf{C}^T = \mathbf{C}$, $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}$, $\mathbf{C}^2 = \mathbf{I}$ с собственными значениями $\lambda_1 = -1, \lambda_2, \dots, \lambda_A = 1$ и детерминантом $\det \mathbf{C} = -1$, заданная элементами $C_{s1} = C_{1s} = C_{11} = 1/\sqrt{A}$, $C_{ss} = a_0/\sqrt{A}$, $C_{ss'} = a_1/\sqrt{A}$, $a_0 = 1/(1 - \sqrt{A}) < 0$, $a_1 = a_0 + \sqrt{A}$, $s, s' = 2, \dots, A$, $s \neq s'$:

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{A}} \left(\sum_{t=1}^A x_t \right), \quad \xi_s = \frac{1}{\sqrt{A}} \left(x_1 + \sum_{t=2}^A a_0 x_t + \sqrt{A} x_{s+1} \right), \quad s = 1, \dots, A-1,$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{A}} \left(\sum_{t=0}^{A-1} \xi_t \right), \quad x_s = \frac{1}{\sqrt{A}} \left(\xi_0 + \sum_{t=1}^{A-1} a_0 \xi_t + \sqrt{A} \xi_{s-1} \right), \quad s = 2, \dots, A.$$

Заметим, что при $A = 2$ симметризованные координаты подобны, с точностью до нормировочных множителей, координатам Якоби, рассмотренным в [18], тогда как при $A = 4$ они соответствуют другому выбору симметризованных координат $(\ddot{x}_4, \ddot{x}_1, \ddot{x}_2, \ddot{x}_3)^T = C(x_4, x_1, x_2, x_3)^T$, рассмотренных в [19].

Принимая во внимание соотношения $a_1 - a_0 = \sqrt{A}$, $a_0 - 1 = a_0 \sqrt{A}$, относительные координаты $x_{ij} \equiv x_i - x_j$ пары частиц i и j выражаются в терминах только $(A-1)$ внутренних симметризованных координат:

$$x_{ij} \equiv x_i - x_j = \xi_{i-1} - \xi_{j-1} \equiv \xi_{i-1, j-1}, \quad (2)$$

$$x_{i1} \equiv x_i - x_1 = \xi_{i-1} + a_0 \sum_{i'=1}^{A-1} \xi_{i'}, \quad i, j = 2, \dots, A. \quad (3)$$

Эти важные соотношения существенно упрощают процедуру симметризации (или антисимметризации) осцилляторных базисных функций и вычисления соответствующих интегралов парного взаимодействия $V^{\text{pair}}(x_{ij})$. Связь между симметризованными и якобиевскими координатами рассмотрена в работе [17].

Заметим, что парные потенциалы $U^{\text{pair}}(x_{ij}(\boldsymbol{\xi})) = U^{\text{pair}}(\xi_{i-1, j-1})$ из (2) для $i, j = 2, \dots, A$ зависят только от разности симметризованных координат ξ_{i-1} и ξ_{j-1} , что даёт возможность сформулировать задачу рассеяния тождественной частицы с номером 1 на кластере из $(A-1)$ тождественных частиц с внутренними симметризованными координатами $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_i\}_{i=1}^{A-1} \in \mathbf{R}^{(A-1) \times d}$ и с парными потенциалами осцилляторного типа в системе центра масс $\xi_0 \in \mathbf{R}^d$ по координате $\xi_1 \in \mathbf{R}^d$:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} + H_{\text{int}} + \sum_{i=1}^A V(x_i(\xi_0, \boldsymbol{\xi})) - E \right] \Psi(\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{A-1}) = 0,$$

$$H_{\text{int}} = -\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \sum_{i=2}^A V^{\text{pair}}(\xi_{i1}(\xi_1, \boldsymbol{\xi})) + H_{2, A-1}^{\text{osc}},$$

$$H_{2, A-1}^{\text{osc}} = \sum_{i=2}^{A-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \xi_i^2 \right) + \sum_{i, j=2; i < j}^{A-1} U^{\text{pair}}(\xi_{ij}),$$

где H_{int} — гамильтониан внутренней подсистемы, $V^{\text{pair}}(x_{i1}(\boldsymbol{\xi})) = V^{\text{pair}}(\xi_{i-1} + a_0 \sum_{i'=1}^{A-1} \xi_{i'})$ — потенциалы парного взаимодействия первой частицы с $(A-1)$ частицами кластера из (3) для $i = 2, \dots, A$. Свойства симметрии/антисимметрии частиц относительно перестановки координат $\xi_1 \leftrightarrow \xi_j$ можно учесть требованием симметрии решения — инверсии по координате ξ_1 относительно точки $\xi_1 = 0$.

Аналогично можно сформулировать задачу рассеяния кластера b_1 на кластере b_2 в системе их центра масс $\xi_0 = \xi_{0; b_1} + \xi_{0; b_2} \in \mathbf{R}^d$ по относительной координате $\xi_{b_1 b_2} = \xi_{0; b_1} - \xi_{0; b_2} \in \mathbf{R}^d$, соединяющей центры масс кластеров b_1 и b_2 с

внутренними симметризованными координатами $\boldsymbol{\xi}_{b_1} = \{\xi_{i;b_1}\}_{i=1}^{A_{b_1}-1} \in \mathbf{R}^{(A_{b_1}-1) \times d}$ и $\boldsymbol{\xi}_{b_2} = \{\xi_{j;b_2}\}_{j=1}^{A_{b_2}-1} \in \mathbf{R}^{(A_{b_2}-1) \times d}$ ($A_{b_1} + A_{b_2} = A$):

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} + H_{\text{int}} + \sum_{i=1}^A V(x_i(\xi_0, \xi_{b_1 b_2}, \boldsymbol{\xi}_{b_1}, \boldsymbol{\xi}_{b_2})) - E \right] \Psi(\xi_0, \xi_{b_1 b_2}, \boldsymbol{\xi}_{b_1}, \boldsymbol{\xi}_{b_2}) = 0,$$

$$H_{\text{int}} = -\frac{\partial^2}{\partial \xi_{b_1 b_2}^2} + \sum_{i=1}^{A_{b_1}-1} \sum_{j=1}^{A_{b_2}-1} V^{\text{pair}}(x_{ib_1 j b_2}(\xi_{b_1 b_2}, \xi_{ib_1}, \xi_{j b_2})) + H_{1, A_1-1}^{\text{osc}} + H_{2, A_2-1}^{\text{osc}},$$

$$H_{s, A_s-1}^{\text{osc}} = \left(\sum_{i=1}^{A_s-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_{i; b_s}^2} + \xi_{i; b_s}^2 \right) + \sum_{i, j=1; i < j}^{A_s-1} U^{\text{pair}}(\xi_{ij; b_s}) \right),$$

где H_{int} — гамильтониан подсистемы, $V^{\text{pair}}(x_{ib_1 j b_2}(\xi_{b_1 b_2}, \xi_{ib_1}, \xi_{j b_2}))$ — потенциал парного взаимодействия, $x_{ib_1 j b_2} = x_{ib_1} - x_{j b_2}$ — расстояния между i -й и j -й частицами кластеров b_1 и b_2 в лабораторной системе координат. При заданной симметрии/антисимметрии кластеров свойство симметрии/антисимметрии относительно перестановок частиц по координате $\xi_{b_1 b_2}$ учитывается требованием симметрии решения — инверсии по координате $\xi_{b_1 b_2}$ относительно точки $\xi_{b_1 b_2} = 0$ [7].

В симметризованных координатах $\xi_0 \in \mathbf{R}^d$ и $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \dots, \xi_{A-1}\} \in \mathbf{R}^{(A-1) \times d}$ уравнение (1) принимает вид:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} - \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\xi}^2} + \boldsymbol{\xi}^2 + U(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) - E \right] \Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) = 0,$$

$$U(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i, j=1; i < j}^A U^{\text{pair}}(x_{ij}(\boldsymbol{\xi})) + \sum_{i=1}^A V(x_i(\xi_0, \boldsymbol{\xi})). \quad (4)$$

В силу (2) уравнение (4) *инвариантно* относительно перестановок $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$, $i, j = 1, \dots, A-1$, т.е. *инвариантность* уравнения (1) при перестановках $x_i \leftrightarrow x_j$ при $i, j = 1, \dots, A$ сохраняется. Это факт проявления одного из наиболее важных свойств предложенного подхода. В работе используется осцилляторная система единиц.

3. Представление симметризованных координат

Ограничимся рассмотрением решения уравнения (4) с осцилляторным потенциалом $U^{\text{pair}}(x_{ij}(\boldsymbol{\xi})) = 0$, т.е. $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, в s -волновом приближении, в котором компоненты симметризованных координат $\xi_0 \in \mathbf{R}$ и $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \dots, \xi_{A-1}\} \in \mathbf{R}^{A-1}$, $\xi_i \in \mathbf{R}$ заданы в одномерном евклидовом пространстве ($d = 1$). Искомые решения задачи $\Psi(\xi_0, \boldsymbol{\xi})$ симметричные (S) (или антисимметричные (A)) относительно перестановок A частиц ищем в ПСК в виде разложения по полному набору кластерных функций $\langle \boldsymbol{\xi} | j \rangle \equiv \Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi})$, симметричных (S) (или антисимметричных (A)) относительно перестановок A частиц, которые даются как решения задачи на собственные значения при соответствующих собственных значениях энергии $\varepsilon_j^{S(A)}$:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\xi}^2} + \boldsymbol{\xi}^2 - \varepsilon_j^{S(A)} \right] \Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) = 0, \quad \langle i | j \rangle = \int d\boldsymbol{\xi} \Phi_i^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) \Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) = \delta_{ij}. \quad (5)$$

Решения задачи (5) ищем в виде разложения

$$\Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i_1, \dots, i_{A-1} \in \Delta_j} \hat{\alpha}_j^{S(A)} \Phi_{[i_1, \dots, i_{A-1}]}^{(\text{osc})}(\boldsymbol{\xi}) \quad (6)$$

по осцилляторным функциям

$$\Phi_{[i_1, \dots, i_{A-1}]}^{(\text{osc})}(\boldsymbol{\xi}) \equiv \bar{\Phi}_{[i_1, \dots, i_{A-1}]} = \prod_{k=1}^{A-1} \bar{\Phi}_{i_k}(\xi_k), \quad \bar{\Phi}_{i_k}(\xi_k) = \frac{\exp(-\xi_k^2/2) H_{i_k}(\xi_k)}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^{i_k}} \sqrt{i_k!}}, \quad (7)$$

где $H_{i_k}(\xi_k)$ — полиномы Эрмита [20]. Здесь набор $\Delta_j = \{i_1, \dots, i_{A-1}\}$ определён условием $\Delta_j = \{i_1, \dots, i_{A-1} \mid \left(\sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1 \right) = \varepsilon_j^{S(A)}\}$, $\Phi_{[i_1, \dots, i_{A-1}]}^{(\text{osc})}(\boldsymbol{\xi})$ — собственные функции $(A-1)$ -мерного осциллятора с группой динамической симметрии U_A [21], соответствующие собственным значениям энергии $\varepsilon_{[i_1, \dots, i_{A-1}]}^{(\text{osc})} \equiv \varepsilon_j^{(\text{osc})} = 2f - A - 1$, $f = \sum_k^{A-1} i_k$, с кратностью вырождения $p_A(j) = (A + f - 2)!/f!/(A - 2)!$, т.е. при $A = 3$ и $A = 4$, при $p_3(j) = f + 1$, $p_4(j) = (f + 2)(f + 1)/2$.

Алгоритм ПСК (SCR) построения решений $\Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) \in \text{irr}U_{A-1} \supset S_A$ уравнения (5), симметричных (S) (или антисимметричных (A)) относительно перестановок A частиц, в виде линейных комбинаций (6) функций $(A-1)$ -мерного осциллятора приведён в работе [17]. Алгоритм ПСК (SCR) состоит из двух последовательно выполняемых процедур, реализованных CAS MAPLE [12]. На первом шаге, используя свойства симметризованных координат (2), стандартными методами [15] вычисляются собственные функции, симметричные или антисимметричные относительно перестановок $(A-1)$ частиц группы S_{A-1} : $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$, $i, j = 1, \dots, A-1$. На втором шаге, используя свойство (3), строятся функции, симметричные относительно перестановки $x_1 \leftrightarrow x_2$ неприводимого представления $[S_{A-1}, 1]$ группы S_A [22], которые затем ортогонализуются с помощью процедуры Грамма–Шмидта.

Ниже представлены результаты построения в аналитическом виде S- и A-функций и собственных значений с учётом их кратности для $A = 3$ и $A = 4$.

При $A = 3$ в полярных координатах $\xi_1 = \rho \cos \varphi$, $\xi_2 = \rho \sin \varphi$ имеем следующий полный и ортогональный набор базисных функций:

$$\Phi_{k,m}^{S(A)}(\rho, \varphi, A = 3) = \sqrt{\frac{2k!}{(k+3m)!}} (\rho^2)^{3m/2} e^{-\rho^2/2} L_k^{3m}(\rho^2) Y_m^{S(A)}(3m(\varphi + \pi/12)), \quad (8)$$

где $L_k^{3m}(\rho^2)$, $k = 0, 1, \dots$, — обобщённые полиномы Лагерра [20], $Y_m^S(\varphi) = \cos(\varphi)/\sqrt{(1 + \delta_{m0})\pi}$, $m = 0, 1, \dots$ и $Y_m^A(\varphi) = \sin(\varphi)/\sqrt{\pi}$, $m = 1, 2, \dots$, — угловые функции. Решения (8) классифицируются неприводимыми представлениями группы симметрии D_{3m} . Соответствующие уровни энергии определяются по формуле $\varepsilon_{k,m}^{S(A)} = 2(2k+3m+1)$ и $K+1$ -кратно вырождены, если $\varepsilon_{k,m}^{S(A)} - \varepsilon_{\text{ground}}^{S(A)} = 12K + K'$, где K' принимает одно из следующих значений $K' = 0, 4, 6, 8, 10, 14$ и $\varepsilon_{\text{ground}}^S = 2$, $\varepsilon_{\text{ground}}^A = 8$, т.е. кратность вырождения с учётом симметрии составляет $1/6$ кратности вырождения $p_3(j)$ уровней без учёта симметрии.

При $A = 4$ собственные функции $\Phi_j(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})^{S(A)} \equiv \Phi_{[i_1, i_2, i_3]}^{S(A)}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ выражаются в терминах собственных функций одномерного осциллятора из (7)

$$\begin{aligned} \Phi_j^{S(A)}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \\ = N_{[i_1, i_2, i_3]}^{-1/2} (\bar{\Phi}_{[i_1, i_2, i_3]} + \bar{\Phi}_{[i_2, i_3, i_1]} + \bar{\Phi}_{[i_3, i_1, i_2]} \pm \bar{\Phi}_{[i_2, i_1, i_3]} \pm \bar{\Phi}_{[i_1, i_3, i_2]} \pm \bar{\Phi}_{[i_3, i_2, i_1]}). \end{aligned}$$

Квантовые числа i_1, i_2, i_3 принимают следующие значения: в симметричном случае $i_1 = 0, 1, 2, \dots, i_2 = i_1, i_1+2, i_1+4, \dots, i_3 = i_2, i_2+2, i_2+4, \dots$ и в антисимметричном случае $i_1 = 0, 1, 2, \dots, i_2 = i_1 + 2, i_1 + 4, i_1 + 6, \dots, i_3 = i_2 + 2, i_2 + 4, i_2 + 6, \dots$. Величина $N_{[i_1, i_2, i_3]}$ — число перестановок чисел i_1, i_2, i_3 , принимает следующие значения $N_{[i_1, i_2, i_3]} = \{6, i_1 < i_2 < i_3; 1, i_1 = i_2 = i_3; 3, \text{иначе}\}$. Уровни энергии $\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}^{S(A)} = 2(i_1 + i_2 + i_3 + 3/2)$ вырождены с кратностью $3K^2 + (3+K')K + K' + \delta_{0K'}$, если $\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}^{S(A)} - \varepsilon_{\text{ground}}^{S(A)} = 4(6K + K') + K''$, где $K' = 0, 1, 2, 3, 4, 5, K'' = 0, 6, \varepsilon_{\text{ground}}^S = 3, \varepsilon_{\text{ground}}^A = 15$, т.е. кратность вырождения с учётом симметрии составляет $1/24$ кратности вырождения $p_4(j)$ уровней без учёта симметрии. Заметим, что состояния, описываемые наборами чётных (или нечётных) квантовых чисел i_1, i_2, i_3 , обладают октаэдральной (или тетраэдральной) симметрией. При $d = 3$ тетраэдральная симметрия состояний для $A = 4$ рассматривалась в [19].

На рис. 1 показаны профили S и A осцилляторных собственных функций $\Phi_{[i_1, i_2, i_3]}^{S(A)}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ для $A = 4$. Четыре максимума (чёрные) и четыре минимума (серые) S собственной функции $\Phi_{[1,1,1]}^S(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ расположены в вершинах двух правильных тетраэдров, формирующих *звёздчатый октаэдр*, с рёбрами, показанными чёрными и серыми линиями, соответственно. Восемь максимумов и шесть внешних минимумов S собственной функции $\Phi_{[0,0,4]}^S(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ расположены в вершинах куба и октаэдра, ребра которого показаны чёрными и серыми линиями соответственно. Положения двенадцати максимумов A осцилляторной собственной функции, $\Phi_{[0,2,4]}^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ совпадают с вершинами многогранника с 20 треугольными гранями (только 8 из них правильные треугольники) и 30 рёбрами, 6 из которых имеют длину 2, 25, а остальные — 2, 66 (осц. ед.).

4. Уравнения метода сильной связи каналов в ПСК

Ограничимся s -волновым приближением [1], т.е. одномерным евклидовым пространством ($d = 1$). Асимптотические граничные условия для решения $\Psi^{S(A)}(\xi_0, \xi) = \{\Psi_{i_o}^{S(A)}(\xi_0, \xi)\}_{i_o=1}^{N_o}$ ($\xi_0, \xi = \{\xi_1, \dots, \xi_{A-1}\}$) соответствующие условию “падающая волна и расходящиеся волны” при $\xi_0^+ \rightarrow +\infty$ и $\xi_0^- \rightarrow -\infty$, представимы в матричном виде $\Psi^{S(A)} = \mathbf{F}^{S(A)T} \mathbf{F}$:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{\rightarrow}(\xi_0^+) & \mathbf{F}_{\leftarrow}(\xi_0^+) \\ \mathbf{F}_{\rightarrow}(\xi_0^-) & \mathbf{F}_{\leftarrow}(\xi_0^-) \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0^+) \\ \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{X}^{(+)}(\xi_0^+) \\ \mathbf{X}^{(-)}(\xi_0^-) & \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{S}, \quad (9) \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{X}_{i_o}^{(\mp)}(\xi_0) = \frac{\exp(\mp i(p_{i_o} \xi_0))}{\sqrt{p_{i_o}}}$, $v = \leftarrow, \rightarrow$ указывает направление движения частиц по оси ξ_0 , $N_o = \max_{2E \geq \varepsilon_j^{S(A)}} j \leq j_{\text{max}}$ — число открытых каналов при фиксированной энергии E , импульс p_{i_o} в каждом из которых определяется по формуле $p_{i_o}^2 = E - \varepsilon_{i_o}^{S(A)} > 0$; \mathbf{S} — унитарная и симметричная матрица рассеяния

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\rightarrow} & \mathbf{T}_{\leftarrow} \\ \mathbf{T}_{\rightarrow} & \mathbf{R}_{\leftarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}. \quad (10)$$

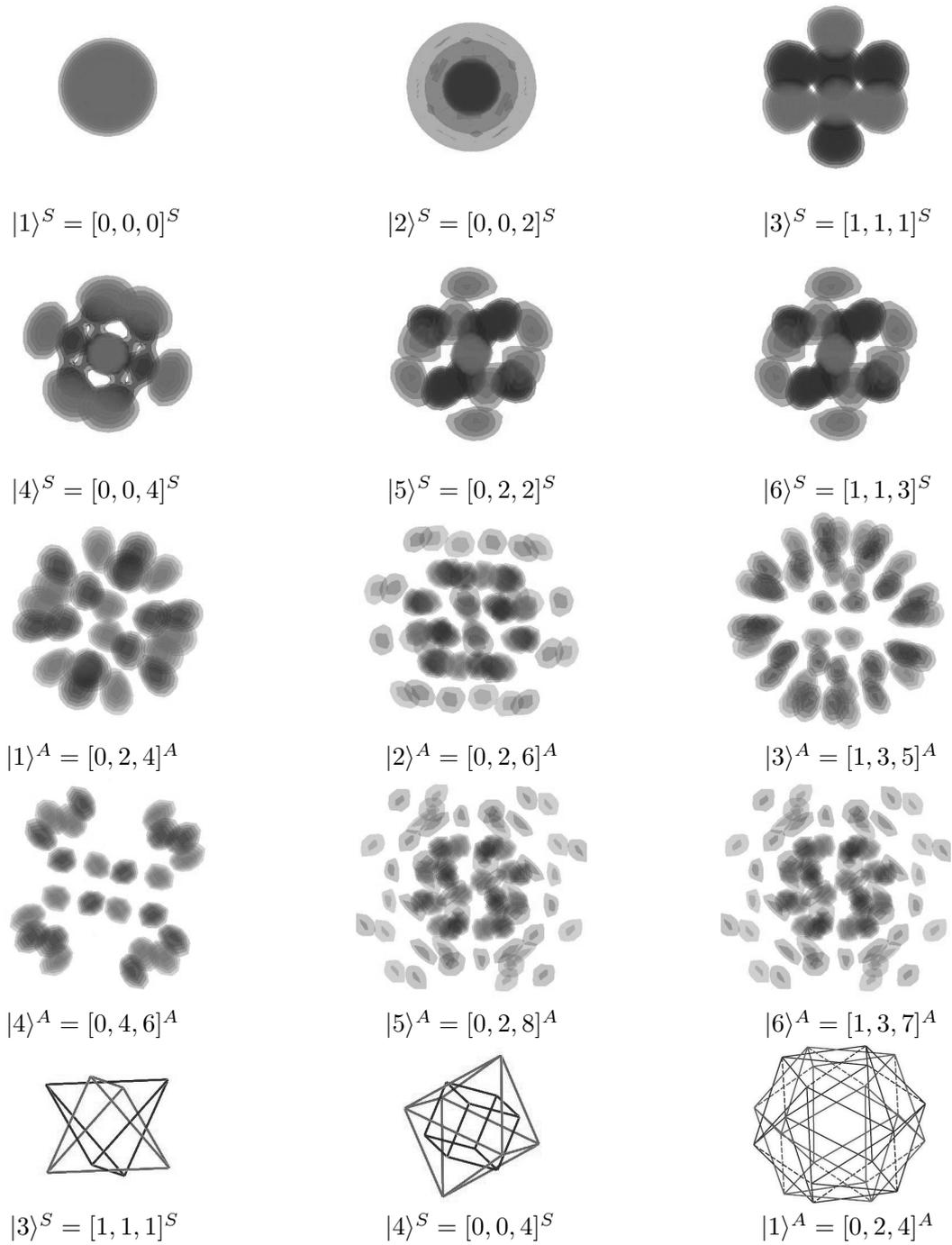


Рис. 1. Профили первых шести собственных функций 3D осциллятора $\langle \xi | j \rangle^{S(A)}$, симметричных и антисимметричных относительно перестановок $A = 4$ частиц в 3D-пространстве относительных координат (ξ_1, ξ_2, ξ_3) и положения максимумов (чёрный) и минимумов (серый) собственных функций $|3\rangle^S$, $|4\rangle^S$ и $|1\rangle^A$

Прямоугольные матрицы $\mathbf{R}_{\rightarrow} = \{R_{ji_o}^{\rightarrow} = R_{ji_o}^{\rightarrow}(E)\}$, $\mathbf{R}_{\leftarrow} = \{R_{ji_o}^{\leftarrow} = R_{ji_o}^{\leftarrow}(E)\}$, $\mathbf{T}_{\rightarrow} = \{T_{ji_o}^{\leftarrow} = T_{ji_o}^{\leftarrow}(E)\}$ и $\mathbf{T}_{\leftarrow} = \{T_{ji_o}^{\rightarrow} = T_{ji_o}^{\rightarrow}(E)\}$ амплитуд отражения и прохождения обладают следующими свойствами [12]:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\rightarrow}^{\dagger} \mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{R}_{\rightarrow}^{\dagger} \mathbf{R}_{\rightarrow} &= \mathbf{I}_{oo} = \mathbf{T}_{\leftarrow}^{\dagger} \mathbf{T}_{\leftarrow} + \mathbf{R}_{\leftarrow}^{\dagger} \mathbf{R}_{\leftarrow}, \\ \mathbf{T}_{\rightarrow}^{\dagger} \mathbf{R}_{\leftarrow} + \mathbf{R}_{\rightarrow}^{\dagger} \mathbf{T}_{\leftarrow} &= \mathbf{0} = \mathbf{R}_{\leftarrow}^{\dagger} \mathbf{T}_{\rightarrow} + \mathbf{T}_{\leftarrow}^{\dagger} \mathbf{R}_{\rightarrow}, \\ \mathbf{T}_{\rightarrow}^T &= \mathbf{T}_{\leftarrow}, \quad \mathbf{R}_{\rightarrow}^T = \mathbf{R}_{\rightarrow}, \quad \mathbf{R}_{\leftarrow}^T = \mathbf{R}_{\leftarrow}. \end{aligned} \quad (11)$$

Решение задачи (4) в симметризованных координатах представимо в виде разложения

$$\Psi_{i_o}^{S(A)}(\xi_0, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) \chi_{ji_o}^{S(A)}(\xi_0) \quad (12)$$

по ортонормированному базису (6) (анти)симметричных базисных функций $\Phi_j^{S(A)}(\boldsymbol{\xi})$ $(A-1)$ -мерного осциллятора с собственными значениями энергии $\varepsilon_i^{S(A)}$, построенному в ПСК. Искомые функции $\chi_{ji_o}^{S(A)}(\xi_0)$ удовлетворяют краевой задаче для системы связанных уравнений галёркинского типа

$$\sum_{j=1}^{j_{\max}} \left[\left(-\frac{d^2}{d\xi_0^2} - p_i^2 \right) \delta_{ij} + V_{ij}^{S(A)}(\xi_0) \right] \chi_{ji_o}^{S(A)}(\xi_0) = 0, \quad (13)$$

где $V_{ij}^{S(A)}(\xi_0)$ — эффективные потенциалы

$$V_{ij'}^{S(A)}(\xi_0) = \int d\boldsymbol{\xi} \Phi_i^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}) \left(\sum_{k=1}^A V(x_k) \right) \Phi_{j'}^{S(A)}(\boldsymbol{\xi}). \quad (14)$$

Однородные граничные условия при $\xi_0 = \xi_t$ и $t = \min, \max$ имеют вид

$$\left. \frac{d\mathbf{F}(\xi_0)}{d\xi_0} \right|_{\xi_0=\xi_t} = \mathcal{R}(\xi_t) \mathbf{F}(\xi_t), \quad (15)$$

где $\mathcal{R}(\xi)$ — неизвестная матрица размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$. Искомое решение $\mathbf{F}(\xi_0) = \{\chi_{i_o}(\xi_0)\}_{i_o=1}^{N_o} = \{\{\chi_{ji_o}(\xi_0)\}_{j=1}^{j_{\max}}\}_{i_o=1}^{N_o}$ — матрица размерностью $j_{\max} \times N_o$ вычисляется с помощью программы KANTBP 3 [23, 24].

5. Резонансное туннелирование кластера из нескольких тождественных частиц

Ограничимся случаем $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, т.е. случаем осцилляторных парных потенциалов. В результате решения сформулированной выше задачи рассеяния имеем искомые элементы матриц амплитуд отражения и прохождения $R_{ji_o}(E)$ и $T_{ji_o}(E)$, которые входят в асимптотические краевые условия (9), (10) как неизвестные. Соответственно, имеем $|R_{ji_o}(E)|^2$ ($|T_{ji_o}(E)|^2$) — вероятности перехода в состояние, описывающее отражённую (прошедшую) волну, т.е. коэффициенты отражения или прохождения. Отметим, что $|R_{ji_o}(E)|^2 + |T_{ji_o}(E)|^2 = 1$. На рис. 2 показаны зависимости от энергии полных вероятностей прохождения $|T_{ii}^2| = \sum_{j=1}^{N_o} |T_{ji}(E)|^2$.

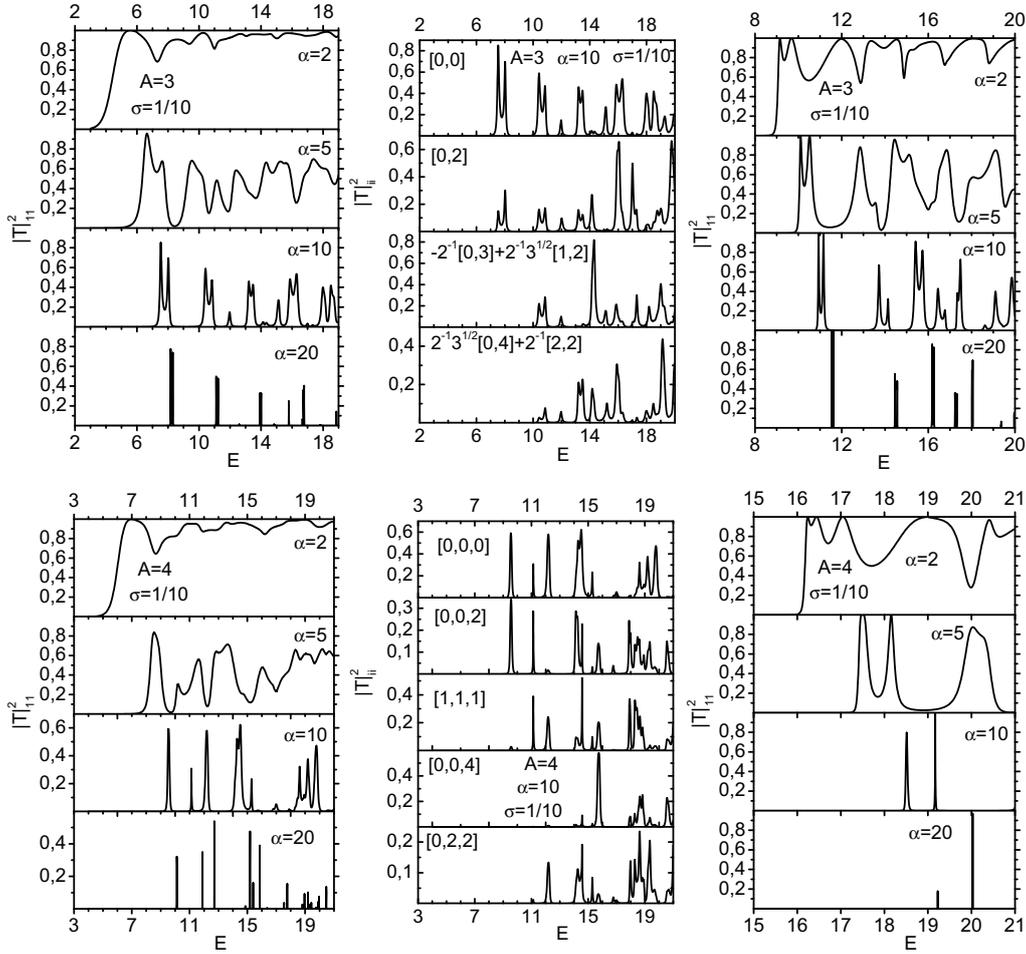


Рис. 2. Зависимость от энергии столкновения полной вероятности прохождения кластера $A = 3, 4$ частиц, связанных осцилляторным потенциалом через отталкивающий гауссовый барьер (в осц. ед.): слева для падающей волны основного S-состояния, в центре для падающих волн возбуждённых S-состояний, и справа для падающей волны основного A-состояния).

Эти вероятности перехода из i -того состояния в каждое из N_o состояний вычислялись из решения краевой задачи (13)–(15) в слабой форме Галёркина, с помощью KANTBP 3.0 [23, 24] на конечноэлементной сетке узлов $\Omega_{\xi_0} = \{-\xi_0^{\max}, \xi_0^{\max}\}$ из N_{elem} с лагранжевыми элементами четвёртого порядка $p = 4$. Для S-решений при $A = 3, 4$ использовались следующие параметры: $j_{\max} = 21, 39$, $\xi_0^{\max} = 10.5, 12.8$, $N_{\text{elem}} = 800, 976$, тогда как для A-решений: $j_{\max} = 16, 15$, $\xi_0^{\max} = 10.5, 12.8$, $N_{\text{elem}} = 800, 976$.

Численные эксперименты показали строгое соответствие с теоретическими оценками собственных функций и коэффициентов прохождения и отражения. Были вычислены значения коэффициента Рунге

$$\beta_l = \log_2 \left| \frac{\sigma_l^h - \sigma_l^{h/2}}{\sigma_l^{h/2} - \sigma_l^{h/4}} \right|, \quad l = 1, 2, 3, \quad (16)$$

с абсолютными погрешностями на четырёх вдвое сгущающихся сетках:

$$\begin{aligned} \sigma_1^h &= \|\chi_j^{h/8}(\xi_0; E) - \chi_j^h(\xi_0; E)\|_0, & \sigma_2^h &= \|(|R|_{jj}^2)^{h/8}(E) - (|R|_{jj}^2)^h(E)\|_0, \\ \sigma_3^h &= \|(|T|_{jj}^2)^{h/8}(E) - (|T|_{jj}^2)^h(E)\|_0, \end{aligned} \quad (17)$$

Из (16) определяются численные оценки порядка скорости сходимости используемой численной схемы, т.е. теоретические оценки равны $\beta_1 = p+1$ для собственных функций и $p+1 < \beta_{2,3} < 2p$ для коэффициентов прохождения и отражения (в зависимости от способа их вычисления из неоднородной задачи или из вариационной оценки). В приближения порядка $p = 4$ получена численная оценка коэффициента Рунге в интервале 4.6 ÷ 4.8 для собственных функций, которая соответствует теоретическим оценкам при фиксированном числе j_{\max} уравнений (13). Вычисления погрешностей (17) выполнялись с помощью программы KANTBP 3.0 [23, 24] с машинной точностью $\sim 10^{-12}$ на компьютере 2 x Xeon 3.2 GHz, 4 GB RAM, используя Intel Fortran 77 и представление real*8 для вещественных чисел, с 16 значащими цифрами. На рис. 3 показаны максимальные значения $P_j = \max_{\xi_0} |\chi_i(\xi_0)|^2$ компонент разложения (12) функции падающей волны основного S-состояния кластера для симметричных состояний кластеров из $A = 3, 4$ частиц в зависимости от номера компоненты j . Минимальное значение $\sim 10^{-4}$ достигается для компонент $j > j_0 \sim 20$, что демонстрирует сходимость разложения (12) решения по кластерным функциям и позволяет оценить скорость сходимости, используя подходящую экстраполяционную формулу. Время вычисления коэффициентов прохождения и отражения и собственных функций при фиксированном значении энергии для рассматриваемых примеров составило 30 секунд.

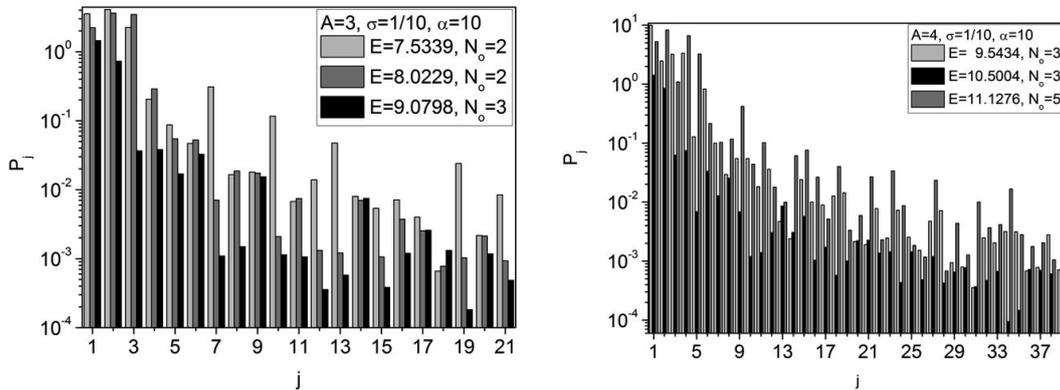


Рис. 3. Максимальные значения $P_j = \max_{\xi_0} |\chi_i(\xi_0)|^2$ компонент разложения (12) функции падающей волны основного S-состояния кластера. Соответствующие плотности вероятности $|\chi_i(\xi_0)|^2$ представлены на рис. 5 а, б, ж для $A = 3$ и на рис. 5 д, з, е для $A = 4$. Компоненты, соответствующие случаю полного прохождения, выделены чёрным цветом

Результаты вычислений полной вероятности прохождения кластера из $A = 3, 4$ частиц через отталкивающий гауссовый барьер системы, представлены на рис. 2. Из рис. 2 видна немонотонная зависимость вероятности прохождения от энергии столкновения, положения максимумов которых соответствует энергии квазистационарных (метастабильных) состояний. Наблюдаемые резонансы и есть проявление эффекта квантовой прозрачности. С увеличением высоты барьера пики становятся уже, и их положения сдвигаются в сторону больших значений энергии. Мультиплетная структура пиков симметричных состояний подобна структуре пиков антисимметричных состояний. Для трёх частиц главные пики двойные, тогда

как для четырёх частиц пики одинарные. Для более высоковозбуждённых начальных состояний кластера положения пиков коэффициента прохождения сдвигаются в сторону больших значений энергии столкновения. При этом набор положений пиков из возбуждённых состояний с учётом их смещения остаётся примерно таким же, как для переходов из основного состояния, подобно тому как это наблюдалось в модельных расчётах [3]. Например, для $A = 3$ положение третьего пика для переходов из основного и первого возбуждённого состояний ($E = 10, 4167$ и $E = 10, 4156$) совпадает с положением первого пика для переходов из следующих двух возбуждённых состояний ($E = 10, 4197$ и $E = 10, 4298$).

6. Классификация квазистационарных состояний

Вычисление положений резонансов – максимумов коэффициента прохождения, рассмотренных в предыдущем разделе, проводилось решением краевой задачи для системы уравнений (13) с условиями третьего рода (15) на сетке узлов по энергии E с шагом $\delta_E = 0,01$ на интервалах $E \in (E_{\text{ground}}^{S(A)}, 20)$ для $A = 3$ и $E \in (E_{\text{ground}}^{S(A)}, 21)$ для $A = 4$. При этом уточнение положений максимумов коэффициента прохождения с абсолютной точностью $\delta'_E = 10^{-8}$ было реализовано в программе методом золотого сечения. Отметим, что решение задачи на собственные значения, позволяющее вычислить комплексные собственные значения энергии квазистационарных состояний, порождающих эти резонансы в указанных интервалах энергии, требует значительных компьютерных ресурсов. Поэтому использовалась упрощённая постановка задачи с осцилляторными парными потенциалами $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, позволяющая не только доказать существование требуемых квазистационарных состояний, но и дать их классификацию.

Поскольку были выбраны узкие потенциальные барьеры $V(x_i)$, то использовалась их аппроксимация δ -потенциалами. Для оценки положений максимумов коэффициента прохождения T по энергии $E^{S(A)}$, а также для доказательства существования и классификации порождающих их квазистационарных состояний S или A типа, локализованных в области многомерного барьера $V(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^A V(x_i)$, ограничимся решением задачи на собственные значения для уравнения (1) в A -мерной области специального типа на основе разложения решения по A -мерному осцилляторному базису. Эта задача решается в декартовых координатах x_1, \dots, x_A в одной из $2^A - 2$ подобластей $\Omega_t = \{x_1, \dots, x_A | \sigma_i x_i > 0\}$, $\sigma_i = \pm 1$, условиями Дирихле (DC) $\Psi(x_1, \dots, x_A)|_{\partial\Omega_t} = 0$ на внутренней границе $\partial\Omega_t^{\text{in}} = \cup_{i=1}^A \{x_i = 0\}$ и условиями Дирихле на внешней границе $\partial\Omega_t^{\text{out}}$, выбранной подобласти Ω_t . При этом значение $\sigma_i = \pm 1$ указывает местоположение i -й частицы, соответственно, на правой или на левой стороне барьера.

В процедуре DC мы ищем решение в области $\bar{\Omega} = \Omega_t \cup \partial\Omega_t^{\text{in}} \cup \partial\Omega_t^{\text{out}} \subset \mathbf{R}^A$ в виде разложения Галёркина $\Psi_i^D(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{j_{\text{max}}} \bar{\Phi}_j(\mathbf{x}) \Psi_{ji}^D$ по ортогональному базису A -мерного осциллятора $\bar{\Phi}_j(\mathbf{x}) = \sum_l a_l \prod_{k=1}^A \bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$, $\bar{\Phi}_j(\mathbf{x}) \in L_2(\bar{\Omega})$ на области определения $\bar{\Omega}$. В силу условий Дирихле $\bar{\Phi}_{i_k}(x_k = 0) = 0$ на внутренних границах $\partial\Omega_t^{\text{in}}$ следует ограничение на базисные функции, отличающиеся от $\bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$ из (7) только областью определения $\sigma_k x_k > 0$ и нормировочным множителем $\sqrt{2}$: индексы i_k должны быть нечётные. Для получения функций, симметричных (или антисимметричных) относительно перестановок на всей области определения \mathbf{R}^A , необходимо и достаточно, чтобы функция в одной из ям была симметричной (антисимметричной) относительно перестановок координат x_i с одинаковыми σ_i . В результате мы приходим к алгебраической задаче на собственные

значения $D\Psi^D = \Psi^D E^D$ с вещественной симметричной матрицей размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$. В процедуре DC мы ищем приближенное решение в одной из потенциальных ям, т.е. пренебрегаем туннелированием через барьеры между ямами. Таким образом, мы не можем вычислить расщепление, присущее точным собственным значениям, отвечающим собственным функциям состояний с различной перестановочной симметрией. Однако мы можем объяснить механизм их появления, распределение в конфигурационном пространстве, и дать классификацию, которая является важной характеристикой спектра.

Ниже мы приводим алгоритм DC в виде псевдокода:

Алгоритм DC:

Input:

A is the number of identical particles;

$x_k, k = 1, \dots, A$ are the Cartesian coordinates of the identical particles;

$\sigma_k = \pm 1$ indicates the location of the k^{th} particle ;

j_{\max} is the number of the eigenfunctions of A-dimensional harmonic oscillator;

Output:

$D = \{D_{j'j}\}$ is the $j_{\max} \times j_{\max}$ matrix ;

E_i^D and Ψ_{ji}^D are the real-value eigenenergies and eigenvectors;

Local:

$\Phi_j = \sqrt{2^A} \prod_{k=1}^A \bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$;

$I(i'_k, i_k) = \int_0^\infty \bar{\Phi}_{i'_k}(x) \bar{\Phi}_{i_k}(x) dx = \frac{2^{(i'_k+i_k)/2} {}_2F_1(i'_k, i_k; (2-i'_k-i_k)/2; 1/2)}{\Gamma((2-i'_k-i_k)/2) \sqrt{i'_k! i_k!}}$;

$\Gamma(*)$ is the gamma-function, ${}_2F_1(*, *; *, *)$ is the hypergeometric function;

1: $Eq := (-\Delta + \sum (\sigma_k x_k - \sigma_{k'} x_{k'}) / 2A)$;

2: $Eq := \sqrt{A/(A-1)}(Eq, \Delta \rightarrow \Delta/(A/(A-1)), x_k \rightarrow x_k \sqrt{A/(A-1)}$;

3: $Eq := Eq, \sigma_k^2 \rightarrow 1, \Delta = \sum_k (x_k^2 - (2n_k + 1))$;

4: $Eq := Eq \prod \bar{\Phi}_{i_k}(x_k)$;

5: $Eq := x_k = (\sqrt{i_k} + 1 \bar{\Phi}_{i_k+1}(x_k) + \sqrt{i_k} \bar{\Phi}_{i_k-1}(x_k)) / (\sqrt{2} \bar{\Phi}_{i_k}(x_k))$;

6: **for** $j, j' = 1, \dots, j_{\max}$ **do**
 $D_{j'j} := \Phi_{i_k}(x_k) \rightarrow I(i'_k, i_k)$;

end for

7: $D\Psi_{ji}^D = \Psi_{ji}^D E_i^D \rightarrow E_i^D$ and Ψ_{ji}^D ;

Первые шесть шагов алгоритма DC реализованы в CAS MAPLE, седьмой шаг — решение алгебраической задачи на собственные значения, выполнялся с помощью процедуры IMTQL2 [25] из пакета программ LAPACK, реализованной на языке FORTRAN 77.

В табл. 1 и 2 представлены резонансные значения энергии E_S (E_A) для S (A) состояний при $A = 3$ и $A = 4$, $\sigma = 1/10$, $\alpha = 20$, которые соответствуют максимумам коэффициентов прохождения $|T|_{ii}^2$, приведённым на рис. 2 и 4.

В случае $A = 3$ имеется шесть одинаковых ям в конфигурационном пространстве \mathbf{R}^3 . Симметрия относительно плоскости $\xi_0 = 0$, в которой локализованы барьеры, объясняет наличие дублетов (см. рис. 2). Наличие состояний с определённой симметрией связано с тем, что ось ξ_0 — ось симметрии третьего порядка. В отличие от случая $A = 2$ имеется одно дополнительное условие, связанное с наличием условия симметрии: в области, ограниченной плоскостями парных ударов «12» и «13», собственные функции задачи должны быть симметричны или антисимметричны относительно плоскости $x_2 = x_3$.

Энергетические уровни симметричных и антисимметричных состояний разделяются. Первые 3 симметричных и одно антисимметричное решения задачи в указанной области имеют лидирующие компоненты (см. также табл. 1):

Таблица 1
Классификация первых десяти резонансных значений энергии E_S (E_A) симметричных (ангисимметричных) состояний для $A = 3$ частиц при $\sigma = 1/10$, $\alpha = 20$ и их аппроксимации E_i^D с помощью осцилляторного базиса. В последней строке лидирующие компоненты $(i_1 i_2 i_3) \equiv \Phi_{i_1}(x_1)\Phi_{i_2}(x_2)\Phi_{i_3}(x_3)$ функций в октанте $\sigma_1 = -\sigma_2 = -\sigma_3$

| i | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|----------------------------------|-------|-----------------|-----------------|--------|--------|-----------------|---------------------------|-----------------|-----------------|------------|
| $A = 3$ | | | | | | | | | | |
| E_S | 8, 18 | 11, 11 | | 12, 60 | 13, 93 | | 14, 84 | 15, 79 | | 16, 67* |
| | 8, 31 | 11, 23 | | 14, 00 | | | 14, 88 | | | 16, 73(8)* |
| E_A | | | 11, 55 | | | 14, 46 | | | 16, 18 | |
| | | | 11, 61 | | | 14, 56 | | | 16, 25 | |
| E_i^D | 8, 19 | 11, 09 | 11, 52 | 12, 51 | 13, 86 | 14, 42 | 14, 74 | 15, 67 | 16, 11 | 16, 53 |
| L.c. Ψ^D $(i_1 i_2 i_3)$ | (111) | (113) +(131) | (113) -(131) | (311) | (133) | (115) -(151) | (133) -(115) -(151) | (313) +(331) | (331) -(313) | (511) |

Таблица 2
Классификация первых десяти резонансных значений энергии E_S симметричных состояний для кластера из $A = 4$ частиц и их аппроксимации E_i^{D31}, E_i^{D22} при $\sigma = 1/10$, $\alpha = 20$. В последних двух строках лидирующие компоненты $(i_1 i_2 i_3 i_4) \equiv \Phi_{i_1}(x_1)\Phi_{i_2}(x_2)\Phi_{i_3}(x_3)\Phi_{i_4}(x_4)$ функций в области прострства определяемой равенствами $\sigma_1 = -\sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4$ для $D31$ и $\sigma_1 = \sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4$ для $D22$. Квадратные скобки подразумевают суммирование по всем перестановкам чисел.

| i | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|--|--------|--------|---------|--------|----------|------------------------|------------------------|--------|-----------------------|-----------------------|
| E_S | 10, 12 | 11, 89 | 12, 71 | 14, 86 | 15, 19 | 15, 41 | 15, 86 | 16, 37 | 17, 54 | 17, 76 |
| E_i^{D31} | 10, 03 | | 12, 60 | 14, 71 | 15, 04 | | | 16, 18 | 17, 34 | 17, 56 |
| E_i^{D22} | | 11, 76 | | | | 15, 21 | 15, 64 | | | |
| L.c. Ψ^{D31} $(i_1 i_2 i_3 i_4)$ | (1111) | | (1 113) | (3111) | (1 331) | | | (5111) | (3 113) -(1 133) | (3 113) +(1 133) |
| L.c. Ψ^{D22} $(i_1 i_2 i_3 i_4)$ | | (1111) | | | | (13 11) +(11 13) | (13 11) -(11 13) | | | |

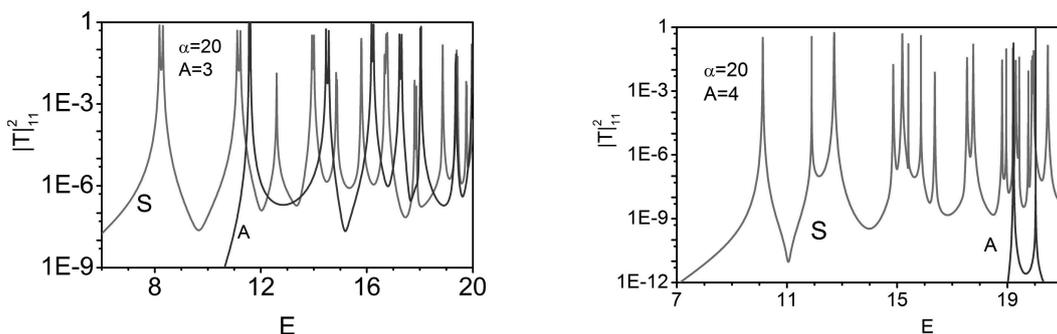


Рис. 4. То же, что и на эпюрах рис. 2 для $A = 3, 4$, $\sigma = 1/10$, $\alpha = 20$, но в логарифмическом масштабе.

$$2\sqrt{2}\bar{\Phi}_1(x_1)\bar{\Phi}_1(x_2)\bar{\Phi}_1(x_3), \quad 2\bar{\Phi}_1(x_1)(\bar{\Phi}_1(x_2)\bar{\Phi}_3(x_3) + \bar{\Phi}_3(x_2)\bar{\Phi}_1(x_3)),$$

$$2\sqrt{2}\bar{\Phi}_3(x_1)\bar{\Phi}_1(x_2)\bar{\Phi}_1(x_3)2\bar{\Phi}_1(x_1)(\bar{\Phi}_1(x_2)\bar{\Phi}_3(x_3) - \bar{\Phi}_3(x_2)\bar{\Phi}_1(x_3)).$$

Таким образом, распространяя эти решения на все шесть ям, получаем шесть симметричных и два антисимметричных решения. Нижние уровни энергетического спектра образуют последовательности мультиплетов.

При $A = 4$ имеется 14 ям в конфигурационном пространстве \mathbf{R}^4 . Шесть ям в центральной области, каждая из них соответствует случаю (с обозначением «D22»), когда две частицы расположены по одну сторону барьера, а оставшиеся две частицы — по другую сторону. Остальные восемь ям (с обозначением «D31») расположены по краям центральной области, каждая из них соответствует случаю, когда одна частица находится по одну сторону барьера и остальные три частицы — по другую сторону. Поскольку ямы D22 уже, чем ямы D31, уровни энергий E_i^{D22} с одинаковыми квантовыми числами i_1, i_2, i_3, i_4 расположены выше соответствующих уровней E_i^{D31} (см. табл. 2). Пики, соответствующие локализации волновой функции в ямах D22 являются синглетными, поскольку в окрестности гиперплоскости симметрии $\xi_0 = 0$ барьеров нет, за исключением начала координат. Два набора ям D31, аналогично случаю трёх частиц $A = 3$ разделены барьерами, и в этом случае должны наблюдаться дублеты. Однако они не наблюдаются (см. рис. 2), поскольку два набора ям D31 разделены двумя барьерами, поэтому уровни в дублете расположены ближе друг к другу по сравнению с $A = 3$. Дублеты будут наблюдаться при больших значениях α , когда ширина пика станет сравнима с расщеплением уровней.

Собственная функция, соответствующая первому максимуму коэффициента прохождения (см. рис. 5) имеет минимум в окрестности нуля, т.е. локализована в ямах D31, а функция второго максимума локализована в окрестности нуля, т.е. в ямах D22, что подтверждено в последних строках табл. 2.

Аппроксимация непроницаемыми стенками рассмотренного выше случая узкого барьера $\alpha = 20$, $\sigma = 0, 1$ при $A = 3, 4$ даёт оценку с погрешностью менее 2% вычисленных с помощью алгоритма ДС резонансных энергий E^D , приведённых в таблицах 1 и 2, и позволяет классифицировать соответствующие квазистационарные состояния.

7. Заключение

В работе предложена модель квантового туннелирования кластера, состоящего из A тождественных частиц, связанных парными потенциалами осциляторного типа, через короткодействующие потенциальные барьеры. Модель сформулирована в новом представлении симметризованных координат (ПСК).

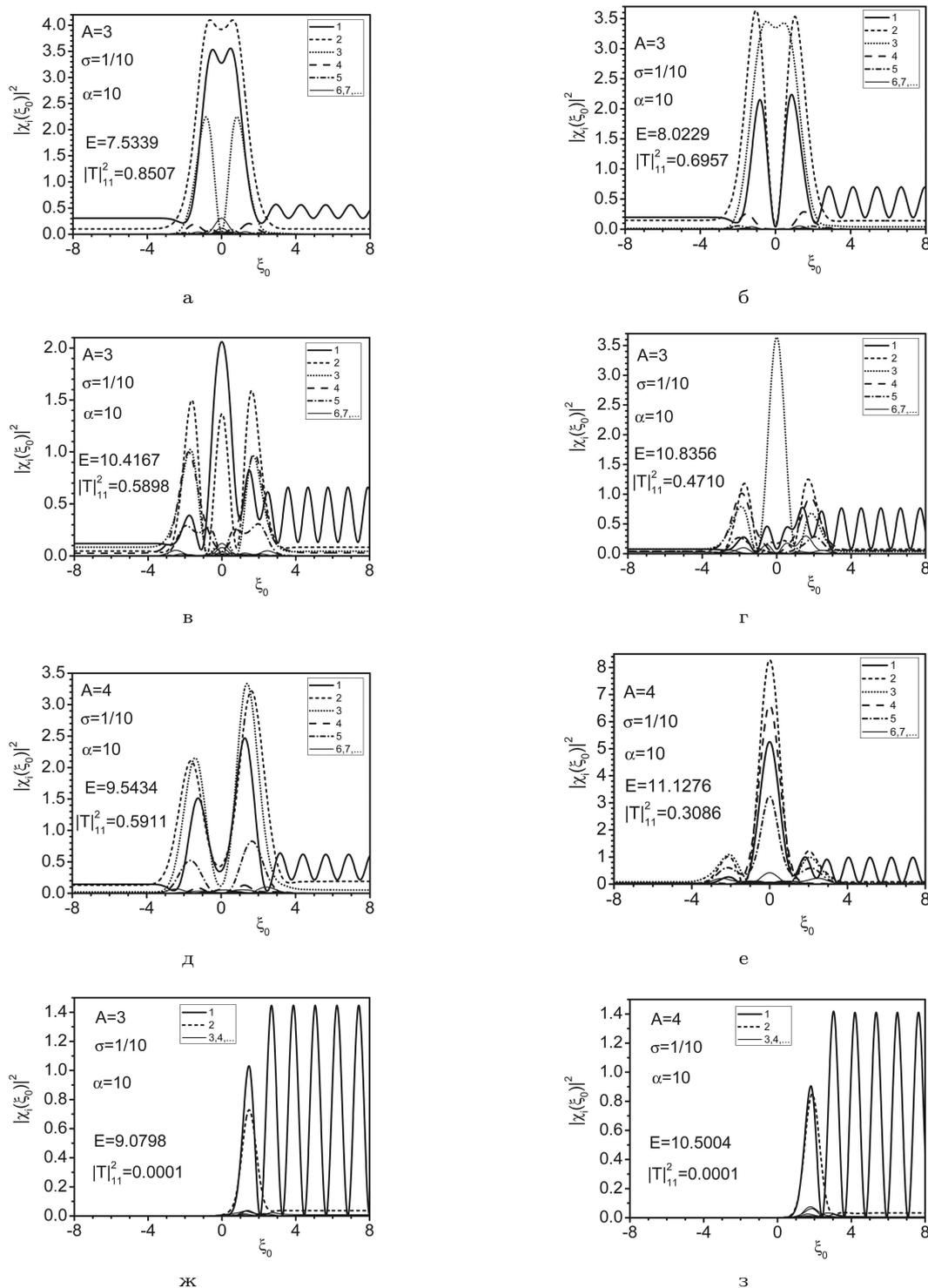


Рис. 5. Плотности вероятности $|\chi_i(\xi_0)|^2$ компонент разложения (12) функции падающей волны основного S-состояния кластера в зависимости от энергии столкновения E , соответствующие отдельным максимумам и минимумам коэффициента прохождения из рис. 2. Параметры гауссовского барьера $\alpha = 10$ и $\sigma = 0.1$

Построена математическая модель составной системы (кластера) из нескольких тождественных частиц в s -волновом приближении (в одномерном евклидовом пространстве) с дискретным спектром по внутренним симметризованным переменным относительного движения в системе центра масс и непрерывным спектром по переменной центра масс системы (кластера).

Спиновая часть волновой функции может быть определена, используя подходящую стандартную процедуру, и включена в более строгие вычисления. В данной формулировке многоканальная задача рассеяния для уравнения Шрёдингера с несколькими короткодействующими отталкивающими барьерами сведена к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по переменной центра масс системы с \mathbf{R} -матричными условиями третьего рода в методе сильной связи каналов. Для решения краевой задачи с однородными условиями третьего рода разработан и применён комплекс программ KANTBP 3.0. Редукция реализована разложением волновой функции по осцилляторному базису кластера нескольких связанных частиц, который симметричен или антисимметричен относительно перестановки A исходных декартовых координат. Этот базис построен в виде линейной комбинации $(A - 1)$ частичных осцилляторных базисных функций и имеет существенно меньшую кратность вырождения по сравнению с исходным базисом, что позволяет редуцировать компьютерный ресурс. Получены аналитические выражения для спектра и кластерных функций гармонического двумерного и трёхмерного осцилляторов, симметричных или антисимметричных относительно перестановки трёх $A = 3$ и четырёх $A = 4$ частиц в новых симметризованных координатах ($\xi = \{\xi_1 = \rho \cos \varphi, \xi_2 = \rho \sin \varphi\} \in \mathbf{R}^2 \setminus \{0\}$) и ($\xi = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3\} \in \mathbf{R}^3$), и указана кратность вырождения энергетических уровней. Подход применим также для двумерного и трёхмерного евклидова пространства при использовании осцилляторного базиса соответствующей размерности.

Проведён анализ эффекта квантовой прозрачности, т.е. резонансного туннелирования кластера из нескольких тождественных частиц через отталкивающие барьеры. Показано, что этот эффект обусловлен существованием подбарьерных квазистационарных состояний, погруженных в непрерывный спектр. Для расчёта энергий квазистационарных состояний и их классификации разработан алгоритм решения краевой задачи для эллиптического уравнения в A -мерной области специального типа на основе разложения решения по A -мерному осцилляторному базису. Показано, что для рассмотренных симметричных гауссовских барьерных потенциалов положения энергии симметричных (S) и антисимметричных (A) квазистационарных состояний близки, из-за сходной мультиплетной структуры осцилляторных уровней энергии при фиксированном числе частиц. Это обстоятельство объясняет сходное поведение коэффициентов прохождения из симметричных S и антисимметричных A состояний со сдвигом пороговых энергий. Однако мультиплетная структура положений энергий этих квазистационарных состояний изменяется с увеличением числа частиц так, что для трёх частиц главные максимумы двойные, тогда как для двух и четырёх частиц они однократные. Численные эксперименты и анализ решений показали также, что для более высоковольтных возбуждённых начальных состояний кластеров максимумы коэффициента прохождения сдвигаются в сторону больших значений энергии столкновения, при этом набор положений пиков (максимумов) из возбуждённых состояний с учётом их смещения остаётся примерно таким же, как и из основного состояния.

Предложенный подход в представлении симметризованных координат (ПСК) и разработанные комплексы символьно-численных алгоритмов и программ при соответствующей адаптации применимы для математически корректного анализа тетраэдральной и октаэдральной симметрии в ядрах, квантовой диффузии молекул и микрокластеров через поверхность, механизма фрагментации в генерации нейтронно-избыточных лёгких ядрах, а также механизмов подбарьерного слияния тяжёлых ядер.

Литература

1. Пеньков Ф. М. Квантовая прозрачность барьеров для структурных частиц //

- ЖЭТФ. — 2000. — Т. 118. — С. 806–815. [Pen'kov F. M. Quantum Transmittance of Barriers for Composite Particles // ZHETF. — 2000. — Vol. 91. — P. 698–705. — (in russian).]
2. *Pijper E., Fasolino A.* Quantum Surface Diffusion of Vibrationally Excited Molecular Dimers // J. Chem. Phys. — 2007. — Vol. 126. — P. 014708.
 3. *Ahsan N., Volya A.* Quantum Tunneling and Scattering of a Composite Object Reexamined. // Phys. Rev. C. — 2010. — Vol. 82. — P. 064607.
 4. *Ershov S. N., Danilin B. V.* Breakup of Two-Neutron Halo Nuclei // Phys. Part. Nucl. — 2008. — Vol. 39. — Pp. 1622–1720.
 5. *Гринюк Б. Е., Сименюг И. В.* Структура ядра ${}^6\text{He}$ в трёхчастичной модели // Ядерная физика. — 2009. — Т. 72. — С. 10–24. [Grinyuk B. E., Simenog I. V. Structure of the ${}^6\text{He}$ Nucleus in the Three-Particle Model // Phys. Atom. Nucl.— 2009. — Vol. 72. — P. 6–19. — (in russian).]
 6. *Sünkel W., Wildermuth K.* About the Antisymmetrization of Many Nucleon Systems // Phys. Lett. B. — 1972. — Vol. 41. — Pp. 439–442.
 7. *Вильдермут К., Тан Я.* Единая теория ядра. — Мир, 1980. [Wildermuth K. and Tang Y. C. A Unified Theory of the Nucleus. — Vieweg: Braunschweig, 1977.]
 8. *Ринг Р., Расмуссен Д., Массман Г.* Проблемы проницаемости неодномерных барьеров // ЭЧАЯ. — 1976. — Т. 7. — С. 916–951. [Barrier Penetration Theory in more than One Dimension / R. Ring, J. Rasmussen, H. Massman // Sov. J. Part. Nucl. — 1976. — Vol. 7. — P. 916–951. — (in russian).]
 9. *Hagino K., Rowley N., Kruppa A. T.* A Program for Coupled-Channel Calculations with All Order Couplings for Heavy-Ion Fusion Reactions // Comput. Phys. Commun. — 1999. — Vol. 123. — P. 143.
 10. *Shilov V. M.* Sub-Barrier Fusion of Intermediate and Heavy Nuclear Systems // Phys. Atom. Nucl. — 2012. — Vol. 75. — Pp. 485–490.
 11. Channeling Problem for Charged Particles Produced by Confining Environment / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, V. L. Derbov et al. // Phys. Atom. Nucl. — 2009. — Vol. 72. — Pp. 811–821.
 12. Symbolic-Numerical Algorithms to Solve the Quantum Tunneling Problem for a Coupled Pair of Ions / A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar et al. // Lecture Notes in Computer Science. — 2011. — Vol. 6885. — Pp. 175–191.
 13. Tetrahedral Symmetry in Nuclei: New Predictions Based on the Collective Model / A. Dobrowolski, A. Gózdź, A. Mazurek, K. Dudek // International Journal of Modern Physics E. — 2011. — Vol. 20. — Pp. 500–506.
 14. *Tagami S., Shimizu Y. R., Dudek J.* A Microscopic Study of Tetrahedral-Symmetric Nuclei by Angular-Momentum and Parity Projection Methods // arXiv:1301.3279v1. — 2013.
 15. *Fock V. A.* Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems // Zs. Phys. — 1930. — Vol. 61. — Pp. 126–148.
 16. *Kanada-En'yo Y., Hidaka Y.* α -cluster Structure and Density Waves in Oblate Nuclei // Phys. Rev. C. — 2011. — Vol. 84. — Pp. 014313–1–16.
 17. *Гусев А. А.* Новый метод построения осцилляторных функций квантовой системы тождественных частиц в симметризованных координатах // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2013. — № 3. — С. 52–67. [Gusev A. A. New Method for Constuction of the Oscillator Functions of a Quantum System of Identical Particles in Symmetrized Coordinates // Bulletin of PFUR, Series “Mathematics. Information Sciences. Physics.”. — 2013. — No 3. — P. 52–67. — (in russian).]
 18. The General Harmonic-Oscillator Brackets: Compact Expression, Symmetries, Sums and Fortran Code / G. P. Kamuntavičius, R. K. Kalinauskas, B. R. Barrett et al. // Nucl. Phys. A. — 2001. — Vol. 695. — Pp. 191–201.
 19. *Kramer P., Moshinsky M.* Group Theory of Harmonic Oscillators (III). States with Permutational Symmetry // Nucl. Phys. — 1966. — Vol. 82. — Pp. 241–274.

20. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. — М.: Наука, 1979. [Abramovits M., Stigun I. A. Handbook of Mathematical Functions. — New York: Dover, 1972.]
21. *Baker Jr. G. A.* Degeneracy of the n-Dimensional, Isotropic, Harmonic Oscillator // Phys. Rev. — 1956. — Vol. 103. — Pp. 1119–1120.
22. *Lévy-Leblond J.-M.* Global and Democratic Methods for Classifying N Particle States // Ann. Phys. — 1966. — Vol. 7. — Pp. 2217–2229.
23. KANTBP 2.0: New Version of a Program for Computing Energy Levels, Reaction Matrix and Radial Wave Functions in the Coupled-Channel Hyperspherical Adiabatic Approach / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich // Comput. Phys. Commun. — 2008. — Vol. 179. — Pp. 685–693.
24. *Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Vinitzky S. I., Abrashkevich A. G.* A Program Package for Solution of Two-Dimensional Discrete and Continuum Spectra Boundary-Value Problems in Kantorovich (Adiabatic) Approach. — 2013. — <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/indexe.html>.
25. *Уилкинсон Д., Райнш Ц.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. — М.: Машиностроение, 1976. [Wilkinson, J. H. and Reinsch, C. Handbook for Automatic Computation. Linear Algebra. — Berlin: Springer-Verlag, 1971.]

UDC 517.958:530.145.6

The Model of Tunneling of Clusters Through Repulsive Barriers in Symmetrized Coordinates Representation

A. A. Gusev

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research*

6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980

Formulation of a mathematical model for the system A identical particles with pair interaction of oscillator type in the repulsive barrier potentials in the form of a boundary-value problem for elliptic equations in new symmetrized coordinates, effective methods, algorithms and program complexes for the analysis of its solutions are presented. Reduction of the problem for a cluster of A identical particles to subsystems “(one particle) + (cluster of $(A - 1)$ particles)” and “(a cluster of A_{b_1} particles) + (cluster of A_{b_2} particles)” is considered. The solution of the boundary-value problem for a cluster of A identical particles sought the form of an expansion over the cluster $(A - 1)$ -dimensional oscillator basis functions, symmetric and antisymmetric with respect to permutations of A identical particles, i.e. in the symmetrized coordinates representation [Gusev A.A. // Bulletin of PFUR. Series “Mathematics, Information Sciences. Physics”. — 2013. — No 3. — P. 52–67]. The problem is reduced to the boundary value problem for a set of coupled second-order ordinary differential equations with the \mathbf{R} -matrix third type boundary conditions in the close coupling channel method. The amplitude matrix of transmission and reflection and the eigenfunctions of the continuous spectrum of the scattering problem with respect to the center of mass are calculated with help of the program complex KANTBP 3.0. The effectiveness of the approach is demonstrated by the analysis of the solutions of the quantum tunneling of clusters consisting of a number of identical particles with oscillator-type pair interaction through a repulsive barrier in the s-wave approximation. The analysis of the effect of quantum transparency, i.e. resonant tunneling of a cluster of several identical particles through the repulsive barriers, which is due to the presence of quasi-stationary states embedded in a continuum is given. To calculate the positions of the energy of quasistationary states and their classification, the algorithm of solving the boundary value problems for elliptic equations in A -dimensional domain of a special type based on the decomposition of solutions A -dimensional oscillator basis is developed. The developed approach and set of programs focused on the analysis of the quantum diffusion of molecules, channeling and tunneling clusters and ions in crystals, as well as tetrahedral and octahedral symmetry of the nuclei.

Key words and phrases: cluster models, nuclear reaction models and methods, coupled-channel models, quantum tunneling.