Г.Ф. ФІЛІППОВ, М.Д. СОЛОХА-КЛИМЧАК, О.В. НЕСТЕРОВ
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
*(Вул. Метрологічна 14-б, Київ, 03143; e-mail: nesterov@bitp.kyiv.ua)*

# ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ АЛГЕБРАЇЧНОЇ ВЕРСІЇ МЕТОДУ РЕЗОНУЮЧИХ ГРУП У РАЗІ ОДНОВИМІРНОГО ВИПАДКУ. І. АНАЛІТИЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

УДК 539.14

*На прикладі одновимірного випадку розглядаються особливості проведення аналітичних розрахунків в межах Алгебраїчної версії методу резонуючих груп, яка ґрунтується на розкладі хвильової функції квантової системи по осциляторному базису. Детально обговорено побудову матричних елементів гамільтоніана за допомогою техніки твірних функцій та твірних матричних елементів. Знайдено асимптотичну поведінку коефіцієнтів розкладу хвильової функції по осциляторному базису при прямуванні осциляторного квантового числа до нескінченності у випадку неперервного спектра. Отримана асимптотична залежність матричних елементів потенціальної енергії від осциляторного квантового числа з гаусівським потенціалом.*

*Ключові слова*: одновимірний випадок, алгебраїчна версії методу резонуючих груп, осциляторний базис, матричні елементи, асимптотика коефіцієнтів.

## 1. Вступ

Алгебраїчна версія методу резонуючих груп (АВ МРГ), основні положення якого спочатку були сформульовані в роботах [1, 2], – це кластерний підхід, технічно ґрунтований на розкладанні функцій відносного руху кластерів за осциляторним базисом. Він від самого початку орієнтований на опис властивостей станів дискретного та неперервного спектра легких атомних ядер з єдиних позицій. Останнє робить його особливо цікавим, оскільки дослідження станів неперервного спектра легких атомних ядер уже багато років привертає увагу теоретиків і експериментаторів. Пояснення тому просте. Ці ядра, як правило, мають лише невелику кількість станів дискретного спектра. Переважна кількість їхніх станів перебуває у спектрі неперервному.

З точки зору успішності використання, АВ МРГ вже відбулася як факт. За роки її застосування опублікована вже дуже велика кількість робіт, присвячених дослідженню станів дискретного спектра легких атомних ядер, одноканальних та багатоканальних реакцій за участю легких атомних ядер, зв'язку колективних та кластерних мод руху, вплив урахування принципу Паулі на властивості легких атомних ядер, вивчення властивостей гіперядер та інше [3–12]. При цьому, на жаль, завдяки їх великій кількості, ми тут не зможемо надати посилання на багато і багато робіт, які були виконані в рамках АВ МРГ, що не зменшує їх значущості. Тут відразу слід відмітити, що поряд з роботами по розвитку і застосуванню АВ МРГ, слід ознайомитись з роботами [13–16], тісно пов'язаними з останньою ідеологічно.

Цитування: Філіппов Г.Ф., Солоха-Климчак М.Д., Нестеров О.В. Основні положення алгебраїчної версії методу резонуючих груп у разі одновимірного випадку. І. Аналітичні результати. *Укр. фіз. журн.* **70**, №7, 429 (2025).
© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

Для того, щоб легше було розібратися в можливостях застосування АВ МРГ, бажано детальніше ознайомитися з особливостями роботи з осциляторним базисом, використання якого є основою останньої. Відповідно, метою цієї роботи є прагнення допомогти читачеві на одновимірних прикладах, що не зменшує загальності розгляду, глибше проникнути в "таємниці" використання осциляторного базису для опису станів як дискретного, так і неперервного спектра квантових систем. Для цього ми розглядаємо одновимірні квантово-механічні задачі, що моделюють наявність зв'язаних або квазістаціонарних станів з потенціалами гаусівського типу. Останнє не є дуже великим обмеженням на системи, які ми можемо розглядати, оскільки базис гаусівських функцій є повним і ми можемо представити любий потенціал з розумною точністю як суперпозицію гаусів.

На даний час нам відомо лише дві роботи, в яких демонструвалась можливість використання осциляторного базису для опису станів неперервного спектра одновимірних квантових систем [17, 18]. Наша робота відрізняється, в основному, від двох останніх тим, що ми значну увагу приділяємо демонстрації техніки аналітичних розрахунків розвинутій в рамках АВ МРГ. Ідея виконання цієї роботи належить Г.Ф. Філіппову, який залишив свої нотатки з приводу її написання.

Тобто нам належить розв'язувати рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$
$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

де

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2},$$

а $\hat{V}(x)$ задається у вигляді гаусівської функції або суперпозиції гаусівських функцій вигляду

$$V_0 \exp\left(-\frac{x^2}{r_0^2}\right).$$

Як видно з останнього, наш потенціал завжди є функція парна, завдяки чому наша задача розпадається практично на дві задачі: з додатною та від'ємною парністю. Зазначимо, що надалі ми здебільшого будемо для скорочення тексту та більшої визначеності, виписувати формули для додатної парності. Всі необхідні вирази для від'ємної парності отримуються аналогічно для додатної, або можуть бути отримані з формул для останньої простим переозначенням індексів. Конкретні ж розрахунки, які будуть представлені у другій частині статті, проводяться для обох випадків.

Замість того, щоб розв'язувати диференціальне рівняння для хвильової функції $\Psi(x)$, ми представляємо цю функцію у вигляді ряду – розкладу за функціями Ерміта.

$$\Psi(x) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m \phi_m(x),$$
$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2^m m!\, r_0\sqrt{\pi}}} H_m(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad (1)$$

де змінна $x$ знерозмірена осциляторним радіусом $r_0$. При цьому, коли розглядаються парні стани, то $m$ – парне, а коли непарні – $m$ – непарні, що визначається властивостями парності поліномів Ерміта. Все це приводить нас до системи алгебраїчних рівнянь вигляду

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

яку ми розв'язуємо, розглядаючи стани як дискретного, так і неперервного спектра, задаючи відповідні граничні умови, знаходячи набір коефіцієнтів, що являє собою хвильову функцію задачі в осциляторному поданні та енергії зв'язаних станів або характеристики процесу розсіювання. Очевидно, що нашу систему рівнянь елементарно можливо переписати у матричному вигляді. Тобто працюючі в АВ МРГ ми працюємо в рамках матричної квантової механіки. Використовуване представлення зазвичай називають енергетичним, або $n$-представленням.

## 2. Обчислення матричних елементів гамільтоніана, твірні функції та твірні матричні елементи

Матричні елементи оператора кінетичної енергії, обчислені на осциляторних функціях, відомі. У нашому випадку, якщо їх виражати в одиницях $\hbar^2/mr_0^2$, мають вигляд:

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

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

Тут, відповідно до нашої попередньої домовленості, ми виписали матричні елементи оператора кінетичної енергії тільки для випадку позитивної парності. А на що тут треба звернути увагу, так це те, що матриця кінетичної енергії є тридіагональною, тобто матрицею Якобі, або $J$-матрицею. Методи матричної квантової механіки, в яких кінетична енергія тридіагональна, часто називають методами $J$-матриці, що стосується також і АВ МРГ.

Оскільки на практиці обчислення матричних елементів оператора кінетичної енергії зазвичай не викликає труднощів, то більшою мірою ми зосередимо свою увагу на обчисленні матричних елементів оператора потенціальної енергії. Для цього нам потрібно обчислювати інтеграли вигляду

$$\langle 2n|\,\hat{V}|2\tilde{n}\rangle = V_0 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \phi^*_{2n}(x) \exp\left(-\frac{x^2}{b_0^2}\right) \phi_{2\tilde{n}}(x)\,dx.$$

Формули для обчислень таких інтегралів відомі (див., наприклад, [19]). Тому ми можемо відразу записати, що

$$\langle 2n|\,\hat{V}|2\tilde{n}\rangle = (-1)^{n+\tilde{n}} V_0 z^{1/2} (1-z)^{n+\tilde{n}} \times$$
$$\times \sqrt{\frac{(2n-1)!!(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!(2\tilde{n})!!}}\, {}_2F_1\left\{-n, -\tilde{n}; \frac{1}{2}; \left(\frac{z}{1-z}\right)^2\right\}, \qquad (3)$$

або в розгорнутому вигляді:

$$\langle 2n|\,\hat{V}|2\tilde{n}\rangle = (-1)^{n+\tilde{n}} V_0 z^{1/2} (1-z)^{n+\tilde{n}} \sqrt{\frac{(2n)!(2\tilde{n})!}{2^{2n}2^{2\tilde{n}}}} \times$$
$$\times \sum_{k=0}^{\min\{n,\tilde{n}\}} \frac{2^{2k}}{(n-k)!\,(\tilde{n}-k)!\,(2k)!} \left(\frac{z}{1-z}\right)^{2k}, \qquad (4)$$

де

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

Хорошою перевіркою на справедливість формул (3), (4) є вибір в ролі оператора потенціальної енергії одиниці. У нас це досягається тим, що ми можемо спрямувати до нескінченності $b_0$, перетворюючи $z$ на одиницю. Це повинно призвести до того, що матриця потенціальної енергії перетвориться на діагональну матрицю з матричними елементами $V_0$ завдяки ортонормованості функцій Ерміта.

Здається, що задача розрахунків матричних елементів гамільтоніана розв'язана. Але під час розгляду реальних задач фізики доводиться стикатися і з набагато складнішими виразами для матричних елементів і працювати з матричними рівняннями великої розмірності, де ситуація стає не такою простою. Тому для обчислення матричних елементів гамільтоніана було розроблено спеціальну техніку, що дістала назву техніки твірних функцій і твірних матричних елементів [20, 21], тісно пов'язану з поданням Баргмана для осциляторних функцій.

Розглянемо похідну функцію для функцій Ерміта в запису, що збігається за своїм виглядом із записом модифікованої орбіталі Блоха–Брінка. Тобто

$$\Phi_x(R) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} r_0^{1/2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}Rx - \frac{R^2}{2}\right\} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \qquad (5)$$

Останній розклад ставить у відповідність кожній функції Ерміта вираз:

$$\phi_n(R) = \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n,$$

який можна розглядати як образ осциляторної функції в представленні генераторних параметрів. Вибір коефіцієнта $1/\sqrt{n!}$ дає нам змогу працювати з нормованими функціями.

Для того, щоб обчислити твірні матричні елементи деякого оператора $\widehat{O}(x)$ введемо ще одну орбіталь вигляду (5), у якій генераторний параметр $R$ замінено на генераторний параметр $S$.

$$\Phi_x(S) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} r_0^{1/2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2}Sx - \frac{S^2}{2}\right\} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} S^n \frac{1}{\sqrt{2^2 n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \qquad (6)$$

Інтеграл

$$O_{RS} = \int \Phi_x(R)\, \widehat{O}(x)\, \Phi_x(S)\,dx$$

і називається твірним матричним елементом оператора $\widehat{O}(x)$. Це пов'язано з тим, що його можна

подати у вигляді розкладу:

$$O_{RS} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} \langle n|\widehat{O}(x)|\tilde{n}\rangle \frac{1}{\sqrt{n!}} R^n \frac{1}{\sqrt{\tilde{n}!}} S^{\tilde{n}}.$$

Звідки видно, що коефіцієнтами розкладу твірного матричного елемента за функціями $\phi_n(R)$ і $\phi_{\tilde{n}}(S)$ є шукані матричні елементи оператора $\widehat{O}(x)$ як коефіцієнти перед $\phi_n(R)\,\phi_{\tilde{n}}(S)$. Очевидно, що у повній відповідності з означенням твірної функції це еквівалентно тому, що диференціюючи останній вираз потрібну кількість разів за $R$ і за $S$ з подальшим їхнім зануленням, ми можемо одержати будь-який потрібний для нас матричний елемент, що розраховується на осциляторних базисних функціях.

Виписавши основні співвідношення для обчислення твірних матричних елементів, треба згадати про те, що якщо ми маємо функції, задані в просторі генераторних змінних, то відповідно до канонів квантової механіки, можемо в цих самих змінних записати оператори фізичних величин. У деяких випадках це легко вдається зробити.

Так, в одиницях $\hbar\omega$ оператор гамільтоніана гармонійного осцилятора набуває вигляду:

$$\hat{H}_{occ} = R\frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{2}.$$

Це випливає з того очевидного факту, що $R$ можна розглядати як оператор народження осциляторного кванта, а $\partial/\partial R$ оператором його знищення, оскільки:

$$R\phi_n(R) = \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1}, \quad \partial/\partial R\,\phi_n = \sqrt{n}\phi_{n-1},$$
$$\hat{H}_{occ}\phi_n(R) = \left(R\frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{2}\right)\phi_n(R) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\phi_n(R).$$

Виявляється, що оператор:

$$\hat{k} = -i\frac{d}{dx} \Rightarrow -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dR} - R\right)$$

і, відповідно,

$$\frac{\hat{k}^2}{2} = \frac{d^2}{2dx^2} \Rightarrow \frac{1}{4}\left(\frac{d}{dR} - R\right)^2 =$$
$$= \frac{1}{4}\left(\frac{d^2}{dR^2} - 2R\frac{d}{dR} - 1 + R^2\right)$$

являють собою оператора імпульсу та кінетичної енергії.

Тобто

$$-\frac{\hat{k}^2}{2}\phi_n(R) = -\frac{1}{4}\sqrt{n(n-1)}\phi_{n-2}(R) +$$
$$+\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\phi_n(R) - \frac{1}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\phi_{n+2}(R).$$

Представимо явні вигляди трьох цікавих для нас твірних матричних елементів та їх формальних розкладів.

Це інтеграл перекриття з одиничним оператором, або інтеграл нормування:

$$I_{RS} = \exp(RS) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}R^n S^{\tilde{n}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}R^n\frac{1}{\sqrt{n!}}S^{\tilde{n}} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(R)\phi_n(S) = \sum_{n=0,\tilde{n}=0}^{\phi_n}(R)\phi_{\tilde{n}}(S)\delta_{n,\tilde{n}}. \qquad (7)$$

Твірний матричний елемент кінетичної енергії:

$$T_{RS} = 1/2\exp(RS)\left(-1+(R-S)^2\right) =$$
$$= \sum_{n=0,\tilde{n}=0}^{\infty}\phi_n(R)\,\phi_{\tilde{n}}(S)\,\delta_{n,\tilde{n}} =$$
$$= \frac{1}{2}\left(-1+(R-S)^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\phi_n(R)\phi_n(S). \qquad (8)$$

Твірний матричний оператора потенціальної енергії:

$$V_{RS} = V_0 z^{1/2}\exp\left\{zRS - \frac{1-z}{2}\left(R^2+S^2\right)\right\} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\tilde{n}=0}^{\infty}\langle n|\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle\,\phi_n(R)\,\phi_{\tilde{n}}(S). \qquad (9)$$

З цих виразів видно: матриця перекриття з одиницею є одиничною матрицею, що очевидно, оскільки власні функції гармонічного осцилятора ортонормовані. Матриця оператора кінетичної енергії тридіагональна, з елементами, які наведені в (5). І, звичайно, розглядаючи $\langle n|\,\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle$ з позитивною парністю, ми отримуємо матричний елемент у вигляді (3) або (4).

Наведені твірні матричні елементи (7), (8), (9) не мають властивості парності. Але їх можна спроектувати на стан із певною парністю стандартним чином. У нашому випадку це можливо зробити вже на рівні твірних матричних елементів, скориставшись зокрема тим, що твірні функції вигляду (5), (6) влаштовані таким чином, що для них

заміна $x$ на $-x$ еквівалентна заміні $R$ на $-R$. Покажемо результат на прикладі твірних матричних елементів оператора потенціальної енергії:

$$V_{RS}^{+} = z^{1/2}\mathrm{ch}\,(zRS)\exp\left\{-\frac{(1-z)}{2}\left(R^2+S^2\right)\right\} =$$

$$= z^{1/2}\sum_{n=0,\tilde{n}=0}^{\infty}\langle 2n|\hat{V}|2\tilde{n}\rangle\,\phi_{2n}\,(R)\,\tilde{\phi}_{2\tilde{n}}\,(S),$$

$$V_{RS}^{-} = z^{1/2}\mathrm{sh}\,(zRS)\exp\left\{-\frac{(1-z)}{2}\left(R^2+S^2\right)\right\} =$$

$$= z^{1/2}\sum_{n=0,\tilde{n}=0}^{\infty}\langle 2n+1|\hat{V}|2\tilde{n}+1\rangle\,\phi_{2n+1}\,(R)\,\tilde{\phi}_{2\tilde{n}+1}\,(S).$$

Можна й не робити такого проектування, але при цьому треба весь час пам'ятати про особливості парності поліномів Ерміта.

Розвиток АВ МРГ досяг рівня розгляду багатокластерних задач, де, зважаючи на величезну складність прямих формул для обчислення матричних елементів потенціальної енергії, практично єдиним способом їхнього обчислення є використання рекурентних співвідношень, джерелом яких може бути метод похідних функцій і похідних матричних елементів. Тут же, на простому прикладі, ми спробуємо викласти основні принципи їхнього отримання в рамках цього методу. Звернемося до твірного матричного елемента (9)

$$V_{RS} = V_0 z^{1/2}\exp\left\{zRS-\frac{1-z}{2}\left(R^2+S^2\right)\right\} =$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\tilde{n}=0}^{\infty}\langle n|\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle\,\phi_n\,(R)\,\phi_{\tilde{n}}\,(S). \qquad (10)$$

Подіємо оператором знищення кванта $\partial/\partial R$ на праву та ліву частину останньої рівності:

$$\frac{\partial V_{RS}}{\partial R} = \sum_{n,\tilde{n}}\langle n|\hat{V}|\tilde{n}\rangle\,\sqrt{n}\phi_{n-1}\,(R)\,\phi_{\tilde{n}}\,(S),$$

та

$$\frac{\partial V_{RS}}{\partial R} = \{zS-(1-z)\,R\}\,V_{RS} =$$

$$=\sum_{n,\tilde{n}}\langle n|\,\hat{V}|\tilde{n}\rangle\Big\{z\sqrt{\tilde{n}+1}\phi_n\,(R)\,\phi_{\tilde{n}+1}\,(S)\,-$$

$$-\,(1-z)\,\sqrt{n+1}\phi_{n+1}\,(R)\,\phi_{\tilde{n}}\,(S)\Big\}.$$

Прирівнюючи два останні вирази і зіставляючи коефіцієнти при однакових функціях, отримуємо рекурентне співвідношення для матричних елементів оператора потенціальної енергії:

$$\langle n|\,\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\Big\{z\sqrt{\tilde{n}}\,\langle n-1|\,\hat{V}\,|\tilde{n}-1\rangle\,-$$

$$-\sqrt{n-1}\,(1-z)\,\langle n-2|\,\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle\Big\}. \qquad (11)$$

Особливістю цього рекурентного співвідношення є те, що воно не працює при $n=0$, тобто для першого рядка матриці гамільтоніана з додатною парністю. Тому нам потрібно доповнити наше перше рекурентне співвідношення ще хоча б одним, яке нівелює цей недолік і приводить нас до повного набору рекурентних співвідношень.

Подіємо оператором знищення кванта $\partial/\partial S$ на праву та ліву частину рівності (10) і отримаємо:

$$\langle n|\,\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\tilde{n}}}\Big\{z\sqrt{n}\,\langle n-1|\,\hat{V}\,|\tilde{n}-1\rangle\,-$$

$$-\sqrt{\tilde{n}-1}\,(1-z)\,\langle n|\,\hat{V}\,|\tilde{n}-2\rangle\Big\}. \qquad (12)$$

Цих двох рекурентних співвідношень цілком достатньо для отримання елементів повної матриці потенціальної енергії, якщо задати отримані за прямими формулами найпростіші з них для розгону рекурентних співвідношень.

Іноді спочатку отримані рекурентні співвідношення не є найзручнішими для проведення числових розрахунків. Тоді, маючи їх повний набір, можливо побудувати їх лінійні комбінації, які є більш цікавими. З нашими рекурентними співвідношеннями можливо проробити таке:

1. Помножимо обидві частини рекурентного співвідношення (11) на $\sqrt{n/\tilde{n}}$.

2. Помножимо обидві частини рекурентного співвідношення (12) на $\sqrt{n/\tilde{n}}$.

3. Віднімемо від першого результату другий і отримаємо нове рекурентне співвідношення

$$\left(\sqrt{\frac{n}{\tilde{n}}}-\sqrt{\frac{\tilde{n}}{n}}\right)\langle n|\,\hat{V}\,|\tilde{n}\rangle = (1-z)\times$$

$$\times\left(\sqrt{\frac{\tilde{n}-1}{n}}\,\langle n|\,\widehat{V}\,|\tilde{n}-1\rangle-\sqrt{\frac{n-1}{\tilde{n}}}\,\langle n-2|\,\widehat{V}\,|\tilde{n}\rangle\right).$$

Воно симетричне по відношенню до перестановки $n$ та $\tilde{n}$ і дозволяє розраховувати всі матричні

елементи матриці оператора потенціальної енергії крім діагональних. При цьому з нього видно, що всі недіагональні матричні елементи обертаються на нуль при $z = 1$.

4. Після виконання пунктів 1 та 2 додамо (11) до (12) і покладемо $\tilde{n}$ дорівнює $n$. Отримаємо

$$\langle n|\,\hat{V}\,|n\rangle = z\,\langle n-1|\,\widehat{V}\,|n-1\rangle - \\ -(1-z)\sqrt{\frac{n-1}{n}}\,\langle n-2|\,\widehat{V}\,|n\rangle.$$

Це рекурентне співвідношення дозволяє розраховувати матричні елементи оператора потенціальної енергії, які розміщені на головній діагоналі. При $z = 1$ всі матричні елементи дорівнюють $V_0$ відповідно до ортонормованості функцій Ерміта.

Діючи в попередній спосіб, можливо отримати і інші рекурентні співвідношення. Наприклад, використовуючи оператори $\partial^2/\partial R^2$, $\partial^2/\partial S^2$ та $\partial^2/(\partial/R\partial S)$, можливо знайти повний набір з трьох рекурентних співвідношень. Відзначимо, що рекурентні співвідношення, які ми отримуємо, не є суть породження методу твірних функцій та твірних матричних елементів, а прямий наслідок властивостей функцій Ерміта. Питання тільки в тому, в якому представленні їх шукати – в координатному, чи в представленні генераторних параметрів. Цікаві для нас відомості про властивості функцій Ерміта неважко знайти в книзі [22].

### 3. Асимптотичні співвідношення

Відомо, яке важливе значення відіграє знання асимптотичної поведінки хвильової функції при проведенні квантово-механічних розрахунків в координатному представленні. Така сама картина спостерігається і при використанні розкладу по осциляторному базису, особливо коли це стосується дослідження станів неперервного спектра, де в ролі хвильової функції, як і для станів дискретного спектра, виступає набір коефіцієнтів розкладу хвильової функції по осциляторному базису $\{C_n\}$. Властивістю осциляторного розкладу є те, що чим більше значення квантового числа $n$, тим більшим відстаням від початку координат відповідає внесок від базисної функція $\phi_n(x)$. Тому нас буде цікавити асимптотична поведінка коефіцієнтів розкладу $\{C_n\}$ і деяких інших величин при великих значеннях $n$.

Рівняння Шредінгера в координатному представленні

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right)\right\}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

у міру збільшення $|x|$ спрощується і стає хвильовим рівнянням вільного руху

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{13}$$

Загальний розв'язок цього рівняння можна записати у вигляді суперпозиції парного і непарного розв'язку:

$$\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx,$$

де

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

У дискретному представленні з огляду на принцип відповідності між дискретним і континуальним представленнями має відбуватися те саме. При цьому природним є граничний перехід до рівнянь

$$\sum_{\tilde{n}}^{\infty}\langle n|\,\hat{T}\,|\tilde{n}\rangle C_{\tilde{n}} = E_n C_n. \tag{14}$$

Для того, щоб краще зрозуміти логіку наших подальших міркувань, перш ніж перейти до аналізу цієї системи рівнянь, розглянемо асимптотичну поведінку коефіцієнтів, спираючись на властивості поліномів Ерміта у разі значень $n$, що набагато перевищують одиницю. Тобто, розглянемо інтеграл

$$C_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi_{2n}(x)\cos(kx)\,dx,$$

обчислення якого дає нам коефіцієнти розкладу функції вільного руху.

Відомо, що поліноми Ерміта задовольняють інтегральне рівняння (див., наприклад, [23]):

$$e^{-\frac{x^2}{2}}H_{2n}(x) = (-1)^n\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^{\infty}e^{-\frac{t^2}{2}}H_{2n}(t)\cos(xt)\,dt.$$

Ця чудова рівність, зокрема, означає інваріантність функцій Ерміта, щодо перетворення Фур'є.

Використання останньої рівності одразу приводить нас до співвідношення

$$C_{2n} = Ar_0\,(-1)^{\,n}\sqrt{2\pi}H_{2n}\,(kr_0)\,e^{-\frac{k^2r_0^2}{2}}, \qquad (15)$$

де $A$ – нормувальний множник, явно виписаний у формулі (1).

Знайшовши точні вирази для коефіцієнтів розкладу $\cos(kx)$ по осциляторному базису, нам слід продемонструвати, наскільки реально на практиці може бути реалізовано розклад хвильової функції вільного руху за скінченним числом осциляторних функцій. Для цього поставимо собі завдання чисельно відновити функцію неперервного спектра з використанням отриманих коефіцієнтів розкладу в наперед заданій області зміни аргументу. Результати такого чисельного експерименту наведено на рис. 1. Як область зміни незалежної змінної $x$ взято відрізок, кінці якого розташовані в точках –50 Фм і 50 Фм. Розглянуто три варіанти результатів розрахунків, які відповідають використанню різного числа базисних функцій, тобто $n = 50$, $n = 100$ і $n = 200$.

Наведені графіки демонструють те, що за допомогою розкладу по осциляторних функціях досить легко передати функцію вільного руху частинки. При енергії 10 МеВ нам потрібно використати парні функції з $n = 50$ для передачі функції вільного руху до відстані приблизно у 25 Фм, $n = 100$–40 Фм, а при $n = 200$ більше 50 Фм. Відмітимо, що з точки зору АВ МРГ, оскільки в її рамках зазвичай розглядається взаємодія легких атомних ядер, відстані, які ми представили на рисунку, є достатньо великими навіть при врахуванні кулонівської взаємодії, яка є далекодіючою, а асимптотика є іншою. Тут ми просто спробували як найкраще продемонструвати певні можливості розкладу функції вільного руху по осциляторному базису.

Перехід до асимптотичного виразу поліномів Ерміта в формулі (1) може бути здійснено за допомогою асимптотичної рівності (див., наприклад, [23]):

$$H_n(x) = \sqrt{2}\left(\frac{2n}{e}\right)^{\frac{n}{2}} e^{\frac{x^2}{2}}\left[\cos\left(Nx - \frac{n\pi}{2}\right) + \right.$$

$$\left. + O\left(\frac{1}{n}\right) + O\left(n^{-\frac{1}{4}}\,|x|^{\frac{5}{2}}\right)\right], \qquad (16)$$

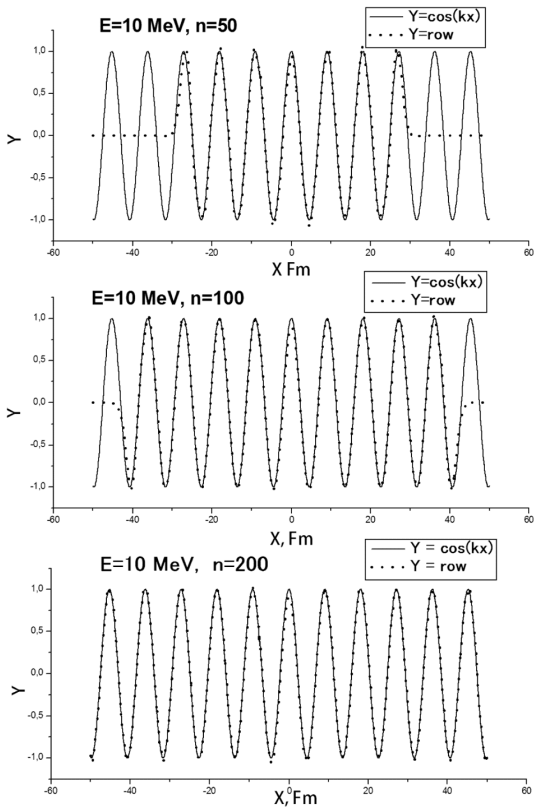


***Рис. 1.*** Подання функції вільного руху у вигляді ряду за власними функціями гармонійного осцилятора

де $N = \sqrt{2n+1}$. Тут відразу ж слід підкреслити той факт, що застосовність цієї формули значною мірою залежить від співвідношення значень величин $n$ і $|x|$.

Після використання співвідношень (15) і (16), а також застосування формули Стірлінга до спрощення виразу для нормувального множника ми доходимо до остаточного виразу, який можна подати у вигляді

$$C_{2n} = \frac{2r_0}{r_0^{1/2}\sqrt[4]{4n+1}}\cos\left(kr_0\sqrt{4n+1}\right). \qquad (17)$$

Тут слід звернути увагу на те, що величина $N = r_0\sqrt{4n+1}$ являє собою координату квазікласичної точки повороту одновимірного гармонічного осцилятора. Ця точка відіграє дуже важливу роль в теорії гармонічного осцилятора, яка полягає у дедалі суттєвішій концентрації хвильової функції осцилятора в області точок повороту в міру переходу до дедалі більших значень осциляторного

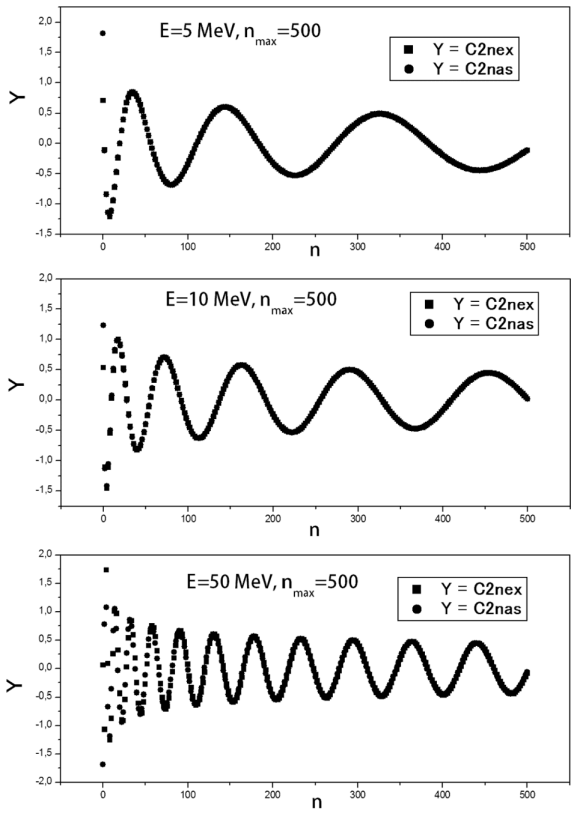


***Рис. 2.*** Порівняння точних значень коефіцієнтів розкладу функції вільного руху за осциляторними функціями з їхніми асимптотичними значеннями за різних значень енергії

квантового числа. При $n \to \infty$ поведінка хвильової функції набуває $\delta$-подібного характеру. Трактування цього факту можна дати вже в межах класичних уявлень, де зрозуміло, що за великих значень енергії осцилятора частинка з великою швидкістю проходить точку рівноваги, перебуваючи при цьому найбільш тривалий час у районі точок повороту.

Поглянемо на отримання асимптотичних виразів з іншого боку. Повернемося до рівнянь (14). Вони є дискретними рівняннями типу

$$-\frac{1}{2}\sqrt{n\left(n-\frac{1}{2}\right)}C_{2n-2}+\left[\frac{1}{2}\left(2n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}k^2r_0^2\right]\times$$
$$\times C_{2n}-\frac{1}{2}\sqrt{(n+1)\left(n+\left(\frac{1}{2}\right)\right)}C_{2n+2}=0.$$

За великих значень $n$ ми можемо розглядати коефіцієнти розкладу $C_{2n}$ як функцію неперервної змінної $2n$

$$C_{2n}=C\left(2n\right).$$

При цьому записати, що $C\left(2n\pm 2\right)\to C\left(x\pm\Delta x\right)$. $(x=2n,\ \Delta x=2)$ і скористатися розкладом в ряд Тейлора

$$C\left(x\pm\Delta x\right)\approx C\left(x\right)\pm\Delta x\frac{dC\left(x\right)}{dx}+\frac{1}{2}\left(\Delta x\right)^2\frac{d^2C\left(x\right)}{dx^2},$$

що дає змогу трансформувати алгебраїчне рівняння в диференційне

$$-\frac{1}{2}\sqrt{n\left(n-\frac{1}{2}\right)}\left[C\left(x\right)-2\frac{dC\left(x\right)}{dx}+2\frac{d^2C\left(x\right)}{dx^2}\right]+$$
$$+\left[\frac{1}{2}\left(2n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}k^2r_0^2\right]C\left(x\right)-$$
$$+\frac{1}{2}\sqrt{(n+1)\left(n+\left(\frac{1}{2}\right)\right)}\times$$
$$\times\left[C\left(x\right)+2\frac{dC\left(x\right)}{dx}+2\frac{d^2C\left(x\right)}{dx^2}\right]=0.$$

Спираючись на попередній досвід введемо нову змінну $R_n$ замість змінної $x=2n$

$$R_n=\sqrt{4n+1}=\sqrt{2x+1}.$$

Переводячи похідні та коефіцієнти рівняння до нових змінних і розкладаючи останні в ряд за ступенями $1/R_n$ з утриманням четвертих ступенів цієї величини, приходимо до рівняння

$$R_n^2\frac{d^2C\left(R_n\right)}{dR_n^2}+R_n\frac{dC\left(R_n\right)}{dR_n}+$$
$$+\left[-\frac{1}{4}+R_n^2k^2r_0^2\right]C\left(R_n\right)=0.$$

Тобто в результаті всіх перетворень ми прийшли до рівняння Бесселя порядку $1/2$. Розв'язками цього рівняння є функції $J_{1/2}\left(\sqrt{kr_0\left(4n+1\right)}\right)$ і $N_{1/2}\left(\sqrt{kr_0\left(4n+1\right)}\right)$ друга з них з точністю до коефіцієнта і позначень збігається з виразом (17).

Проілюструємо на конкретних прикладах те, коли коефіцієнти розкладу функції вільного руху за осциляторним базисом можуть бути замінені їхніми асимптотичними виразами. Для цього звернемося до рис. 2. На ньому проведено порівняння точних значень коефіцієнтів розкладу функцій вільного руху за осциляторним базисом з їхніми асимптотичними значеннями за різних значень енергії.

Наведені на рисунку результати вказують на те, що вихід на асимптотичний режим коефіцієнтів розкладу функції вільного руху відбувається за різних значень квантового числа залежно від енергії частинки, що налітає. Чим вона більша, тим більше осциляторних функцій слід залучити для цього. Це нескладно зрозуміти, якщо звернутися до коментаря до формули (16).

На останньому етапі цього розділу розглянемо поведінку матричних елементів потенціальної енергії під час переходу до великих значень $n$ і $\tilde{n}$, використовуючи формулу (3). Для спрощення будемо вважати що $z = 1/2$. Відповідно до цього отримаємо

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

Згідно з цим отримаємо

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

А матричний елемент оператора потенціальної енергії з гаусівською залежністю набуває вигляду

$$\langle 2n|\,\hat{V}\,|2\tilde{n}\rangle = (-1)^{n+\tilde{n}}\,V_0\left(\frac{1}{2}\right)^{n+\tilde{n}+\frac{1}{2}} \times$$
$$\times\sqrt{\frac{(2n-1)!!\,(2\tilde{n}-1)!!}{(2n)!!\,(2\tilde{n})!!}}\,\frac{\Gamma(1/2)\,\Gamma(n+\tilde{n}+1/2)}{\Gamma(n+1/2)\,\Gamma(\tilde{n}+1/2)}. \quad (18)$$

Використовуючи формули Стірлінга, у випадку, що розглядається, можна дійти до такого співвідношення:

$$\langle 2n|\,\hat{V}\,|2\tilde{n}\rangle \approx \frac{1}{2}V_0\left(-\frac{1}{2}\right)^{n+\tilde{n}} \times$$
$$\times\sqrt{\frac{1}{\pi\sqrt{n\tilde{n}}}}\left(1+\frac{\tilde{n}}{n}\right)^n\left(1+\frac{n}{\tilde{n}}\right)^{\tilde{n}}. \quad (19)$$

Тут можна побачити, що для головної діагоналі зі зростанням $n$ спостерігається спадання величини матричного елемента потенціальної енергії за законом $1/\sqrt{n}$, що видно зі співвідношення

$$\langle 2n|\,\hat{V}\,|2\tilde{n}\rangle \approx \frac{V_0}{2\sqrt{\pi\,n}},$$

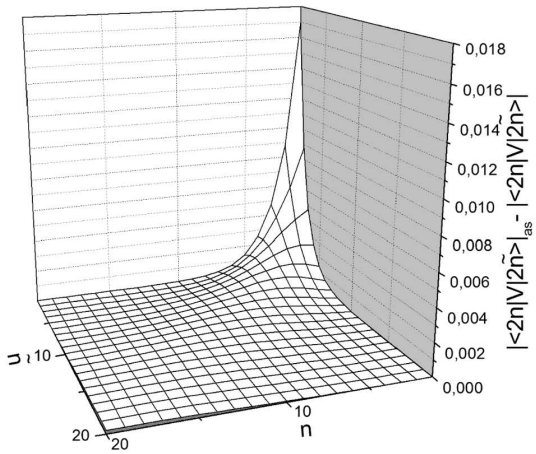


***Рис. 3.*** Порівняння точних і асимптотичних значень матричних елементів потенціальної енергії

тоді як матричні елементи оператора кінетичної енергії зростають пропорційно $n$. Тобто, на якомусь етапі розширення матриці ми можемо знехтувати матричними елементами потенціальної енергії в порівнянні з матричними елементами кінетичної енергії вважаючи, що з цього місця матриця гамільтоніана є тридіагональною.

Порівняння результатів розрахунків матричних елементів за формулами (18) і (19) ілюструється рис. 3. На ньому наведено різниці модулів зазначених матричних елементів, розгляд яких показує, що в міру збільшення квантових чисел лівої та правої функцій точні значення матричних елементів досить швидко виходять на їхні асимптотичні значення.

## 4. Висновки

Оскільки мета, до якої ми прагнули при написанні цієї роботи полягала в тому, щоб використовуючи досить негромісткий з аналітичної точки зору одновимірний випадок, ми показали, які прийоми можна використати для побудови матриці гамільтоніана при використанні Алгебраїчної версії методу резонуючих груп. Показали, в який спосіб отримати асимптотичну поведінку коефіцієнтів розкладу хвильової функції по осциляторних функціях при спрямуванні осциляторного квантового числа до нескінченності у випадку розгляду станів неперервного спектра. Продемонстрували збіжність матричних елементів потенціальної енергії до їх асимптотичних значень.

*Висловлюємо подяку В. Василевському за корисні обговорення результатів. Дана робота була частково підтримана Програмою фундаментальних досліджень Відділення фізики і астрономії Національної академії наук України (проект РК № 0122U000889) та фондом Саймонса.*

1. Г.Ф. Филиппов, И.П Охрименко. О возможности использования осцилляторного базиса для решения задач непрерывного спектра. *Ядерная физика* **32**, 932 (1980).
2. Г.Ф. Филиппов. Об учете правильной асимптотики в разложениях по осцилляторному базису. *Ядерная физика* **33**, 928 (1981).
3. Г.Ф. Филиппов, В.С. Василевский, Л.Л. Чоповский. О резонансах $^7$Li в канале $\alpha + t$. *Ядерная физика* **37**, 839 (1983).
4. В.С. Василевский, Т.П. Коваленко, Г.Ф. Филиппов. Многоканальная теория $0^+$-резонанса $^4$He. *Ядерная физика* **48**, 80 (1988).
5. G.F. Filippov, V.S. Vasilevsky, A.V. Nesterov. Excitation of $^8$Be monopole resonances under $\alpha - \alpha$ scattering. *Nucl. Phys.* **426**, 327 (1984).
6. A. Sytcheva, F. Arickx, J. Broeckhove, V.S. Vasilevsky. Monopole and quadrupole polarization effects on the $\alpha$-particle description of $^8$Be. *Phys. Rev. C* **71**, 044322 (2005).
7. V.S Vasilevsky, F Arickx. Algebraic model for quantum scattering: Reformulation, analysis, and numerical strategies. *Phys. Rev. A* **55**, 265 (1997).
8. G. Filippov, Y. Lashko. Peculiar properties of the cluster-cluster interaction induced by the Pauli exclusion principle. *Phys. Rev. C* **70**, 064001 (2004).
9. Yu.A. Lashko, G.F. Filippov. How the Pauli principle governs the decay of three-cluster systems. *Nucl. Phys. A* **806**, 124 (2008).
10. V.S. Vasilevsky, A.V. Nesterov, F. Arickx J. Broeckhove. S-factor of the $^3$He($^3$H, 2n)$^4$He and$^3$He($^3$He, 2p)$^4$He reactions using a three-cluster exit channel. *Phys. Rev. C* **63**, 064604 (2001).
11. Yu.A. Lashko, A.V. Nesterov, V.S. Vasilevsky. Structure of the ground and excited states in $^9_\Lambda$Be nucleus. *Nucl. Phys. A* **1016**, 122325 (2021).
12. Yu.A. Lashko, G.F. Filippov, V.S. Vasilevsky, M.D. Soloha-Klymchak. Phase portraits of quantum systems. *Few-body Systems* **55**, 817 (2014).
13. E.J. Heller, H.A. Yamani. New $L^2$ approach to quantum scattering: Theory. *Phys. Rev. A* **9**, 1201 (1974).
14. E.J. Heller, H.A. Yamani. *J*-matrix method: Application to-wave electron-hydrogen scattering. *Phys. Rev. A* **9**, 1209 (1974).
15. H.A. Yamani, L. Fishman. *J*-matrix method: Extensions to arbitrary angular momentum and to Coulomb scattering. *J. Math. Phys.* **16**, 410 (1975).
16. *The J-Matrix Method. Developments and Applications.* Edited by A.D. Alhaidari H.A. Yamani, E.J. Heller, M.S. Abdelmonem (Springer, 2008).
17. A.D. Alhaidari, H. Bahlouli, M.S. Abdelmonem. *J*-matrix method of scattering in one dimension: The nonrelativistic theory. *Annals of Physics* **324**, 256 (2009).
18. A.D. Alhaidari. On the asymptotic solutions of the scattering problem. *J. Phys. A*: *Math. Theor.* **41**, 175201 (2008).
19. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов произведений, изд. 4-е* (Физматгиз, 1963), 851 с.
20. А.В. Нестеров. О технике использования многочастичного осцилляторного базиса при исследовании свойств трехкластерных систем. *Ядерная физика* **56**, 35 (1993).
21. V.S. Vasilevsky. A.V. Nesterov, F. Arickx, J. Broeckhove. The algebraic model for scattering in three-s-cluster systems. I. Theoretical background. *Phys. Rev. C* **63**, 034606 (2001).
22. А.С. Давыдов. *Квантовая механика, изд. 2-е* (Наука, 1973).
23. П.К. Суетин. *Классические ортогональные многочлены, 3-е изд.* (Физматлит, 2005).

Одержано 02.05.25

*G.F. Filippov, M.D. Soloha-Klymchak, A.V. Nesterov*

FUNDAMENTALS OF THE ALGEBRAIC VERSION OF THE RESONATING-GROUP METHOD IN THE ONE-DIMENSIONAL CASE. I. ANALYTIC RESULTS

The features of analytic calculations in the framework of the algebraic version of the resonating-group method, which is based on expanding the wave function of a quantum system on the basis of oscillator functions, have been examined in the one-dimensional case. The construction of the Hamiltonian matrix elements using the technique of generating functions and generating matrix elements has been discussed in detail. The asymptotic behavior is found for the coefficients in the wave function expansion in the oscillator function basis as the oscillator quantum number tends to infinity in the continuous spectrum case. The asymptotic dependence of the potential-energy matrix elements on the oscillator quantum number has been obtained for a Gaussian potential.

*Keywords*: one-dimensional case, algebraic version of the resonating-group method, oscillator basis, matrix elements, asymptotics of coefficients.