УДК 539.17

ПОЛИНОМИАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЯДЕРНОГО ОПТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Ю. К Хохлов

Предлагается трижды непрерывная на всей оси r кусочно-полиномиальная функция, которая в средней части практически совпадает с известной функцией Вудса–Саксона, а на краях свободна от некоторых свойственных ей недостатков. Как дополнительное следствие, увеличивается скорость вычисления функции, а также создается возможность естественного изменения ее формы в окрестности начала оси r.

Потенциал Вудса–Саксона [1] характеризуется форм-функцией

$$f(r) = 1/(1 + \exp((r - R_7)/A)), \tag{1}$$

где R_7 – радиус эффективной границы; A – параметр диффузности границы.

На практике приходится обрезать функцию (1) на некотором большом R_9, что нарушает ее непрерывность. С другой стороны, в начале оси r производная функции (1) отлична от нуля, что создает некоторую воронкообразность потенциала, ничем физически не обоснованную.

Чтобы устранить указанные нежелательные свойства, автор первоначально присоединял к выражению (1) кусочно-определенные корректирующие полиномы четвертой степени, такие, что основная, физически наиболее важная часть потенциала (вокруг точки $r = R_7$), оставалась практически неизменной. Однако, вскоре стало ясно, что и саму функцию (1) желательно представить в кусочно-полиномиальной форме. Этим достигаются единообразие описания, существенное увеличение скорости вычислений и, наконец, возможность свободно распоряжаться формой потенциала в окрестности начала оси r. Для реализации последнего преимущества мы вводим участок $(0, R_5)$, на котором потенциал не обязан иметь форму (1). В данной работе потенциал на этом участке определяется, как константа.

Всего на ось r наносится пять точек с номерами 5, 6, 7, 8, 9, причем

$$R_7 - R_6 = R_8 - R_7 = A \cdot \mathrm{Ln}(3). \tag{2}$$

Полиномиальная функция обозначается через $y(r)$; используются также обозначения типа $R_{65} = R_6 - R_5$, $f_5 = f(R_5)$ и т.п.

На участке (R_6, R_8) функция $f(r) - 1/2$ антисимметрична относительно точки 7. Требуется, чтобы и функция $y(r) - 1/2$ обладала этим свойством. С учетом указанной симметрии $y(r)$ ищется в виде

$$\begin{array}{ll} r < R_5, & P_0, \\ R_5 \le r < R_6, & P_0 + P_3 \cdot (r - R_5)^3 + P_4 \cdot (r - R_5)^4, \\ R_6 \le r < R_8, & Q_0 + Q_1 \cdot (r - R_7) + Q_3 \cdot (r - R_7)^3, \\ R_8 \le r < R_9, & T_3 \cdot (R_9 - r)^3 + T_4 \cdot (R_9 - r)^4 + T_5 \cdot (R_9 - r)^5, \\ R_9 \le r, & 0. \end{array} \tag{3}$$

Кроме (3) требуются выражения для $y'(r)$, $y''(r)$, которые, однако, опущены ради экономии места.

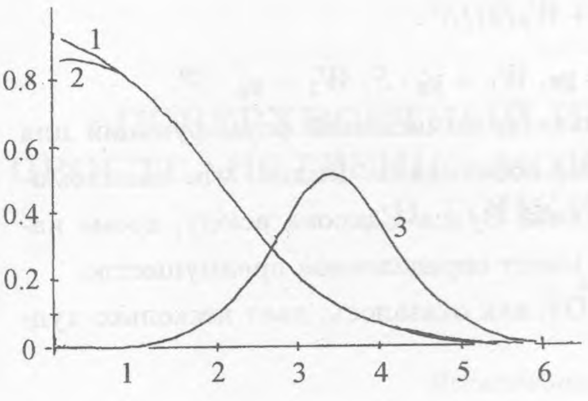
Согласно (1) и (2) для определения коэффициентов системы (3) имеются значения: $f_6 = 3/4$, $f_7 = 1/2$, $f_8 = 1/4$, $f_8' = -1/(4 \cdot A)$, $f_8'' = -3/(32 \cdot A^2)$ и т.д. Спрашивается, с какими из этих значений может или должна совпадать функция $y(r)$? Весьма желательно равенство самих функций. Что касается производных, то тут возникает неоднозначность выбора цепочки уравнений. Рассмотрим ситуацию в точке 8. Система уравнений, определяющая коэффициенты системы (3), имеет вид:

$$Q_0 + Q_1 \cdot H + Q_3 \cdot H^3 = y_8, \tag{4a}$$

$$Q_1 + 3 \cdot Q_3 \cdot H^2 = y_8', \tag{4b}$$

$$6 \cdot Q_3 \cdot H = y_8''. \tag{4c}$$

Допустим, что все три значения в правой части совпадают с соответствующими значениями функции (1) и ее производных. Тогда коэффициенты Q определяются системой (4) однозначно. Однако коэффициенты Q_0 и Q_1 уже определены в точке 7, как y_7 и y_7'. В результате получаются три уравнения для одной неизвестной Q_3.



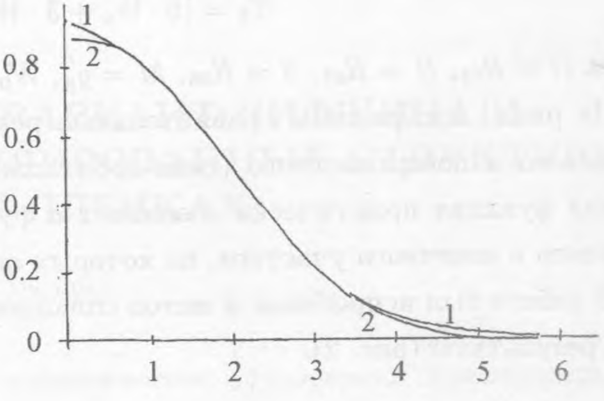


Рис. 1. *Форм-функции для некоторых реальных значений параметров R_7 и A. 1 – первоначальная функция (1); 2 – полиномиальная функция (3); 3 – функция для спин-орбитального взаимодействия, полученная путем дифференцирования полиномиальной функции типа (3) и изменения ее знака.*

Рис. 2. *1 – первоначальная функция; 2 – интерполяционное представление, использующее на участке (R_6, R_8) кубический сплайн. Видно, что в области "хвоста" имеется некоторое нежелательное отличие от кривой 1.*

Чтобы выйти из возникшего тупика, откажемся от задания величин Q_1 и y_8'', т.е. переведем их в разряд неизвестных, подлежащих вычислению. Это повлечет за собой следующую последовательность действий:

Из системы уравнений (4a), (4b) при $Q_0 = 1/2$ получается

$$Q_1 = 3 \cdot (\mathrm{Log}3 - 4)/(32 \cdot H),\ Q_3 = (4 - 3 \cdot \mathrm{Log}3)/(32 \cdot H^3);$$

после этого y_8'' становится известной на основании (4c). Вследствие отмеченной выше симметрии рассмотрение ситуации в точке 6 не дает ничего нового. Остальное элементарно:

$$P_3 = (y_6' + M \cdot G/3)/G^2,$$

$$P_4 = -(y_6' + M \cdot G/2)/(2 \cdot G^3),$$

$$P_0 = 3/4 - (P_3 + P_4 \cdot G) \cdot G^3;$$

$$T_3 = (10 \cdot W_0 + 4 \cdot W_1 + W_2/2)/S^3,$$

$$T_4 = (-15 \cdot W_0 - 7 \cdot W_1 - W_2)/S^4,$$

$$T_5 = (6 \cdot W_0 + 3 \cdot W_1 + W_2/2)/S^5.$$

Здесь $G = R_{65}$, $H = R_{87}$, $S = R_{98}$, $M = y_8''$, $W_0 = y_8$, $W_1 = y_8' \cdot S$, $W_2 = y_8'' \cdot S^2$.

На рис. 1 изображены сравнительные результаты вычислений форм-функций для объемного и поверхностного (спин-орбитального) потенциала. Видно, что полиномиальная функция практически совпадает с функцией Вудса–Саксона всюду, кроме начального и конечного участков, на которых она имеет определенное преимущество.

В работе был испробован и метод сплайнов. Он, как оказалось, дает несколько худшие результаты (рис. 2).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Saxon D., Woods R. Phys. Rev., **95**, 577 (1954).

Поступила в редакцию 28 декабря 2001 г.