

УДК 530.145

МЕТОД СЕПАРАБИЛИЗАЦИИ В ЗАДАЧАХ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

А. Л. Зубарев

Ташкентский государственный
университет, Ташкент

Дан обзор работ по применению метода сепарабилизации в задаче двух тел и в многоканальной теории. Приводятся результаты численных расчетов, на основе которых можно сделать вывод о достаточно быстрой сходимости. Показана связь метода с вариационными принципами. Рассмотрена возможность изучения поправок к дифракционному приближению.

Some reports about the application of separabilisation method to two-body problem and multichannel theory are analyzed. It is presented the results of numerical calculations on which the conclusion about rapid enough convergence of method can be made. It is considered the possibility of learning the corrections to diffraction approximation.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы появились рафинированные методы решения уравнений Фаддеева, основанные на аппроксимации двухчастичной t -матрицы $t(k, k', z)$ рядами с сепарабельными слагаемыми:

$$t^{(N)}(k, k', z) = \sum_{i, j=1}^N [C^{-1}(z)]_{ij} \eta_i(k) \eta_j(k'). \quad (1)$$

Как известно, в этом случае система двумерных интегральных уравнений (для состояний с данным полным моментом) сводится к одномерной системе, допускающей численное решение. Сепарабельное представление (1) получается, если фурье-образ потенциала факторизован

$$V_i^{(N)}(k, k') = \sum_{i, j=1}^N [d^{-1}]_{ij} \eta_i^l(k) \eta_j^l(k'). \quad (2)$$

Потенциалы такого типа, введенные в теорию Вигнером, были впоследствии применены Ямагучи [1] к задаче двух тел и в настоящее время успешно применяются для исследования свойств атомного ядра. Например, Браун и Болстерли [2] предложили модель

рассмотрения частично-дырочных состояний в ядрах. использующую сепарабельное приближение:

$$\langle ph | V | p'h' \rangle = \langle ph | D | 0 \rangle \langle 0 | D | p'h' \rangle \gamma$$

где $|ph\rangle$ — частично-дырочное состояние; D — оператор дипольного момента. В рамках этой модели в работе [3] рассмотрена задача о дипольном фотопоглощении в ядрах с учетом состояний непрерывного спектра.

В теории интегральных уравнений приближение (2) известно как замена ядра на вырожденное. Суть идеологии сепарабилизации заключается в следующем. Рассмотрим тождество

$$V = VV^{-1}V = V|i\rangle\langle i|V^{-1}|j\rangle\langle j|V \quad (3)$$

(наборы $|i\rangle$ и $|j\rangle$ разные). Обрывая в (3) суммирование по полным наборам, получаем сепарабельное приближение [4, 5]

$$V^{(N)} = \sum_{i,j=1}^N V|i_i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle \zeta_j | V; \quad (4)$$

$$[d^{-1}]_{ij} = \langle \zeta_i | V | \eta_j \rangle.$$

Сходимость разложения (4) обеспечивается известной теоремой о том, что если V — вполне непрерывный оператор, то его можно сколь угодно точно аппроксимировать по норме оператором конечного ранга $V^{(N)}$.

Таким образом, задача решается заменой V на $V^{(N)}$, при этом величина $|V - V^{(N)}|$ характеризует погрешность. В этом смысле метод сепарабилизации близок к τ -процессу Ланцоша [6], в основе которого лежит довольно простая идея. Обычно бывает трудно найти погрешность вычисленного решения задачи, но на вопрос, для какой близкой задачи вычисленный ответ был бы точным решением, ответить нетрудно.

Для задач с дискретным спектром метод сепарабилизации близок к методу промежуточных задач, который был применен Вайнштейном [7] при определении собственных частот задачи о зажатой прямоугольной пластине, так как в некоторых случаях приближение (2) наряду с методом Ритца дает двухсторонние оценки на собственные значения. Впоследствии метод Вайнштейна получил развитие в работах Ароншайна, Безли, Фокса и др. [8—11].

В настоящей работе рассматривается применение метода сепарабилизации в квантовомеханических задачах двух и нескольких тел. В основном анализируется случай непрерывного спектра. При разработке приближенных методов следует иметь в виду квантовомеханическую задачу многих тел, поскольку строить рафинированные приближения к парциальной задаче двух тел нецелесообразно, так как соответствующее уравнение всегда можно проинтегрировать численным методом. Однако различные приближенные способы решения задачи двух тел удобны введе-

нием в построение методов решения значительно более сложных задач. При рассмотрении задачи двух тел доказывається, что большинство из описанных в литературе методов аппроксимации (1) укладываются в рамки формулы (4). Исследуется сходимость методов. Обобщается метод сепарабилизации для случая ядерной задачи многих тел. На основе этого обобщения решаются в явном виде уравнения метода сильной связи каналов, причем удается учесть виртуальные переходы в непрерывном спектре. Показывается, что эту процедуру можно применить не только к задачам ядерной физики, но и к столкновению заряженных частиц с атомами.

Исследуется связь метода сепарабилизации с вариационными методами. Показано, что для задач рассеяния и для задач на связанные состояния приближение (4) приводит к сходящейся последовательности вариационных принципов, первый член которой совпадает с вариационным принципом Швингера. Рассматривается возможность построения амплитуды, одинаково хорошо описывающей рассеяние при низких и при высоких энергиях.

Исследуется итерационный процесс, к которому приводит сепарабилизация. Показывается равномерная и экспоненциальная сходимость процесса в задачах двух тел и в многоканальных задачах. Численная сходимость изучается на примерах задачи двух тел и рассеяния позитронов на атомах водорода. Строится метод нахождения двухсторонних оценок на физические наблюдаемые в ядерной задаче двух и трех тел, для задач непрерывного и дискретного спектров. Рассматривается рассеяние при высоких энергиях, исследуются поправки к приближению Борна и эйкональному приближению в задаче двух тел. На основе метода сепарабилизации изучается возможность нахождения френелевских поправок и поправок на неадиабатичность в приближении Глаубера. Исследуются нестационарные задачи, которые представляют особый интерес в связи с развитием лазерной техники. Очевидно, что однозначная интерпретация наблюдаемых возможна в том случае, если при решении динамических уравнений не привлекаются никакие дополнительные соображения о свойствах системы, т. е. при безмодельном методе решения уравнений. При этом процедура приближения должна гарантировать сходимость процесса приближения и быть достаточно универсальной.

1. ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ

Рассмотрим применение метода сепарабилизации к задаче двух тел.

Уравнение Липпмана — Швингера для двухчастичной t -матрицы $T(E + i\epsilon)$ имеет вид

$$T = V + VG_0T = V + TG_0V, \quad (5)$$

где $G_0 = 1/(E - H_0 + i\epsilon)$. Подставляя в (5) $V^{(N)}$ из (4), получаем

$$T^{(N)} = (V | \eta_i \rangle d_{ij}^{(N)} \langle \zeta_j | V \rangle + \\ + (V | \eta_i \rangle d_{ij}^{(N)} \langle \zeta_j | V G_0 T^{(N)}). \quad (6)$$

Ищем решение (6) в виде

$$T^{(N)} = V | \eta_i \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \zeta_j | V, \quad (7)$$

тогда для $C_{ij}^{(N)}$ имеем выражение

$$[C^{-1}]_{ij} = \langle \zeta_i | V - V G_0 V | \eta_j \rangle. \quad (8)$$

Для уравнения Шредингера

$$| \Psi \rangle = | \varphi \rangle + C_0 V | \Psi \rangle \quad (9)$$

приближение для потенциала (4) приводит к решению в виде

$$\left. \begin{aligned} | \Psi^{(N)} \rangle &= | \varphi \rangle + G_0 V | \eta_i \rangle c_i; \\ c_i &= C_{ij}^{(N)} \langle \zeta_j | V | \varphi \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Для получения представления (2) чаще всего используются разложения, основанные на методах Бубнова — Галеркина [12], Гильберта — Шмидта [13] и Бейтмана [14]. В методах Бубнова — Галеркина и Гильберта — Шмидта функции η имеют явный вид лишь для некоторых простых потенциалов. Для большинства реалистических потенциалов их можно построить численно, что существенно усложняет задачу. Метод Бейтмана применим к более широкому классу потенциалов. Это разложение наиболее удобно, если $V_l(k, k')$ имеет явный вид, например, для потенциалов, являющихся суперпозицией Юкавы. Покажем, что перечисленные выше разложения укладываются в рамки формулы (4).

Рассмотрим задачу Гильберта — Шмидта

$$\left[H_0 + \frac{1}{\mu_n(E)} V \right] | \psi_n(E) \rangle = E | \psi_n(E) \rangle; \quad (11) \\ \langle \Psi_n | V | \Psi_m \rangle = -\mu_n \delta_{mn}.$$

Положим в (4) $\eta_i = \zeta_i = \Psi_i$, тогда

$$\langle k | V^{(N)} | k' \rangle = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{\mu_i(E)} \langle k | V | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | V | k' \rangle,$$

но

$$V | \Psi_i \rangle = \mu_i(E) (E - H_0) | \Psi_i \rangle,$$

следовательно,

$$\left. \begin{aligned} \langle k | V^{(N)} | k' \rangle &= - \sum_{i=1}^N \mu_i(E) a_i(k, E) a_i^*(k', E); \\ a_i(k, E) &= (k^2/2m - E) \Psi_i(k, E). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Формула (12) дает известное разложение Гильберта — Шмидта для фурье-образа потенциала.

В методе Бубнова — Галеркина фурье-образ потенциала представляется в виде

$$V^{(N)}(k, k') = \sum_{i=1}^N M_i(k) M_i(k'), \tag{13}$$

где $M_n(k) = \langle k | V | \Phi_n \rangle$, а система базисных функций Φ_n удовлетворяет условию ортонормируемости с весом потенциала

$$\langle \Phi_m | V | \Phi_n \rangle = \delta_{mn}.$$

Очевидно, что, полагая в (4) $\eta_i = \xi_i = \Phi_i$, получаем разложение (13).

Разложение Бейтмана для l -гармоники фурье-образа потенциала

$$V_l(k, k') = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{j_l(kr)}{k} \frac{j_l(k'r)}{k'} V(r) dr$$

имеет вид

$$V_l^{(N)}(k, k') = \sum_{i,j=1}^N V_l(k, s_i) d_{ij}^{(N)} V_l(s_j, k'); \tag{14}$$

$$[d^{-1}]_{ij} = V_l(s_i, s_j).$$

Нетрудно показать, что положив в (4) $\eta_i = \xi_i = j_l(s_i r)$, получим разложение (14). Разложение Бейтмана для фурье-образа потенциала

$$V^{(N)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{i,j=1}^N V(\mathbf{k}, \mathbf{s}_i) V(\mathbf{s}_j, \mathbf{k}') d_{ij}^{(N)}; \tag{15}$$

$$[d^{-1}]_{ij} = V(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j)$$

получается при $\eta_i = \xi_i = \exp(is_i r)$ [15]. Сравнивая (14) и (4), замечаем, что метод сепарабилизации есть естественное обобщение метода Бейтмана на случай произвольных сепарабилизирующих функций. Поэтому интересно рассмотреть подробнее сходимость разложения (14). Покажем, что для разложения Бейтмана справедлива следующая теорема [16].

Существует система узлов s_i , для которой:

1) если функция $V(x, y)$ непрерывна на конечном отрезке $[a, b]$, то разложение (14) сходится к $V(x, y)$ равномерно на $[a, b]$;

2) если $V(x, y)$ интегрируема на $[a, b]$, то разложение (14) сходится к $V(x, y)$ почти во всех точках отрезка $[a, b]$;

3) если $V(x, y)$ интегрируема на $[a, b]$ и в точке (x_0, y_0) непрерывна, то в этой точке разложение (14) сходится к $V(x, y)$.

Докажем теорему для отрезка $[0, 1]$. Очевидно, что переход к любому конечному отрезку триангулен. Введем систему точек $\alpha_i = (i - 1)/2^{m-1}$, $1 \leq i \leq 2^{m-1}$ (m — целое). Рассмотрим отрезки $l_{mi} = [(i - 1)/2^{m-1}, i/2^{m-1}]$. В случае $i = 2^{m-1}$ отрезок $l_{m, 2^{m-1}}$ необходимо считать замкнутым также справа. Ясно, что $l_{m1} + l_{m2} + \dots + l_{m2^{m-1}} = [0, 1]$. Введем кусочно-постоянную функцию

$$x \in l_{mi}, \quad 1 \leq i \leq 2^{m-1};$$

$$\Psi^m(x, y) = b_{ij} \quad \text{при} \quad y \in l_{mj}, \quad 1 \leq j \leq 2^{m-1},$$

где b_{ij} равно среднему значению $V(x, y)$ при $x \in l_{mi}$, $y \in l_{mj}$. Построим систему узлов $V(s_i, s_j) = b_{ij}$, $s_i \in l_{mi}$, $s_j \in l_{mj}$. Тогда нетрудно видеть, что

$$\left. \begin{aligned} \Psi^m(x, y) = \sum_{i, j=1}^{2^{m-1}} \Psi^m(x, s_i) d_{ij} \Psi^m(s_j, y); \\ [d^{-1}]_{ij} = V(s_i, s_j). \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

С другой стороны, $\Psi^m(x, y)$ является отрезком ряда Фурье — Хаара для функции $V(x, y)$ и все утверждения теоремы о сходимости $\Psi^m(x, y)$ к $V(x, y)$ справедливы. А так как правая часть (16) стремится к разложению Бейтмана для $V(x, y)$, то теорема доказана.

Как видно из теоремы, равномерная сходимость разложения Бейтмана для потенциала, а следовательно, и для t -матрицы, не зависит от знакоопределенности потенциала, в то время как разложение Гильберта — Шмидта сходится равномерно лишь для знакопостоянных потенциалов (теорема Мерсера).

Покажем единственность сепарабилизации (4). Пусть имеется оператор конечного ранга

$$\tilde{V} = \sum_{i, j=1}^N |y_i\rangle \alpha_{ij} \langle z_j|. \quad (17)$$

Если (17) удовлетворяет свойствам разложения (4)

$$\tilde{V} | \eta_i \rangle = V | \eta_i \rangle, \quad \langle \zeta_i | \tilde{V} = \langle \zeta_i | V, \quad (18)$$

то $\tilde{V} = V^{(N)}$.

Действительно,

$$\tilde{V} = V | \eta_1 \rangle \langle \zeta_1 | V / \langle \zeta_1 | V | \eta_1 \rangle, \quad (19)$$

при $N = 1$

$$\tilde{V} = V^{(M-1)} + \beta | y_m \rangle \langle z_m |; \quad N = M;$$

$$\beta | y_m \rangle \langle z_m | = \frac{(V - V^{(M-1)}) | \eta_M \rangle \langle \zeta_M | (V - V^{(M-1)})}{\langle \zeta_M | V - V^{(M-1)} | \eta_M \rangle}. \quad (20)$$

Таким образом, из условия (18) разложение (17) определяется однозначно.

Описанные в литературе методы сепарабилизации потенциала имеют существенный недостаток. Дело в том, что в каждом порядке приближения описываются приближенно не только немассовые свойства t -матрицы, но и свойства амплитуды на полумассовой поверхности. Поэтому в такой постановке задачи изучение зависимости трехчастичных наблюдаемых от чисто немассовых свойств двухчастичных амплитуд представляется затруднительным. Разложение (4) позволяет легко преодолеть это затруднение. В самом деле, выбирая в качестве одной из функций η решение уравнения Шредингера (9) Ψ , например

$$\eta_1 = \Psi, \quad \eta_2, \dots, \eta_N, \tag{21}$$

получаем, что

$$V^{(N)} | \Psi \rangle = V | \Psi \rangle, \tag{22}$$

т. е.

$$T^{(N)} | k \rangle = T | k \rangle.$$

Следовательно, в этом случае на полумассовой поверхности амплитуда в каждом порядке приближения описывается точно.

Отметим, что сепарация по функциям (21) есть естественное обобщение разложения Нойеса — Ковальского.

При изучении зависимости трехчастичных наблюдаемых от полумассовых свойств двухчастичных амплитуд полезно иметь сепарабельное приближение для двухчастичной t -матрицы, при котором амплитуда на массовой поверхности описывается точно. Для потенциалов «hard core» такая процедура построена в работе [17]. Для достижения этой цели в нашем случае введем уравнение [18]

$$\tilde{t}_l(k, k', z) = \tilde{V}_l(k, k') + 4\pi m \int_0^\infty \frac{V_l(k, k'') \tilde{t}_l(k'', k', z) k''^2 dk''}{mz - k''^2 + i\epsilon}. \tag{23}$$

Уравнение (23) отличается от уравнения Липпмана — Швингера неоднородным членом. Следовательно, если $\gamma_l(k, k', z)$ — резольвента ядра уравнения Липпмана — Швингера, тогда

$$t_l(k, k', z) = V_l(k, k') + \int_0^\infty \gamma_l(k, k'', z) V_l(k'', k') dk'';$$

$$\tilde{t}_l(k, k', z) = \tilde{V}_l(k, k') + \int_0^\infty \gamma_l(k, k'', z) \tilde{V}_l(k'', k') dk''.$$

Выберем в качестве $\tilde{V}_l(k, k')$ разложение Бейтмана l -гармоники фурье-образа потенциала

$$\begin{aligned} V_l(k, k') &= \sum_{i, j=1}^N d_{ij}^{(N)} V_l(k, s_i) V_l(s_j, k'), \\ [d^{-1}]_{ij} &= V_l(s_i, s_j); \\ \tilde{t}_l(k, k', z) &= \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^N d_{ij}^{(N)} [t_l(k, s_j z) V_l(s_j, k') + t_l(k', s_j z) V_l(s_j, k)]. \end{aligned} \quad (24)$$

Если один из узлов s_i , например s_1 , равен $\sqrt{m|z|}$, то на массовой поверхности $\tilde{t}_l = t_l$.

Рассмотрим интересный способ выбора сепарирующих функций, который описан в работе [19]. Введем функцию $|f_n\rangle$

$$G_0 |f_n\rangle = |\eta_n\rangle, \quad (25)$$

тогда

$$\begin{aligned} V^{(N)} &= \sum_{n, l=1}^N V G_0 |f_n\rangle d_{nl}^{(N)} \langle \zeta_l | V; \\ d_{nl}^{-1} &= \langle \zeta_n | V G_0 | f_l \rangle; \\ T^{(N)} &= \sum_{n, l=1}^N V G_0 |f_n\rangle C_{nl}^{(N)} \langle \zeta_l | V; \\ [C^{-1}]_{nl} &= \langle \zeta_n | (V - V G_0 V) G_0 | f_l \rangle. \end{aligned}$$

Далее определим функции $|h_n\rangle$

$$|f_n\rangle = (1 - V G_0)^{-1} |h_n\rangle. \quad (26)$$

В этом случае

$$\left. \begin{aligned} T^{(N)} &= \sum_{n, l=1}^N T G_0 |h_n\rangle C_{nl}^{(N)} \langle \zeta_l | V; \\ [C^{-1}]_{nl} &= \langle \zeta_n | V G_0 | h_l \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

Представление (27) обладает важным свойством

$$T^{(N)} G_0 |h_n\rangle = T G_0 |h_n\rangle. \quad (28)$$

Поскольку ядра уравнений Фаддеева имеют вид $T G_0$, то из (28) следует, что для их решения наиболее естественно выбрать в качестве сепарирующих функций какие-нибудь приближенные решения уравнений Фаддеева.

2. ЯДЕРНАЯ ЗАДАЧА МНОГИХ ТЕЛ

Очень интенсивно метод сепарабилизации используется при построении приближенных схем для описания процессов упругого и неупругого рассеяния в рамках модели оболочек. Все приближения основаны на приближенной замене ядра K уравнения Липпмана — Швингера

$$\begin{aligned} \Psi_E^{a(+)} &= \chi_E^{a(+)} + (E + i\epsilon - H_0)^{-1} V \Psi_E^{a(+)}; \\ K &= (E + i\epsilon - H_0)^{-1} V \end{aligned} \quad (29)$$

оператором $K^{(N)}$ конечного ранга N , и их можно разделить на две группы. К первой группе относятся методы, в которых остаточное взаимодействие V аппроксимируется оператором конечного ранга по формуле (4) [20—25]. Ко второй — методы, в которых приближение конечного ранга применяется к функции Грина [26—29]. В некоторых работах, относящихся к первой группе, для факторизации остаточного взаимодействия между состояниями непрерывного спектра используется разложение Гильберта — Шмидта, а затем для остатка $K^{\text{res}} = K - K^{(N)}$ развивается теория возмущений. В работе [30] на примере точно решаемой модели анализируется точность этих подходов. Модель описывает S -рассеяние бесспиновой частицы на ядре мишени, которое может находиться в двух состояниях. При заданном $K^{(N)}$ в рамках модели можно найти поправки в любом порядке теории возмущений по K^{res} . Основные результаты анализа следующие:

- 1) точность приближения растет с увеличением N ;
- 2) точность возрастает с увеличением порядка теории возмущений по K^{res} ;
- 3) довольно хорошая точность достигается уже при малых N и порядках теории возмущений;
- 4) в целом лучшую точность дают приближения первой группы.

Перейдем теперь к рассмотрению применения идеологии сепарабилизации непосредственно к уравнениям метода сильной связи каналов. Рассмотрим рассеяние частицы a на ядре, используя гамильтониан

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) = K_a(\mathbf{r}) + h_A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) + \sum_i V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (30)$$

где \mathbf{r} — координаты частицы a ; \mathbf{R}_i — координаты нуклонов; $V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — потенциал взаимодействия частицы a с i -м нуклоном; $K_a(\mathbf{r})$ — оператор кинетической энергии рассеиваемой частицы; h_A — гамильтониан ядра-мишени, имеющий собственные функции φ_ν и собственные значения ϵ_ν

$$[h_A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) - \epsilon_\nu] \varphi_\nu(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) = 0. \quad (31)$$

Разложив волновую функцию системы Ψ , удовлетворяющую уравнению

$$H\Psi = E\Psi, \quad (32)$$

в ряд по $\varphi_\nu(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A)$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) = \sum_\nu \Psi_{\mathbf{k}_\nu}(\mathbf{r}) \varphi_\nu(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) \quad (33)$$

и подставив полученное разложение в (32), получим следующую систему уравнений метода сильной связи каналов:

$$\left. \begin{aligned} [K_\alpha(\mathbf{r}) - E + \varepsilon_\nu] \Psi_{\mathbf{k}_\nu}(\mathbf{r}) &= -V_{\nu\mu}(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}_\mu}(\mathbf{r}); \\ V_{\nu\mu}(\mathbf{r}) &= \int \varphi_\nu^*(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) \sum_i V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \times \\ &\times \varphi_\mu(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) d^3R_1, \dots, d^3R_A. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Волновая функция $\Psi_{\mathbf{k}_\nu}$ описывает систему a плюс ν -возбужденное состояние ядра-мишени.

Перейдем к системе интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}_\nu}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \varphi_{\mathbf{k}_\nu}(\mathbf{r}) + \int G_{0\nu}^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_{\nu\mu}(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}_\mu}^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r'; \\ G_{0\nu}^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp[ik_\nu |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \end{aligned} \quad (35)$$

где $\varphi_{\mathbf{k}_\nu}(\mathbf{r})$ — плоская волна во входном канале. Уравнение (35) будем решать методом сепарабилизации. Заметим, что теперь $V\Psi = V_{\nu\mu}\Psi_{\mathbf{k}_\mu}$ и, следовательно, формула (4) примет вид *

$$\left. \begin{aligned} V_{\nu\mu}^{(N)} \Psi_{\mathbf{k}_\mu} &= \sum_{i,j=1}^N V_{\nu\mu} |\eta_\mu^i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle \xi_l^j | V_{ln} | \Psi_{\mathbf{k}_n} \rangle, \\ [d^{-1}]_{ij} &= \langle \xi_\nu^i | V_{\nu\mu} | \eta_\mu^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Используя (36), получаем решение уравнения (35):

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}_\nu}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \varphi_{\mathbf{k}_\nu}(\mathbf{r}) + \\ + \int \sum_{i,k=1}^N G_{0\nu}^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_{\nu\mu}(\mathbf{r}') \eta_\mu^i(\mathbf{r}') d^3r' C_{ik}^{(N)} \langle \xi_l^k | V_{ln} | \varphi_{\mathbf{k}_l} \rangle, \\ [C^{-1}]_{ik} &= \langle \xi_l^i | V_{ln} - V_{ln} G_{0l}^{(+)} V_{ln} | \eta_\mu^k \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

Выражения (37) дают полное решение задачи, так как амплитуды упругого и неупругого процессов определяются выражением

$$f_n^{(N)}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,k=1}^N \langle \mathbf{k}'_n | V_{nm} | \eta_m^i \rangle C_{ik}^{(N)} \langle \xi_l^k | V_{ln} | \varphi_{\mathbf{k}_l} \rangle. \quad (38)$$

* В (36) суммирование по ν, μ, l, n включает в себя интегрирование по непрерывному спектру.

При переходе в импульсное представление получаем систему интегральных уравнений с ядрами $Q_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, и метод сепарабилизации в данном представлении означает замену ядра Q_{nm} на вырожденное

$$Q_{nm}^{(N)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{i,j=1}^N d_{ij} f_n^i(\mathbf{k}) \eta_m^{*j}(\mathbf{k}'). \quad (39)$$

Таким образом, используя известные в теории интегральных уравнений теоремы о замене ядра на вырожденное, можно утверждать, что

$$|f_n(\theta, \varphi) - f_n^{(N)}(\theta, \varphi)| \sim |Q_{nm} - Q_{nm}^{(N)}|. \quad (40)$$

До сих пор в стороне оставляли вопрос о выборе сепарирующих функций, так как он будет обсуждаться на протяжении всей работы. Здесь же укажем на выбор функций в виде

$$\eta_n^i = \zeta_n^i = \delta_{in} \exp(is_i \mathbf{r}). \quad (41)$$

Параметры s_i могут выбираться из условий минимума функционала (40). Сепарабилизация (41) есть не что иное, как обобщение метода Бейтмана на проблему многих тел. В заключение подчеркнем, что метод сепарабилизации можно применять также и к задачам атомной физики, а именно, к рассеянию частиц на нейтральных атомах [31].

3. ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ И МЕТОД СЕПАРАБИЛИЗАЦИИ

Покажем, что на основе сепарабельного приближения (4) можно получить бесконечную последовательность вариационных принципов, в которой первое место занимает вариационный принцип Швингера.

Для парциальной задачи двух тел положим в формуле (4)

$$N = 1 \text{ и } |\eta\rangle = |\zeta\rangle = |\chi_l\rangle. \quad (42)$$

Тогда

$$V^{(1)} = V |\chi_l\rangle \langle \chi_l| V / \langle \chi_l| V |\chi_l\rangle. \quad (43)$$

С потенциалом (43) уравнение

$$\Psi_l(r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r, r') V(r') \Psi_l(r') dr', \quad (44)$$

где

$$G_l(r, r') = \begin{cases} k^{-1} j_l(kr) n_l(kr'), & r \leq r'; \\ k^{-1} n_l(kr) j_l(kr'), & r' \leq r, \end{cases}$$

решается в явном виде, и для фазы рассеяния получаем выражение

$$\operatorname{tg} \delta_l = -\frac{1}{k} (\langle j_l | V | \chi_l \rangle)^2 / \langle \chi_l | V - VG_l V | \chi_l \rangle. \quad (45)$$

Отметим, что выражение (45) есть вариационный функционал Швингера с пробной функцией $|\chi_l\rangle$ [32]. Таким образом, при одночленной сепарабилизации (43) сепарирующая функция является пробной. Рассмотрим N -членную сепарабилизацию

$$\left. \begin{aligned} V^{(N)} = \sum_{i,j=1}^N V | \chi_l^i \rangle d_{ij}^{(N)} \langle \chi_l^j | V; \\ [d^{-1}]_{ij} = \langle \chi_l^i | V | \chi_l^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

В этом случае (44) так же решается и

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{tg} \delta_l = -\frac{1}{k} \sum_{i,j=1}^N \langle j_l | V | \chi_l^i \rangle C_{ij}^{(N)} \langle j_l | V | \chi_l^j \rangle, \\ [C^{-1}]_{ij} = \langle \chi_l^i | V - VG_l V | \chi_l^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

Покажем, что (47) — вариационный функционал, устойчивый относительно вариаций первого порядка по каждой из пробных функций $|\chi_l^i\rangle$. Для доказательства подставим в функционал $\chi_l^k = \Psi_l + \delta\Psi_l$, тогда

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta_l &= -\frac{1}{k} \sum_{i,j=1}^N \langle \Psi_l | V - VG_l V | \chi_l^i \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \Psi_l | V - VG_l V | \chi_l^j \rangle = \\ &= -\frac{1}{k} \langle j_l | V | \Psi_l \rangle + O[(\delta\Psi_l)^2]. \end{aligned}$$

Перейдем к трехмерной задаче двух тел. Положим в (4)

$$\left. \begin{aligned} |\eta_i\rangle &= |\chi_{\mathbf{k}}^{i(+)}\rangle, \\ |\zeta_i\rangle &= |\chi_{\mathbf{k}'}^{i(-)}\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

Подставляя (48) в уравнение $\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = |\mathbf{k}\rangle + G_0^{(\pm)} V \Psi_{\mathbf{k}}$, получаем для амплитуды выражение

$$\left. \begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,j=1}^N \langle \chi_{\mathbf{k}'}^{i(-)} | V | \mathbf{k} \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \mathbf{k}' | V | \chi_{\mathbf{k}}^{j(+)} \rangle, \\ [C^{-1}]_{ij} = \langle \chi_{\mathbf{k}'}^{i(-)} | V - VG_0 V | \chi_{\mathbf{k}}^{j(+)} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

При $N = 1$ выражение (49) сводится к вариационному принципу Швингера для амплитуды рассеяния. Аналогично рассмотрен-

ному выше случаю парциальной задачи двух тел можно показать, что (49) стационарно относительно вариаций первого порядка по каждой пробной функции. Пусть

$$\chi_{\mathbf{k}'}^{m(-)} = \Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} + \delta\Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}, \quad \chi_{\mathbf{k}}^{n(+)} = \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} + \delta\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)},$$

тогда

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \langle \mathbf{k}' | V | \Psi_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle + O[(\delta\Psi)^2]. \quad (50)$$

В проблеме двух тел решение можно найти точно и вариационные принципы (47), (49) вряд ли будут очень полезны. Для большего числа частиц, где точное решение уравнения Шредингера найти невозможно, такого рода обобщение вариационного принципа становится важным.

В многоканальной теории в случае упругого процесса выберем сепарабилизацию

$$|\eta_n^i\rangle = |\chi_{\mathbf{k}_n}^{i(+)}\rangle, \quad |\zeta_n^i\rangle = |\chi_{\mathbf{k}_n}^{i(-)}\rangle,$$

тогда амплитуда упругого процесса определяется выражением

$$\left. \begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,j=1}^N \langle \Phi_{\mathbf{k}'_\alpha} | V_{\alpha\beta} | \chi_{\mathbf{k}'_\beta}^{i(+)} \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \chi_{\mathbf{k}'_\gamma}^{j(-)} | V_{\gamma\delta} | \Phi_{\mathbf{k}_\delta} \rangle, \\ [C^{-1}]_{ij} &= \langle \chi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{i(-)} | V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\gamma} G_{0\gamma}^{(+)} V_{\gamma\delta} | \chi_{\mathbf{k}'_\delta}^{j(+)} \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

где $|\Phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ — плоская волна, соответствующая входному каналу, т. е.

$$|\Psi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{(+)}\rangle = |\Phi_{\mathbf{k}'_\alpha}\rangle + G_{0\alpha}^{(+)} V_{\alpha\beta} |\Psi_{\mathbf{k}'_\beta}^{(+)}\rangle. \quad (52)$$

Докажем теперь, что (51) есть вариационный функционал, стационарный относительно вариаций первого порядка по любой из пробных функций χ . Предположим, что

$$\chi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{m(-)} = \Psi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{(-)} + \delta\Psi, \quad \chi_{\mathbf{k}'_\beta}^{n(+)} = \Psi_{\mathbf{k}'_\beta}^{(+)} + \delta\Psi. \quad (53)$$

Подставляя (53) в (51), имеем

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,j=1}^N \langle \Psi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{(-)} | V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\gamma} G_{0\gamma}^{(+)} V_{\gamma\beta} | \chi_{\mathbf{k}'_\beta}^{i(+)} \rangle \times \\ &\times C_{ij}^{(N)} \langle \chi_{\mathbf{k}'_\delta}^{j(-)} | V_{\delta\sigma} - V_{\delta\rho} G_{0\rho}^{(+)} V_{\rho\sigma} | \Psi_{\mathbf{k}'_\sigma}^{(+)} \rangle = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_{\mathbf{k}'_\alpha}^{(-)} | V_{\alpha\beta} | \Phi_{\mathbf{k}'_\beta} \rangle + O[(\delta\Psi)^2]. \end{aligned}$$

Для неупругих процессов без перераспределения построим сепарабельное приближение

$$\left. \begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{(N)} &= \sum_{i,j=1}^N V_{\alpha\gamma} |\eta_{\mathbf{k}_\gamma}^{i(+)}\rangle d_{ij}^{(N)} \langle \xi_{\mathbf{k}_\delta}^{j(-)} | V_{\delta\beta}, \\ [d^{-1}]_{ij} &= \langle \xi_{\mathbf{k}_\alpha}^{i(-)} | V_{\alpha\beta} | \eta_{\mathbf{k}_\beta}^{j(+)} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

Тогда для амплитуды получаем

$$\left. \begin{aligned} f_m(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,j=1}^N \langle \varphi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)} | V_{\alpha\beta} | \eta_{\mathbf{k}_\beta}^{i(+)} \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \xi_{\mathbf{k}_\delta}^{j(-)} | V_{\delta\sigma} | \varphi_{\mathbf{k}_\sigma} \rangle, \\ [C^{-1}]_{ij} &= \langle \xi_{\mathbf{k}_\alpha}^{i(-)} | V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\gamma} G_{0\gamma}^{(+)} V_{\gamma\beta} | \eta_{\mathbf{k}_\beta}^{j(+)} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

Здесь $\varphi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)}$ — плоская волна в канале с номером m , т. е.

$$|\Psi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)(\pm)}\rangle = |\varphi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)}\rangle + G_{0\alpha}^{(\pm)} V_{\alpha\beta} |\Psi_{\mathbf{k}_\beta}^{(m)(\pm)}\rangle.$$

Легко видеть, что если $\xi_{\mathbf{k}_\alpha}^{i(-)} = \Psi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)(-)} + \delta\Psi$; $\eta_{\mathbf{k}_\alpha}^{i(+)} = \Psi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)(+)} + \delta\Psi$,

$$\text{то } f_m(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \langle \varphi_{\mathbf{k}_\alpha}^{(m)} | V_{\alpha\beta} | \Psi_{\mathbf{k}_\beta}^{(+)} \rangle + O[(\delta\Psi)^2].$$

Итак, как в задаче двух тел, так и в многоканальной теории на основе метода сепарабилизации получается последовательность вариационных принципов, сходимость которой обеспечивается сходимостью разложения (4), причем первый член этой последовательности совпадает с вариационным принципом Швингера. Из изложенного следует, что каждому из этих принципов можно придать динамический смысл, поскольку $|V - V^{(N)}|$ характеризует погрешность. И, наконец, в отличие от существующих в данных вариационных принципах идет варьирование сразу по набору пробных функций. Этот факт приводит к уникальной возможности построения приближенного решения квантовомеханических уравнений. Как правило, соответствующие динамические уравнения можно довольно точно проинтегрировать в исключительных случаях. Сепарируя по этим функциям, получаем амплитуду, которая во всех исключительных случаях совпадает с точной, а в промежуточной области может дать оценку погрешности. Например, выбирая в качестве пробных функций в задаче двух тел S -волновое и эйкональное решения, находим амплитуду, описывающую процессы рассеяния в более широкой области, чем эйкональная амплитуда или S -волновое решение.

Перейдем теперь к задачам на связанное состояние. Покажем, что разложение (4) и в этом случае приводит к вариационному принципу. Рассмотрим задачу двух тел и для простоты ограничим-

ся в (4) $N = 1$, $\eta = \zeta = \chi$. В этом случае уравнение $\Psi_E = G_E V \Psi$ решается в явном виде и энергия связи определяется из следующего выражения:

$$1 = \langle \chi | V G_E V | \chi \rangle / \langle \chi | V | \chi \rangle. \tag{56}$$

Пусть $\chi = \psi + \delta\Psi$, $E = E_0 + \delta E$, тогда

$$\frac{\langle \Psi | V G_{E_0} V | \Psi \rangle + 2 \langle \delta\Psi | V G_{E_0} V | \Psi \rangle}{\langle \Psi | V | \Psi \rangle + 2 \langle \delta\Psi | V | \Psi \rangle} - 1 = -\delta E \text{ const} + O[(\delta\Psi)^2],$$

или $\delta E \sim O[(\delta\Psi)^2]$, т. е. (56) дает для энергии связи функционал, стационарный относительно вариации первого порядка. Метод сепарабилизации приводит к вариационному принципу для собственных значений μ_n задачи Гильберта — Шмидта *. С потенциалом $V^{(1)} = V | \chi \rangle \langle \chi | V / \langle \chi | V | \chi \rangle$ задача Гильберта — Шмидта $\Psi_n = G_E V \Psi_n / \mu_n(E)$ решается в явном виде, и для собственных значений находим

$$\mu_n^{(1)} = \langle \chi | V G_E V | \chi \rangle / \langle \chi | V | \chi \rangle. \tag{57}$$

Покажем, что (57) есть вариационный функционал, устойчивый относительно вариаций первого порядка для пробной функции.

В самом деле, пусть $\chi = \Psi + \delta\Psi$, тогда

$$\mu_n^{(1)} = \frac{\langle \Psi | V G_E V | \Psi \rangle + 2 \langle \delta\Psi | V G_E V | \Psi \rangle}{\langle \Psi | V | \Psi \rangle + 2 \langle \delta\Psi | V | \Psi \rangle} + O[(\delta\Psi)^2] = \mu_n + O[(\delta\Psi)^2].$$

Выбирая в (4) N членов, получаем также последовательность вариационных принципов. Полученные вариационные принципы в настоящее время представляют значительный интерес в связи с новым подходом к теории резонансов, основанном на методе Гильберта — Шмидта [34].

Найдем, что вариационные принципы (49), (51), (53) можно получить непосредственно из вариационного принципа Швингера:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \frac{\langle \chi_{\mathbf{k}}^{(-)} | V | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k}' | V | \chi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}{\langle \chi_{\mathbf{k}}^{(-)} | V - V G_0^{(+)} V | \chi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}. \tag{58}$$

Действительно, выберем пробные функции в виде

$$\chi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \sum_{i=1}^N a_i \chi_{\mathbf{k}}^{(-)i}; \quad \chi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \sum_{i=1}^N b_i \chi_{\mathbf{k}}^{(+)i}. \tag{59}$$

Подставляя (59) в (58) и находя коэффициенты a_i и b_i , из условия $\partial f / \partial a_i = \partial f / \partial b_i = 0$ получаем (49). В работе [35] использовалось разложение типа (59)

$$\chi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \sum_{i=1}^N a_i \Phi_i; \quad \chi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \sum_{i=1}^N b_i \Phi_i. \tag{60}$$

* Вариационный принцип для $\mu_n(E)$ рассматривался в работе [33].

При этом для амплитуды получается так называемое вариационное приближение, которое не стационарно.

Несмотря на то что при определенном выборе пробных функций (49), (51), (53) получаются из (58), покажем, что имеет место не один вариационный принцип с различными пробными функциями, а последовательность вариационных принципов. Для доказательства рассмотрим случай, когда заданный потенциал уже является оператором конечного ранга N , который всегда можно представить в виде

$$V = \left. \begin{aligned} & \sum_{i,j=1}^N W |y_i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle y_j| W, \\ & [d^{-1}]_{ij} = \langle y_i | W | y_j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

Заменив V на $V^{(N)}$ по формуле (4), получим

$$V^{(N)} = \sum_{\alpha, \beta=1}^N V | \eta_{\alpha} \rangle D_{\alpha\beta}^{(N)} \langle \zeta_{\beta} | V, \quad (62)$$

$$[D^{-1}]_{\alpha\beta} = \langle \zeta_{\alpha} | V | \eta_{\beta} \rangle.$$

Подставляя (61) в (62), нетрудно убедиться в том, что $V^{(N)} \equiv V$. Следовательно, если исходный потенциал является оператором конечного ранга N , то вариационный принцип, полученный при N -членной сепарабилизации, приводит к точному значению при любых пробных функциях. На это свойство вариационного принципа Швингера (58) для пробных функций в виде плоских волн указывалось в работе [36].

4. ИТЕРАЦИОННО-СЕПАРАБЕЛЬНЫЙ МЕТОД

Для решения квантовомеханических задач часто употребляется метод итерации, причем возможно несколько итерационных схем [37]. Один из общих недостатков большинства известных итерационных процедур заключается в том, что они сходятся в предположении «слабости взаимодействия».

В работах [31, 38] предложен итерационно-сепарабельный метод (ИСМ) решения квантовомеханических задач, который сходится для произвольных короткодействующих потенциалов. В данном параграфе ИСМ применяется к задаче двух тел и теории многоканального рассеяния.

Сущность ИСМ заключается в следующем: оператор потенциала V заменяем сепарабельным

$$V^{(1)} = V | \chi \rangle \langle \chi | V / \langle \chi | V | \chi \rangle, \quad (63)$$

а в качестве $| \chi \rangle$ выбираем какое-либо приближенное решение $| \chi_0 \rangle$ уравнения

$$(H_0 + V) | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle. \quad (64)$$

Затем с сепарабельным потенциалом (63) уравнение (64) решается в явном виде и находится $\Psi_0 = \Psi(\chi_0)$. После этого, полагая в (63) $|\chi_1\rangle = \Psi_0$, вновь решаем уравнение и находим $\Psi_1 = \Psi(\chi_1)$, затем $|\chi_2\rangle = \Psi_1$ и т. д.

Отметим, что если итерационный процесс

$$(E - H_0) |\Psi^{(N)}\rangle = V |\Psi^{(N-1)}\rangle \langle \Psi^{(N-1)} | V |\Psi^{(N)}\rangle / \langle \Psi^{(N-1)} | V |\Psi^{(N-1)}\rangle \quad (65)$$

сходится, то $\Psi^{(N)}$ сходится к точному решению. В самом деле, в этом случае $\Psi^{(N)} \sim \Psi^{(N-1)}$ и $(E - H_0) |\Psi^{(N)}\rangle \sim V |\Psi^{(N)}\rangle$. Перейдем к сходимости ИСМ для задачи двух тел. Покажем, что для парциального рассеяния справедливо следующее утверждение: ИСМ для фазы рассеяния на короткодействующем потенциале сходится экспоненциально и равномерно.

Для доказательства сходимости процесса

$$\left. \begin{aligned} |\Psi_l^{(N)}\rangle &= |j_l\rangle + G_l V |\Psi_l^{(N-1)}\rangle c^{(N-1)}; \\ c^{(N-1)} &= \langle j_l | V |\Psi_l^{(N-1)}\rangle / \langle \Psi_l^{(N-1)} | V - V G_l V |\Psi_l^{(N-1)}\rangle \end{aligned} \right\} \quad (66)$$

следует указать способ введения метрики. Очевидно, что наиболее удачен случай, когда норма соответствует искомой физической величине. Подходящую для нас норму можно ввести следующим образом:

$$\|\Psi\| = \sup_k |\langle j_l | V | \Psi \rangle|, \quad (67)$$

т. е. если Ψ_l — точное решение уравнения (44), то

$$\|\Psi_l\| = \sup_k |\operatorname{tg} \delta_l(k)|. \quad (68)$$

Когда $\delta_l(k) \sim \pi/2$, необходимо переопределить метрику.

Пусть на каком-то шаге N оказалось, что $\|\Psi_l - \Psi_l^{(N)}\| \sim \epsilon \ll 1$. Тогда

$$\begin{aligned} \|\Psi_l - c^{(N)} \Psi_l^{(N)}\| &= \sup_k |\langle j_l | V | \Psi_l \rangle - \\ &- \langle j_l | V | \Psi_l^{(N)} \rangle \langle \Psi_l^{(N)} | V | j_l \rangle / \langle \Psi_l^{(N)} | V - V G_l V | \Psi_l^{(N)} \rangle|. \end{aligned}$$

Используя результаты разд. 3, получаем $\|\Psi_l - c^{(N)} \Psi_l^{(N)}\| \sim O(\epsilon^2)$. И, следовательно,

$$\|\Psi_l - \Psi_l^{(N+1)}\| = \|G_l V (\Psi_l - c^{(N)} \Psi_l^{(N)})\| \sim O(\epsilon^2),$$

если $G_l V$ — вполне непрерывный оператор. Таким образом, утверждение доказано.

Из изложенного следует, что $|\operatorname{tg} \delta_l - \operatorname{tg} \delta_l^{(N)}| \sim |c^{(N-1)} - 1|^2$ при $|c^{(N-1)} - 1| \ll 1$. Таким образом, на каждом шаге можно оценить погрешность.

Таблица 1

| g | a_1 | a_2 | a_3 | a |
|------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 20 | -0,697674416 | -0,423862662 | -0,632448315 | -0,789290815 |
| 15 | -0,681818179 | -0,530973777 | -0,618485048 | -0,759095221 |
| 10 | -0,652173914 | -0,615034185 | -0,617338575 | -0,709979757 |
| 5 | -0,576923072 | -0,592755220 | -0,596135705 | -0,606672674 |
| 2 | -0,428571425 | -0,436187397 | -0,436745792 | -0,436821375 |
| 1 | -0,300000000 | -0,302182432 | -0,302224215 | -0,302225343 |
| 0,5 | -0,187500000 | -0,187956839 | -0,187959047 | -0,187959058 |
| 0,1 | -0,046875000 | -0,046881022 | -0,046881025 | -0,046881023 |
| -0,1 | 0,053571429 | 0,053579508 | 0,053579510 | 0,053579510 |
| -0,5 | 0,374999996 | 0,377094965 | 0,377105295 | 0,377105247 |
| -1,0 | 1,499999985 | 1,574344038 | 1,575890094 | 1,575920298 |
| -1,3 | 4,875000357 | 6,144098341 | 6,198497951 | 6,200247526 |
| -1,4 | 10,500000715 | 20,370762348 | 21,150523662 | 21,180144786 |

Примечание: a — длина рассеяния на потенциале (69); a_1 , a_2 , a_3 — первое, второе и третье ИСМ-приближения соответственно.

Перейдем к численной сходимости метода. В табл. 1 приведены длины рассеяния на потенциале

$$V(r) = g\theta(1-r)/r. \quad (69)$$

Точное значение длины рассеяния a на таком потенциале легко вычислить [37]:

$$a = - \sum_n g^n / [(n+1)! (n-1)!] / \sum_n g^n / n! \quad (70)$$

Из табл. 1 видно, что, как и утверждалось, в области значений g , где сходится борновский ряд, первое приближение ИСМ не хуже, чем второе борновское, второе приближение ИСМ не хуже четвертого, третье не хуже восьмого борновского и т. д.

Для трехмерной задачи двух тел итерационно-сепарабельный метод обобщается следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}^{(N)(+)} &= |\mathbf{k}\rangle + G_0^{(+)} V |\Psi_{\mathbf{k}}^{(N-1)(+)}\rangle c^{(N-1)}; \\ c^{(N-1)} &= \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(N-1)(-)} | V | \mathbf{k} \rangle / \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(N-1)(-)} | V - V G_0^{(+)} V | \Psi_{\mathbf{k}}^{(N-1)(+)} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (71)$$

В случае многоканальных задач ИСМ обобщается аналогично. Чтобы проиллюстрировать метод, рассмотрим столкновение позитронов с атомами водорода. Так как масса позитрона мала по сравнению с массой протона, то движение ядра в процессе столкновения несущественно и им можно пренебречь.

Предположим также, что аннигиляция идет через канал образования позитрония, тогда соответствующая система уравнений

имеет следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} (h^2\Delta/2\mu + E - E_n) F_n(\mathbf{r}) &= V_{nm}(\mathbf{r}) F_m(\mathbf{r}); \\ V_{nm} &= \int \Psi_n^*(\mathbf{r}') (1/r - 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi_m(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \right\} \quad (72)$$

где Ψ_n — система собственных функций атома водорода. В табл. 2 приведены в атомной системе единиц длины рассеяния e^+H позитрона на атоме водорода, рассчитанные итерационно-сепарабельным методом.

Таблица 2

| Метод | Статистический потенциал | 1S—2S | 1S—2S—2P | 1S—2S—2P—3S | 1S—2S—2P—3S—4S |
|---------------|--------------------------|-------|----------|-------------|----------------|
| ИСМ | 0,561 | 0,541 | 0,365 | 0,356 | 0,355 |
| Точный расчет | 0,582 | 0,564 | — | — | — |

Для сравнения приведены данные точных расчетов на статистическом потенциале и с учетом сильной связи состояний 1S—2S [39]. Видно, что ИСМ дает длины рассеяния, близкие к точным в задаче с ограниченным числом каналов. Наибольший вклад в длину рассеяния, как и следовало ожидать, вносит учет виртуального P-состояния атома водорода. Из табл. 2 видно, что ряд по виртуальным S-состояниям быстро сходится.

Таким образом, итерационно-сепарабельный метод представляет собой быстросходящуюся универсальную процедуру, которая применима для расчетов ядерных столкновений, а также столкновений заряженных частиц с атомами.

5. ДВУСТОРОННИЕ ОЦЕНКИ В ЯДЕРНОЙ ЗАДАЧЕ ДВУХ И ТРЕХ ТЕЛ

Несмотря на то что для процессов рассеяния вариационные принципы носят характер условия стационарности, а не минимума или максимума, проблема получения одно- и двусторонних границ на параметры рассеяния не является безнадежной. В этом направлении проведено уже довольно много исследований [40—42].

Остановимся здесь на применении метода сепарабилизации для построения двусторонних оценок на физические наблюдаемые в ядерной задаче двух и трех тел [43—44]. Суть метода в следующем: вместо данной задачи с гамильтонианом H рассматриваем две другие с промежуточными гамильтонианами H_- и H_+ ,

для которых решения находятся просто, причем $H_- \leq H \leq H_+$. В результате получаем двусторонние оценки. Итак, задача состоит в построении двух потенциалов V_- и V_+ , таких, что $V_- \leq V \leq V_+$, с которыми уравнение Шредингера решается точно. Рассмотрим сначала случай, когда взаимодействие не содержит отгалкивания $V = -W$, где оператор W — положительный, т. е. $\langle \Psi | W | \Psi \rangle \geq 0$ для любой Ψ . Покажем, что разложение (4) с $|\eta_i\rangle = |\xi_i\rangle$ приводит к V_+ . В самом деле,

$$J = \left(\langle \Psi | + \sum_i c_i^* \langle \eta_i | \right) W \left(\sum_j c_j |\eta_j\rangle + |\Psi\rangle \right) \geq 0 \quad (73)$$

при любых c_i . Выберем c_i из условия $\partial J / \partial c_i = \partial J / \partial c_i^* = 0$, тогда

$$J = \langle \Psi | W | \Psi \rangle - \sum_{i,j=1}^N \langle \Psi | W | \eta_i \rangle d_{ij}^{(N)} \langle \eta_j | W | \Psi \rangle,$$

или

$$\langle \Psi | V | \Psi \rangle \leq \langle \Psi | V^{(N)} | \Psi \rangle \quad (74)$$

при любых функциях η_i и при любом N , следовательно, $V^{(N)} = V_+$. Для построения V_- перейдем в импульсное пространство. Рассмотрим тождество

$$\left. \begin{aligned} W(k, k') &\equiv W^{(N)}(k, k') + W_1(k, k'); \\ W_1(k, k') &= W(k, k') - W^{(N)}(k, k'). \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

Так как $W_1(k, k') \geq 0$, то, используя неравенство Гельдера, нетрудно показать, что

$$W_1(k, k') \leq \sqrt{W_1(k, k) W_1(k', k')}. \quad (76)$$

На основе (76) получаем

$$\tilde{W}^{(N)}(k, k') = W^{(N)}(k, k') + \sqrt{W_1(k, k) W_1(k', k')}$$

или

$$\begin{aligned} \tilde{V}^{(N)}(k, k') &= V^{(N)}(k, k') + \\ &+ \sqrt{(V^{(N)}(k, k) - V(k, k))(V^{(N)}(k', k') - V(k', k'))}. \end{aligned} \quad (77)$$

Приближение (77) обладает следующими свойствами:

- 1) $\tilde{V}^{(N)}(k, k) = V(k, k)$;
- 2) $\tilde{V}^{(N)}(k', k') = V(k', k')$;
- 3) $\tilde{V}^{(N)}(k, k') \leq V(k, k')$,

т. е. $\tilde{V}^{(N)} = V_-$.

Для потенциалов, содержащих отталкивание, построение операторов V_+ и V_- обобщается следующим образом [44]: пусть $V = V_{от} - V_{пр}$, где $V_{от} \geq 0$ и $V_{пр} \geq 0$, тогда $V_- = V_{от}^{(N)} - \tilde{V}_{пр}^{(M)}$, $V_+ = \tilde{V}_{от}^{(N)} - V_{пр}^{(M)}$. Для получения $V^{(N)}$ естественно выбрать разложение Бейтмана.

Покажем теперь, что промежуточные потенциалы V_+ и V_- приводят к двусторонним оценкам. Для этого воспользуемся неравенствами Фейнмана [4]. Пусть потенциал является функцией от некоторого параметра λ . Тогда для связанного состояния $(H_0 + V) \Psi_n = -|E_n| \Psi_n$ имеем

$$\frac{\partial |E_n|}{\partial \lambda} = - \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right| \Psi_n \right\rangle, \quad (78)$$

а для задачи рассеяния

$$\frac{\partial \delta_l}{\partial \lambda} = -2m \left\langle \Psi \left| \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right| \Psi \right\rangle \alpha; \quad (79)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \lambda} = 2m\alpha^2 \left\langle \Psi \left| \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right| \Psi \right\rangle; \quad (80)$$

$$\frac{\partial (\text{tg } \delta_l)}{\partial \lambda} = -2m \left\langle \Psi \left| \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right| \Psi \right\rangle. \quad (81)$$

В равенствах (79)–(81) Ψ являются решениями парциального уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(\lambda) - E \right) \Psi = 0 \quad (82)$$

с различными граничными условиями; a — длина рассеяния; $\alpha = \cos^2 \delta_l$.

Чтобы выявить рамки применимости выражений (79)–(81), рассмотрим вкратце вывод этих соотношений. Для этого продифференцируем по λ уравнение (82):

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(\lambda) - E \right) \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} = -\frac{\partial V}{\partial \lambda} \Psi. \quad (83)$$

Умножим (82) на $\partial \Psi / \partial \lambda$, а (83) — на Ψ , вычтем одно из другого и проинтегрируем по r от 0 до ∞ . Если Ψ , $\partial \Psi / \partial \lambda$ имеют асимптотическое поведение в виде стоячих волн

$$\begin{aligned} \Psi &\sim \sin(kr - l\pi/2) + \text{tg } \delta_l \cos(kr - l\pi/2); \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} &\sim \frac{\partial \text{tg } \delta_l}{\partial \lambda} \cos(kr - l\pi/2), \end{aligned}$$

то в результате получаем

$$\frac{\partial \text{tg } \delta_l}{\partial \lambda} = -2m \left\langle \Psi \left| \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right| \Psi \right\rangle.$$

При выводе предполагалось, что во всех точках Ψ является дифференцируемой функцией по λ . Следовательно, (81) нарушается, если при изменении потенциала фаза δ_l проходит через резонансные значения $(2n + 1)\pi/2$, а соотношение (80) нарушается, если при изменении потенциала появляется или исчезает связанное состояние. Во всех остальных случаях, даже если разница между V_+ , V_- и V не мала, $\text{tg } \delta_l^{(\pm)}$, $\delta_l^{(\pm)}$, $a^{(\pm)}$, $E_n^{(\pm)}$ могут служить верхними и нижними границами соответствующих величин.

Введем параметр λ следующим образом [4]:

$$V_1 = V_- + \lambda(V - V_-), \quad V_2 = V_+ + \lambda(V - V_+),$$

тогда

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial |E_n^{(1)}|}{\partial \lambda} &= -\langle \Psi_n | V - V_- | \Psi_n \rangle; \\ \frac{\partial |E_n^{(2)}|}{\partial \lambda} &= -\langle \Psi_n | V - V_+ | \Psi_n \rangle; \\ \frac{\partial \delta_l^{(1)}}{\partial \lambda} &= -2m \langle \Psi | V - V_- | \Psi \rangle \alpha; \\ \frac{\partial \delta_l^{(2)}}{\partial \lambda} &= -2m \langle \Psi | V - V_+ | \Psi \rangle \alpha; \\ \frac{\partial a^{(1)}}{\partial \lambda} &= 2m (a^{(1)})^2 \langle \Psi | V - V_- | \Psi \rangle; \\ \frac{\partial a^{(2)}}{\partial \lambda} &= 2m (a^{(2)})^2 \langle \Psi | V - V_+ | \Psi \rangle; \\ \frac{\partial \text{tg } \delta_l^{(1)}}{\partial \lambda} &= -2m \langle \Psi | V - V_- | \Psi \rangle; \\ \frac{\partial \text{tg } \delta_l^{(2)}}{\partial \lambda} &= -2m \langle \Psi | V - V_+ | \Psi \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (84)$$

Проинтегрируем (84) по λ от 0 до 1, тогда

$$\left. \begin{aligned} |E_n^{(+)}| &\leq |E_n| \leq |E_n^{(-)}|; \\ \delta_l^{(+)} &\leq \delta_l \leq \delta_l^{(-)}; \\ a^{(-)} &\leq a \leq a^{(+)}; \\ \text{tg } \delta_l^{(+)} &\leq \text{tg } \delta_l \leq \text{tg } \delta_l^{(-)}. \end{aligned} \right\} \quad (85)$$

В табл. 3 приведены результаты расчета [43] энергии связи дейтона $|\epsilon_d|$, энергии связи трития $|E_t|$, синглетной длины рассеяния a_s и триплетной длины рассеяния a_t с потенциалами двух типов:

- 1) $V(r) = V \exp(-\alpha r^2)$;
- 2) $V(r) = V \exp(-\beta r)$.

Таблица 3

| Тип потенциала | | a_s , ферми | a_t , ферми | $ \varepsilon_d $, Мэв | $ E_t $, Мэв |
|----------------|--------------|---------------|---------------|-------------------------|---------------|
| точный | приближенный | | | | |
| 1 | V_+ | -23,6 | 5,450 | 2,2 | 8,96 |
| | V_- | -25,0 | 5,424 | 2,3 | 9,02 |
| 2 | V_+ | -23,6 | 5,450 | 2,2 | 9,22 |
| | V_- | -25,4 | 5,33 | 2,4 | 9,227 |

Расчет проводился при следующих значениях параметров потенциалов:

$$\begin{aligned}
 V_0^s &= -32,348 \text{ ферми}^{-2}; & V_0^t &= -77,022 \text{ ферми}^{-2}; \\
 \alpha_s &= 0,315 \text{ ферми}^{-2}; & \alpha_t &= 0,480 \text{ ферми}^{-2}; \\
 V^s &= -103,343 \text{ ферми}^{-2}; & V^t &= -179,249 \text{ ферми}^{-2}; \\
 \beta_s &= 1,364 \text{ ферми}^{-1}; & \beta_t &= 1,442 \text{ ферми}^{-1}.
 \end{aligned}$$

Для построения $V^{(N)}$ использовалось разложение Бейтмана с $N = 3$, причем узлы разложения определялись из минимума χ^2 :

$$\chi^2 = \int |V(k, k') - V^{(3)}(k, k')|^2 \times dk dk' / \int |V(k, k')|^2 dk dk'.$$

Во всех случаях $\chi^2 \sim 10^{-3}$. Отметим, что для получения более узких границ условия следовало бы выбирать из условий минимума

$$\begin{aligned}
 &|\delta_l^{(+)} - \delta_l^{(-)}|, \quad |a^{(+)} - a^{(-)}|, \\
 &||E_n^{(+)}| - |E_n^{(-)}|| \text{ и т. д.}
 \end{aligned}$$

Односторонняя граница для фазы рассеяния в случае экспоненциального потенциала [45] приведена на рис. 1. Для построения $V^{(N)}$ использовалось разложение Бейтмана с $N = 4$, причем один из узлов $s_4 = k$ ($k^2/2\mu$ — энергия).

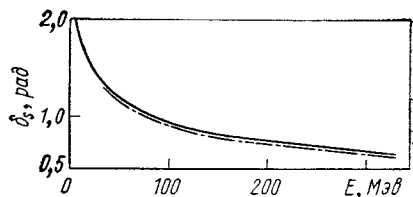


Рис. 1. 3S_1 — фаза рассеяния для экспоненциального потенциала: — — — точный расчет; - - - $\delta_s^{(+)}$

6. ВЫСОКИЕ ЭНЕРГИИ

Успешное применение дифракционной теории многократного рассеяния (приближение Глаубера [46]) в той области энергий и переданных импульсов, где данная теория не должна работать, привлекло внимание к проблеме поправок. В рамках глауберовского приближения не учитываются следующие эффекты: а) неадиабатические; б) поправки, связанные с отклонением от геометрической оптики (френелевские поправки); в) немассовые и т. п.

Некоторые из указанных эффектов обсуждались в литературе. Френелевские поправки рассматривались в работе [48], неадиабатические — в работе [49], немассовые — в работах [50].

Здесь часть из этих поправок исследуется на основе метода сепаратизации [47]. Рассмотрим сначала задачу двух тел. С уменьшением энергии частиц или с увеличением угла рассеяния возрастает значение поправок, связанных с отклонением от геометрической оптики.

Напомним, что высокоэнергетическому приближению соответствует решение уравнения Шредингера с эйкональной функцией Грина:

$$G_E(\mathbf{r}) = \frac{m}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{k} + i\varepsilon} = \frac{m}{ik} \exp(ikz) \theta(z) \delta(\rho),$$

здесь $\mathbf{k} = (0, 0, k)$, $\rho \perp \mathbf{k}$. Решения уравнения с такой функцией Грина известны:

$$\left. \begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle &= \exp\left(ikz - \frac{im}{k} \int_{-\infty}^z V(\rho, z') dz'\right); \\ \langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}| &= \exp\left(-ikz - \frac{im}{k} \int_{-\infty}^z V(\rho, z') dz'\right). \end{aligned} \right\} \quad (86)$$

Сенарируя потенциал по этим функциям, т. е. полагая в (4) $N=1$; $|\eta\rangle = |\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$; $\langle\xi| = \langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}|$, получаем амплитуду в следующем виде:

$$\begin{aligned} f_{ES} &= f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') C(\mathbf{k}, \mathbf{k}'); \\ C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \\ &- \int f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}-\eta) f_E(\mathbf{k}-\eta, \mathbf{k}') g(\mathbf{k}, \eta) \frac{d^3\eta}{(2\pi)^3})^{-1}. \end{aligned} \quad (87)$$

Здесь $f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — эйкональная амплитуда; $g = G_0 - G_E$ — разность между точной и эйкональной функциями Грина. Очевидно, что в амплитуде f_{ES} френелевские поправки учтены. Из явного выражения для

$$g(\mathbf{k}, \eta) = m\eta^2 / [(\mathbf{k}\eta + i\varepsilon)(2\mathbf{k}\eta - \eta^2 + i\varepsilon)] \quad (88)$$

следует: а) $C \rightarrow 1$ при $E \rightarrow \infty$; б) с увеличением угла рассеяния C растет.

Для примера рассмотрим рассеяние на гауссовом потенциале

$$V(r) = -A \exp(-\alpha^2 r^2), \tag{89}$$

причем ограничимся низшим по A/E членом разложения в поправочном множителе C . В итоге

$$C^{-1} = 1 - J, \tag{90}$$

где

$$J = m \int \frac{d^3 \eta}{(2\pi)^3} \frac{\eta^2}{(k\eta + i\epsilon)(2k\eta - \eta^2 + i\epsilon)} \frac{V_{|\Delta + \eta|} V_{|\eta|}}{V_{|\Delta|}};$$

$$\Delta = \mathbf{k} - \mathbf{k}'; \quad \Delta \mathbf{k} \sim 0; \quad V_{|\Delta|} = \pi^{3/2} \exp[-\Delta^2 / (2\alpha)^2] / \alpha^3.$$

В предельных случаях а) $\Delta/\alpha \ll 1$ и б) $\Delta/\alpha \gg 1$ выражение для J принимает довольно простой вид:

$$\text{а) } J = \frac{m}{2\pi} \frac{A}{8k^2} \left(1 + \frac{\Delta^2}{2\alpha^2} + \dots \right); \tag{91}$$

$$\text{б) } J = -\frac{m}{2\pi} \frac{A}{8k^2} \exp(\Delta^2 / 8\alpha^2) \Delta / (2\sqrt{2\alpha}), \tag{92}$$

т. е. поправка для больших передач может быть существенной.

Ввиду того что (87) есть не что иное, как вариационный функционал Швингера с эйкональной пробной функцией, необходимо иметь количественные оценки близости полученной амплитуды к точной. В этой связи в работе [51] предпринята попытка получить такие оценки.

Выбирая в (4) $N = 1$, $|\eta\rangle = |\zeta\rangle = |\Psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$ или $|\eta\rangle = |\zeta\rangle = |\mathbf{k}\rangle$, получаем соответственно

$$\left. \begin{aligned} \tilde{f}_{E_s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tilde{C}_E; \\ f_{B_s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tilde{C}_B, \end{aligned} \right\} \tag{93}$$

где f_B — амплитуда рассеяния в борновском приближении. Полные сечения, вычисленные в приближении (93) для потенциала (89), приведены на рис. 2. Параметры A и α таковы, что (89) воспроизводит данные нейтрон-нейтронного рассеяния при низких энергиях. Видно, что при больших энергиях \tilde{f}_{B_s} ближе к эйкональной амплитуде, чем f_B .

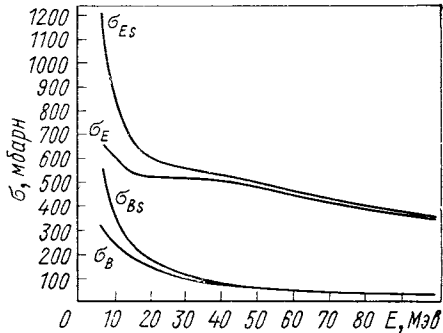


Рис. 2. Полное сечение для потенциала (89):

σ_B, σ_E — полные сечения в борновском и эйкональном приближениях; $\sigma_{B_s}, \sigma_{E_s}$ — при сепарабиллизации по плоским волнам и по эйкональному решению соответственно

Поскольку при малых энергиях f_{B_s} удовлетворительно описывает рассеяние (численные расчеты показывают, что в этой энергетической области \tilde{f}_{B_s} точнее второго борновского приближения), а при больших энергиях f_{E_s} ближе к точной амплитуде, естественно выбрать в (4) $N = 2$, $|\eta_1\rangle = |\mathbf{k}\rangle$, $|\eta_2\rangle = |\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}\rangle$. Теперь амплитуда имеет вид $f_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') C_1 + f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}') C_2$.

Перейдем теперь к поправкам в теории Глаубера. Напомним кратко вывод формул дифракционного приближения в рамках многоканальной потенциальной модели

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}_v}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{k}_v \mathbf{r}) \delta_{v\nu_0} + \int G_{0v}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') V_{\nu\mu}(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}'\mu}^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r'; \\ G_{0v}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= (-m/2\pi\hbar^2) (\exp[ik_v |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|] / |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \end{aligned} \right\} \quad (94)$$

В случае, когда рассеиваемая частица очень быстрая, представляется разумным использовать адиабатическое приближение. В этом приближении, пренебрегая энергией возбуждения системы в (34), получаем функцию Грина, не зависящую от индекса ν :

$$G_{0v(\text{ад})}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (-m/2\pi\hbar^2) \exp[ik |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|] / |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|. \quad (95)$$

Подставляя (95) в (94) и пользуясь эйконоальным приближением для функции Грина (86), получаем решение (94) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}_v}^{(+)}(\mathbf{r}) &= \exp(ikz) \int \varphi_v^*(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) \times \\ &\times \exp\left(-\frac{ik}{2E} \int_{-\infty}^z \sum_i V_i(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) dz'\right) \varphi_{\nu_0}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) d\tau, \quad (96) \\ d\tau &= d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_A. \end{aligned}$$

Используя (96) в выражении, например, для амплитуды упругого рассеяния

$$\begin{aligned} f(E, \Delta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \exp(-i\mathbf{k}'\mathbf{r}) V_{\nu_0\mu}(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}'\mu}^{(+)}(\mathbf{r}) d^3r, \\ \Delta &= \mathbf{k} - \mathbf{k}', \end{aligned}$$

получаем приближение Глаубера

$$\begin{aligned} f_G(E, \Delta) &= \frac{ik}{2\pi} \int \exp[i(\Delta\rho)] [1 - \exp(i\delta(\rho, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_A))] \times \\ &\times |\Psi_{\nu_0}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A)|^2 d\tau d^2\rho, \quad (97) \end{aligned}$$

где

$$\delta(\rho, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_A) = \sum_i \delta(\rho - \mathbf{s}_i) = \sum_i -\frac{k}{2E} \int_{-\infty}^{+\infty} V_i(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) dz;$$

\mathbf{s}_i — поперечная компонента вектора \mathbf{R}_i .

Итак, для получения (97) необходимо сделать адиабатическое и эйкональное приближения.

Перейдем теперь к соответствующим поправкам. Для анализа френелевских поправок, которые соответствуют учету эффектов отклонения эйкональной функции Грина от выражения (95), естественно сепарировать $V_{\mu\nu}$ по функциям (96), а затем с данным потенциалом найти амплитуду, решая уравнение

$$\Psi_{\mathbf{k}_\nu}^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{k}_\nu\mathbf{r}] \delta_{\nu\nu_0} + \int G_{0\nu(\text{ад})}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') V_{\nu\mu}(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}_\mu}^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (98)$$

Программа такого типа была рассмотрена в работе [47] для упругого pd -рассеяния.

Что касается неадиабатических поправок, то для их анализа методом сепарабилизации следует приближение сепарабельного потенциала применить непосредственно к уравнению (94), при этом естественно возникают также и френелевские поправки.

В заключение укажем на возможность эффективного учета неадиабатических эффектов. Введем среднюю энергию возбуждения ядра q , так что

$$\tilde{G}_{0\nu}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp[i(k+q)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (99)$$

Ясно, что q зависит от вида процесса, от угла рассеяния и т. п. С пропагатором (99) уравнения (94) в эйкональном приближении решаются и, сепарируя потенциал по этим решениям, получаем вариационный функционал для определения q .

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ

Метод сепарабилизации может оказаться полезным и при рассмотрении нестационарных задач. Так, в работе [52] в модели сепарабельного потенциала исследовалась задача — об ионизации связанного уровня.

Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_0 \Psi + V(t) \Psi. \quad (100)$$

Будем искать решение (100) в виде

$$\Psi = \sum_k c_k(t) \Psi_k, \quad (101)$$

где $i\hbar \partial \Psi_k / \partial t = H_0 \Psi_k$, тогда $i dc_m / dt = \langle \Psi_m(t) | V(t) | \Psi_n(t) \rangle c_n$, или

$$c_m(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t \langle \Psi_m'(t') | V(t') | \Psi_n(t') \rangle c_n(t') dt \quad (102)$$

Применим к $V(t)$ одночленную сепарабилизацию

$$V^{(1)}(t) = V(t) |\chi(t)\rangle \langle \chi(t)| V(t) / \langle \chi(t) | V(t) | \chi(t) \rangle, \quad (103)$$

тогда

$$c_m^{(1)}(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t \frac{\langle \Psi_m(t') | V(t') | \chi(t') \rangle \langle \chi(t') | V(t') | \Psi_n(t') \rangle c_n(t')}{\langle \chi(t') | V(t') | \chi(t') \rangle} dt'.$$

Введем

$$J^{(1)}(t) = \langle \chi(t) | V(t) | \Psi_m(t) \rangle c_m^{(1)}(t) / \langle \chi(t) | V(t) | \chi(t) \rangle. \quad (104)$$

Для функции $J^{(1)}$ получаем уравнение

$$\left. \begin{aligned} J^{(1)}(t) &= \frac{\langle \chi(t) | V(t) | \Psi_m(t) \rangle c_m(t_0)}{\langle \chi(t) | V(t) | \chi(t) \rangle} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t Q(t, t') J^{(1)}(t') dt'; \\ Q(t, t') &= \frac{\langle \chi(t) | V(t) | \Psi_m(t) \rangle \langle \Psi_m(t') | V(t') | \chi(t') \rangle}{\langle \chi(t) | V(t) | \chi(t) \rangle}. \end{aligned} \right\} \quad (105)$$

Выражение (105) значительно проще, чем (102), так как в данном случае имеется одно уравнение, а не система. Если решение (105) найдено, то

$$c_m^{(1)}(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t \langle \Psi_m(t') | V(t') | \chi(t') \rangle J^{(1)}(t') dt'. \quad (106)$$

Для N -членной сепарабилизации

$$\left. \begin{aligned} V^{(N)}(t) &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N V(t) |\chi_\alpha(t)\rangle d_{\alpha\beta}^{(N)} \langle \chi_\beta(t) | V(t), \\ [d^{-1}]_{\alpha\beta} &= \langle \chi_\alpha(t) | V(t) | \chi_\beta(t) \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (107)$$

введем

$$J_\alpha^{(N)}(t) = \sum_{\beta=1}^N d_{\alpha\beta}^{(N)} \langle \chi_\beta(t) | V(t) | \Psi_n(t) \rangle c_n^{(N)}(t). \quad (108)$$

В этом случае для $J_\gamma^{(N)}$ имеем систему N уравнений:

$$\left. \begin{aligned} J_\gamma^{(N)}(t) &= d_{\gamma\delta}^{(N)} \langle \chi_\delta(t) | V(t) | \Psi_m(t) \rangle c_m(t_0) + \\ &+ \frac{1}{i} \int_{t_0}^t Q_{\gamma\alpha}(t, t') J_\alpha^{(N)}(t') dt'; \\ Q_{\gamma\alpha}(t, t') &= d_{\gamma\delta}^{(N)}(t) \langle \chi_\delta(t) | V(t) | \Psi_m(t) \rangle \times \\ &\times \langle \Psi_m(t') | V(t') | \chi_\alpha(t') \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (109)$$

а для $c_m^{(N)}$ получаем выражение

$$c_m^{(N)}(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i} \int \langle \Psi_m(t') | V(t') | \chi_\alpha(t') \rangle J_\alpha^{(N)}(t') dt'.$$

Что касается выбора χ_a , то в качестве сепарирующих функций, исходя из идеологии данной работы, следует выбирать какие-то приближенные решения (100), а формулы (105), (109) использовать как возможное улучшение уже имеющихся приближений. Отметим, что для получения решения (100) в замкнутом виде следует также провести сепарацию и по времени. Для периодических решений это в принципе возможно, однако в настоящее время не ясен смысл такой процедуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрим перспективы применения метода сепарабилизации. В задачах на связанные состояния этот метод следует использовать при решении уравнений метода K -гармоник [53]. Например, выбирая в качестве сепарирующих функций решения, полученные в приближении $K_{\text{мин}}$ и учитывая результаты разд. 4, можно надеяться, что тем самым значительно улучшается имеющееся приближение. Вариационные методы для задачи Гильберта — Шмидта, видимо, найдут применение в исследованиях резонансов.

Для задач рассеяния можно воспользоваться итерационно-сепарабельным методом для получения трехмерных нуклон-нуклонных амплитуд и для реалистических расчетов трехчастичных систем выше трехчастичного порога.

Последовательность вариационных принципов может оказаться весьма полезной при получении двухчастичных амплитуд, совпадающих с точными при высоких и низких энергиях и для построения амплитуд, совпадающих при высоких энергиях с дифракционным приближением, а при низких энергиях — с амплитудой, полученной при решении уравнений Фаддеева. Очевидно, что расчеты такого типа можно осуществить на имеющихся ЭВМ.

Заметим, что результаты работ [54], в которых метод сепарабилизации применялся непосредственно к ядрам уравнений Фаддеева, показывают, что данным методом можно пользоваться и при решении интегральных уравнений для четырех нуклонов. Можно надеяться, что в дальнейшем метод сепарабилизации найдет применение и для задач, не рассмотренных в данной работе (уравнения Хартри — Фока и т. п.).

Автор выражает глубокую благодарность В. Б. Беляеву за обсуждения и поддержку, а также Б. Н. Захарьеву и Е. Вже-дионко за интерес к работе и полезные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vamaguchi Y. «Phys. Rev.», 1954, v. 95, p. 1628.
2. Brown G. E., Bolsterli M. «Phys. Rev. Lett.», 1959, v. 3, p. 472.
3. Bauer M., Prots F. «Nucl. Phys.», 1966, v. 89, p. 230.
4. Sugar R., Blankenbecler R. «Phys. Rev. B», 1964, v. 136, p. 472.

5. Fuller R. C. «Phys. Rev.», 1969, v. 188, p. 1649.
6. Ланцонн К. Практические методы прикладного анализа. М., Физматгиз, 1961.
7. Вайнштейн А. «Математика», 1964, т. 85, с. 91.
8. Bazley N. W. «Phys. Rev.», 1960, v. 120, p. 144.
9. Bazley N. W., Fox D. W. «Phys. Rev.», 1961, v. 129, p. 483.
10. Bazley N. W., Fox D. W. «J. Math. Phys.», 1962, v. 4, p. 1147.
11. Гудд С. Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Пер. с англ. М., «Мир», 1970.
12. Efimov V. N. Comptes Rend. Congr. Internat. Phys. Nucl. VII, Paris, 1964, p. 258. Препринты ОИЯИ, P-2546, P-2899, 1960.
13. Фадеев Л. Д. В кн.: Доклад на V Международной конференции по физике электронных и атомных столкновений. М., «Наука», 1967; Sitenko A. G., Kharchenko V. F., Petrov N. M. «Phys. Lett. B», 1968, v. 28, p. 308; Ball J. S., Wong D. Y. «Phys. Rev.», 1968, v. 169, p. 1362; Харченко В. Ф., Петров Н. М. Препринт ИТФ, 69-19, 1969.
14. Беляев В. Б., Вжедионко Е. Препринт ОИЯИ, P4-4144, 1968.
15. Беляев В. Б., Вжедионко Е., Иргазиев Б. Ф. «Ядерная физика», 1974, т. 20, с. 1267.
16. Беляев В. Б., Зубарев А. Л. «Ядерная физика», 1971, т. 14, с. 548.
17. Беляев В. Б., Зубарев А. Л. «Fizika», 1971, Bd 3, S. 77.
18. Зубарев А. Л., Фирсов В. И. «Изв. вузов. Сер. физ.», 1974, т. 6, с. 37.
19. Sadhal K. Adhikari, Sloan J. H. Preprint University New South Wales. Australia, 1974.
20. Glöckle W., Hufner J., Weidenmüller U. A. «Nucl. Phys. A», 1967, v. 90, p. 481.
21. Ebenhön W. e. a. «Z. Phys.», 1967, Bd 202, S. 302.
22. Dietrich K. Fundamentals in nuclear theory. Ed. A. de Shalit and C. Villi. IAEA, Vienna, 1967, p. 773.
23. Ebenhön W., Glöckle W., Hüpner J. «Phys. Lett. B», 1967, v. 24, p. 361.
24. Romo W. J. «Nucl. Phys. A», 1968, v. 116, p. 617.
25. Rosenfeld L. Spectroscopic and group theoretical methods in physics. The Racah memorial vol. Ed. F. Bloch e. a., Amsterdam, 1968, p. 203.
26. Sasakawa T. «Progr. Theor. Phys. Supp.», 1963, v. 27, p. 1.
27. Austern N. «Phys. Rev.», 1969, v. 188, p. 1595.
28. Balashov V. V., Pal D., Fetisov V. N. «Phys. Lett.», 1965, v. 17, p. 290.
29. Балашов В. В. и др. «Ядерная физика», 1965, т. 2, с. 461.
30. Romo W. J. «Nucl. Phys. A», 1972, v. 191, p. 65.
31. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П., Никитина О. В. В кн.: Доклады на Всесоюзном семинаре по теории атомов и атомных спектров. Ташкент, «Фан», 1974, с. 42.
32. Swinger J. «Phys. Rev.», 1947, v. 72, p. 742.
33. Spruch L. In: Proc. of 9-th Summer meeting of nuclear Phys. Hercegnovi, 1964, v. 1, p. 191.
34. Weinberg S. «Phys. Rev.», 1963, v. 131, p. 440; Бадалян А. М., Симонов Ю. А. Теория двух- и трехчастичных резонансов. Препринт МИФИ, 1973.
35. Hufner J., Lemmer R. H. «Phys. Rev.», 1968, v. 175, p. 1394.
36. Joachain C. «Bull. Cl. Scient. Acad. Roy. Belg.», 1962, v. 48, p. 302.
37. Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. Пер. с англ. М., «Мир», 1972.
38. Зубарев А. Л., Ивлиева И. Н., Подкопаев А. П. Препринт ОИЯИ, P4-8634, 1975.
39. Burke P. G., Schey U. M. «Phys. Rev.», 1962, v. 126, p. 147.
40. Hahn Y., O'Malley T. F., Spruch L. «Phys. Rev. B», 1964, v. 134, p. 397.
41. Hahn Y., Spruch L. «Phys. Rev.», 1967, v. 153, p. 1159.

42. Жигунов В. П., Захарьев Б. Н. Метод сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. М., Атомиздат, 1974.
43. Беляев В. Б., Зубарев А. Л. Сообщения ОИЯИ, Е4-6095, 1971.
44. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П. «Труды Ташкентск. ун-та. Сер. физ.», 1974.
45. Беляев В. Б., Зубарев А. Л., Иргазиев Б. Ф. Сообщения ОИЯИ, Р4-6505; 1972.
46. Ситенко А. Г. УФЖ, 1959, т. 4, с. 152; Глаубер Р. УФН, 1971, т. 103, с. 641.
47. Зубарев А. Л., Мусаханов М. М. Препринт ОИЯИ, Е4-8543, 1975.
48. Gottfried K. «Ann. Phys.», 1971, v. 66, с. 868.
49. Kohmura T. «Nucl. Phys. B», 1972, v. 36, p. 228;
Колыбасов В. М., Кондратюк Л. А. «Ядерная физика», 1973, Т. 18, с. 316.
50. Pumphin J., Ross M. «Phys. Rev. Lett.», 1968, v. 21, p. 1778; Грибов В. И. ЖЭТФ, 1969, т. 56, с. 892; Анисович В. В., Волковицкий П. Э., Дахно Л. Т. ЖЭТФ, 1972, т. 63, с. 1576.
51. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П. «Изв. АН Уз ССР. Сер. физ.-мат.», 1975.
52. Переломов А. М., Попов В. С., Терентьев М. В. ЖЭТФ, 1966, т. 50, с. 1393.
53. Симонов Ю. А. В кн.: Доклады на проблемном симпозиуме по физике ядра. Тбилиси, 1967, с. 7; Симонов Ю. А. Проблемы современной ядерной физики. М., «Наука», 1971, с. 51.
54. Кукулин В. И. «Ядерная физика», 1971, т. 14, с. 862; Kharchenko V. F., Petrov N. M., Kuzmichev V. E. «Phys. Lett. B», 1970, v. 32, p. 19; Kharchenko V. F., Storozhenko S. A., Kuzmichev V. E. «Nucl. Phys. A», 1972, v. 188, p. 609; Харченко В. Ф., Кузьмичев В. Е., Шадчин С. А. Препринт ИТФ-73-96Р, 1973.