

УДК 530.145

ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ШВИНГЕРА

А. Л. Зубарев

Ташкентский государственный университет, Ташкент

Рассматривается приложение вариационного принципа Швингера (ВПШ) к задачам дискретного, непрерывного спектра, а также к нестационарным задачам.

Представлены результаты численных расчетов, на основании которых сделан вывод об универсальности и эффективности данного подхода к проблеме малого числа тел.

It is considered the application of Schwinger variational principle (SVP) to the discrete, continuous spectrum problems and to the unstationary tasks.

It is presented the results of numerical calculations on which the conclusion about the universality and efficiency of such method in the problem of a few bodies can be made.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, большинство вариационных расчетов содержит элемент случайности, что обусловлено произволом в выборе пробной функции. Ситуация становится более благоприятной, если в расчете используется разложение по полной системе функций и удается наблюдать практическую сходимость.

Для рассматриваемых в данной работе вариационных принципов Швингера (ВПШ) можно указать критерий точности не только для стационарных величин, но и для волновой функции, т. е. по существу, имеет место динамический подход. Отметим, что под ВПШ в дальнейшем понимаются стационарные выражения для соответствующих величин, полученные при аппроксимации взаимодействия или его части оператором конечного ранга с последующим точным решением динамических уравнений.

Поскольку все рассмотрение основано на эквивалентности ВПШ и метода сепарабилизации потенциала, опишем кратко этот метод.

Рассмотрим символическое тождество

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

где V — потенциал; $|i\rangle$, $|j\rangle$ — вообще говоря, разные полные наборы. Обрывая в (1) суммирование по полным наборам, получаем сепарабельное приближение [1—3]:

$$V^{(N)} = \left. \begin{aligned} & \sum_{i,j=1}^N V|\eta_i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle \chi_j|V; \\ & [d^{-1}]_{ij} = \langle \chi_i|V|\eta_j\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Формула (2) в действительности представляет собой интерполяционный процесс, так как $V^{(N)}|\eta_i\rangle = V|\eta_i\rangle$, $\langle \chi_i|V^{(N)} = \langle \chi_i|V$. Можно показать [3], что частными случаями разложения (2) являются известные методы Бубнова — Галеркина [4], Гильберта — Шмидта [5], Бейтмана [6] при соответствующем выборе сепарирующих функций $|\eta\rangle$ и $|\chi\rangle$. Аппроксимация (2) тесно связана с так называемым методом промежуточных задач Вайнштейна в формулировке Безли и Фокса [7].

Отметим, что в литературе приводятся два вида функционалов Швингера:

$$f_I(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -(1/2\pi) \langle \mathbf{k}'|V|\chi_{\mathbf{k}'}^{(+)}\rangle \times \\ \times \langle \chi_{\mathbf{k}}^{(-)}|V|\mathbf{k}\rangle / \langle \chi_{\mathbf{k}}^{(-)}|V - VG_0V|\chi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle; \quad (3)$$

$$f_{II}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -(1/2\pi) (\langle \mathbf{k}'|V|\eta_{\mathbf{k}'}^{(+)}\rangle + \\ + \langle \eta_{\mathbf{k}}^{(-)}|V|\mathbf{k}\rangle - \langle \eta_{\mathbf{k}}^{(-)}|V - VG_0V|\eta_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle); \quad (4)$$

где $|\chi^{(\pm)}\rangle$, $|\eta^{(\pm)}\rangle$ — пробные функции; G_0 — свободная функция Грина.

Функционал (3) получается из (4) при определенном выборе $|\eta^{(\pm)}\rangle$. Положим $|\eta_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = c^{(+)}|\chi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$, $|\eta_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle = c^{(-)}|\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle$, а коэффициенты $c^{(\pm)}$ определим из уравнений $\partial f_{II}/\partial c^{(+)} = \partial f_{II}/\partial c^{(-)} = 0$. В этом случае $f_{II} = f_I$.

В дальнейшем будем использовать ВПШ в формулировке (3). Сходимость разложения (2) обеспечивается известной теоремой: 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, 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.

В настоящей работе подводится итог исследований, проведенных нами для изучения ВПШ в квантовомеханической проблеме малого числа тел [8—17].

Рассматривается задача о прохождении квантовой частицы через потенциальные барьеры. Строятся ВПШ для коэффициентов отражения и прохождения. В ядерной задаче двух тел данная методика применяется к построению немассовых амплитуд. Исследуются уравнения метода сильной связи каналов. Показано, что можно учесть виртуальные переходы в непрерывном спектре. Изучается итерационный процесс, к которому приводит ВПШ.

Для потенциалов, содержащих отталкивание, ВПШ в формулировке (3) не является удобным. В работе подробно исследуется этот случай. Найдены примеры (*p* μ -рассеяние), когда вариационно-итерационный метод Швингера сходится, но не к точному решению. Показано, как следует обобщить ВПШ для таких потенциалов. Рассматривается рассеяние при высоких энергиях. Построены «дуальные» амплитуды, совпадающие с точными при высоких и низких энергиях.

Особый интерес представляют задачи на связанные состояния, так как для таких задач ВПШ широко не применялся. В работе рассматриваются поправки к основному приближению метода К-гармоник на примере ядра ^{16}O .

Исследуются нестационарные задачи. ВПШ в этом случае может служить теоретической основой для построения приближенных методов, выходящих за рамки теории возмущений. В качестве примера рассмотрено резонансное рассеяние ультрахолодных нейтронов.

Очевидно, что поскольку ВПШ получается при точном решении динамических уравнений с приближенным потенциалом, то независимо от выбора пробных функций решение будет качественно правильно описывать квантовомеханические эффекты. Ясно также, что из всех вариационных принципов лучшим будет тот, который слабее всех зависит от вида пробной функции. ВПШ, по сравнению с вариационными принципами Кона, Хюльтена, Ритца, обладает именно этим свойством.

1. ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Одномерная задача. Прохождение через потенциальный барьер. Пусть потенциал $V(x)$ отличен от нуля в интервале (a, b) и частицы движутся слева, так что невозмущенная волновая функция равна e^{ikx} . При стандартном способе рассмотрения для того, чтобы найти коэффициенты отражения R и прозрачности D либо аппроксимируют потенциальный барьер прямоугольными потенциалами и сшивают полученные в каждой из областей решения

уравнения Шредингера

$$d^2\psi(x)/dx^2 + [k^2 - V(x)]\psi(x) = 0, \quad (5)$$

либо используют метод фазовых функций. Однако для потенциалов достаточно сложного вида на основании этих подходов трудно оценить погрешность.

Перепишем (5) в интегральной форме

$$\psi(x) = \exp(ikx) + \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x') V(x') \psi(x') dx'; \quad (6)$$

$$G(x, x') = (1/2ik) \exp(ik|x - x'|).$$

Следовательно,

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = \exp(ikx) + \exp(-ikx) \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ikx') V(x') \psi(x') dx';$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x) = \exp(ikx) + \exp(ikx) \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ikx') V(x') \psi(x') dx',$$

т. е. коэффициенты отражения и прозрачности определяются из уравнений:

$$\left. \begin{aligned} R = |f_r|^2; \quad f_r = \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ikx') V(x') \psi(x') dx'; \\ D = |f_d|^2; \quad f_d = 1 + \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ikx') V(x') \psi(x') dx'; \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где f_r и f_d — амплитуды отраженной и прошедшей волн соответственно.

Введем

$$\psi_k^{(\pm)}(x) = \exp(ik'x) + \int_{-\infty}^{+\infty} G^*(x, x') V(x') \psi_k^{(\pm)}(x') dx'. \quad (8)$$

Положим в (2) $N=1$. С потенциалом

$$\langle V^{(1)}\psi \rangle(x) = V(x) \eta(x) \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x') V(x') \psi(x') dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(y) V(y) \eta(y) dy$$

уравнение (6) решается в явном виде:

$$\left. \begin{aligned} \psi^{(1)}(x) &= \exp(ikx) + \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x') V(x') \eta(x') dx' \cdot C; \\ C &= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x) V(x) \exp(ikx) dx / \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x') V(x') \eta(x') dx' - \right. \\ &\quad \left. - \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy \chi^*(x') V(x') G(x', y) \eta(y) V(y) \right]; \\ f_r^{(1)} &= \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ikx) V(x) \eta(x) dx \cdot C; \\ f_d^{(1)} &= 1 + \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ikx) V(x) \eta(x) dx \cdot C. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Нетрудно показать, что если $\eta = \psi + \delta\psi$; $\chi = \psi_{-k}^- + \delta\psi$, то

$$f_r^{(1)} = f_r + O[(\delta\psi)^2],$$

и если

$$\eta = \psi + \delta\psi; \chi = \psi_k^- + \delta\psi,$$

то

$$f_d^{(1)} = f_d + O[(\delta\psi)^2].$$

Аналогично можно рассмотреть N -членную факторизацию. В качестве примера рассмотрим отражение от δ -образного потенциала $\alpha\delta(x)$:

$$f_r^{(1)} = \alpha/(2ik - \alpha); f_d^{(1)} = 2ik/(2ik - \alpha).$$

Видим, что результат совпадает с точным решением, а зависимость от пробных функций пропала. Это не случайно, так как δ -образный потенциал является оператором 1-го ранга, т. е. $V^{(1)} = V$. Выбирая $\eta = \chi = \exp(ikx)$, получаем аналог борновского приближения:

$$f_d^{(1)} = 1 + \frac{1}{2ik} \times$$

$$\left(\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx \right)^2.$$

$$\times \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx - \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(-ikx) V(x) \exp(ik|x-y|) V(y) \exp(iky)}{\dots}$$

Парциальная задача двух тел. Положим в (2) $N = 1$ и $|\eta\rangle = |\chi\rangle = |\eta_l\rangle$, тогда

$$V^{(1)} = V |\eta_l\rangle \langle \eta_l| V / \langle \eta_l| V |\eta_l\rangle. \quad (10)$$

С потенциалом (10) уравнение

$$\psi_l(r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r, r', E) V(r') \psi_l(r') dr' \quad (11)$$

решается в явном виде, и для фазы рассеяния получаем выражение

$$\text{tg } \delta_l^{(1)} = (1/k) (\langle j_l | V | \eta_l \rangle)^2 / \langle \eta_l | V - V G_l V | \eta_l \rangle, \quad (12)$$

которое совпадает с вариационным функционалом Швингера. В случае N -членной сепарабилизации $|\eta_i\rangle = |\chi_i\rangle = |\eta_i^i\rangle$ уравнение (11) также решается:

$$\text{tg } \delta_l^{(N)} = -\frac{1}{k} \sum_{i, j=1}^N \langle j_l | V | \eta_i^i \rangle C_{ij}^{(N)} \langle j_l | V | \eta_j^j \rangle; \\ [C^{-1}]_{ij} = \langle \eta_i^i | V - V G_l V | \eta_j^j \rangle. \quad (13)$$

Покажем, что (13) — вариационный функционал Швингера. Для доказательства выберем пробную функцию в (10) в виде

$$|\eta_l\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\eta_i^i\rangle. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (12) и определяя коэффициенты c_i из условия стационарности (12)

$$\partial \text{tg } \delta_l^{(1)} / \partial c_i = 0, \quad (15)$$

получаем (13).

Перейдем к построению вариационного принципа (ВП) для немассовых амплитуд. Уравнение Липпмана — Швингера для немассовой волновой функции имеет вид

$$|\psi_l(q, E)\rangle = |q\rangle + G_l(E) V |\psi_l(q, E)\rangle. \quad (16)$$

Здесь $|q\rangle \equiv j_l(qr)$; $\langle r' | G_l(E) | r\rangle = G_l(r, r', E)$. Используя решение (16), нетрудно получить выражение для t -матрицы:

$$\langle k | t_l(E) | k'\rangle = -(1/k) \langle k | V | \psi_l(k', E)\rangle;$$

$$\langle k | t_l(k^2/2\mu) | k\rangle = \text{tg } \delta_l.$$

Положим в (2) $N=1$ и $|\eta\rangle = |\eta_l(k')\rangle$, $|\chi\rangle = |\eta_l(k)\rangle$. Тогда уравнение (16) решается следующим образом:

$$\begin{aligned} |\psi_l^{(1)}(k', E)\rangle &= |k'\rangle + G_l(E) V |\eta_l(k')\rangle \times \\ &\times \langle \eta_l(k) | V | k'\rangle / \langle \eta_l(k) | V - V G_l V | \eta_l(k')\rangle, \end{aligned}$$

и для t -матрицы получаем функционал

$$\begin{aligned} \langle k | t_l^{(1)}(E) | k'\rangle &= -\frac{1}{k} \langle k | V^{(1)} | \psi_l^{(1)}(k', E)\rangle = \\ &= -\langle k | V | \eta_l(k')\rangle \langle \eta_l(k) | V | k'\rangle / k \langle \eta_l(k) | V - V G_l(E) V | \eta_l(k')\rangle, \end{aligned}$$

который стационарен относительно вариаций первого порядка:

$$\begin{aligned} |\eta_l(k)\rangle &= |\psi_l(k, E)\rangle + |\delta\psi_l(k, E)\rangle; \\ |\eta_l(k')\rangle &= |\psi_l(k', E)\rangle + |\delta\psi_l(k', E)\rangle. \end{aligned}$$

Аналогично (13) можно рассмотреть N -членную сепарабилизацию.

Трехмерная задача двух тел. Положим в (2)

$$|\eta_i\rangle = |\chi_{\mathbf{k}}^{i(+)}\rangle, \quad |\chi_i\rangle = |\chi_{\mathbf{k}'}^{i(-)}\rangle. \quad (17)$$

Подставляя (17) в уравнение

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + G_0^{(\pm)} V |\psi^{(\pm)}\rangle,$$

получаем для амплитуды выражение

$$\left. \begin{aligned} f^{(N)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i, j=1}^N \langle \mathbf{k}' | V | \chi_{\mathbf{k}}^{i(+)}\rangle C_{ij}^{(N)} \langle \chi_{\mathbf{k}'}^{j(+)} | V | \mathbf{k}\rangle; \\ [C^{-1}]_{ij} &= \langle \chi_{\mathbf{k}'}^{i(-)} | V - V G_0^{(+)} V | \chi_{\mathbf{k}}^{j(+)}\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

При $N=1$ (18) сводится к ВП для амплитуды рассеяния, следовательно, (18) стационарно относительно вариаций первого порядка по каждой пробной функции $|\chi^i\rangle$. В самом деле, пусть

$$\begin{aligned} |\chi_{\mathbf{k}'}^{m(-)}\rangle &= |\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}\rangle + |\delta\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}\rangle; \\ |\chi_{\mathbf{k}}^{n(+)}\rangle &= |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle + |\delta\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle, \end{aligned}$$

тогда

$$f^{(N)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \frac{1}{2\pi} \langle \delta\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | W - W^{(N)} | \delta\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle; \quad W = V - V G_0 V.$$

Отметим, что, в отличие от парциальной задачи, даже короткодействующий потенциал в общем случае не является вполне непрерывным оператором, если например, V — локальный оператор. Однако $f^{(N)}$ сходится к f , так как $G_0 V$ для короткодействующих потенциалов — вполне непрерывный оператор.

Укажем на весьма важное свойство ВПШ [8].

Рассмотрим случай, когда заданный потенциал уже является оператором конечного ранга N , который всегда можно представить в виде

$$V = \sum_{i,j=1}^N A |z_i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle y_j | A; [d^{-1}]_{ij} = \langle y_i | A | z_j\rangle. \quad (19)$$

Заменяем V на $V^{(N)}$ по формуле (2):

$$\left. \begin{aligned} V^{(N)} &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N V | \eta_\alpha \rangle D_{\alpha\beta}^{(N)} \langle \chi_\beta | V; \\ [D^{-1}]_{\alpha\beta} &= \langle \chi_\alpha | V | \eta_\beta \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Подставляя (19) в (20), нетрудно убедиться, что

$$V^{(N)} \equiv V. \quad (21)$$

Следовательно, если исходный потенциал является оператором конечного ранга N , то вариационный принцип, основанный на функционале Швингера для пробной функции вида $\psi = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i$ при вариационном выборе c_i , приводит к точному значению при любых ψ_i .

Многоканальная теория. Перейдем теперь к системе интегральных уравнений метода сильной связи:

$$| \psi_{\mathbf{k}_\nu}^{(\pm)} \rangle = | \Phi_{\mathbf{k}_\nu} \rangle + \sum_{\mu} G_{0\nu}^{(\pm)} V_{\nu\mu} | \psi_{\mathbf{k}_\mu}^{(\pm)} \rangle, \quad (22)$$

где $| \Phi_{\mathbf{k}_\nu} \rangle$ — плоская волна во входном канале. Так как $(V\psi)_\nu = \sum_{\mu} V_{\nu\mu} \psi_{\mathbf{k}_\mu}$, то формула (2) примет вид

$$\left. \begin{aligned} (V^{(N)}\psi)_\nu &= \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mu, l, n} V_{\nu\mu} | \eta_\mu^i \rangle d_{ij}^{(N)} \langle \chi_l^j | V_{ln} | \psi_{\mathbf{k}_n} \rangle; \\ [d^{-1}]_{ij} &= \sum_{\nu\mu} \langle \chi_\nu^i | V_{\nu\mu} | \eta_\mu^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Подставляя (23) в (22), получаем, например, для амплитуды упругого рассеяния выражение *

$$\left. \begin{aligned} f^{(N)} &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{i,j=1}^N \sum_{m, l, l'} \langle \mathbf{k}_l' | V_{lm} | \eta_m^i \rangle C_{ij}^{(N)} \langle \chi_l^j | V_{ll'} | \Phi_{\mathbf{k}_l'} \rangle; \\ [C^{-1}]_{ij} &= \sum_{ll'\mu} \langle \chi_l^i | V_{ll'} - V_{ll'} G_{0l'} V_{l'\mu} | \eta_\mu^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

* Суммирование по m, l, l' включает в себя интегрирование по непрерывному спектру.

Так же как и в задаче двух тел, можно получить эквивалентность (24) ВПШ. Предположим, что

$$\eta_m^{i1} = \psi_{k_m}^{(+)} + \delta\psi_{k_m}^{(+)}; \quad \chi_m^{i1} = \psi_{k'_m}^{(-)} + \delta\psi_{k'_m}^{(-)},$$

тогда [8]

$$f^{(N)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \frac{1}{2\pi} \sum_{\mu, \nu} \langle \delta\psi_{k'_\mu}^{(-)} | (W_{\mu\nu} - W_{\mu\nu}^{(N)}) | \delta\psi_{k_\nu}^{(+)} \rangle, \quad (25)$$

где

$$W_{\mu\nu} = V_{\mu\nu} - \sum_l V_{\mu l} G_{0l}^{(+)} V_{l\nu}.$$

Аналогично задаче двух тел ВП (24) может быть получен из вариационного функционала

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2\pi} \sum_{l', ml} \langle k'_l | V_{1m} | \eta_m \rangle \times \\ \times \langle \chi_l | V_{ll'} | \Phi_{kl'} \rangle / \sum_{n, \mu, n'} \langle \chi_n | V_{n\mu} - V_{nn'} G_{0n'}^{(+)} V_{n'\mu} | \eta_\mu \rangle$$

для пробных функций вида

$$\eta_m = \sum_{i=1}^N b_i \eta_m^i; \quad \chi_l = \sum_{i=1}^N a_i \chi_l^i,$$

если b_i и a_i выбираются из условия

$$\partial f^{(1)} / \partial b_i = \partial f^{(1)} / \partial a_i = 0.$$

Если матрица взаимодействия V_{ij} — оператор конечного ранга:

$$\left. \begin{aligned} V_{ij} &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N \sum_{n, l} A_{in} | z_n^\beta \rangle d_{\beta\alpha}^{(N)} \langle y_l^\alpha | A_{lj}; \\ [d^{-1}]_{\alpha\beta} &= \sum_{i, j} \langle y_i^\alpha | A_{ij} | z_j^\beta \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

то, заменяя V на $V^{(N)}$, по формулам (23) нетрудно убедиться, что $V^{(N)} = V$, т. е. в этом случае ВП, полученный при N -членной сепаратизации, приводит к точному значению амплитуды.

Остановимся более подробно на возможности аппроксимации V_{ij} оператором конечного ранга $V_{ij}^{(N)}$ в многоканальной теории. Для простоты рассмотрим характерный случай задачи трех тел, а именно, упругое рассеяние частицы 1 на связанном состоянии частиц 2, 3. Тогда

$$V_{ij}(\rho) = \int \psi_i^*(\mathbf{r}_{23}) V(\mathbf{r}_{23}, \rho) \psi_j(\mathbf{r}_{23}) d\mathbf{r}_{23}, \quad (27)$$

где

$$V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) = V_{12} \left(\left| \boldsymbol{\rho} - \frac{m_3}{m_2 + m_3} \mathbf{r}_{23} \right| \right) + V_{31} \left(\left| \boldsymbol{\rho} + \frac{m_2}{m_2 + m_3} \mathbf{r}_{23} \right| \right).$$

Покажем, что приближение (23) получается при замене $V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho})$ оператором конечного ранга $V^{(N)}(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho})$ по формуле (2):

$$V^{(N)} = \sum_{i, j=1}^N V |\eta^i\rangle d_{ij}^{(N)} \langle \chi^j | V;$$

$$[d^{-1}]_{ij} = \int \chi_i^*(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) \eta_j(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) d\mathbf{r}_{23} d\boldsymbol{\rho}.$$

Разложим χ и η по системе функций $\psi_i(\mathbf{r}_{23})$:

$$\chi_i(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mu} \chi_{\mu}^i(\boldsymbol{\rho}) \psi_{\mu}(\mathbf{r}_{23}); \quad \eta_i(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mu} \eta_{\mu}^i(\boldsymbol{\rho}) \psi_{\mu}(\mathbf{r}_{23}).$$

Тогда

$$[d^{-1}]_{ij} = \sum_{\mu\nu} \int \chi_{\mu}^{i*}(\boldsymbol{\rho}) V_{\mu\nu}(\boldsymbol{\rho}) \eta_{\nu}^j(\boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho} \equiv \sum_{\mu\nu} \langle \chi_{\mu}^i | V_{\mu\nu} | \eta_{\nu}^j \rangle$$

и

$$\int \psi_i^*(\mathbf{r}_{23}) V^{(N)}(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) \psi_j(\mathbf{r}_{23}) d\mathbf{r}_{23} = \sum_{m, n=1}^N \sum_{\mu l} V_{i\mu} | \eta_{\mu}^m \rangle d_{mn}^{(N)} \langle \chi_l^n | V_{lj},$$

т. е. получим в точности выражение (23).

Однако известно, что даже после отделения углового момента $V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho})$ не является вполне непрерывным оператором, поэтому (23) есть формальное равенство. И, следовательно, ВПШ для многоканальных задач не динамический подход, так как нельзя сослаться на малость $|V - V^{(N)}|$, поэтому кажется, что в данном случае ВПШ имеет незначительные преимущества перед формулами Кона, Хюльтена. Покажем, что в ряде случаев это не так. Во многих задачах хорошим приближением является пренебрежение сильной связью каналов $V_{\nu\mu}$, когда и $|\nu\rangle$ и $|\mu\rangle$ относятся к непрерывному спектру [18]. Если сделать такое приближение, то интегрирование в (27) по r_{23} будет проводиться в конечных пределах и $V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho})$ можно будет заменить на вполне непрерывный оператор $V(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}) \theta(R - r_{23})$. Ясно, что в рамках данного приближения можно описывать не только упругое рассеяние, но и процессы развала. Таким образом, ВПШ дает возможность учесть виртуальные переходы в непрерывном спектре.

Вариационно-итерационный метод. При решении квантово-механических задач наиболее часто употребляется метод итераций. Вариационно-итерационная техника, которую мы рассматриваем в данном пункте, не только дает способ систематического улучшения пробной функции, но и приводит к возможности оценки погрешности на каждом шаге.

Вариационно-итерационный метод Швингера (ВИМШ) основан на интегральных уравнениях для волновой функции. В парциальной задаче двух тел ВИМШ для фазы рассеяния формируется следующим образом [25]:

$$\left. \begin{aligned} |\psi_i^{(N+1)}\rangle &= \bar{G}_i^{(N)} V |\psi_i^{(N)}\rangle; \\ \bar{G}_i^{(N)}(r, r') &= G_i(r, r') - j_l(kr) j_l(kr') / k \operatorname{tg} \delta_l^{(N)}; \\ G_i(r, r') &= \begin{cases} k^{-1} j_l(kr) n_l(kr'), & r \leq r'; \\ k^{-1} n_l(kr) j_l(kr'), & r' \leq r; \end{cases} \\ \operatorname{tg} \delta_l^{(N)} &= -k^{-1} \langle j_l | V | \psi_i^{(N)} \rangle^2 \langle \psi_i^{(N)} | V - V G_i V | \psi_i^{(N)} \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

где $|\psi_i^{(N)}\rangle$ — пробная волновая функция в N -й итерации; V — оператор потенциала; j_l, n_l — функции Риккати — Бесселя; k — волновой вектор рассеивающейся частицы; $\delta_l^{(N)}$ — фаза рассеяния в N -й итерации.

В работе [19] был предложен итерационно-сепарабельный метод (ИСМ). Сущность ИСМ заключается в замене точного оператора потенциала V сепарабельным оператором первого ранга:

$$V^{(1)} = V |\varphi_i^{(0)}\rangle \langle \varphi_i^{(0)} | V / \langle \varphi_i^{(0)} | V | \varphi_i^{(0)} \rangle, \quad (29)$$

где в качестве начальной пробной функции $|\varphi_i^{(0)}\rangle$ выбирается какое-либо приближенное решение уравнения (11). С сепарабельным потенциалом (29) уравнение (11) решается в явном виде, находится волновая функция в первом приближении $|\varphi_i^{(1)}\rangle$, которая затем используется в качестве сепарирующей в (29), и т. д. Таким образом, заменяя в (11) V на сепарабельный потенциал N -го приближения

$$V^{(1)} = V |\varphi_i^{(N)}\rangle \langle \varphi_i^{(N)} | V / \langle \varphi_i^{(N)} | V | \varphi_i^{(N)} \rangle, \quad (30)$$

получаем

$$|\psi_i^{(N+1)}\rangle = |j_l\rangle + G_i V |\varphi_i^{(N)}\rangle C^{(N)}(k), \quad (31)$$

где

$$C^{(N)}(k) = \langle \varphi_i^{(N)} | V | \psi_i^{(N+1)} \rangle / \langle \varphi_i^{(N)} | V | \varphi_i^{(N)} \rangle. \quad (32)$$

Подставляя (31) в (32), получаем выражение для $C^{(N)}(k)$ через функции только N -й итерации:

$$C^{(N)}(k) = \langle j_l | V | \varphi_i^{(N)} \rangle / \langle \varphi_i^{(N)} | V - V G_i V | \varphi_i^{(N)} \rangle. \quad (33)$$

Фаза рассеяния в ИСМ для N -й итерации также получается заменой точного потенциала V на сепарабельный (30):

$$\operatorname{tg} \delta_l^{(N)} = -k^{-1} \langle j_l | V | \varphi_i^{(N)} \rangle C^{(N)}. \quad (34)$$

При построении ИСМ (31), (33) предполагалось, что на каждом шаге итерации выполняется условие

$$\langle \varphi_l^{(N)} | V | \varphi_l^{(N)} \rangle \neq 0. \quad (35)$$

Для знакоопределенных потенциалов это условие выполняется всегда.

Несмотря на различную, казалось бы, методику построения ИСМ и ВИМШ, они приводят к идентичным выражениям для фаз рассеяния, что видно из сравнения (28) и (34). Хотя фазы рассеяния на каждом шаге итераций для обоих методов совпадают, волновые функции $|\varphi_l^{(N)}\rangle$ (31) и $|\psi_l^{(N)}\rangle$ (28), если $|\varphi_l^{(0)}\rangle = |\psi_l\rangle$, различаются на коэффициент

$$|\psi_l^{(N)}\rangle = [C^{(0)}C^{(1)} \dots C^{(N-1)}]^{-1} |\varphi_l^{(N)}\rangle.$$

Можно показать, что

$$\text{tg } \delta_l - \text{tg } \delta_l^{(N)} \sim |C^{(N)} - 1|^2,$$

если $|C^{(N)} - 1| \ll 1$. Это позволяет на каждом шаге оценить погрешность результатов.

Нетрудно убедиться, что если ИСМ сходится, то ряд $C_k^{(N)}$ должен стремиться к единице:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} C^{(N)}(k) = 1. \quad (36)$$

Выражение (36) является, в свою очередь, необходимым условием сходимости итерационно-сепарабельного метода. Если условие (36) выполняется, то интегральные уравнения для функции (31)

$$|\varphi_l\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} |\varphi_l^{(N)}\rangle$$

и точной волновой функции $|\psi_l\rangle$ (11) совпадают. Таким образом, ИСМ приводит к сходящейся процедуре не только для фаз рассеяния, как ВИМШ, но и для волновых функций, причем на каждом шаге итерации фазы рассеяния, естественно, определяются из асимптотики волновых функций.

Если условие (35) построения ИСМ не выполняется и в пределе при $N \rightarrow \infty$ имеет место равенство

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \varphi_l^{(N)} | V | \varphi_l^{(N)} \rangle = 0, \quad (37)$$

а для точной волновой функции

$$\langle \psi_l | V | \psi_l \rangle \neq 0,$$

то в этом случае соотношение (36) доказать нельзя и ИСМ может не сходиться. Мало того, идеология ИСМ тогда с самого начала неприменима.

Таким образом, из сходимости ВИМШ при условии (37) еще не следует, что он сошелся к точной фазе рассеяния. Однако необходимо указать, что и в случае (37), в принципе, возможно выполнение условия (36) и тогда ВИМШ сойдется к точному решению (это возможно, если $\langle \psi_l | V | \psi_l \rangle = 0$).

В качестве иллюстрации ИСМ для многоканальных задач рассмотрим упругое рассеяние позитрона на атоме водорода и протона на мезоатоме дейтона [14]:

$$e^+ + H \rightarrow e^+ + H; \quad p + d\mu \rightarrow p + d\mu.$$

Для этих процессов при нулевом полном моменте системы частиц ИСМ строится следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} |\varphi_{nl}^{(N+1)}\rangle &= j_0(k_n r) \delta_{n,1} \delta_{l,0} + \sum_{n',l'} G_{nl} V_{nl, n'l'} |\varphi_{n'l'}^{(N)}\rangle C^{(N)}(k_1); \\ C^{(N)}(k_1) &= \sum_{nl} \left\{ j_0 |V_{10nl}| \varphi_{nl}^{(N)} \right\} / \left. \begin{aligned} &\sum_{n,l,n',l',n'',l''} \langle \varphi_{nl}^{(N)} | V_{nl, n'l'} - \\ &- V_{nl, n'l'} G_{n'l'} V_{n'l', n''l''} | \varphi_{n''l''}^{(N)} \rangle; \end{aligned} \right\} \quad (38) \end{aligned}$$

$$\operatorname{tg} \delta_0^{(N)} = \sum_{nl} (k_1)^{-1} \langle j_0 | V_{10, nl} | \varphi_{nl}^{(N)} \rangle C^{(N)}(k_1), \quad (39)$$

где n, l — квантовые числа, характеризующие состояние атома (мезоатома) водорода; k_n — волновой вектор рассеивающейся частицы в канале n . ВИМШ для фазы рассеяния дает выражение, совпадающее с (39).

Необходимое условие сходимости ИСМ (38) для многоканальных задач совпадает с (36); ИСМ (38) нельзя построить, если имеет место условие типа (37):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n,l} \langle \varphi_{nl}^{(N)} | V_{nl, n'l'} | \varphi_{n'l'}^{(N)} \rangle = 0. \quad (40)$$

В этом случае может иметь место патологическая сходимость ВИМШ не к точной фазе рассеяния, если условие (36) не выполняется.

Для сходимости ВИМШ с точностью, обусловленной точностью вычисления интегралов в (39), было проведено от 3 до 10 итераций. Результаты вычислений показали, что действительно, если имеет место условие (40) (с нужной точностью), необходимое условие сходимости ИСМ (36) не выполняется и наблюдается патологическая сходимость ВИМШ. Если же (40) не выполняется, то ряд $C^{(N)}(k_1)$ стремится к единице, ИСМ сходится и для ВИМШ также наблюдается правильная сходимость.

В качестве нулевых приближений были выбраны

$$|\varphi_{nl}^0\rangle = |j_0\rangle \delta_{n1} \delta_{l0} \quad (41)$$

и набор волновых функций атома (мезоатома) водорода для дискретного спектра

$$|\varphi_{nl}^{(0)}\rangle = |\psi_{nl}\rangle. \quad (42)$$

В случаях, когда наблюдалась патологическая сходимость ВИМШ [условие (36) не выполнялось] ряды значений $C^{(N)}$ и $\text{tg } \delta_0^{(N)}$ сходились к величинам, которые не менялись при переходе от начального приближения (41) к (42). Это показывает, что оба начальных приближения в этих случаях далеки от точной волновой функции. Укажем, что при выборе $|\varphi_{nl}^{(0)}\rangle$, достаточно близкой к точной, ИСМ обеспечит сходимость нашей итерационной функции $|\varphi_{nl}^{(N)}\rangle$ именно к точной.

При учете малого числа закрытых каналов ($1S - 2S$) начальное приближение (41), видимо, достаточно близко к точной волновой функции, так что условие (36) выполняется и ВИМШ сходится именно к точному решению. При увеличении числа закрытых каналов ($1S - 2S - 2P$) приближение (41) уже настолько плохо, что ВИМШ дает только патологическую сходимость, когда $\lim_{N \rightarrow \infty} C^{(N)} \neq 1$. Из физических соображений следует, что при увеличении энергии рассеивающихся частиц (41) для ($1S - 2S - 2P$) вновь может стать достаточно хорошим начальным приближением, чтобы обеспечить сходимость ВИМШ к точной фазе рассеяния (это видно из таблицы). Следовательно, при большом

Т а б л и ц а

$E, \text{ эв}$	Учитываемые каналы	Общее число каналов	C	$\text{tg } \delta_0$ или длина рассеяния	Тип процесса	
0,000	$l=0; n=1,2$	2	1	0,562 (0,564)	} e^+H	
0,000	$l=0,1; (l+1) \leq n < 2$	3	0,373	0,1717		
0,544	} $l=0,1; (l+1) \leq n \leq 2$	3	0,641	-0,0533 (-0,0426)		
2,176		3	0,908	-0,0584 (-0,1472)		
4,898		3	0,978	-0,2462 (-0,2460)		
4,898		5	0,965	-0,231		
4,898	$l=0,1; (l+1) \leq n \leq 3$	5	0,965	-0,231		
4,898	$l=0,1; (l+1) \leq n \leq 6$	11	0,943	-0,218		
0,000	} $l=0,1; (l+1) \leq n \leq 2$	3	0,145	0,339		} $p d\mu$
0,000		3	0,238	-0,0726		
10,000		3	0,238	-0,0726		

Примечание.

В таблице приведены в атомной системе единиц фазы и длины для e^+H - и $p d\mu$ -упругого рассеяния при различных энергиях и с учетом разного числа закрытых каналов, вычисленные ВИМШ. В скобках даны значения, полученные численным интегрированием соответствующей системы уравнений сильной связи каналов [20].

числе закрытых каналов и достаточно малых энергиях оба нулевых приближения (41), (42) настолько плохи, что ВИМШ не схо-

дится к точной фазе рассеяния. Из таблицы видно, что даже в этих случаях фазы и длины рассеяния ВИМШ (39) отличаются от точных [20] не более чем на 25%.

Таким образом, в случае многоканального рассеяния сама сходимость ВИМШ еще не говорит о том, что получены именно точные результаты, если не выполняется необходимое условие сходимости ИСМ (36); такая ситуация реализуется при рассмотрении e^+N - и $p\bar{d}\mu$ -упругого рассеяния с учетом конечного числа закрытых каналов.

Потенциалы, содержащие отталкивание. До сих пор мы оставляли в стороне вопрос: все ли ВПШ получаются при аппроксимации (2). Очевидно, что при конечномерной аппроксимации $V^{(N)}$ вариационный принцип получится, если хотя бы для одной пробной функции будет выполняться соотношение

$$V^{(N)}|\varphi\rangle = V|\varphi\rangle; \quad \langle\varphi|V^{(N)} = \langle\varphi|V. \quad (43)$$

В этом смысле ВПШ, полученные на основе (2), являются оптимальными, так как (43) выполняется для максимального числа пробных функций, равного N . Однако в ряде случаев возникает необходимость рассмотреть и другие возможности.

Мы видели, что если потенциал V не является знакоопределенным оператором, то сходимость вариационно-итерационного метода Швингера может быть патологической. Это связано с тем, что $\langle\varphi|V|\varphi\rangle$ обращается в нуль, следовательно, факторизация $V^{(1)} = V|\varphi\rangle\langle\varphi|V/\langle\varphi|V|\varphi\rangle$ не является удобной.

Представим потенциал в виде

$$V = V_1 + V_2, \quad (44)$$

где $V_1 > 0$, $V_2 < 0$. Хотя $\langle\varphi|V\varphi\rangle$ может равняться нулю, $\langle\varphi|V_1|\varphi\rangle$ и $\langle\varphi|V_2|\varphi\rangle$ в нуль не обращаются. Заменяем V на оператор второго ранга, но так, чтобы только для одной пробной функции выполнялось (43). По-видимому, таких замен существует большое количество; мы остановимся на двух — (45) и (50):

$$\left. \begin{aligned} \tilde{V}^{(2)} = & (1/d) \langle\eta_l|V_2 - V_2G_lV_1|\eta_l\rangle V_1|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_1 + \\ & + \langle\eta_l|V_1 - V_1G_lV_2|\eta_l\rangle V_2|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_2 - \\ - & \langle\eta_l|V_1G_lV_2|\eta_l\rangle V_1|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_2 - \langle\eta_l|V_2G_lV_1|\eta_l\rangle V_2|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_1; \\ d = & \langle\eta_l|V_1|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_2|\eta_l\rangle - \langle\eta_l|V_1|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_2G_lV_1|\eta_l\rangle - \\ & - \langle\eta_l|V_2|\eta_l\rangle \langle\eta_l|V_1G_lV_2|\eta_l\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

С потенциалом (45) уравнение (11) решается следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\Psi}_l^{(2)} &= j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r, r', E) V_1(r') \eta_l(r') dr' \cdot C_1 + \\ &+ \int_0^\infty G_l(r, r', E) V_2(r') \eta_l(r') dr' \cdot C_2; \\ C_1 &= \langle \eta_l | V_1 | j_l \rangle / \langle \eta_l | V_1 - V_1 G_l V_1 - V_1 G_l V_2 | \eta_l \rangle; \\ C_2 &= \langle \eta_l | V_2 | j_l \rangle / \langle \eta_l | V_2 - V_2 G_l V_2 - V_2 G_l V_1 | \eta_l \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

а для фазы рассеяния получается стационарное выражение

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \tilde{\delta}_l^{(2)} &= -\frac{1}{k} \left[\frac{\langle j_l | V_1 | \eta_l \rangle \langle \eta_l | V_1 | j_l \rangle}{\langle \eta_l | V_1 - V_1 G_l V_1 - V_1 G_l V_2 | \eta_l \rangle} + \right. \\ &\left. + \frac{\langle j_l | V_2 | \eta_l \rangle \langle \eta_l | V_2 | j_l \rangle}{\langle \eta_l | V_2 - V_2 G_l V_2 - V_2 G_l V_1 | \eta_l \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (47)$$

Можно рассмотреть $2N$ -членную аппроксимацию:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{tg} \tilde{\delta}_l^{(2N)} &= -\frac{1}{k} \left[\sum_{i, j=1}^N \langle j_l | V_1 | \eta_i^j \rangle [W_1^{-1}]_{ij} \langle \eta_i^j | V_1 | j_l \rangle + \right. \\ &\left. + \langle j_l | V_2 | \eta_i^j \rangle [W_2^{-1}]_{ij} \langle \eta_i^j | V_2 | j_l \rangle \right]; \\ [W_1]_{ij} &= \langle \eta_i^j | V_1 - V_1 G_l V_1 - V_1 G_l V_2 | \eta_j^i \rangle; \\ [W_2]_{ij} &= \langle \eta_i^j | V_2 - V_2 G_l V_2 - V_2 G_l V_1 | \eta_j^i \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

Покажем стационарность (48). Пусть

$$|\eta_i^j\rangle = |\psi_l\rangle + |\delta\psi_l\rangle.$$

После несложных преобразований получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \tilde{\delta}_l^{(2N)} &= \operatorname{tg} \delta_l - (1/k) \langle \delta\psi_l | W - W_1^{(N)} - W_2^{(N)} | \delta\psi_l \rangle; \\ W &= V_1 + V_2 - V_1 G_l V_2 - V_2 G_l V_1 - V_1 G_l V_1 - V_2 G_l V_2; \\ W_1 &= V_1 - V_1 G_l V_1 - V_1 G_l V_2; \quad W_2 = V_2 G_l V_2 - V_2 G_l V_1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_i^{(N)} &= \sum_{n, m=1}^N W_i | \eta_l^n \rangle [d_i^{-1}]_{nm} \langle \eta_l^m | W_i; \\ [d_i]_{nm} &= \langle \eta_l^n | W_i | \eta_l^m \rangle. \end{aligned}$$

Аналогично (31) сформулируем итерационный процесс:

$$\left. \begin{aligned} |\varphi_l^{(N+1)}\rangle &= |j_l\rangle + G_l V_1 |\varphi_l^{(N)}\rangle C_1^{(N)} + G_l V_2 |\varphi_l^{(N)}\rangle C_2^{(N)}; \\ C_1^{(N)} &= \frac{\langle j_l | V_1 | \varphi_l^{(N)} \rangle}{\langle \varphi_l^{(N)} | V_1 - V_1 G_l V_1 - V_1 G_l V_2 | \varphi_l^{(N)} \rangle}; \\ C_2^{(N)} &= \langle j_l | V_2 | \varphi_l^{(N)} \rangle / \langle \varphi_l^{(N)} | V_2 - V_2 G_l V_2 - V_2 G_l V_1 | \varphi_l^{(N)} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

Следующая замена, на которой мы остановимся, определяется из [15]:

$$\tilde{V}^{(2)} = V_1 | \eta_l \rangle \langle \eta_l | V_1 \langle \eta_l | V_1 | \eta_l \rangle + V_2 | \eta_l \rangle \langle \eta_l | V_2 \langle \eta_l | V_2 | \eta_l \rangle. \quad (50)$$

Далее можно показать, что потенциал (50) приводит к фазе рассеяния, которая стационарна относительно вариаций первого порядка пробной функции $|\eta_l\rangle$, и сформулировать итерационный процесс. Отметим, что вариационные принципы, основанные на (45), в литературе не рассматривались.

Высокие энергии. Предположим, что имеется набор пробных функций, близких к точной в различных энергетических интервалах; подставив их в (2), получим амплитуду (25), для которой можно утверждать, что она описывает рассеяние во всей области энергий, т. е. формула (25) представляет собой интерполяционную процедуру.

Для построения «дуальных» амплитуд на основе интерполяционных формул естественно выбрать $N = 2$, а в качестве сепарирующих функций — S -волновое решение ψ_S и высокоэнергетическое приближение [11]. В многоканальной теории подходящими являются приближения Глаубера [21]:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}_v}(\mathbf{r}) &= \exp(ikz) \int \psi_S^*(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) \times \\ &\times \exp\left(-\frac{ik}{2E} \int_{-\infty}^z \sum_i V_i(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) dz\right) \psi_{v_0}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_A) d\tau; \\ d\tau &= d\mathbf{R}_1, \dots, d\mathbf{R}_A \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

(\mathbf{r} — координата налетающей частицы, $V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — потенциал взаимодействия налетающей частицы с i -м нуклоном, ψ_v — волновая функция ядра мишени), и S -волновое решение, полученное при интегрировании уравнений Фаддеева [22].

Из (25) следует, что найденная амплитуда при высоких и низких энергиях будет близка к точной из-за малости $\delta\psi$, а в области средних энергий из-за малости $|W - W^{(N)}|$.

Рассмотрим рассеяние на потенциале типа прямоугольной ямы с параметрами, описывающими экспериментальные данные по низкоэнергетическому нуклон-нуклонному рассеянию. Построим три типа амплитуд:

$$N = 1; \quad \eta_{\mathbf{k}^{(+)}} = |\mathbf{k}\rangle; \quad \eta_{\mathbf{k}^{(-)}} = |\mathbf{k}'\rangle; \quad (51a)$$

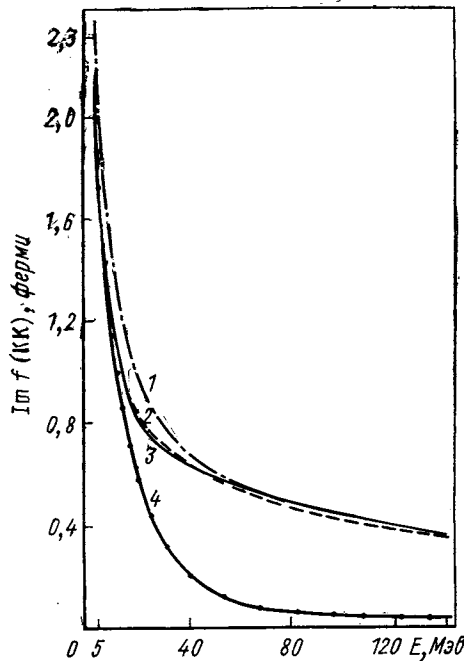
$$N = 1; \quad \eta_{\mathbf{k}^{(+)}} = \eta_{\mathbf{k}^{(-)}} = \psi_S; \quad (51b)$$

$$N = 2; \quad \eta_{\mathbf{k}^{(+)}} = \eta_{\mathbf{k}^{(-)}} = \psi_S; \quad \eta_{\mathbf{k}^{2+}} = |\mathbf{k}\rangle; \quad \eta_{\mathbf{k}^{2-}} = |\mathbf{k}'\rangle. \quad (51b)$$

При сепарабилизации (51a) амплитуда $f^{(1)}$ практически совпадает с точной при энергии $E \sim 100$ Мэв, а в области $E < 100$ Мэв

ошибка составляет $\sim 40\%$. В случае (51б) амплитуда $f_S^{(1)}$ совпадает с точной при $E < 10$ Мэв, так как при низких энергиях основной вклад дает S -волна. При больших энергиях (~ 150 Мэв) $f_S^{(1)}$ отличается от точной примерно на порядок.

«Дуальная» амплитуда $f^{(2)}$ (51в) совпадает с $f^{(1)}$, $f_S^{(1)}$ и с точной соответственно в областях высоких и низких энергий. В области средних энергий $f^{(2)}$ также достаточно близка к точной амплитуде f (отклонение менее 10%).



Мнимые части амплитуд рассеяния на нулевой угол в зависимости от энергии E :

1 — $f^{(1)}$; 2 — f ; 3 — $f^{(2)}$; 4 — $f_S^{(1)}$

дает с эйкональной, а в области больших углов — с приближением, полученным суммированием борновского ряда методом стационарной фазы. В отличие от квазиклассической амплитуды, построенной в [24], в нашем подходе процессы рассеяния описываются при более низких энергиях [9]. Отметим, что если S -волновое решение точно не известно, то подходящим низкоэнергетическим приближением может служить $\psi_S = \exp(-\beta r)$, где β — вариационный параметр (см., например, [25]).

Перейдем теперь к вычислению френелевских поправок к приближению Глаубера. При выводе в рамках потенциальной теории глауберовского выражения для амплитуды рассеяния быстрой

На рисунке приведены мнимые части амплитуд рассеяния $f^{(1)}$, $f_S^{(1)}$, f^2 и f на нулевой угол (синглетное рассеяние). Видно, что наибольшее отклонение от точной величина $\text{Im } f^{(2)}$ (\mathbf{k}, \mathbf{k}) имеет в области энергий 20—80 Мэв, но оно не превышает 4%.

Таким образом, интерполяционная формула (25) приводит к амплитуде, которая с большой точностью описывает процесс упругого рассеяния при любых энергиях.

На основе данного подхода можно получить высокоэнергетическую амплитуду в области и малых, и больших углов рассеяния. В самом деле, выбирая в качестве сепарирующих функций приближения Глаубера и Шиффа [23], получаем амплитуду, которая в области малых углов совпа-

частицы на ядре делаем следующие приближения [26]: 1) пренебрегаем энергией связи и кинетической энергией нуклонов ядра. Это приближение часто называют адиабатическим ($G \rightarrow \tilde{G}$); 2) используем приближение геометрической оптики ($\tilde{G} \rightarrow G_2$). Здесь G — точная свободная функция Грина. Так как нас интересуют френелевские поправки, то расчет проведем в рамках адиабатического приближения, а в качестве пробной функции выберем решение Глаубера. Рассмотрим пример упругого pd -рассеяния. В этом случае [27]

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \delta(r) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{R}) \left[\frac{k^2 - p^2}{2m} - \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{p})^2}{2M} + i\varepsilon \right]^{-1}. \quad (52)$$

Здесь k и m (k' и m') — импульс и масса налетающего (рассеянного) мезона; M — масса дейтона. Разность между \tilde{G} и \tilde{G}_0 имеет вид

$$g(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \delta(r) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{q})\mathbf{R}] g(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (53)$$

где

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = (m^2/2\mu) q^2 / (\mathbf{k}\mathbf{q} + i\varepsilon) (\mathbf{k}\mathbf{q} - \mathbf{q}^2 + i\varepsilon); \\ \mu = mM / (m + M).$$

С учетом результатов предыдущих разделов приходим к выражению для амплитуды рассеяния на закрепленных центрах, где учтены френелевские поправки:

$$\left. \begin{aligned} f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) &= C(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}); \\ C &= f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) \left[f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) - \right. \\ &\quad \left. - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{r}) f_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \right]^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

Здесь f_0 — амплитуда в эйкональном (глауберовском) приближении. Усреднив затем по начальной и конечной волновым функциям, получаем выражение для амплитуды рассеяния на дейтоне с учетом френелевских поправок.

Для сравнения с результатами других работ вычислим приближенно выражение (54). При этом, считая поправку малой, находим

$$f_1 = f_0 + \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} f_0(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{r}) f_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) g(\mathbf{k}, \mathbf{q}). \quad (55)$$

Во втором слагаемом в (55) амплитуду f_0 возьмем в импульсном приближении:

$$f_0 \approx \exp(i\Delta\mathbf{r}/2) f_{0\pi n}(\Delta) + \exp(-i\Delta\mathbf{r}/2) f_{0\pi p}(\Delta); \quad \Delta = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \quad (56)$$

Отметим, что πN -амплитуду следует взять в эйкональном приближении ($f_{0\pi N}$). В результате получим

$$\begin{aligned}
 f_1 = & f_0 + \exp(i\Delta r/2) \int g(\mathbf{q}) f_{0\pi n}(\mathbf{q}) f_{0\pi n}(-\mathbf{q} + \Delta) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} + \\
 & + \exp(-i\Delta r/2) \int g(\mathbf{q}) f_{0\pi p}(\mathbf{q}) f_{0\pi p}(-\mathbf{q} + \Delta) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} + \\
 & + \int g(\mathbf{q}) f_{0\pi p}(\mathbf{q}) f_{0\pi n}(-\mathbf{q} + \Delta) \exp[i(\mathbf{q} + \Delta/2)\mathbf{r}] \frac{d^3q}{(2\pi)^3} + \\
 & + \int g(\mathbf{q}) f_{0\pi p}(\mathbf{q}) f_{0\pi p}(-\mathbf{q} + \Delta) \exp[i(\mathbf{q} - \Delta/2)\mathbf{r}] \frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \quad (57)
 \end{aligned}$$

Видим, что второе и третье слагаемые просто перенормируют импульсное приближение для f_0 ; они соответствуют френелевским поправкам к амплитудам πN -рассеяния; четвертое и пятое слагаемые представляют собой френелевские поправки, перенормирующие эффекты перерассеяния. Эти поправки рассматривались в ряде работ (см., например, [26, 28]).

При любом методе вычислений трудность вызывает вопрос параметризации немассовой амплитуды.

В заключение этого раздела остановимся на интересном выборе пробных функций ВПШ, который применялся в работе [29] для расчета nd -рассеяния выше порога. Основную идею этого подхода поясним на примере задачи двух тел. Выражение (18) при $N = 1$ имеет вид

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -(1/2\pi) \langle \mathbf{k}' | V | \eta_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \langle \eta_{\mathbf{k}}^{(-)} | V | \mathbf{k} \rangle / \langle \eta_{\mathbf{k}}^{(-)} | V - VG_0V | \eta_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle. \quad (57')$$

Введем новые функции:

$$|U_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = V | \eta_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle; \quad |U_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle = V | \eta_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle.$$

Подставляя $U^{(\pm)}$ в (57'), получаем для функционала (57') выражение

$$\begin{aligned}
 f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = & \\
 = & -(1/2\pi) \langle \mathbf{k}' | U_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \langle U_{\mathbf{k}}^{(-)} | \mathbf{k} \rangle / [\langle U_{\mathbf{k}}^{(-)} | V^{-1} | U_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle - \langle U_{\mathbf{k}}^{(-)} | G_0 | U_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle].
 \end{aligned}$$

Смысл введения функций $U^{(\pm)}$ состоит в том, что, во-первых, нет необходимости знать поведение функций при больших r (при условии, что $V(r)$ является короткодействующим) и, во-вторых, не нужно вычислять интеграл $\langle \eta | VG_0V | \eta \rangle$.

2. ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР

Рассмотрим уравнение Липпмана — Швингера для связанного состояния системы A нуклонов:

$$\psi = -G_E V \psi, \quad (58)$$

где G_E — функция Грина свободного движения. Заменим V оператором конечного ранга $V^{(N)}$ по формуле (2) с $|\eta_i\rangle = |\chi_i\rangle$.

Тогда уравнение (58) решается в явном виде:

$$\left. \begin{aligned} |\tilde{\psi}\rangle &= -G_{\tilde{E}} V \sum_{i=1}^N c_i |\eta_i\rangle; & c_i &= \sum_{k=1}^N B_{ik} c_k; \\ B_{ik} &= -\sum_{j=1}^N d_{ij}^{(N)} \langle \eta_j | V G_{\tilde{E}} V | \eta_k \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

а энергия связи E определяется из условия равенства нулю определителя матрицы

$$D_{ik} = \delta_{ik} - B_{ik}. \quad (60)$$

Для $N = 1$

$$|\tilde{\psi}\rangle = G_{\tilde{E}} V |\eta\rangle; \quad (61)$$

$$\langle \eta | V G_{\tilde{E}} V | \eta \rangle / \langle \eta | V | \eta \rangle = -1. \quad (62)$$

Покажем, что (62) приводит для энергии связи E к вариационному функционалу, устойчивому относительно вариации первого порядка [12]. Действительно, пусть $\eta = \psi + \delta\psi$; $\tilde{E} = E + \delta E$, тогда

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

т. е. $\delta E = O([\delta\psi]^2)$. Здесь ψ — точное решение (58) с энергией E . Выберем в (61), (62) пробную функцию η в виде

$$|\eta\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\eta_i\rangle, \quad (63)$$

а коэффициенты c_i определим из условия

$$\partial \tilde{E} / \partial c_i = 0. \quad (64)$$

Подставляя (63) в (62) и учитывая (64), видим, что c_i определяется из (59), а энергия связи — из (60).

Рассмотрим случай, когда V из (58) является оператором конечного ранга N . Для таких потенциалов (2) переходит в тождество, следовательно, вариационная процедура построения оптимальной комбинации из N пробных функций, основанная на функционале (62), для потенциалов конечного ранга дает всегда результат, совпадающий с точным [12].

Именно таким свойством обладает ВПШ для амплитуды рассеяния. Поэтому (62) будем называть ВПШ для энергии связи. В отличие от вариационного принципа Ритца (ВПР), (62) приводит к односторонним границам только для потенциалов, не содержащих отталкивания [3] *. Покажем, что тем не менее на основе ВП

* Этот результат не зависит от того, рассматривается основное состояние или возбужденное.

(62) можно получить в случае произвольного взаимодействия одностороннюю границу на энергию связи. Для этого рассмотрим тождество $V \equiv \tilde{V}^{(N)} + (V - \tilde{V}^{(N)}) = V^{(N)} + V_1$. Тогда в первом порядке теории возмущений по V_1

$$E^{(1)} = \tilde{E} + \frac{\langle \tilde{\psi} | V | (\tilde{\psi} - \sum_{i=1}^N c_i \eta_i) \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}, \quad (64a)$$

где $\tilde{\psi}$ и \tilde{E} определяются выражениями (59), (60). Легко видеть что $E^{(1)}$ — вариационный функционал Ритца с пробной функцией $\tilde{\psi}$, т. е. $E^{(1)}$ — верхняя граница.

На основе ВП (62) можно сформулировать итерационный процесс:

$$|\psi_N\rangle = -G_{E_N} V |\psi_{N-1}\rangle; \quad \langle \psi_{N-1} | V G_{E_N} V |\psi_{N-1}\rangle / \langle \psi_{N-1} | V |\psi_{N-1}\rangle = -1,$$

и использовать его для дальнейшего улучшения имеющегося приближения. Сходимость этого процесса подробно исследовалась в [25].

ВПР также может быть получен на основе идеологии сепаратизации. Однако при этом приходится аппроксимировать весь гамильтониан. Действительно, заменим H на $H^{(1)} = H | \chi \rangle \times \langle \chi | / \langle \chi | \chi \rangle$. С таким гамильтонианом уравнение $H\psi = E\psi$ решается, и для энергии получаем ВПР: $E = \langle \chi | H | \chi \rangle / \langle \chi | \chi \rangle$. В этой связи ВПР предпочтительней ВПР, поскольку кинетическая энергия не аппроксимируется, т. е. асимптотика решения при любых пробных функциях является правильной.

Существует мнение, что конечномерный оператор $V^{(N)}$ дает не более N связанных состояний. Это так, если сепарирующие функции не зависят от энергии. В общем случае даже $V^{(1)}$ может привести к целому спектру. Рассмотрим, например, S -волновую задачу двух тел:

$$(d^2/dr^2 + 2\mu E/\hbar^2 - 2\mu V/\hbar^2) \psi = 0. \quad (65)$$

В случае связанного состояния $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2\mu$ и

$$\left. \begin{aligned} \psi(r) &= - \int G_E(r, r') V(r') \psi(r') dr'; \\ G_E(r, r') &= \begin{cases} (\mu/\hbar^2 \kappa) \exp(-\kappa r) [\exp(\kappa r') - \exp(-\kappa r')], & r' \leq r. \\ (\mu/\hbar^2 \kappa) [\exp(\kappa r) - \exp(-\kappa r)] \exp(-\kappa r'), & r \leq r'. \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (66)$$

Пусть R радиус действия потенциала $V(r)$, т. е. $V(r) = 0$ при $r > R$, а $\psi_1(E, r)$ — регулярное решение (65) в области дей-

ствия потенциала. Положим в (59) $N = 1$, $|\eta\rangle = |\psi_1\rangle$, тогда

$$|\psi\rangle = -G_E V |\psi_1\rangle; \langle \psi_1 | V G_E V | \psi_1 \rangle / \langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle = -1. \quad (67)$$

Учитывая (66) и то, что ψ_1 — решение (65), получаем из (67):

$$\psi_1'(R) / \psi_1(R) = -\kappa. \quad (68)$$

Уравнение (68) совпадает с точным условием сшивки, из которого определяется весь спектр. В задаче рассеяния пробная функция ψ_1 также приводит к точной фазе рассеяния.

Для потенциала типа прямоугольной ямы решение парциального уравнения Шредингера имеет вид $j l (k_0 r)$, где $k_0^2 = (2\mu/\hbar^2) \times (E - V_0)$. Следовательно, разложение Бейтмана с одним из узлов, равным k_0 , точно описывает задачи на связанное состояние и рассеяние на полумассовой поверхности. Ясно, что запись

пробной функции $|\eta\rangle$ в виде $|\eta\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\eta_i\rangle$ и переформулировка ВП для $|\eta\rangle$ в ВП для $|\eta_i\rangle$ при соответствующем оптимальном выборе c_i может быть сделана, конечно, и с ВПР. Однако при этом для энергии получается уравнение, среди корней которого находятся нефизические значения [30]. Последовательность ВП (59) свободна от этого недостатка, так как найдена из решения (58) с потенциалом $V^{(N)}$.

Что касается правомерности замены V на $V^{(N)}$ в многочастичных задачах, т. е. можно ли придать динамический смысл ВППШ (в смысле малости $|V - V^{(N)}|$), укажем, что в задачах на связанные состояния V определен на классе квадратично-интегрируемых функций и замена V на $V^{(N)}$ оправдана. Расчеты по данной методике для задачи трех тел проведены в работе [31]; в ней показана быстрая сходимость.

Так как асимптотика решения в методе Швингера правильная при любом выборе пробных функций, то удобным является осцилляторный базис. Этот базис широко используется в ВПР, и разработана методика для вычисления матричных элементов типа

$$\langle \eta_i | V | \eta_j \rangle; \langle \eta_i | G_E | \eta_j \rangle, \quad (69)$$

где $|\eta_i\rangle$ — осцилляторные функции. Упростим ВППШ так, чтобы вычислять нужно было только матричные элементы (69). Рассмотрим случай $N = 1$ и заменим (62) приближенным выражением

$$\sum_{i,j=1}^N \frac{\langle \eta | V | \eta_i \rangle \langle \eta_i | G_E | \eta_j \rangle \langle \eta_j | V | \eta \rangle}{\langle \eta | V | \eta \rangle} = -1. \quad (70)$$

Хотя стационарность (70) носит приближенный характер, однако это выражение удобно для практических расчетов и, что особенно

важно, получается при замене V на оператор первого ранга $V^{(1)}$:

$$V^{(1)} = \sum_{i, j=1}^N \frac{\langle \eta_i | V | \eta_i \rangle \langle \eta_j | V | \eta_j \rangle}{\langle \eta_i | V | \eta_i \rangle} | \eta_i \rangle \langle \eta_j |. \quad (71)$$

Также можно рассмотреть общий случай (59).

Поправки к основному приближению метода многомерных гармоник. Расчеты энергий связи легчайших ядер показали, что метод K -гармоник быстро сходится, т. е. основной вклад в волновую функцию и энергию низковозбужденных состояний дают первые члены с $K = K_{\text{мин}}$ [32]. Однако вопрос о быстрой сходимости метода при переходе к тяжелым ядрам (например, к ^{16}O и т. п.) остается открытым.

Вычислим поправки к основному приближению метода K -гармоник [10]. Для простоты будем считать, что основная гармоника с полным моментом J и его проекцией на ось z J_z единственна:

$$U_{K_{\text{мин}}, J, J_z}(\Omega_{3A-3}) \equiv U_{K_{\text{мин}}}(\Omega_{3A-3}).$$

Положим в (62)

$$\eta = \rho^{-(3A-4)/2} \varphi(\rho) U_{K_{\text{мин}}}(\Omega_{3A-3}) \quad (72)$$

и, воспользовавшись приближением работы [33], найдем

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\psi} &= -V\eta / \left(\frac{\kappa(\kappa+1)}{2m\rho^2} + |\tilde{E}| \right); \\ \int_0^{\infty} d\rho \left[\varphi^2(\rho) \bar{V}^2(\rho) / \left(\frac{\kappa(\kappa+1)}{2m\rho^2} + |\tilde{E}| \right) \right] / \int_0^{\infty} d\rho \varphi^2(\rho) \bar{V}(\rho) &= -1, \end{aligned} \right\} \quad (73)$$

где

$$\kappa = K_{\text{мин}} + (3A-6)/2;$$

$$\bar{V}^n(\rho) = \int U_{K_{\text{мин}}}^{\dagger}(\Omega_{3A-3}) V^n U_{K_{\text{мин}}}(\Omega_{3A-3}) d\Omega_{3A-3},$$

а $\varphi(\rho)$ для многонуклонных ядер близка к осцилляторной [34]:

$$\varphi(\rho) = \exp[-(\rho - \bar{\rho})^2 / \Delta\rho^2]; \quad \Delta\rho \sim \bar{\rho} / \sqrt{A}. \quad (74)$$

Очевидно, что в разложении $\tilde{\psi}$ по гиперсферическим функциям содержатся, кроме основной, все потенциальные гармоники.

Хотя (73) получено в тех же приближениях, что и выражение для поправок в работе [33], наши формулы значительно проще (отсутствует член с \bar{V}^3). Этот факт — одно из преимуществ данного подхода.

В качестве примера оценим \tilde{E} для ядра ^{16}O и бесспинового двухчастичного потенциала вида

$$V_{ij} = \lambda_1 \exp(-\rho_{ij}^2/\tau_1^2) - \lambda_2 \exp(-\rho_{ij}^2/\tau_2^2) \quad (75)$$

с параметрами *

$$\lambda_1 = 10; \quad \tau_1 = 1; \quad \lambda_2 = 1,58; \quad \tau_2 = 2,5, \dagger \quad (76)$$

которые приводят к энергии ^{16}O в основном приближении:

$$E_0 = -6. \quad (77)$$

Для $\bar{\rho} = 10$ расчет по формуле (73) дает

$$E = -21,9. \quad (78)$$

(Выражения \bar{V}^2 для ядра ^{16}O и потенциала (75) приведены в [33].) Точность (78) можно оценить, используя (64а). Для случаев (75), (76) имеем:

$$|\Delta \tilde{E}/E| \cdot 100\% \sim 30\%; \quad \Delta \tilde{E} = E^{(1)} - \tilde{E}. \quad (79)$$

Учитывая, что в действительности точность расчета \tilde{E} значительно лучше, так как при получении (79) использовалась верхняя граница для $|\Delta \tilde{E}|$, можно утверждать, что уже в первом приближении метода происходит значительное улучшение приближения $K_{\text{мин}}$. Значение (78) находится в качественном согласии с результатом работы [33], где для этого же самого примера найдена оценка $E < -15$.

Задачи с более сложными граничными условиями. Для того чтобы продемонстрировать эффективность ВПП в задачах дискретного спектра, рассмотрим задачи СВЧ-пробоя. Проблеме пробоя газа в неоднородном СВЧ-поле посвящено большое число работ [35, 36]. В таком поле для нестационарного уравнения диффузии, описывающего плотность электронов:

$$\nabla(D\nabla n) + v_{\text{net}}n = \partial n/\partial t \quad (80)$$

($v_{\text{net}} = v_i - v_a$ — эффективная частота ионизации, зависящая от эффективного поля $E_{\text{эф}} = |E|/\sqrt{1 + \omega^2/\nu^2}$; $|E|$ — модуль СВЧ-поля; ν — частота столкновений электронов в газе; ω — круговая частота; v_i и v_a — соответственно частоты ионизации и прилипания; D — коэффициент диффузии), получить аналитическое точное решение, как правило, невозможно.

Для нахождения условий пробоя в газе обычно используют методы, основанные на ВПП. В первом из них, предложенном Эпштейном [35], из условия непрерывного пробоя $\partial n/\partial t = 0$ получен ВП:

$$\delta \langle \eta | L_0 - v_{\text{net}} | \eta \rangle = 0,$$

где $L_0 = -\nabla(D\nabla)$; η — пробная функция.

Во втором подходе, предложенном Майхеном [36], уравнение (80) приводит к задаче на собственные значения. Для этого произ-

* Здесь энергии измеряются в единицах $20,6 \text{ Мэв}$, а расстояния — в ферми.

водят разложение плотности электронов $n(r, t)$ по полной системе функций:

$$n(r, t) = \sum_k N_k(r) T_k(t).$$

После этого (80) сводится к системе уравнений:

$$\left. \begin{aligned} (L_0 + \nu) N_k &= \lambda_k N_k; \\ \partial T_k / \partial t &= -\lambda_k T_k, \end{aligned} \right\} \quad (81)$$

где λ_k — собственное значение; $L_0 = -\nabla(D\nabla)$; $\nu = -\nu_{\text{net}}$. Из (81) следует, что начало непрерывного пробоя соответствует условию, при котором минимальное собственное значение $\lambda_k^{\text{мин}}$ равно нулю.

Для нахождения $\lambda_k^{\text{мин}}$ используют ВПР:

$$\lambda_k^{\text{мин}} = -\langle \eta | L_0 + \nu | \eta \rangle / \langle \eta | \eta \rangle.$$

с пробной функцией $|\eta\rangle$, удовлетворяющей граничным условиям: $\eta = 0$ на поверхности излучателя и $\nabla\eta \rightarrow 0$ для открытой части пространства. ВПР получается при замене ν на оператор конечного ранга по формуле (2). Следует подчеркнуть, что вычисление функций Грина оператора L_0 для большинства используемых моделей не представляет трудностей. В работах [35, 36] продемонстрирован ВПР на некоторых модельных задачах, точное решение которых известно. Покажем, что ВПР с такими же пробными функциями приводит к более точным результатам [17]. Для этого введем следующие обозначения:

$$\nu = \nu_0 f(r); \quad D = D_0; \quad \mu = \nu_0 l^2 / D_0. \quad (82)$$

Рассмотрим СВЧ-пробой между двумя бесконечными параллельными пластинами. Граничные условия: $n(0) = n(1) = 0$. Запишем уравнение диффузии для этого случая:

$$d^2 n / dx^2 + \mu f(x) n = \partial n / \partial t. \quad (82')$$

Функция Грина оператора d^2/dx^2 с соответствующими граничными условиями имеет вид

$$G(x, x') = \begin{cases} x(1-x'), & x' > x; \\ x'(1-x), & x' < x. \end{cases} \quad (83)$$

Если $f(x) = 1$, то точное решение:

$$n = \sin \pi x; \quad \mu = \pi^2 = 9,869.$$

Приведем значения, полученные вариационными методами с пробными функциями:

$$\eta = x(1-x); \quad (84)$$

$$\eta = x(1-x)(c_1 + c_2 x^2) \quad (85)$$

(c_1, c_2 — вариационные параметры).

Для (84): ВПР — $\mu = 10,0$; ВПШ — $\mu = 9,883$, т. е. точность ВПШ на порядок выше ВПР.

Для (85): ВПР — $\mu = 9,99$; ВПШ — $\mu = 9,881$. Отсюда видно, что ВПШ с пробной функцией (84) значительно точнее ВПР с пробной функцией (85). Если использовать в ВПШ пробную функцию $\eta = 1$, которая не удовлетворяет граничным условиям, то получается результат $\mu = 12,0$, отличающийся всего на 20% от точного.

В случае $f(x) = 1 - x$ (в этой же задаче) точное значение $\mu = 18,956$.

Рассмотрим результаты, полученные вариационными методами с пробными функциями:

$$\eta = x(1 - x); \tag{86}$$

$$\eta = x(1 - x)(c_1 + c_2x^2). \tag{87}$$

Для (86): ВПР — $\mu = 20,0$; ВПШ — $\mu = 19,09$.

Для (87): ВПР — $\mu = 19,02$; ВПШ — $\mu = 18,961$. Видно, что с пробной функцией (87) ВПШ приводит к решению, практически совпадающему с точным.

Перейдем к двумерным задачам. Рассмотрим СВЧ-пробой в цилиндрическом резонаторе радиусом R и длиной L . Уравнение в этом случае имеет вид

$$\partial^2 n / \partial r^2 + (1/r) \partial n / \partial r + \partial^2 n / \partial z^2 + \mu f(r, z) n = \partial n / \partial t, \tag{88}$$

а граничные условия: $n_{r=0} = 0$, $n_{r=R} = 0$. Если выбрать $f(r) = 1 - r^2$, то переменные разделяются и точное решение при $\pi R/L = k = 1$ дает $\mu = 8,5$. Функция Грина для радиального уравнения равна

$$G(r, r') = \begin{cases} (1/c) I_0(kr) [I_0(kr') + cK_0(kr')], & r < r'; \\ (1/c) I_0(kr') [I_0(kr) + cK_0(kr)], & r > r', \end{cases} \tag{89}$$

где $c = I_0(k)/K_0(k)$; $I_0(kr)$ и $K_0(kr)$ — функции Бесселя и Макдональда мнимого аргумента.

Результаты, полученные вариационными методами с пробной функцией $\eta = (1 - r^2) \sin \pi z$ при $k = 1$: ВПР — $\mu = 9,33$; ВПШ — $\mu = 8,868$. И в этом случае результат, полученный ВПШ, значительно точнее ВПР.

Резюмируя приведенные выше примеры, можно сказать, что даже в задачах со сложными граничными условиями ВПШ предпочтительнее ВПР.

3. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ШВИНГЕРА В НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ

В ряде задач атомной и ядерной физики (как, например, в многофотонной ионизации атомов [37], в реакциях с тяжелыми ионами [38]) мы встречаемся с необходимостью выхода за рамки стандартной теории возмущений. Хотя в этом направлении имеются определенные успехи (методы квазиэнергий [39] *, функций Грина [40] и т. п.), большое число каналов, которое нужно учитывать, а также частный характер имеющихся приближений приводят к тому, что следует исследовать общие методы теоретического описания подобных систем. Основой такого подхода могут, очевидно, служить вариационные принципы **.

Основные уравнения. Волновая функция системы удовлетворяет уравнению

$$i\partial\psi(\zeta, t)/\partial t = [H_0(\zeta) + V(\zeta, t)]\psi(\zeta, t), \quad (90)$$

решение которого естественно искать в виде разложения

$$\psi(\zeta, t) = \sum_{\nu} a_{\nu}(t) \exp[-iE_{\nu}t] |\nu\rangle$$

по собственным функциям ядра (атома) в отсутствие внешнего поля

$$H_0|\nu\rangle = E_{\nu}|\nu\rangle.$$

Тогда для a_{ν} получаем систему уравнений

$$i \frac{da_{\nu}}{dt} = \sum_{\nu'} \exp(i\omega_{\nu\nu'}t) \langle \nu | V(t) | \nu' \rangle a_{\nu'}, \quad (91)$$

где $\omega_{\nu\nu'} = (E_{\nu} - E_{\nu'})$; $a_{\nu}(t)$ — амплитуда вероятности найти систему в момент времени t в одном из состояний $|\nu\rangle$.

Пусть в начальный момент времени t_0 система находится в состоянии $|\nu_0\rangle$, тогда имеем следующие начальные условия для решения системы (91):

$$a_{\nu}(t_0) = \sigma_{\nu\nu_0}.$$

* Ожидается, что использование квазиэнергий будет плодотворным в теории многофотонной ионизации, хотя практическое использование квазиэнергий в теории многоквантовых процессов, по-видимому, затруднительно [41].

** Отметим, что аналогичный ВП для бесконечного промежутка времени рассматривался в работе [42], а обобщение ВП типа ВП Кона, Хьюльена на нестационарные задачи дано в [43].

Перепишем (91) в интегральной форме

$$a_v(t) = \delta_{vv_0} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t \sum_{v'} V_{vv'}(t') a_{v'}(t') dt', \quad (92)$$

где

$$V_{vv'}(t) = \exp(i\omega_{vv'}t) \langle v | V(t) | v' \rangle.$$

Введем

$$a_v(t, T) = \delta_{vv_0} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^T \sum_{v'} V_{vv'}(t') \theta(t-t') a_{v'}(t', T) dt'; \quad (93)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Легко видеть, что

$$a_v(t, T) = a_v(t), \quad \text{если } t \leq T,$$

а при $t > T$

$$a_v(t, T) = \delta_{vv_0} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^T \sum_{v'} V_{vv'}(t') a_{v'}(t') dt',$$

т. е.

$$a_v(t, T) = \begin{cases} a_v(t), & t \leq T; \\ a_v(T), & t > T. \end{cases} \quad (94)$$

Такая ситуация реализуется, если потенциал выключается в момент времени T ; в этом смысле уравнения (93) аналогичны уравнениям метода фазовых функций.

Нам в дальнейшем понадобятся также функции $a_v^{i(-)}(t, T)$:

$$a_v^{i(-)}(t, T) = \delta_{vv_i} - \frac{1}{i} \int_{t_0}^T \sum_{v'} V_{vv'}(t') \theta(t'-t) a_{v'}^{i(-)}(t', T) dt'. \quad (95)$$

При $t \leq T$ $a_v^{i(-)}(t, T)$ являются решением системы (92) с начальными условиями

$$a_v^{i(-)}(T, T) = \delta_{vv_i}.$$

Метод сепарабилизации. Для решения системы (93) обобщим метод сепарабилизации потенциала в многоканальной теории.

Заменяем V на оператор конечного ранга $V^{(N)}$ по формуле

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\nu'} V_{\nu\nu'}^{(N)}(t) b_{\nu'}(t) = \\ = \sum_{i, j=1}^N \sum_{\mu, \mu', \nu'} V_{\nu\mu}(t) \eta_{\mu}^i(t) d_{ij}^{-1} \int_{t_0}^T (\eta_{\mu'}^{j(-)}(t'))^* V_{\mu'\nu'}(t') b_{\nu'}(t') dt'; \\ d_{ij} = \sum_{\mu'\nu'} \int_{t_0}^T (\eta_{\mu'}^{i(-)}(t))^* V_{\mu'\nu'}(t) \eta_{\nu'}^j(t) dt. \end{aligned} \right\} (96)$$

С потенциалом (96) система (93) решается в явном виде:

$$\left. \begin{aligned} a_{\nu}^{(N)}(t, T) = \delta_{\nu\nu_0} + \frac{1}{i} \sum_{i, j=1}^N \sum_{\nu'\mu} \int_{t_0}^T V_{\nu\nu'}(t') \theta(t-t') \eta_{\nu'}^i(t') \times \\ \times dt' [C^{-1}(T)]_{ij} \int_{t_0}^T (\eta_{\mu}^{j(-)}(t''))^* V_{\mu\nu_0}(t'') dt''; \\ C_{ij}(T) = \sum_{\mu\nu'} \left[\int_{t_0}^T (\eta_{\mu}^{i(-)}(t))^* V_{\mu\nu'}(t) \eta_{\nu'}^j(t) dt - \right. \\ \left. - \frac{1}{i} \sum_{\mu'} \int_{t_0}^T dt \int_{t_0}^T dt' (\eta_{\mu}^{i(-)}(t))^* V_{\mu\mu'}(t) \theta(t-t') V_{\mu'\nu'}(t') \eta_{\nu'}^j(t') \right]. \end{aligned} \right\} (97)$$

Укажем на специфические особенности сепарабилизации по времени. Из (97) видно, что при $t < T$ $a_{\nu}^{(N)}(t, T)$ не имеет смысла. В самом деле, мы заменили потенциал на нелокальный по времени. Поэтому $a_{\nu}^{(N)}(t, T)$ зависит от полей при временах, не только меньших, но и больших t вплоть до T . Этот факт, очевидно, противоречит условию причинности. Однако для $a_{\nu}^{(N)}(T, T)$ никаких противоречий нет. Используя (94) и заменяя T на t , приходим к решению уравнений (91), полученному методом сепарабилизации [16]:

$$a_{\nu}^{(N)}(t) \equiv a_{\nu}^{(N)}(t, t); \tag{98}$$

$$\begin{aligned} a_{\nu}^{(N)}(t) = \delta_{\nu\nu_0} + \frac{1}{i} \sum_{i, j=1}^N \sum_{\nu'\mu} \int_{t_0}^t V_{\nu\nu'}(t') \eta_{\nu'}^i(t') dt' [C^{-1}(t)]_{ij} \times \\ \times \int_{t_0}^t (\eta_{\mu}^{j(-)}(t''))^* V_{\mu\nu_0}(t'') dt''. \end{aligned} \tag{99}$$

Остановимся вкратце на сходимости (99). Рассмотрим уравнения

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\nu_0}^{(+)}(t, T) &= \exp(-iE_{\nu_0}t) |\nu_0\rangle + \\ &+ \frac{1}{i} \int_{t_0}^T \exp[iH_0(t'-t)] \theta(t-t') V(t') \psi_{\nu_0}^{(+)}(t', T) dt'; \\ \psi_{\nu}^{(-)}(t, T) &= \exp(-iE_{\nu}t) |\nu\rangle - \\ &- \frac{1}{i} \int_{t_0}^T \exp[iH_0(t'-t)] \theta(t'-t) V(t') \psi_{\nu}^{(-)}(t', T) dt', \end{aligned} \right\} \quad (100)$$

решения которых удовлетворяют (90). Амплитуда определяется из равенства

$$a_{\nu}(t, T) = \langle \Phi_{\nu}(t) | \psi_{\nu_0}^{(+)}(t, T) \rangle; \quad \Phi_{\nu}(t) = \exp(-iE_{\nu}t) |\nu\rangle.$$

Для решения (100) используем тождество, вообще говоря, символическое:

$$V = VV^{-1}V = \sum_{i,j} V |i\rangle \langle\langle i | V^{-1} | j \rangle\rangle \langle\langle j | V; \quad (101)$$

здесь $|i\rangle\rangle, |j\rangle\rangle$ — полные наборы также и по времени в интервале $[t_0, T]$;

$$\langle\langle i | V | j \rangle\rangle \equiv \int_{t_0}^T dt \int \chi_i^*(\zeta, t) V(\zeta, t) \varphi_j(\zeta, t) d\zeta.$$

Оборвем в (101) суммирование по полным наборам, тогда

$$\left. \begin{aligned} V^{(N)} &= \sum_{i,j=1}^N V | \varphi_i \rangle\rangle d_{ij}^{-1} \langle\langle \chi_j | V; \\ d_{ij} &= \langle\langle \chi_i | V | \varphi_j \rangle\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (102)$$

С потенциалом (102) система (100) решается, и для $a_{\nu}^{(N)}(t)$ после соответствующих преобразований приходим к (99). Из приведенного рассуждения ясно, что если уравнения (100) имеют решения, другими словами, если ядра (100) вполне непрерывны, то (99) сходится.

Вариационный принцип Швингера. Покажем, что (99) стационарно относительно вариаций первого порядка по каждой из проб-

ных функций η . Рассмотрим сначала случай $N = 1$. Тогда

$$a_{\nu}^{(1)}(t) = \delta_{\nu\nu_0} + \frac{\sum_{\nu'\mu} \int_{t_0}^t V_{\nu\nu'}(t') \eta_{\nu'}(t') dt' \int_{t_0}^t (\eta_{\mu}^{(-)}(t''))^* V_{\mu\nu_0}(t'') dt''}{\sum_{\sigma\rho} \int_{t_0}^t dt' \left[(\eta_{\sigma}^{(-)}(t'))^* V_{\sigma\rho}(t') \eta_{\rho}(t') - \right.} \quad (103)$$

$$\left. \rightarrow -\frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt'' \sum_{\delta} (\eta_{\sigma}^{(-)}(t'))^* V_{\sigma\delta}(t') \theta(t' - t'') V_{\delta\rho}(t'') \eta_{\rho}(t'') \right]$$

Перепишем (103) в виде

$$a_{\nu}^{(1)}(t) = \delta_{\nu\nu_0} + \frac{\sum_{\mu\nu'\mu''\nu''} \int_{t_0}^t \delta_{\nu\mu} V_{\mu\nu'}(t') \eta_{\nu'}(t') dt' \int_{t_0}^t (\eta_{\mu}^{(-)}(t''))^* V_{\mu'\nu''}(t'') \delta_{\nu''\nu_0} dt''}{\sum_{\sigma\rho} \int_{t_0}^t dt' \left[(\eta_{\sigma}^{(-)}(t'))^* V_{\sigma\rho}(t') \eta_{\rho}(t') - \right.} \quad (104)$$

$$\left. \rightarrow -\frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt'' \sum_{\delta} (\eta_{\sigma}^{(-)}(t'))^* V_{\sigma\delta}(t') \theta(t' - t'') V_{\delta\rho}(t'') \eta_{\rho}(t'') \right]$$

Далее, воспользовавшись (95) и (94), получим:

$$\sum_{\mu\nu'} \int_{t_0}^t \delta_{\nu\mu} V_{\mu\nu'}(t') \eta_{\nu'}(t') dt' = \sum_{\mu\nu'} \int_{t_0}^t dt' \left[(a_{\mu}^{\nu(-)}(t', t))^* V_{\mu\nu'}(t') \eta_{\nu'}(t') - \right. \\ \left. - \frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt'' \sum_{\mu'} (a_{\mu}^{\nu(-)}(t', t))^* V_{\mu\mu'}(t') \theta(t' - t'') V_{\mu'\nu'}(t'') \eta_{\nu'}(t'') \right]; \\ \sum_{\mu'\nu'} \int_{t_0}^t (\eta_{\mu}^{(-)}(t'))^* V_{\mu'\nu'}(t') \delta_{\nu'\nu_0} dt' = \\ = \sum_{\mu'\nu'} \int_{t_0}^t dt' \left[(\eta_{\mu}^{(-)}(t'))^* V_{\mu'\nu'}(t') a_{\nu'}(t', t) - \right. \\ \left. - \frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt'' \sum_{\mu} (\eta_{\mu}^{(-)}(t'))^* V_{\mu'\mu}(t') \theta(t' - t'') V_{\mu\nu'}(t'') a_{\nu'}(t'', t) \right].$$

Следовательно, если

$$\eta_{\mu}^{(-)}(t') = a_{\mu}^{v(-)}(t', t) + \delta a_{\mu}^{v(-)}; \quad \eta_{\mu}(t') = a_{\mu}(t', t) + \delta a_{\mu},$$

то

$$\alpha_v^{(1)}(t) = a_v(t) + O[(\delta a)^2],$$

т. е. (103) — вариационный функционал.

Выберем в (103) пробные функции

$$\eta_v(t) = \sum_{i=1}^N a_i \eta_v^i(t); \quad \eta_{\mu}^{(-)}(t) = \sum_{i=1}^N b_i \eta_{\mu}^{i(-)}(t). \quad (104)$$

Подставляя (104) в (103) и находя коэффициенты a_i , b_i из условий

$$\partial a_v^{(1)}(t) / \partial a_i = \partial a_v^{(1)}(t) / \partial b_i = 0,$$

получим, что $a_v^{(1)}(t) = a_v^{(N)}(t)$. Отсюда, если

$$\eta_{\mu}^k(t') = a_{\mu}(t', t) + \delta a_{\mu};$$

$$\eta_{\mu}^{n(-)}(t') = a_{\mu}^{v(-)}(t', t) + \delta a_{\mu}^{v(-)},$$

тогда

$$a_v^{(N)}(t) = a_v(t) + O[(\delta a)^2]$$

и утверждение доказано.

В качестве примера использования ВП (103) выберем

$$\eta_{\mu}(t') = \delta_{\mu\nu_0}; \quad \eta_{\mu}^{(-)}(t') = \delta_{\mu\nu}. \quad (105)$$

Подставляя (105) в (103), получаем для амплитуды выражение

$$a_v^{(1)}(t) = \delta_{v\nu_0} +$$

$$+ \frac{1}{i} \frac{\left(\int_{t_0}^t V_{v\nu_0}(t') dt' \right)^2}{\int_{t_0}^t V_{v\nu_0}(t') dt' - \frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \sum_{\mu} V_{v\mu}(t') \theta(t' - t'') V_{\mu\nu_0}(t'')}, \quad (106)$$

представляющее собой улучшенное борновское приближение и с точностью до членов, квадратичных по взаимодействию, совпадающее со вторым борновским приближением.

Отметим, далее, что если гамильтониан от времени явно не зависит, то, заменяя V на $\exp(-\varepsilon |t|) V$ и полагая $t_0 = -\infty$, получаем для $a_v^{(1)}(\infty)$ обычный ВПШ.

Прохождение частицы через потенциальный барьер с периодически меняющейся глубиной. В работе [41] исследовано прохожде-

ние частицы через узкий потенциальный барьер с периодически меняющейся глубиной и в результате численных расчетов получено, что отражение частицы от такого барьера носит резонансный характер. В данном разделе рассмотрим эту задачу на основе ВПШ. Пусть потенциал

$$V(x, t) = -(\alpha + \lambda \cos \omega t) \delta(x). \quad (107)$$

Остановимся на случае упругого рассеяния. Подставив потенциал (107) в (106), воспользуемся адиабатической гипотезой, т. е. заменим $V(x, t)$ на $\exp(-\varepsilon |t|) V(x, t)$, устремим в (106) $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$ и в результате получим для коэффициента отражения R выражение*

$$R = |\alpha^2/2k(\lambda^2/8\sqrt{\omega - k^2} - \alpha) + i(\alpha^2 + 2k\lambda^2/8\sqrt{\omega + k^2})|^2, \quad (108)$$

которое справедливо, если $\omega \neq 0$.

Из (108) видно, что если $\alpha > 0$, т. е. при $\lambda = 0$ в системе имеется связанное состояние, то при $k^2 < \omega$ отражение носит резонансный характер, а вблизи резонанса выражение для R имеет вид формулы Брейта — Вигнера с шириной, зависящей от передачи. В области энергий $k^2 > \omega$ резонансов нет.

При $\lambda = 0$ выражение (108) переходит в точную формулу для коэффициента отражения на δ -образном потенциале.

Остановимся вкратце на физической картине явления. При $k^2 < \omega$ система может испустить квант ω , перейти в область отрицательных энергий, а затем поглотить квант ω ; при $k^2 > \omega$ вероятность поглощения реального кванта мала**.

Известно [44], что ультрахолодные нейтроны (УХН) благодаря крайне малой энергии ($\sim 10^{-7}$ эв) дают уникальную возможность для исследования нестационарных квантовомеханических эффектов.

Особенно интересен случай, когда частота нестационарного поля связана с энергией УХН соотношением $k^2 < \omega$.

Очевидно, что поле (107) для УХН можно получить, например, помещая ферромагнитную фольгу в переменное магнитное поле. Так как в экспериментах с УХН реализуется случай $\alpha > 0$, то отражение УХН носит резонансный характер.

Поскольку реально обнаруживается аномально быстрая утечка УХН из ловушек [45], нам кажется очень интересным использовать высокочастотные магнитные поля для удержания УХН [16]. При этом $\omega \sim 10^8 \div 10^{10}$ 1/сек. Такие частоты вполне достижимы. Кроме того, по-видимому, представляет значительный интерес

* Здесь и далее используем систему единиц $\hbar = 2m = 1$.

** Так как (108) получено на основе ВПШ, т. е. при точном решении задачи с приближенным потенциалом, отсюда следует, что данный эффект не есть специфика δ -образных сил.

экспериментальное изучение резонансов. Не исключено, что данный эффект можно будет использовать для получения моноэнергетических УХН.

При рассмотрении взаимодействия УХН со стенками ловушки приходится учитывать звуковые колебания ловушки. Это взаимодействие можно описать потенциалом вида

$$V(x, t) = -\alpha\delta(x - \lambda \cos \omega t). \tag{109}$$

Воспользовавшись приближением (106), нетрудно получить формулу для амплитуды упруго отраженной волны:

$$a_{-k} = \frac{1}{i} \frac{\alpha^2 J_0^2(2k\lambda)}{-\alpha J_0(2k\lambda) + \frac{\alpha^2}{2\pi i} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int dq \frac{J_m(\lambda(q-k)) J_m(\lambda(q+k))}{q^2 - k^2 + m\omega - i\epsilon}}. \tag{110}$$

В отличие от (108), в (110) учитываются виртуальное поглощение и испускание бесконечного числа квантов.

В заключение этого раздела остановимся на интересной, правда, мало исследованной, возможности распространения полученных в данном разделе результатов в теории ядерных реакций. Дело в том, что почти все теоретические модели основаны на концепции в некотором смысле одночастичного стационарного движения. Одно из таких приближений — оптический потенциал — широко используется. Усложним простое одночастичное движение за счет введения в потенциал зависимости от времени, которая появляется вследствие движения нуклонов в ядре. Таким образом, предлагается многоканальную систему уравнений, описывающую рассеяние частицы на связанном комплексе, заменить на задачу рассеяния частицы на эффективном потенциале, зависящем от времени $U_{\text{эф}}(r, t)$.

Известно, что при низких энергиях ядерные реакции носят резонансный характер, а с ростом энергий доминируют прямые процессы. Этот факт находит простое объяснение в теории с эффективным, зависящим от времени, потенциалом. В самом деле, из (108) следует, что если при $k^2 < \omega$ резонансы есть, то при энергиях больших ω они исчезают.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечислим основные свойства ВПШ.

1. ВПШ позволяет единым образом описывать задачи на связанные состояния, рассеяние и нестационарные задачи.

2. Данный ВП в действительности является динамическим подходом, так как задача решается заменой V на $V^{(N)}$ и $|V - V^{(N)}|$ характеризует погрешность.

3. Если V — вполне непрерывный оператор, то сходимость ВПШ обеспечивается известной теоремой об аппроксимации вполне непрерывного оператора оператором конечного ранга.

4. Если исходное взаимодействие описывается оператором конечного ранга N , то ВП, полученный при N -членной сепарабилизации, приводит к точному значению при любых пробных функциях.

5. ВПШ получается при факторизации взаимодействия, а кинетическая энергия, т. е. асимптотика решения, остается правильной при любых функциях. Поэтому в расчетах энергий связи и волновых функций легких ядер с осцилляторными пробными функциями данный метод будет быстро сходиться в отличие от ВПР.

Необходимо отметить, что ВПШ несколько сложнее ВП Ритца, Кона, Хюльтена, так как содержит интеграл вида $\langle \eta | VG_0V | \eta \rangle$, и на основе этого даже возникло мнение (см., например, [46]), что ВПШ не особенно удобен в практических расчетах. Однако преимущества формулы Швингера, подробно рассмотренные выше, а также возможность выбора относительно простых пробных функций, вселяют уверенность, что данный принцип окажется полезным в квантовомеханических задачах*.

Автор выражает глубокую благодарность В. Б. Беляеву, А. И. Базю, Е. Вжеционко, Ю. Н. Демкову, Б. Н. Захарьеву, В. И. Лушикову, А. Г. Ситенко, А. Я. Смородинскому, В. Ф. Харченко за обсуждение ряда вопросов, рассмотренных в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sugar R., Blankenbekler R. «Phys. Rev.», 1964, v. 136B, p. 472.
2. Fuller R. C. «Phys. Rev.», 1969, v. 188, p. 1649.
3. Зубарев А. Л. «ЭЧАЯ», 1976, т. 7, вып. 2, с. 553.
4. Efimov V. N. In: Proc. Comptes Rend. Congr. Intern. Phys. Nucl. VII, Paris, 1964, p. 258; Препринты ОИЯИ Р-2546, Р-2899, Дубна, 1960.
5. Фаддеев Л. Д. В кн.: Труды V Международной конференции по физике электронных и атомных столкновений. М., «Наука», 1967; Sitenko A. G., Kharchenko V. F., Petrov N. M. «Phys. Lett.», 1968, v. 28B, p. 308.
6. Беляев В. Б., Вжеционко Е. Препринт ОИЯИ Р4-4144, Дубна, 1968.
7. Bazley N. W., Fox D. W. «Phys. Rev.», 1961, v. 129, p. 483.
8. Зубарев А. Л. «Ядерная физика», 1976, т. 23, с. 77.
9. Зубарев А. Л., Мусаханов М. М. Там же, с. 82.
10. Зубарев А. Л. Там же, с. 711.
11. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П. Там же, т. 24 с. 1035.
12. Зубарев А. Л. «ТМФ», 1977, т. 30, с. 73;
13. Зубарев А. Л. Препринт ИТФ-76-55Р, 1976.
14. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П. «ТМФ», 1977.
15. Зубарев А. Л., Подкопаев А. П. «Труды ТашГУ. Сер. физ.», 1977.

* В данной работе мы не останавливались на связи ВПШ с методом аппроксимации Паде [47] и на применении ВПШ к решению уравнений Фаддеева [48] и к релятивистским уравнениям [49].

16. Зубарев А. Л. «Ядерная физика», 1977, т. 26, с. 441.
17. Галимзянов Р. М., Зубарев А. Л., Мезрин О. А. «ЖТФ», 1978, т. 48.
18. Друкарев Г. Ф. Теория столкновений электронов с атомами. М., Физматгиз, 1963.
19. Зубарев А. Л., Ивлиева И. Н., Подкопаев А. П. Препринт ОИЯИ Р4-8634, Дубна, 1975.
20. Burke P. G., Schey U. M. «Phys. Rev.», 1962, v. 126, p. 147.
21. Glauber R. J. «Lect. Theor. Phys.», 1959, v. 1, p. 315; Ситенко А. Г. «УФЖ», 1959, т. 4, с. 152.
22. Беляев В. Б., Вжеционко Е., Зубарев А. Л. «Ядерная физика», 1970, т. 12, с. 923.
23. Schiff L. I. «Phys. Rev.», 1956, v. 103, p. 443.
24. Лукьянов В. К. Препринт ОИЯИ Р4-8744, Дубна, 1975.
25. Море Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Пер. с англ. Т. 2. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
26. Колыбасов В. М., Кондратюк Л. А. «Ядерная физика», 1973, т. 18, с. 316.
27. Sugar R. L., Blankenbckler R. «Phys. Rev.», 1969, v. 183, p. 1387.
28. Gottfried K. «Ann. Phys.», 1971, v. 66, p. 868; Коваль Л. И., Матинян С. Г. «Ядерная физика», 1974, т. 19, с. 380.
29. McDonald F. A., Nuttal J. «Phys. Rev.», 1972, v. 6С, p. 124; Mittal J., Cohen U. L. Ibid., 1969, v. 188, p. 1542.
30. Rosenberg L., Spruch L., O'Malley T. F. Ibid., 1960, v. 118, p. 184.
31. Belyaev V. B. e.a. Preprint JINR E4-8819, 1975.
32. Бадалин А. М. и др. «Ядерная физика», 1967, т. 6, с. 47.
33. Горбатов А. М. Там же, 1973, т. 18, с. 1017.
34. Базь А. И. и др. «Письмо в ЖЭТФ», 1970, т. 12, с. 151.
35. Epstein M. «Phys. Fluids», 1968, v. 11, p. 896; 1969, v. 12, p. 728.
36. Maughan R. L. «Fante J. Appl. Phys.», 1969, v. 40, p. 449, 5207.
37. Делоне Н. Б. «УФН», 1975, т. 115, с. 361.
38. Лукьянов В. К., Титов А. И. «Ядерная физика», 1973, т. 18, с. 306.
39. Зельдович Я. Б. «УФН», 1973, т. 110, с. 139.
40. Тулуб А. В., Фок В. А. «Вестн. Ленингр. ун-та», 1965, т. 16, с. 7; Zernik W. «Phys. Rev.», 1973, v. 132, p. 320; Лебедев И. В. «ТМФ», 1972, т. 11, с. 226.
41. Казанский А. К., Островский В. Н., Соловьев Е. А. «ЖЭТФ», 1976, т. 70, с. 493.
42. Altshuller S., Carlson J. F. «Phys. Rev.», 1954, v. 95, p. 546.
43. Демков Ю. Н. Вариационные принципы в теории столкновений. М., Физматгиз, 1958.
44. Герасимов А. С., Казарновский М. В. «ЖЭТФ», 1976, т. 71, с. 1701.
45. Грошев Л. В. и др. «Phys. Lett.», 1971, v. 34B, p. 293.
46. Тейлор Дж. Теория рассеяния, Пер. с англ. М., «Мир», 1975.
47. Singh S. R., Stauffer A. D. «J. Phys. A», 1975, v. 8, p. 1379.
48. Kharchenko V. F., Storozhenko S. A., Kuzmichev V. E. «Nucl. Phys. A», 1972, v. 188, p. 609; Kharchenko V. F., Petrov N. M., Kuzmichev V. E. «Phys. Lett. B», 1970, v. 32, Кукулин В. И. «Ядерная физика», 1971, т. 14, с. 862.
49. Беляев В. Б., Иргазиев Б. Ф. Там же, 1977, т. 25, с. 450.