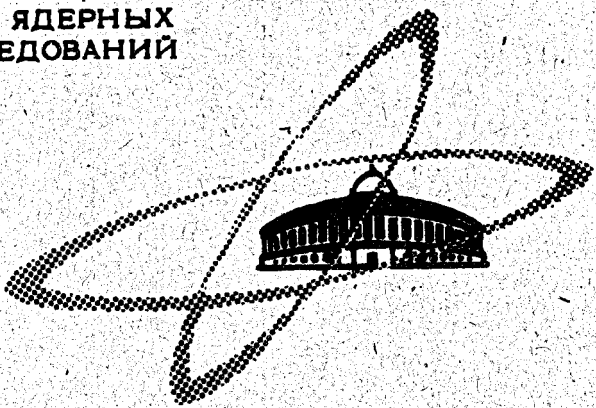


10/11-70

A-62  
ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



P4 - 4907

И.В. Амирханов, А.И. Титов

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ МЕТОДОВ  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

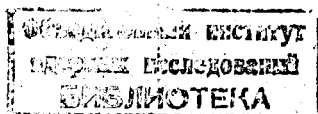
1970

P4 - 4907

И.В. Амирханов, А.И. Титов

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ МЕТОДОВ  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Направлено в журнал "Теоретическая  
и математическая физика"



## В в е д е н и е

Почти все наши знания о природе ядерных взаимодействий при низких энергиях и структуре ядра получены из исследования ядерных реакций. С математической точки зрения рассмотрение каждой реакции с участием  $N$  тел сводится к решению уравнения Шредингера - уравнения в частных производных. Пока не существует общего метода решения этого уравнения, однако в последнее время разработан ряд приближенных методов. Так, в теории ядерных реакций широко используется формализм многоканальной связи /1-4/, в реакциях с малонуклонными системами начинают применяться уравнения Фаддеева /5/.

Перечисленные методы позволяют вычислять приближенные значения параметров реакций (амплитуда рассеяния, фазы рассеяния, характеристики резонансов и т.д.), используя те или иные ограничения на волновую функцию и на гамильтониан системы. Естественно, что преимущество имеют те методы вычисления параметров реакции, которые менее всего чувствительны к сделанным приближениям. Одним из таких методов в задачах рассеяния является вариационный метод. Его отличительной особенностью, по сравнению с вышеперечисленными методами,

является то, что погрешность в определении вычисляемых параметров пропорциональна лишь второму порядку от сделанных приближений в волновой функции.

Все существующие вариационные принципы можно разделить на две группы. В первую группу входят вариационные принципы, основанные на дифференциальном уравнении Шредингера /6,9/, во вторую - на интегральном уравнении Липпмана-Швингера /7,8/.

Вариационный принцип Кона /8/ применялся для описания широкого круга атомных задач /10/. Однако при рассмотрении ядерных реакций с учетом каналов перераспределения и развала непосредственное обобщение метода Кона встречает ряд трудностей /11/.

В первом разделе дана другая (свободная от трудностей) формулировка метода Кона в форме, удобной для непосредственного вычисления амплитуд рассеяния в реакциях с учетом трех частиц, когда открыты все каналы.

В методе Швингера /7,8/ рассматривается функционал

$$[F_{if}] = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle / \langle \Psi_f^{(-)} | V - V G^{(+)} V | \Psi_i^{(+)} \rangle, \quad (1)$$

который приводит к нелинейным уравнениям на неизвестные параметры пробных функций, что сильно затрудняет расчеты. Кроме того, для описания канала развала в реакциях с участием трех тел интегральные уравнения Липпмана-Швингера не применимы, поскольку ядра в них перестают быть ядрами Гильберта-Шмидта /12/. Во втором разделе предлагается способ преодоления этих трудностей на примере задачи трех тел. В третьем разделе мы обсуждаем сделанный выбор пробных функций, а в четвертом разделе вариационные методы, предложенные в первых двух разделах, обобщаются на случай сингулярных потенциалов.

## 1. Вариационный метод Кона

Рассмотрим задачу рассеяния с участием трех частиц, когда открыты все каналы

$$\begin{array}{ll}
 3 + (1+2) \rightarrow 1 + (2+3) & \text{I} \\
 \rightarrow 2 + (1+3) & \text{II} \\
 \rightarrow 3 + (1+2) & \text{III} \\
 \rightarrow 1 + 2 + 3 & \text{IV}
 \end{array} \quad (2)$$

Здесь скобки объединяют частицы, образующие связанную систему (сложная частица). Заметим, что входным каналом может быть любой из каналов в правой части, в зависимости от граничных условий задачи. Кроме того, сложные частицы могут иметь возбужденные состояния, поэтому каждый из каналов (I, II, III) имеет подканалы неупругого рассеяния.

Состояние системы описывается волновой функцией  $\Psi$ , которая удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left[ \sum_{i=1}^3 T_i + \sum_{i < j} V_{ij} \right] \Psi = E \Psi, \quad (3)$$

где  $T_i$  - оператор кинетической энергии частицы с номером  $i$ ,  $V_{ij}$  задает взаимодействие частиц  $i$  и  $j$ .

Нам необходимо решить уравнение (3) с граничными условиями, соответствующими реакции (2), т.е. когда в каналах (I, II, III) асимптотическое выражение функции  $\Psi$  имеет вид:

$$\Psi \rightarrow \sum_{R_i \rightarrow \infty} \sum_{L_1 M_1 n_1=1}^{a_i} \frac{1}{R_i} Y_{L_1 M_1} \phi_{n_1}(\vec{\rho}_{jk}) [\delta_{n_1 \beta} f_{L_1 n_1}(k, R_i) + F_{L_1 M_1 n_1} h_{L_1 n_1}(k, R_i)],$$

$$\Psi \rightarrow 0, \quad R_i \rightarrow 0, \quad (4)$$

в канале развала

$$\Psi \xrightarrow[\rho_{12} \rightarrow \infty]{R_3 \rightarrow \infty} \sum_{L_3 M_3} \sum_{\ell_{12} m_{12}} \frac{1}{R_3 \rho_{12}} Y_{L_3 M_3} Y_{\ell_{12} m_{12}} \int d\epsilon F_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}(\epsilon) h_{L_3}(k_1, R_3) h_{\ell_{12}}(k_2, \rho_{12}),$$

$$\Psi \xrightarrow[\rho_{12} \rightarrow 0]{R_3 \rightarrow 0} 0, \quad (5)$$

или

$$\Psi \xrightarrow[\rho \rightarrow \infty]{} \sum_{(K)} \frac{1}{\rho^2} u_{(K)}(\Omega_5) F_{(K)} h_{(K)}(\rho),$$

$$\Psi \xrightarrow[\rho \rightarrow 0]{} 0. \quad (6)$$

Здесь  $F_{L_1 M_1 \ell_1 m_1}$  - амплитуды рассеяния прямого канала и канала с перераспределением частиц,  $F_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$  или  $F_{(K)}$  - амплитуды рассеяния в канале развала, соответственно, в координатах Якоби ( $\vec{R}_1, \vec{\rho}_{jk}$ ) и обобщенных сферических координатах  $^{12}/(\rho^2 = R_1^2 + \rho_{jk}^2, \Omega_5)$ ,  $\phi_{n_1}(\vec{\rho}_{jk})$  - волновая функция, описывающая связанное состояние двух ( $j+k$ ) тел,  $n_1$  включает в себя все квантовые числа соответствующих двухчастичных состояний. Индекс  $\beta$  символа Кронекера  $\delta_{n_1 \beta}$  задает входной канал,  $a_1$  - число связанных состояний в системе ( $j+k$ ),  $h$  и  $g$  связаны  $^{13}/$  с функциями Бесселя и  $k_{n_1} = \sqrt{\frac{M_1}{\hbar^2}(E - \epsilon_{n_1})}$ ,  $k_1 = \sqrt{\frac{M_3}{\hbar^2}(E - \epsilon)}$ .

Вид граничных условий (4-6) подсказывает, что целесообразно искать волновую функцию в следующем виде:

$$\Psi = X_I(\vec{R}_1, \vec{\rho}_{23}) + X_{II}(\vec{R}_2, \vec{\rho}_{13}) + X_{III}(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}) + X_{IV}(\rho, \Omega_5). \quad (7)$$

Гамильтониан системы, после исключения центра масс системы, можно представить в четырех эквивалентных формах

$$H_i = [ T_{R_i} + T_{p_{jk}} + \sum_{i < j} V_{ij} ], \quad i = 1, 2, 3. \quad (8)$$

$$H_4 = [ T_{\rho} + \Delta \Omega_3 + \sum_{i < j} V_{ij} ].$$

Тогда уравнение (3) можно переписать в виде

$$\sum_{i=1}^{IV} (H_i - E) X_i = 0. \quad (9)$$

В дальнейшем функции  $X_i$  ( $i=I, II, III, IV$ ) будем искать так, чтобы каждая из них обеспечивала асимптотическое поведение  $\Psi$  в своем канале, т.е.  $X_i$  ( $i=I, II, III$ ) обеспечит граничные условия (4), а  $X_{IV}$  обеспечит граничные условия (6).

Теперь вернемся к вариационному принципу. Рассмотрим вариацию функционала

$$I = \int dV \Psi_2 (H - E) \Psi_1 = \int dV \Psi_2 \sum_{i=1}^{IV} (H_i - E) X_i, \quad (10)$$

при произвольной вариации волновой функции

$$\Psi \rightarrow \Psi + \delta \Psi = \sum_{i=1}^{IV} (X_i + \delta X_i), \quad (11)$$

относительно точного значения, удовлетворяющего уравнению (9).

$$\begin{aligned}
\delta I = & \sum_{i=1}^3 \int d\vec{R}_i \oint dS_{\vec{\rho}_{jk}} (\Psi_2 \frac{\partial}{\partial \rho_{jk}} \delta X_i - \delta X_i \frac{\partial}{\partial \rho_{jk}} \Psi_2)_{\rho_{jk} \rightarrow \infty} + \\
& + \sum_{i=1}^3 \int d\vec{\rho}_{jk} \oint dS_{\vec{R}_i} (\Psi_2 \frac{\partial}{\partial R_i} \delta X_i - \delta X_i \frac{\partial}{\partial R_i} \Psi_2)_{R_i \rightarrow \infty} + \\
& + \int d\rho^5 d\Omega_5 (\Psi_2 \frac{\partial}{\partial \rho} \delta X_{iV} - \delta X_{iV} \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi_2)_{\rho \rightarrow \infty}.
\end{aligned} \tag{12}$$

Отметим, что вариация волновой функции на асимптотике приводит к вариации амплитуды рассеяния.

Дальше будем поступать по общему правилу /9/. Например, нам необходимо определить амплитуды перехода из одного подканала  $\beta_1$  в другой подканал  $\beta_2$ . Пробную функцию  $\Psi_1$  необходимо выбрать таким образом, чтобы она имела асимптотику в виде (4) и (6) (индекс у символа Кронекера  $\beta = \beta_1$ ).

Функция  $\Psi_2$  строится искусственно таким образом /9/, чтобы падающая волна была в том канале, амплитуду перехода в который нам необходимо найти ( $\beta = \beta_2$ ). После непосредственной подстановки асимптотики  $\Psi_1, \Psi_2$  в (12) получим

$$\delta I = -4\pi \delta F_{L_i M_i n_i}^{\beta_1 \beta_2} \tag{13}$$

Тогда функционал

$$J_{\beta_1 \beta_2} = \frac{1}{4\pi} I + F_{L_i M_i n_i}^{\beta_1 \beta_2} \tag{14}$$

будет стационарным относительно произвольных вариаций волновых функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  и его стационарное значение равно соответствующей амплитуде.



Для непосредственного применения функционала (14) остается лишь указать способ выбора пробных функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  (или  $x_i$  ( $i=I, II, III, IV$ )). Обоснование сделанного выбора пробных функций изложено в третьем разделе, здесь мы приведем лишь окончательные результаты. Чтобы удовлетворить граничным условиям (4) и (6), пробные функции удобно искать в виде

$$X_i = \sum_{L_i M_i} \sum_{n_i=1}^{a_i} \frac{1}{R_i} Y_{L_i M_i} \phi_{n_i}(\vec{\rho}) [\delta_{n_i} f_{L_i} + \sum_{\beta_1} A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i} X_{\beta_1}^{\approx L_i M_i}], i=1,2,3. \quad (15)$$

$$X_{IV} = \sum_{(K)} \frac{1}{\rho^2} u_{(K)}(\Omega) \sum_{\gamma} A_{\gamma}^{(K)} X_{\gamma}^{\approx(K)}$$

где

$$X_{\beta_1}^{\approx L_i M_i} = \int dR_i' G^{(+)}(R_i, R_i') \Phi_{\beta_1}(R_i'), i=1,2,3.$$

$$X_{\gamma}^{\approx(K)} = \int d\rho' G^{(+)}(\rho; \rho') \Phi_{\gamma}(\rho')$$

известные функции.

Амплитуды рассеяния определяются через введенные величины по формуле

$$F_{L_i M_i n_i}^{\approx L_i M_i} = \sum_{\beta_1} A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i} F_{\beta_1}^{\approx L_i M_i}, \quad (16)$$

$$F_{(K)} = \sum_{\gamma} A_{\gamma}^{(K)} F_{\gamma}^{\approx(K)}$$

где

$$F_{\beta_1}^{\approx L_i M_i} = -\frac{1}{k n_i} \int f_{L_i}(k_{n_i}, R_i) \Phi_{\beta_1} dR_i$$

$$F_{\gamma}^{\approx(K)} = -\frac{1}{\kappa} \int f_{(K)} \Phi_{\gamma} d\rho.$$

После подстановки (15) и (16) в функционал (14) мы получим

$$J(A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i}, A_{\gamma}^{(K)}), \beta_1 = 1, 2, \dots, \infty, \gamma = 1, 2, \dots, \infty, i = 1, 2, 3. \quad (17)$$

Значения неизвестных коэффициентов  $A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i}$  и  $A_{\gamma}^{(K)}$  определяются путем решения системы алгебраических уравнений

$$\frac{\partial J}{\partial A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i}} = 0, \frac{\partial J}{\partial A_{\gamma}^{(K)}} = 0, \beta_1 = 1, 2, \dots, \infty, \gamma = 1, 2, \dots, \infty. \quad (18)$$

После подстановки найденных  $A_{\beta_1}^{n_i L_i M_i}$  и  $A_{\gamma}^{(K)}$  в (16) найдем стационарные значения амплитуд рассеяния.

### Вариационный метод Швингера

Как уже отмечалось, вариационный принцип Швингера не нашел достаточного применения ввиду того, что он приводит к сложным нелинейным уравнениям на неизвестные параметры пробных функций. Обобщение его на реакции типа (2) сталкивается с принципиальной трудностью, которая состоит в том, что ядра соответствующих уравнений Липпмана-Швингера перестают быть ядрами Гильберта-Шмидта /12/.

Вначале мы покажем, каким образом можно получить линейные уравнения (вместо нелинейных). Для этого рассмотрим функционал

$$[F_{i,r}] = \langle \Psi_r^{(-)} | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_r | V | \Psi_i^{(+)} \rangle - \langle \Psi_r^{(-)} | V - V G^{(+)} V | \Psi_i^{(+)} \rangle, \quad (19)$$

где функции  $\Psi_i^{(+)}$  и  $\Psi_r^{(-)}$  удовлетворяют уравнению Липпмана-Швингера. Функционал (19) является стационарным при произвольных вариациях  $\Psi_i^{(+)}$  и  $\Psi_r^{(-)}$  относительно точных значений, удовлетворяющих урав-

нению Липпмана-Швингера, а стационарное значение равно амплитуде рассеяния.

Однако, поскольку волновая функция  $\Psi' = A \Psi$  также удовлетворяет уравнению Липпмана-Швингера, то значение полученной стационарной амплитуды не будет однозначным. Часто от этой неоднозначности избавляются путем замены функционала (19) на (1) (что и приводит к нелинейным уравнениям). Но мы поступим по-другому. Для того чтобы использовать функционал в форме (19), необходимо каким-то способом "нормировать" пробные функции  $\Psi$ . Наиболее просто это сделать путем выбора пробной функции следующим образом:

$$\Psi_{i(f)} = \Phi_{i(f)} + \sum_a A_a^{i(f)} \chi_a^{i(f)}, \quad (20)$$

где  $\Phi_{i(f)}$  - падающая волна и  $\chi_a^{i(f)}$  - известные функции (подробно см. в третьем разделе). Тогда функционал (19) дает стационарное и однозначное значение амплитуды и приводит к линейной системе алгебраических уравнений на коэффициенты  $A_a^{i(f)}$ .

Теперь рассмотрим вторую трудность вариационного принципа Швингера. Мы покажем, что уравнение Шредингера (3) можно эквивалентным образом представить в виде системы интегро-дифференциальных уравнений, которые далее мы запишем в форме, формально совпадающей с уравнением Липпмана-Швингера. Однако смысл элементов, входящих в полученное уравнение, будет иным, и указанная трудность, таким образом, будет преодолена. Для реализации описанной схемы будем искать волновую функцию в виде

$$\Psi = \sum_{i=1}^3 \sum_{n_i=1}^{a_i} \chi_{n_i}(\vec{R}_i) \phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk}) + X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}). \quad (21)$$

Подставляя (21) в (8), получим /3/

$$T_{n_i L_i}^{L_i M_i} X_{n_i}^{L_i M_i} = J_{n_i}^{L_i M_i}, \quad i=1,2,3, \quad T_{L_3 \ell_{12}} \psi_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}} = J_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}, \quad (22)$$

где

$$T_{n_i L_i} = \left[ \frac{d^2}{dR_i^2} + k_{n_i}^2 - \frac{L_i(L_i+1)}{R_i^2} \right], \quad i = 1,2,3, \\ T_{L_3 \ell_{12}} = \left[ \frac{\hbar^2}{2M_3} \left( \frac{d^2}{dR_3^2} + k_1^2 - \frac{L_3(L_3+1)}{R_3^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu_{12}} \left( \frac{d^2}{d\rho_{12}^2} + k_2^2 - \frac{\ell_{12}(\ell_{12}+1)}{\rho_{12}^2} \right) \right]. \quad (23)$$

и

$$J_{n_i}^{L_i M_i} = - \int d\Omega_{R_i} d\rho_{jk}^{\rightarrow} Y_{L_i M_i n_i}^* \phi_{n_i}^* (\rho_{jk}^{\rightarrow}) \left\{ - \sum_{p=1}^3 \frac{M_i}{\hbar^2} v_p \sum_{n_p=1}^{a_p} X_{n_p} \phi_{n_p} + \right. \\ \left. + \sum_{n_j=1}^{a_j} \phi_{n_j} \frac{M_i}{M_j} T_{n_j L_j} X_{n_j} + \sum_{n_k=1}^{a_k} \phi_{n_k} \frac{M_i}{M_k} T_{n_k L_k} X_{n_k} + \frac{M_i}{\hbar^2} [T_{L_3 \ell_{12}} - v_{123}] X \right\}, \quad (24)$$

$$J_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}} = \int d\Omega_{R_3} d\Omega_{\rho_{12}}^{\rightarrow} Y_{L_3 M_3}^* Y_{\ell_{12} m_{12}}^* [v_{123} X + \sum_{p=1}^3 \sum_{n_p=1}^{a_p} \phi_{n_p} \frac{M_p}{\hbar^2} [T_{n_p L_p} - v_p] X_{n_p}],$$

$$v_{123} = (V_{12} + V_{13} + V_{23}), \quad v_j = (V_{1j} + V_{jk}).$$

Несмотря на то, что полученная система (22) является сложной системой интегро-дифференциальных уравнений, она обладает важным свойством, а именно,  $J_{n_i}^{L_i M_i}$  и  $J_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$  являются квадратично интегрируемыми функциями /3/. Поэтому (22) можно переписать в интегральной форме с учетом граничных условий (4) и (6), налагаемых на  $X_{n_i}^{L_i M_i}$  и  $\psi_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$

$$\chi_{n_1}^{L_1 M_1} = \delta_{n_1} \beta f_{L_1} + \int dR'_1 G^{(+)}(R_1; R'_1) J_{n_1}^{L_1 M_1}(R'_1),$$

$$\Psi_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}^{(+)} = \int G^{(+)}(R_3 \rho_{12}; R'_3 \rho'_{12}) J^{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}(R'_3; \rho'_{12}) dR'_3 d\rho'_{12} \quad (25)$$

где

$$G^{(+)}(R_1; R'_1) = \begin{cases} -\frac{1}{k_{n_1}} f_{L_1}(k_{n_1} R'_1) h_{L_1}(k_{n_1} R_1), & R_1 > R'_1, \\ -\frac{1}{k_{n_1}} f_{L_1}(k_{n_1} R_1) h_{L_1}(k_{n_1} R'_1), & R'_1 > R_1, \end{cases} \quad (26)$$

$$G^{(+)}(R_3 \rho_{12}; R'_3 \rho'_{12}) = -\frac{1}{2\pi i} \int d\epsilon G_{\epsilon}^{(+)}(\rho_{12}; \rho'_{12}) G_{E-\epsilon}^{(+)}(R_3; R'_3)$$

функции Грина /14/.

Полученную систему удобно представить в более компактном виде, по форме совпадающем с уравнениями Липпмана-Швингера:

$$\hat{\chi} = \hat{\Phi} + \hat{G} \hat{W} \hat{\chi}. \quad (27)$$

Здесь  $\hat{\chi}$  - вектор, компонентами которого являются функции  $\chi_{n_1}^{L_1 M_1}$  и  $\psi_{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$ ; компоненты вектора  $\hat{\Phi}$  соответствуют падающим волнам. Так, если частица падает только в одном канале, то  $\hat{\Phi}$  - однокомпонентный вектор.  $\hat{G}$  - диагональная матрица, элементами которой является функция Грина в соответствующем канале (26),  $\hat{W}$  - квадратная матрица, состоящая из интегро-дифференциальных операторов (явный вид нетрудно получить из (24)).

Дальше рассуждения проводятся по общей схеме /8,9/. Если нас интересует амплитуда перехода из канала  $i$  в канал  $f$ , то необходимо рассматривать два уравнения типа (27)

$$\begin{aligned}\hat{\chi}_i^{(+)} &= \hat{\Phi}_i + \hat{G} \hat{W} \hat{\chi}_i^{(+)} \\ \hat{\chi}_f^{(-)} &= \hat{\Phi}_f + \hat{G} \hat{W} \hat{\chi}_f^{(-)}\end{aligned}\quad (28)$$

Амплитуда рассеяния определяется по формуле

$$F_{if} = \langle \hat{\chi}_f^{(-)} | \hat{W} | \hat{\Phi}_i \rangle = \langle \hat{\Phi}_f | \hat{W} | \hat{\chi}_i^{(+)} \rangle. \quad (29)$$

Тогда можно написать вариационный принцип для определения амплитуды перехода, который формально имеет вид

$$[F_{if}] = \langle \hat{\chi}_f^{(-)} | \hat{W} | \hat{\Phi}_i \rangle + \langle \hat{\Phi}_f | \hat{W} | \hat{\chi}_i^{(+)} \rangle - \langle \chi_f^{(-)} | \hat{W} - \hat{W} \hat{G} \hat{W} | \chi_i^{(+)} \rangle, \quad (30)$$

$$\delta [F_{if}] = 0.$$

Пробные функции выбираются в следующем виде:

$$\begin{aligned}\chi_{n_i}^{L_i M_i} &= \delta_{n_i} \beta_{L_i} + \sum A_{\beta_i}^{n_i L_i M_i} \chi_{\beta_i}^{L_i n_i} \\ \psi_{L_3 M_3} \ell_{12}^{m_{12}} &= \sum_{\gamma\nu} A_{\gamma\nu}^{L_3 M_3} \ell_{12}^{m_{12}} \psi_{\gamma\nu}^{L_3 \ell_{12}}\end{aligned}\quad (31)$$

где

$$\tilde{\chi}_{\beta_1}^{L_1 M_1} = \int dR_1 G^{(+)}(R_1; R_1') \Phi_{\beta_1}(R_1'), \quad i = 1, 2, 3. \quad (32)$$

$$\tilde{\psi}_{\gamma\nu}^{L_3 \ell_{12}} = \int dR_3' d\rho_{12}' G^{(+)}(R_3 \rho_{12}; R_3' \rho_{12}') \Phi_{\gamma}(R_3') \Phi_{\nu}(\rho_{12}')$$

известные функции.

Теперь, поступая точно так же, как и в предыдущем разделе, мы можем получить систему алгебраических уравнений на неизвестные коэффициенты  $A_{\beta_1}^{n_1 L_1 M_1}$  и  $A_{\gamma\nu}^{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$ .

Подставляя эти коэффициенты в (30), найдем стационарные значения амплитуд рассеяния.

### 3. Выбор пробных функций

Успех вариационных принципов в большой степени зависит от удачного выбора пробных функций. Пробные функции должны быть близкими к точной волновой функции и должны обеспечивать правильную асимптотику волновой функции. Здесь мы, используя результаты работ /15/, предлагаем один способ выбора пробных функций, удовлетворяющих этим требованиям.

Для простоты рассмотрим двухчастичное  $s$ -рассеяние. Тогда решение уравнения Шредингера в системе центра масс удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\phi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin kr + F e^{ikr},$$

$$\phi(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0. \quad (33)$$

Используя (33), уравнение Шредингера перепишем в интегральной форме

$$\phi = \sin kr + \int G V \phi, \quad (34)$$

где  $G$  - функция Грина.

Подставляя следующее разложение

$$V(r) \phi = \sum_n A_n \Phi_n \quad (35)$$

в (34), мы получим

$$\phi = \sin kr + \sum_n A_n \tilde{\phi}_n, \quad (36)$$

где

$$\tilde{\phi}_n = \int G(r, r') \Phi_n(r') dr' - \quad (37)$$

известная функция.

Таким образом, мы получили рецепт построения "пробной функции" (36), используя некоторый полный набор известных функций  $\Phi_n$  (разложение (35) играет лишь вспомогательную роль). Функция Грина в (37) обеспечит выполнение граничных условий (33).



Теперь нетрудно убедиться, что сделанный выбор пробных функций (15) и (31) также удовлетворяет вышесказанным требованиям. Для этого рассмотрим систему уравнений (22). Поскольку  $J_{n_1}^{L_1 M_1}$  и  $J^{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}}$  квадратично интегрируемые функции, то их можно разложить в обобщенный ряд Фурье по некоторому полному набору известных функций

$$J_{n_1}^{L_1 M_1} = \sum_{\beta_1} A_{\beta_1}^{L_1 M_1 n_1} \Phi_{\beta_1}, \quad i = 1, 2, 3, \quad J^{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}} = \sum_{\gamma \nu} A_{\gamma \nu}^{L_3 M_3 \ell_{12} m_{12}} \Phi_{\gamma} \Phi_{\nu}. \quad (38)$$

Подставляя (38) в (25), мы получаем пробные функции в виде (31).

#### 4. Вариационный метод для сингулярных потенциалов

Если в потенциале взаимодействия имеется твердая сердцевина (кор), то вариационные методы, развитые в первых двух разделах, непосредственно не применимы. Это связано с тем, что при вычислении матричных элементов система алгебраических уравнений сталкивается с расходимостями, вызываемыми кором. Для прямых методов эта трудность была преодолена в работе /4/. Здесь мы покажем, каким образом нужно обобщать вариационные методы на задачи с кором.

Пусть каждый потенциал  $V_{ij}$  ( $i \neq j = 1, 2, 3$ ) имеет соответственно бесконечную сердцевину при  $\rho_{ij} \leq a_{ij}$  ( $i \neq j = 1, 2, 3$ ), и гладкая часть потенциала удовлетворяет условию

$$\int_{a_{ij}}^{\infty} \rho_{ij} |V(\rho_{ij})| d\rho_{ij} < \infty. \quad (39)$$

Тогда волновая функция должна удовлетворять (кроме граничных условий (4), (5) и (6)) дополнительному условию, т.е.

$$V_{jk} \Psi = 0, \quad 0 \leq \rho_{jk} < a_{ij}, \quad i \neq k = 1, 2, 3. \quad (40)$$

Так как  $V_{jk}(\rho_{jk})\Psi$  является квадратично интегрируемой функцией по переменной  $\rho_{jk}$  (в чем нетрудно убедиться, используя условия (39) и (40)), то уравнение Шредингера можно переписать в следующем виде. /4/

$$(T_{R_i} + T_{\rho_{jk}} - E)\Psi + \sum_{j < k} \sum_{\ell_{jk}^m} \Phi_{\alpha}(\rho_{jk}) Y_{\ell_{jk}^m} \int d\rho_{jk}^{\vec{\rho}} Y_{\ell_{jk}^m}^* \Phi_{\alpha}^*(\rho_{jk}) V_{jk} \Psi. \quad (41)$$

Здесь  $\Phi_{\alpha}$  — полный набор известных функций. В качестве полного набора  $\Phi_{\alpha}$  необходимо брать функции, ортонормированные соответственно в области от  $\rho_{jk} = a_{ij}$  до  $\infty$ , что обеспечивает выполнение условия (40).

В этом уравнении (41) содержится только гладкая часть потенциала, поэтому трудность бесконечной сердцевины формально преодолена. Теперь, повторяя все выкладки предыдущих разделов, мы можем построить вариационные принципы для этого случая.

В заключение авторы благодарят Е.Н. Захарьева, О. Лхагву, Ю.И. Фенина и В.Л. Шмолина за полезные дискуссии, связанные с темой данной работы.

#### Л и т е р а т у р а

1. Н. Feshbach, Ann. of Phys., 5, 357 (1958); 19, 287 (1962).  
U. Fano, Phys.Rev., 124, 1866 (1961).  
Т.Г. Ефименко, В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. ЯФ, 7, 1968.  
Ann. of Phys., 47, 275 (1968).
2. Ю.А. Симонов. ЯФ, 3, 630 (1966).  
А.М. Бадаля, Ю.А. Симонов. ЯФ, 3, 1032 (1966).

3. И.В. Амирханов, З.К. Смедарчина, Е.Х. Христова. Препринт ОИЯИ Р4-4804, Дубна, 1969.
4. И.В. Амирханов, О. Лхагва, З.К. Смедарчина. Препринт ОИЯИ Р4-4863, Дубна, 1969.
5. Л.Д. Фаддеев. ЖЭТФ, 39, 1459, 1960.  
А.Г. Ситенко, В.Ф. Харченко. Препринт ИТФ, АН УССР, 68-11, Киев, 1968.
6. W. Kohn. Phys.Rev., 84, 495 (1951);  
L. Hulthen, S. Skavlem, Phys.Rev., 88, 484, 1952.  
И.Е. Тамм. ЖЭТФ 19, 74, 1949.
7. I. Schwinger. Phys.Rev., 72, 742, 1947.
8. C.I. Joachain. Symposium on Theoretical Physics and Mathematics, vol. 8, Plenum Press, 1968.
9. Ю.Н. Демков. "Вариационные принципы в теории столкновений". Из-во физ.мат. литературы, Москва, 1958.
10. H.S. Massey, B.L. Moiseiwitsch. Proc.Roy.Soc., A227, 38, 1954;  
C. Schwartz. Ann.Phys., 16, 36 (1961); Phys.Rev., 124, 1468 (1967).
11. I. Nuttal. Phys.Rev.Lett., 19, N.8, 1967.
12. Р. Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц. Из-во "Мир", 1969.
13. Т. Sasakawa. Suppl. of the Prog.Theor.Phys., N.27, 1963.
14. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Из-во "Наука", М., 1966.
15. И.В. Амирханов, В.С. Гурьянов. Препринт ОИЯИ Р4-3741, Дубна, 1968.  
Phys.Letters 28A, N.5, 346 (1968).
- И.В. Амирханов, М.А. Касымжанов. Препринт ОИЯИ Р4-4335, Дубна 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 января 1970 года.