

С 323.3

3-383

18/IV



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б.Н. Захарьев, С.Н. Соколов

P-1593

О ВИРТУАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ
СЛОЖНОЙ ЧАСТИЦЫ

*Ann. Physik, 1965, Bd 15,
h. 3/4, S. 183-191.*

Дубна 1964

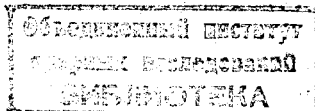
Б.Н. Захарьев, С.Н. Соколов

P-1593

С 323.3

3-383

О ВИРТУАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ
СЛОЖНОЙ ЧАСТИЦЫ



Дубна 1964

2394/3 чр.

1. Введение

Квантовомеханическая задача трех тел представляет большую трудность как для качественного исследования, так и для численного решения. Часть этих трудностей связана с тем, что соответствующее уравнение Шредингера.

$$\left[- \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_1, x_2, x_3) \right] \Psi = 0; \quad |\Psi(+\infty)| < \infty \quad (1)$$

является в значительной мере символическим, не содержащим в себе указаний, как фактически найти волновую функцию (прямая замена этого уравнения конечно-разностным приводит к вычислительно неустойчивым процедурам и дает растущие на бесконечности решения). Поэтому уравнение (1) обычно заменяют формально эквивалентными ему уравнениями, носящими более конструктивный характер, в частности, бесконечной системой связанных одномерных интегро-дифференциальных уравнений (см., например, работы /1-3/). Бесконечную систему затем явно или неявно обрывают, заменяя конечным числом уравнений. Считается, что обрывание не сильно изменяет волновую функцию Ψ , так как отброшенные уравнения относятся к высоким виртуальным состояниям системы, которые по физическим соображениям не должны играть большой роли (так, в частности, поступали и авторы настоящей статьи в работах /2,3/).

Оправдание обрывания системы уравнений по "физическим соображениям" является тревожным признаком, ибо (независимо от возможной правильности окончательных результатов) свидетельствует о неумении формализовать эти самые "соображения" и написать уравнения в таком виде, чтобы их основные свойства, включая возможность обрывания, следовали сразу из самой написанной системы. Кроме того, при интуитивном подходе остаются нерешенными несколько неприятных вопросов.

Во-первых, не ясно, не является ли бесконечная система связанных уравнений чисто символической, т.е. существует ли хотя бы одна сходящаяся процедура получения решения такой бесконечной системы. Во-вторых, даже если бесконечная система "хорошая", не ясно, велика ли ошибка, возникающая при замене ее конечной системой и не теряется ли при этом каких-либо качественных эффектов. Действительно, даже если каждое виртуальное состояние вносит малый вклад в Ψ , то когерентный эффект всех высших состояний может быть велик. В третьих, не ясно, насколько существен произвол, который имеется в определении виртуальных состояний - то есть в вы-

боре системы функций Φ_n , по которым разлагается полная волновая функция Ψ - и в каком случае какая система функций Φ_n предпочтительна.

В настоящей работе сделана попытка хотя бы в простейшем частном случае одномерного движения рассмотреть явно бесконечную систему уравнений и выяснить фактическое положение вещей. В разделе 2 выводится изучаемая система уравнений в дифференциальной и интегральной форме. В разделе 3 для конкретного потенциала V_{12} и произвольных потенциалов V_{13} , V_{23} даются населенности высших виртуальных состояний и погрешности, вносимой отбрасыванием этих состояний. В разделе 4 доказывается, что при сохранении всех виртуальных состояний решение бесконечной системы интегральных уравнений может быть получено методом Фредгольма. В Приложении выводятся оценки коэффициентов систем дифференциальных и интегральных уравнений при двух различных выборах полной системы функций Φ_n .

2. Уравнения движения в интегральной форме

Гамильтониан системы трех частиц, взаимодействующих между собой при помощи потенциалов $V_{12}(x_1 - x_2)$, $V_{23}(x_2 - x_3)$, $V_{13}(x_1 - x_3)$, имеет вид

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} + V_{12} + V_{23} + V_{13}. \quad (2)$$

Допустим, что частицы 1, 2 находятся во взаимно связанном состоянии, так что их можно рассматривать как одну сложную частицу, двигающуюся в поле частицы 3. Обозначим координату центра масс всех трех частиц через z , координату относительного движения частиц 1, 2 через y , а координату относительного движения сложной и простой частиц через x :

$$z = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad y = x_1 - x_2; \quad x = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} - x_3. \quad (3)$$

В этих координатах полная волновая функция $\Psi(x, y, z)$ имеет вид:

$$\Psi(x, y, z) = (c_1 e^{ikz} + c_2 e^{-ikz}) \Psi(x, y). \quad (4)$$

Не зависящая от z функция $\Psi(x, y)$ удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\Psi''}{2M_1} - \frac{\Psi''}{2M_2} + [V_{12}(y) + V_{13}(x + By) + V_{23}(x - Ay)] \Psi = E \Psi, \quad (5)$$

где штрих означает производную по x , точка - производную по y , приведенные массы M_1, M_2 и коэффициенты A, B равны

$$M_1 = \frac{(m_1 + m_2)m_3}{m_1 + m_2 + m_3}, \quad M_2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (6)$$

$$A = \frac{m_1}{m_1 + m_2}, \quad B = \frac{m_2}{m_1 + m_2}.$$

Мы будем рассматривать задачу, когда из $-\infty$ падает поток сложных частиц в некотором состоянии по внутреннему движению; в области, где $V_{13} + V_{23}$ отличен от константы, часть частиц отражается, а часть проходит вперед, причем в процессе рассеяния сложная частица может менять свое внутреннее состояние. Для детального изучения этих процессов волновую функцию $\Psi(x, y)$ при каждом данном x полезно разложить по полной системе функций $\Phi_n(y)$, соответствующих различным внутренним состояниям сложной частицы

$$\Psi(x, y) = \sum_n \phi_n(x) \Phi_n(y), \quad (7)$$

$$\phi_n(x) = \int \Psi(x, y) \Phi_n^*(y) dy \quad (8)$$

и где функции Φ_n могут зависеть от x как от параметра $\Phi_n = \Phi_n(y; x)$. В области, где $V_{13} + V_{23} \neq 0$, понятие "внутреннего состояния" является несколько неопределенным и в выборе системы функций $\Phi_n(y; x)$ имеется некоторая свобода. Практически используется одна из следующих двух систем функций:

а) В качестве Φ_n берутся так называемые свободные волновые функции Φ_n^0 , удовлетворяющие уравнению

$$-\frac{1}{2M_1} \Phi_n'' + V_{12} \Phi_n = E_n^0 \Phi_n. \quad (9)$$

В этом случае, подставляя разложение (7) в (5) и используя (9), получаем

$$\sum_n \Phi_n^0 \left[-\frac{1}{2M_1} \phi_n'' + \phi_n (E_n^0 + V_{13} + V_{23} - E) \right] = 0. \quad (10)$$

Умножая (10) на $-\Phi_m^0$ и интегрируя по y , получаем для $\phi_m(x)$ систему зацепленных дифференциальных уравнений

$$\phi_m'' - 2M_1 (E_n^0 + \Delta E_n^0 - E) \phi_m = \sum_n W_{mn} \phi_n, \quad (11)$$

где

$$\Delta E_m^0(x) = \int (V_{13} + V_{23}) \Phi_m^0{}^2 dy, \quad (12)$$

$$0 \text{ при } m=n$$

$$W_{mn}(x) = \begin{cases} 2M_1 \int (V_{13} + V_{23}) \Phi_n^0 \Phi_m^0 dy, & \text{при } m \neq n \end{cases}$$

б) В качестве функций Φ_n берутся мгновенные функции состояний сложной частицы при фиксированном положении третьей частицы, т.е. при фиксированном x . Они удовлетворяют уравнению

$$-\frac{1}{2M_2} \Phi_n'' + (V_{12} + V_{23} + V_{13}) \Phi_n = E_n(x) \Phi_n \quad (13)$$

и зависят от x как от параметра. Подставляя (7) в (5), используя (13), домножая на $-\Phi_m(y;x)$ и интегрируя по y , получаем для $\phi_m(x)$ систему зацепленных дифференциальных уравнений

$$\phi_m'' - 2M_1(E_m + \Delta E_m - E) \phi_m = -\sum_n K_{mn} \phi_n - 2\sum_n Q_{mn} \phi_n \quad (14)$$

где введены обозначения

$$\Delta E_m(x) = -\frac{1}{2M_1} \int \Phi_m \Phi_m'' dy = -\frac{1}{2M_1} \int (\Phi_m')^2 dy,$$

$$Q_{mn} = \int \Phi_m \Phi_n' dy, \quad Q_{mm} = \int \Phi_m \Phi_m' dy = 0, \quad (15)$$

0 при $m=n$

$$K_{mn} = \begin{cases} \int \Phi_m \Phi_n'' dy & \text{при } m \neq n. \end{cases}$$

Вне области взаимодействия, где $V_{12}' + V_{23}' = 0$, функции Φ_n совпадают с Φ_n^0 , уравнения (11) совпадают с (14) и движение сложной частицы в каждом состоянии m совершается независимо:

$$\phi_m'' - 2M_1(E_m - E) \phi_m = 0. \quad (16)$$

Оценки величин ΔE , W , K , Q сделаны в Приложении. Из этих оценок следует, что при разрывных внешних потенциалах V_{12} , V_{23} коэффициенты зацепления в системах (11), (14) при больших m , n имеют одинаковое асимптотическое поведение. При гладких V_{12} , V_{23} зацепление в системе (4) убывает с m быстрее, чем в (11).

Запишем уравнения (11), (14) в интегральной форме. Обозначим два частных решения уравнения

$$g'' - 2M_1(E_m + \Delta E_m - E)g = 0 \quad (17)$$

через g_{m1} , g_{m2} и условимся их выбирать так, чтобы для тех m , для которых $E_m - E > 0$, решение $g_{m1}(x)$ при $x \rightarrow \infty$ убывало экспоненциально, а решение $g_{m2}(x)$ убывало при $x \rightarrow -\infty$. Для тех m , для которых $E_m - E < 0$, будем считать, что в решении $g_{m1}(x)$ при $x \rightarrow \infty$ присутствует только волна, идущая в положительном направлении, а второе решение связано с первым соотношением $g_{m1} = i g_{m2}^*$. Кроме того все решения подчиним условию нормировки

$$g_{m1}' g_{m2} - g_{m1} g_{m2}' = 1. \quad (18)$$

От функций ϕ_m , ϕ_m' удобнее перейти к их комбинациям

$$\begin{aligned} \phi_{m1} &= g_{m1} (-\phi_m g_{m2}' + \phi_m' g_{m2}), \\ \phi_{m2} &= g_{m2} (\phi_m g_{m1}' - \phi_m' g_{m1}); \\ (\phi_m - \phi_{m1} + \phi_{m2}, \phi_m' - \phi_{m1}' + \phi_{m2}') &= \phi_m \begin{pmatrix} g_{m1} & g_{m2}' \\ g_{m1}' & g_{m2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (19)$$

Функции ϕ_{m1} , ϕ_{m2} удовлетворяют системе дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{aligned} \left(\frac{\phi_{m1}}{g_{m1}}\right)' &= g_{m2} \sum_n (F_{mn1} \phi_{n1} + F_{mn2} \phi_{n2}), \\ \left(\frac{\phi_{m2}}{g_{m2}}\right)' &= -g_{m1} \sum_n (F_{mn1} \phi_{n1} + F_{mn2} \phi_{n2}), \end{aligned} \quad (20)$$

где для разложений по Φ_n^0 и Φ_n , соответственно,

$$F_{mn1} = W_{mn}, \quad F_{mn2} = -K_{mn} - 2Q_{mn} \frac{g_{n1}'}{g_{n1}}. \quad (21)$$

Систему (20) можно переписать в следующей интегральной форме:

$$\begin{aligned} \phi_{m1} &= g_{m1} \int_{-\infty}^x g_{m2} \sum_n (F_{mn1} \phi_{n1} + F_{mn2} \phi_{n2}) dx + c_{m1} g_{m1}, \\ \phi_{m2} &= g_{m2} \int_x^{\infty} g_{m1} \sum_n (F_{mn1} \phi_{n1} + F_{mn2} \phi_{n2}) dx + c_{m2} g_{m2}, \end{aligned} \quad (22)$$

где в соответствии с граничным условием $|\phi(\pm\infty)| < \infty$ константы c_{m1} отличны от нуля только при $E_m < E$. В системе уравнений (22) пределы интегрирования выбраны так, чтобы интегрирование проводилось всегда в сторону убывания стоящих под знаком интеграла функций g_{m1} .

3. Возбуждение высших состояний

Система уравнений (22) имеет такое строение, что в правой части уравнения для каждого из реальных состояний стоит сумма по всем возбужденным состояниям, в том числе и высшим виртуальным состояниям. При обрыве системы волновые функции высших состояний полагаются равными нулю, что вносит в правую часть уравнений

некоторую погрешность. В этом разделе мы попытаемся оценить вероятность возбуждения виртуальных состояний и максимум модуля погрешности, вносимой в правую часть уравнений (22) при откидывании высших состояний.

Вероятности возбуждения и другие свойства системы (22) зависят, разумеется, от величины коэффициентов связи $F_{mnl}(x)$ и скорости убывания функций $g_{mi}(x)$. Мы разберем подробно частный случай, когда потенциал взаимодействия $V_{12}(y)$ имеет вид бесконечной прямоугольной ямы шириной $2a$:

$$V_{12}(y) = \begin{cases} 0 & \text{при } |y| < a \\ \infty & \text{при } |y| \geq a \end{cases} \quad (23)$$

Мы покажем, что вероятность возбуждения $|\phi_m|^2$ быстро падает с ростом m (как $\frac{1}{m^6}$).

Есть основания полагать, что для потенциалов другой формы (например, осцилляторного) функции $|\phi_m|^2$ также будут быстро падать с m . Соответствующие оценки могут быть получены теми же приемами, что для потенциала (23). Изменение формализма потребуется только в противоположном (по сравнению с (23)) крайнем случае, когда потенциал V_{12} имеет непрерывный спектр. Этот физически актуальный случай авторы предполагают рассмотреть в дальнейших работах.

Вернемся к потенциалу (23). Как показано в Приложении, разложение по системе свободных функций $\Phi_m^0(y)$ и по "скользящей" системе $\Phi_m(y; x)$ при больших m дает очень близкие результаты и в обоих случаях функции $F(x)$ приводит к оценке

$$|F_{mnl}(x)| < \frac{1}{|m-n|} [a \text{Var}_{23} V_{23}(x-Ay) + \beta \text{Var}_{13} V_{13}(x+By)], \quad (24)$$

где a, β - некоторые константы. Очевидно, что при потенциалах V_{13}, V_{23} с ограниченной вариацией функции F_{mnl} ограничены (напомним, что $F_{mnl} \equiv 0$). Вводя в дальнейшем для максимума модуля функций краткое обозначение

$$\bar{F} = \max_x |F(x)|, \quad (25)$$

мы для F_{mnl} получаем соотношение

$$\bar{F}_{mnl} = z \frac{\bar{\rho}}{|m-n|}, \quad (26)$$

где

$$\rho = \alpha \text{Var}_{23} V_{23} + \beta \text{Var}_{13} V_{13}, \quad (27)$$

а z здесь и ниже - некоторая константа, по модулю меньшая единицы.

В правые части системы (22) входят также интегралы от g_{mi} . Нетрудно убедиться, что при всех $E_m > E$ в силу нормировки (18) для них справедлива оценка

$$|\int_{x'} g_{m2}(x) dx| = z \frac{\mu}{\pi^2}, \quad (28)$$

$$|\int_x g_{m1}(x) dx| = z \frac{\mu}{\pi^2},$$

где μ - некоторая константа, близкая к $8M_2 a^2 \pi^{-2}$ (см. Приложение).

Беря от правой, а затем и левой части уравнений (22) максимум модуля и учитывая (26), (28), при $E_m > E$ получаем систему линейных уравнений

$$\bar{\phi}_m = z \sum_{n \neq m} \frac{2\mu}{\pi^2} \frac{\bar{\rho}}{|m-n|} \bar{\phi}_n \quad (29)$$

(в (29) учтено, что, согласно (19) и (18), $\phi_{m1} + \phi_{m2} = \phi_m$). Из (29) видно, что, хотя коэффициенты связи F_{mnl} максимальны для соседних состояний и при $n=m+1$ не убывают с m , взаимное влияние состояний убывает с ростом m и для высших состояний система (22) становится почти расщепленной.

Выделим явно состояния выше некоторого $E_{s-1} > E$:

$$\bar{\phi}_m = \frac{z}{\pi^2} \sum_{n \neq m} \frac{2\mu \bar{\rho}}{|m-n|} \bar{\phi}_n + f_m, \quad (30)$$

где

$$f_m = \frac{z}{\pi^2} \sum_{k \neq m} \frac{2\mu \bar{\rho}}{|m-k|} \bar{\phi}_k. \quad (31)$$

Полагая $m, n \geq s$, мы можем записать (30) в матричной форме

$$\bar{\phi} = B \bar{\phi} + f, \quad B_{mn} = \frac{z}{\pi^2} \frac{2\mu \bar{\rho}}{|n-m|} \frac{1-\delta_{mn}}{|n-m|}. \quad (32)$$

Относительно степеней матрицы B можно доказать неравенства

$$(B^2)_{mn} < 2\mu \bar{\rho} B_{mn} R_s; \quad (B^2)_{mm} < (2\mu \bar{\rho})^2 \frac{1}{m^2} R_s, \quad (33)$$

где $R_1 = 1,177; R_2 = 0,392; R_3 = 0,185; R_4 = 0,118;$

$$R_1 = 1,135; R_2 = 0,329; R_3 = 0,163; R_4 = 0,099,$$

а при $s \gg 1$

$$R_s < \frac{2 \ln s}{s^2}, \quad R_s < \frac{\pi^2}{3s^2}. \quad (34)$$

Из (33) следует, что для ряда по степеням B справедлива мажорация

$$B + B^2 + \dots < (B + \nu I) + (B + \nu I)^2 + \dots < (B + \nu I)(I + N + N^2 + \dots), \quad (35)$$

где I означает единичную матрицу и где

$$N = 4\mu\bar{\rho} \sqrt{\left(\frac{R_0}{2}\right)^2 + \frac{\bar{R}_0}{s^2}}, \quad \nu = 2\mu\bar{\rho} \left[-\frac{R_0}{2} + \sqrt{\left(\frac{R_0}{2}\right)^2 + \frac{\bar{R}_0}{s^2}} \right]. \quad (36)$$

Ясно, что начиная с некоторого s число N становится меньшим единицы и ряд последовательных приближений

$$\bar{\phi} = (1 + B + B^2 + \dots) f \quad (37)$$

сходится. При $4\mu\bar{\rho} \frac{\ln s}{s^2} \ll 1$ первый член в (37) становится главным (наступает упомянутое расщепление системы (29)), и мы получаем оценку

$$\bar{\phi}_m < \frac{2\mu\bar{\rho}}{m^2} \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\bar{\phi}_k}{m-k} < \frac{2\mu\bar{\rho}}{m^3} r' \bar{\phi}_1, \quad (38)$$

где

$$r' = \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\bar{\phi}_k s}{\bar{\phi}_1 |s-k|}. \quad (39)$$

Мы видим, что $|\bar{\phi}_m|^2$ - вероятность пребывания сложной частицы в m -ом виртуальном состоянии - убывает не медленнее, чем как $\frac{1}{m^6} - \frac{1}{E^3}$. Оценка (38) выводилась без ограничений на гладкость потенциалов V_{13}, V_{23} . При дифференцируемых V_{13}, V_{23} для F_{mnl} имеет место оценка

$$\bar{F}_{mnl} = z \frac{\bar{\rho}}{(m-1)^2}, \quad (40)$$

где $\bar{\rho}'$ выражается через вариацию производных $\frac{\partial V_{13}}{\partial y}, \frac{\partial V_{23}}{\partial y}$. В этом случае получаем

$$\bar{\phi}_m < \frac{2\mu\bar{\rho}'}{m^4} r' \bar{\phi}_1, \quad r' = \sum_{k=1}^{m-1} \frac{\bar{\phi}_k s^2}{\bar{\phi}_1 (s-k)^2}, \quad (41)$$

т.е. населенность высших состояний падает как $\frac{1}{E^4}$.

Оценим теперь вклад высших состояний в правую часть уравнений для $\phi_k, k < s$. В соответствующую сумму

$$\sigma_k = [g_{k1}(x) \int g_{k2}(x) + g_{k2}(x) \int g_{k1}(x)] \sum_{m=s}^{\infty} (F_{km1} \phi_m + F_{km2} \phi_m) dx \quad (42)$$

входят низшие функции распространения $g_{ki}(x)$, которые, вообще говоря, не убывают с x . Обозначим через \bar{q} выражение

$$\bar{q} = \max_{k < s} \max_{x' > x} |g_{k1}(x') g_{k2}(x)| \quad (43)$$

и воспользуемся оценкой (24). Мы получим оценку

$$\bar{\sigma}_k < \bar{q} \sum_{m=s}^{\infty} \frac{\bar{\phi}_m}{m-k} \int \rho(x) dx. \quad (44)$$

Величина $\frac{\pm \bar{\sigma}_k}{\sigma_k}$ может рассматриваться, очевидно, как погрешность, вносимая в функцию ϕ_k при отбрасывании высших состояний.

Так как

$$\int_{|y| < s} \text{Var } V(x+cy) dx = \int dx \int dy |V(x+cy)| = |c| \int dx \int dy |V'(x+cy)| = \dots \quad (45)$$

$$= 2a |c| \int dx V'(x) = 2a |c| \text{Var } V(x),$$

то интеграл в (44) выражается через полную вариацию потенциалов V_{13} и V_{23} :

$$\int \rho(x) dx = a A \text{Var } V_{23} + \beta B \text{Var } V_{13} = R. \quad (46)$$

Используя оценку (38), для абсолютной погрешности обрезания получаем

$$\bar{\sigma}_k < (\bar{q} R / 2\bar{\rho}\mu r) \bar{\phi} \sum_{m=s}^{\infty} \frac{1}{m^2(m-k)} < (\bar{q} R / 2\bar{\rho}\mu r) \frac{\bar{\phi}_1 s}{3s^3 s-k}. \quad (47)$$

Для относительной погрешности интегрального члена в правой части, очевидно, имеем

$$\left| \frac{\sigma_k}{\bar{\sigma}_k} \right| = \frac{\int_{k1} [g_{k2} + g_{k2} \int_{k1} g_{k1}] \sum_{l=1}^{m-1} (F_{kl1} \phi_{l1} + F_{kl2} \phi_{l2}) dx}{\bar{\rho} \mu s^3}. \quad (48)$$

Итак, погрешность, вносимая в функции $\phi_k(x)$ отбрасыванием в уравнениях (22) виртуальных состояний $\phi_m > s$, при внутреннем потенциале (23) падает как $1/s^3$. Если внешние потенциалы V_{13}, V_{23} дифференцируемы, то погрешность $\frac{\pm \bar{\sigma}_k}{\sigma_k}$, согласно (41), падает еще быстрее - как $1/s^5$.

4. Разрешимость системы интегральных уравнений

Относительно малая населенность высших виртуальных состояний, строго говоря, еще не является доказательством корректности системы уравнений (22). В качестве такого доказательства мы будем рассматривать только указание некоторой процедуры, с помощью которой решение системы (22) можно было бы получить с любой заранее заданной точностью. Аккуратное доказательство, основанное на прямом стремлении номера обрезания s к бесконечности, оказывается чрезвычайно громоздким. Гораздо проще оказывается менее "физическое" доказательство, которое опирается на метод Фредгольма. Итак, покажем, что бесконечная система (22) при внутреннем потенциале (23) не является символической и может быть решена, например, методом Фредгольма.

В методе Фредгольма (см., например, /4,5/) решение интегрального уравнения

$$\phi(x') = \lambda \int K(x', x) \phi(x) dx + f(x') \quad (49)$$

представляется в виде

$$\phi(x') = \frac{1}{D(\lambda)} \int D(x', x; \lambda) f(x) dx, \quad (50)$$

где знаменатель Фредгольма $D(\lambda)$ и функция $D(x', x; \lambda)$ записываются в форме рядов

$$D(\lambda) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} \int K(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n, \quad (51)$$

$$D(x', x; \lambda) = K(x', x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} \int K(x', x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n, \quad (52)$$

где символ $K \begin{pmatrix} x_1, \dots, x_n \\ y_1, \dots, y_n \end{pmatrix}$ означает определитель вида:

$$K \begin{pmatrix} x_1, \dots, x_n \\ y_1, \dots, y_n \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} K(x_1, y_1) & \dots & K(x_1, y_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ K(x_n, y_1) & \dots & K(x_n, y_n) \end{vmatrix} \quad (53)$$

Известно^{/5/}, что для сходимости рядов (51), (52) достаточно, чтобы ядро $K(x', x)$ было квадратично интегрируемо, т.е. чтобы было выполнено неравенство

$$\int |K(x', x)|^2 dx' dx = N < \infty. \quad (54)$$

Заметим, что, если в уравнении (49) сделать замену искомой функции $\phi = A^{-1}(x)\psi$, где $A(x)$ - некоторая заданная функция, мы получим уравнение того же вида, но с преобразованным ядром

$$\bar{K}(x', x) = A(x') K(x', x) A^{-1}(x). \quad (55)$$

Ряды (51), (52) для ядер \bar{K} и K совпадают с точностью до общего множителя и имеют совершенно одинаковые свойства сходимости. Поэтому для сходимости этих рядов достаточно, чтобы существовала такая функция $A(x)$, при которой

$$\int |A^{-2}(x') K^2(x', x) A^{-2}(x)| dx' dx = N_A < \infty. \quad (56)$$

Система (22) записывается в виде (49), если под $\phi(x)$ понимать (бесконечномерный) вектор с компонентами $\phi_{ni}(x)$, а под ядром $K(x', x)$ матрицу с элементами

$$K(k, m, x'; i, n, x) = \delta_{ki} g_{mi}(x') \theta(x' - x) g_{m2}(x) F_{mni}(x) + \delta_{k2} g_{m2}(x) \theta(x - x') g_{mi}(x) F_{mni}(x), \quad (57)$$

где $k, i=1, 2$; $m, n=1, 2, \dots, \infty$, а функция $\theta(x)$, как обычно, равна $\frac{1}{2}(1 + \text{sign } x)$. Условие (56) для ядра (57) требует конечности величины

$$N_A = \sum_{k,i=1}^2 \sum_{m,n=1}^{\infty} |A^2(x') K^2(k, m, x'; i, n, x) A^{-2}(x)| dx' dx. \quad (58)$$

Мажорируем константу N_A . В силу нормировки (18) для произведения $g \theta g$ справедливо неравенство

$$|g_{m1}(x') \theta(x' - x) g_{m2}(x)| < \frac{\gamma}{m}, \quad (59)$$

где γ - некоторая константа. Подставляя в (58) оценку (59) и учитывая, что $\theta(x)\theta(-x) = 0$, получаем

$$N_A = \sum_{m,n=1}^{\infty} \int A^2(x') [g_{m1}(x') \theta(x' - x) g_{m2}(x)]^2 + [g_{m2}(x') \theta(x - x') g_{m1}(x)]^2 [F_{mni}^2(x) + F_{mni}^2(x)] A^{-2}(x) dx' dx < \quad (60)$$

$$< \sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{2\gamma^2}{m^2} \int \frac{F_{mni}^2 + F_{mni}^2}{A^2} dx \int A^2 dx.$$

Выберем в качестве функции $A^2(x)$ выражение

$$A^2(x) = \max_{m,n} \sqrt{F_{mni}^2(x) + F_{mni}^2(x)}. \quad (61)$$

Тогда, согласно (24), получаем

$$N_A < \sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{4\gamma^2}{m^2} \frac{R^2}{(m-n)^2}, \quad (62)$$

где R дается формулой (46). Сумма по m, n также конечна

$$\sum_{\substack{m,n=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{1}{m^2} \frac{1}{(m-n)^2} < \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \cdot 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^4}{18}. \quad (63)$$

Следовательно, для потенциалов V_{13}, V_{23} с ограниченной вариацией,

$$N_A < \frac{2}{9} \pi^4 \gamma^2 R^2 < \infty \quad (64)$$

и ряды (51), (52) сходятся, т.е. система (22) может быть решена методом Фредгольма. Заметим, что даже в рамках довольно грубой мажорации (59) имеется определенный "запас" сходимости и сходимость рядов (51), (52) сохранится при коэффициентах связи F_{mni} , убывающих несколько медленнее, чем как $\frac{1}{|m-n|}$, и при энергиях E_m , растущих не столь быстро, как для потенциала (23).

Следует отметить, что сходимость при разложении по состояниям внутреннего движения и малая населенность высоких виртуальных состояний в рассмотренном нами случае не связаны прямо с обычным условием адиабатичности. Напротив, разложение по Φ_m или Φ_n^0 может быть полезным и в заведомо неадиабатичных задачах.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Оценка коэффициентов в уравнениях для ϕ

Для потенциала (23) функции $\Phi_n^0(y)$ и соответствующие E_n равны:

$$\Phi_n^0(y) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left[n \frac{\pi}{2} \left(\frac{y}{a} + 1 \right) \right]; \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2}{8 M_2 a^2}. \quad (65)$$

Для собственных функций уравнений (9), (13) интегрированием по частям легко доказывается равенство

$$\int \Phi_n \Phi_m f dy = \frac{\int (\Phi_n \Phi_m - \Phi_n^0 \Phi_m^0) f dy}{2 M_2 (E_n - E_m)}. \quad (66)$$

Подставляя (65) в определение (12) коэффициентов W_{mn} и используя (66), после мажорирования подынтегрального выражения по модулю получаем

$$|W_{mn}(x)| < \frac{A}{|n-m|} \frac{M_2}{\pi} \frac{Var [V_{23}(x-Ay) + V_{13}(x+By)]}{|y| < a}, \quad (67)$$

где символ $Var V$ означает вариацию функции V на соответствующем отрезке

$$Var f = \int_{|y| < a} |f| dy. \quad (68)$$

При разрывных потенциалах V_{23} , V_{13} и больших m, n отношение правой части неравенства (67) к левой может быть сколь угодно близко к единице. Таким образом, коэффициенты связи W_{mn} являются, вообще говоря, наибольшими для соседних состояний. Для гладких V_{13} , V_{23} , имеющих ограниченную вариацию производной, вторым интегрированием по частям можно получить более жесткую оценку для $|W_{mn}|$, однако, по-прежнему, связи будут наибольшими для соседних состояний.

Перейдем к оценке коэффициентов связи $K_{mn}(x)$, $Q_{mn}(x)$, возникающих при разложении по скользящей системе функций $\Phi_n(y; x)$ и определенных формулами (15). Дифференцируя обе части уравнения (13) по x , домножая на Φ_n и интегрируя по y , с учетом ортогональности Φ_m и Φ_n получаем

$$-\frac{1}{2M_2} \int \Phi_m \ddot{\Phi}_n^0 dy + \int \Phi_m \Phi_n^0 (V_{13}' + V_{23}') dy + \int \Phi_m \Phi_n^0 (V_{12} + V_{13} + V_{23}) dy = E_n \int \Phi_m \Phi_n^0 dy. \quad (69)$$

С другой стороны, двукратное интегрирование по частям по y и уравнение для Φ_m дают

$$-\frac{1}{2M_2} \int \Phi_m \ddot{\Phi}_n^0 dy = -\frac{1}{2M_2} \int \ddot{\Phi}_m \Phi_n^0 dy = -\int \Phi_m (V_{12}' + V_{13}' + V_{23}' - E) \Phi_n^0 dy. \quad (70)$$

Подставляя (70) в (69), имеем

$$Q_{mn} = -\frac{1}{E_m - E_n} \int \Phi_m \Phi_n (V_{12}' + V_{23}') dy = -\frac{1}{E_m - E_n} \int \Phi_m \Phi_n \left(\frac{\ddot{V}_{13}}{B} - \frac{\ddot{V}_{23}}{A} \right) dy. \quad (71)$$

Мажорируя (71) по модулю, получаем

$$|Q_{mn}| < \frac{1}{|E_m - E_n|} \max_y |\Phi_m \Phi_n| Var \left(\frac{V_{13}}{B} - \frac{V_{23}}{A} \right). \quad (72)$$

При больших m, n функции Φ_m и энергии E_m близки к значениям (65), поэтому

$$|Q_{mn}| < \frac{8 M_2 a}{\pi^2 |m^2 - n^2|} \frac{Var \left(\frac{V_{13}}{B} - \frac{V_{23}}{A} \right)}{|y| < a}. \quad (73)$$

Для малых m, n и больших вариаций потенциалов V_{13} , V_{23} , когда $E_m, E_n \approx V$, оценка (72) сильно завышена. Действительно, если $Var V$ накапливается за счет частых колебаний потенциала, то при интегрировании с гладкими волновыми функциями эти колебания должны сильно компенсировать друг друга. Если же вариация велика за счет скачка, разделяющего область больших и малых V , то в одной из этих областей функции Φ_m , как правило, малы и, в силу условия сшивания, малы и на границе раздела, где V велико. Интеграл в (71) в этом случае также оказывается небольшим. Если не стремиться использовать эффекты подавления, то можно применять оценку (73) для всех m, n .

Дифференцируя (13) дважды по x , умножая дополнительно на Φ_m и интегрируя по y , а затем интегрируя член с $\int \ddot{\Phi}_m \ddot{\Phi}_n^0 dy$ дважды по частям и снова пользуясь уравнением (13) для Φ_m , получаем

$$K_{mn} = -\frac{1}{E_m - E_n} \left[\int \Phi_m (V_{13}'' + V_{23}'') \Phi_n dy + 2 \int \Phi_m (V_{13}' + V_{23}' - E_n') \Phi_n' dy \right] = -\frac{1}{E_m - E_n} \left[\int \Phi_m \left(\frac{\ddot{V}_{13}}{B^2} + \frac{\ddot{V}_{23}}{A^2} \right) \Phi_n dy + -2 \int \Phi_m \left(-\frac{V_{13}}{B} + \frac{V_{23}}{A} \right) \Phi_n' dy - 2 E_n' Q_{mn} \right], \quad (74)$$

где, как нетрудно показать, функция E_n' равна

$$E'_n = \int \Phi_n^2 (V'_{13} + V'_{23}) dy - \int \Phi_n^2 \left(\frac{\dot{V}_{23}}{A} - \frac{\dot{V}_{13}}{B} \right) dy. \quad (75)$$

Рассмотрим (74) при больших m, n , когда для E_m, Φ_m можно приближенно пользоваться формулами (65). Первый член в квадратных скобках тогда оценивается следующим образом

$$J_1 = \left| \int \Phi_m \left(\frac{\ddot{V}_{13}}{B^2} + \frac{\ddot{V}_{23}}{A^2} \right) \Phi_n dy \right| = \left| \int (\dot{\Phi}_m \Phi_n + \Phi_m \dot{\Phi}_n) \left(\frac{\dot{V}_{13}}{B^2} + \frac{\dot{V}_{23}}{A^2} \right) dy \right| < \frac{(n+m)\pi}{2a^2} \text{Var} \left(\frac{V_{13}}{B^2} + \frac{V_{23}}{A^2} \right). \quad (76)$$

Интеграл с Φ_n^* мажорует выражением

$$J_2 = \left| 2 \int \Phi_m \Phi_n^* \left(\frac{V_{23}}{A} - \frac{V_{13}}{B} \right) dy \right| \leq \frac{2}{\sqrt{a}} \max_r |\Phi_n^*| \text{Var} \left(\frac{V_{23}}{A} - \frac{V_{13}}{B} \right). \quad (77)$$

Грубую оценку максимума модуля Φ_n^* можно получить, разложив Φ_n^* в ряд по Φ_m и, полагая приближенно $\Phi_m^* = \Phi_m^0$, мажорируя ряд почленно:

$$|\Phi_n^*| = \left| \sum_m \Phi_m Q_{mn} \right| \leq \sum_m |\Phi_m| |Q_{mn}| \leq \frac{8M_2 \sqrt{a}}{\pi^2} \sum_{m \neq n} \frac{1}{|m^2 - n^2|} \text{Var} \left(\frac{V_{13}}{B} - \frac{V_{23}}{A} \right). \quad (78)$$

Так как сумма

$$\sum_{m \neq n} \frac{1}{|m^2 - n^2|} = \frac{1}{4n^2} + \frac{1}{n} \sum_{m=1}^{2n-1} \frac{1}{n} < \frac{\ln(4n-1)}{n} \quad (79)$$

стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$, то при больших n интеграл J_2 мал по сравнению с J_1 и может быть отброшен.

Стоящий в квадратных скобках в (74) член с Q_{mn} по сравнению с J_1 имеет порядок $\frac{1}{(m+n)^2(m-n)}$ и заведомо может быть отброшен. Окончательно, при больших m, n имеем:

$$|K_{mn}| \leq \frac{4M_2}{\pi} \frac{1}{|n-m|} \text{Var} \left(\frac{V_{13}}{B^2} + \frac{V_{23}}{A^2} \right). \quad (80)$$

Оценим элементы матрицы F , определенной вторым из выражений (21). При больших n функции ξ_{ni} приближенно пропорциональны квазиклассическим, так что

$$\left| \frac{\xi_{ni}'}{\xi_{ni}} \right| \approx \sqrt{2M_1(E_n + \Delta E_n - E)} = \frac{n\pi}{2a} \sqrt{\frac{M_1}{M_2}}. \quad (81)$$

Из (73), (80), (81) получаем

$$|F_{mn}(x)| < \frac{4M_2}{\pi} \frac{1}{|n-m|} \left[\text{Var} \left(\frac{V_{13} + V_{23}}{B^2 A^2} \right) + 2 \sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \text{Var} \left(\frac{V_{13}}{B} - \frac{V_{23}}{A} \right) \right]. \quad (82)$$

В силу упомянутых выше эффектов подавления связей при малых m или n , оценка (78), выведенная для больших m, n справедлива при всех m, n .

Для гладких внешних потенциалов V_{13}, V_{23} оценки (67), (73), (80), (82) являются завышенными. Интегрированием выражений (66) и (71) по частям и прямым мажорированием по модулю выражения (74), вместо (67), (82) получаем, соответственно,

$$|W_{mn}(x)| < \frac{\rho_0(x)}{(m-n)^2}, \quad (83)$$

$$|F_{mn}(x)| < \frac{\rho_1(x)}{(m-n)^2}, \quad (84)$$

где в функции ρ_0, ρ_1 входят вариации производных V'_{13}, V'_{23} . Оценим теперь добавки ΔE_m к эффективной энергии E_m . При разложении по функциям Φ_m^0 эти добавки ограничены

$$|\Delta E_m^0| = \left| \int \Phi_m^0{}^2 (V_{13} + V_{23}) dy \right| < \frac{1}{a} \int_{-a}^a |V_{13}(x+By) + V_{23}(x-Ay)| dy, \quad (85)$$

и при $m \rightarrow \infty$ стремятся к выражению

$$\Delta E_\infty^0(x) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a (V_{13} + V_{23}) dy, \quad (86)$$

которое может иметь любой знак.

При разложении по функциям Φ_m добавки к энергии согласно (15) не отрицательны и, согласно (78), (79), стремятся к нулю не медленнее, чем $\frac{(\ln m)^2}{m^2}$. Можно показать, что для Φ_m^* справедлива формула

$$\Phi_m^* = \frac{2M_2}{\Delta_m} \left[\Phi_m \int_0^y \Phi_m \Phi_m^* (E_m^* - V'_{13} - V'_{23}) dy - \Phi_m^* \int_0^y \Phi_m^2 (E_m^* - V'_{13} - V'_{23}) dy + c_m \Phi_m \right], \quad (87)$$

где Φ_m^* - второе (растущее в $+\infty$) решение уравнения (13),

$$\Delta_m = \int_0^y \Phi_m \Phi_m - \Phi_m^* \Phi_m^* \quad (88)$$

и где константа c_m определяется из условия $\int \Phi_m^* \Phi_m dy = 0$. Подставляя в (87) при больших m для функций Φ_m квазиклассические выражения, нетрудно убедиться, что $\max |\Phi_m^*|$ ведет себя как $1/m$, а

$$|\Phi_m| < \dots \quad \Delta E_m \approx \frac{1}{m^2}, \quad (89)$$

так что логарифм в оценке (78) возникает за счет почленного мажорирования знакопеременного ряда.

Л и т е р а т у р а

1. H. Feshbach. Unified Theory of Nuclear Reactions. Ann. of Phys., 5, 357 (1958).
2. Б.Н. Захарьев, С.Н. Соколов. Эффект усиленной проникаемости для сложных частиц. Препринт ОИЯИ, Р-1473 (1983).
3. Б.Н. Захарьев, С.Н. Соколов. О плотности резонансов при рассеянии на связанных частицах. Препринт ОИЯИ, Р-1562 (1984).
4. С.Г. Михлин. Интегральные уравнения ГИТТЛ, 1949.
5. И.А. Ипкович. О рядах Фредгольма. ДАН СССР, IX, 423 (1948).

Рукопись поступила в издательский отдел
16 марта 1984 г.