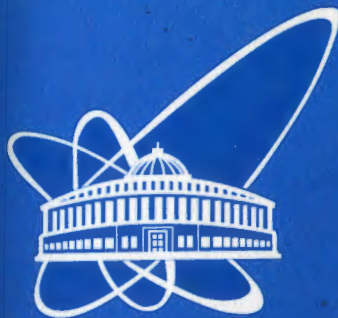


01-255



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

41835

P11-2001-255

О. Чулуунбаатар, И. В. Пузынин, Д. В. Павлов,  
А. А. Гусев, С. И. Ларсен, С. И. Виницкий

НЬЮТОНОВСКИЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ  
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ  
ДЛЯ СИСТЕМЫ ТРЕХ ЧАСТИЦ НА ПРЯМОЙ

Напрвлено в «Journal of Physics B»

2001

# 1 Введение

Трехчастичные модели с потенциалами нулевого радиуса и граничными условиями находят широкое применение в атомной и ядерной физике [1, 2]. В адиабатическом представлении исходная многомерная задача рассеяния методом Канторовича сводится к многоканальной спектральной задаче для системы дифференциальных уравнений второго порядка на полуоси с переменными коэффициентами [3]-[7]. Для непрерывного спектра при заданном значении энергии в открытом канале неизвестными являются собственная функция и фазовый сдвиг, который входит в определение асимптотического выражения для собственной функции и в соответствующее краевое условие. Для дискретного спектра неизвестными являются собственная функция и энергия в закрытом канале.

Существенным моментом для эффективной реализации итерационных схем решения такой задачи является привлечение детальной информации об асимптотическом поведении переменных коэффициентов и собственных функций [8]-[12], а также оптимальный выбор дополнительного интегрального условия, необходимого для нахождения фазового сдвига или энергии [13, 14]. В работе [15] в качестве такого дополнительного условия был выбран вариационный функционал Швингера [16, 17] и построены ньютоновские итерационные схемы решения одномерной задачи рассеяния.

В данной работе двумерная задача рассеяния в адиабатическом представлении формулируется как многоканальная спектральная задача для системы одномерных интегральных уравнений с использованием вариационного функционала Швингера. Построены устойчивые ньютоновские итерационные схемы для вычисления с заданной точностью собственных функций и собственных значений, которые определяют фазовый сдвиг и энергию, соответственно, для непрерывного и дискретного спектра. Сходимость адиабатического разложения и эффективность предложенных схем продемонстрирована для интегрируемой модели трех тождественных частиц на прямой с парными притягивающими потенциалами нулевого радиуса ниже трехчастичного порога.

## 2 Задача трех частиц в адиабатическом представлении

Для трех тождественных частиц на прямой введем локальные координаты Якоби  $\{\xi, \eta\} \in R^2$  в системе центра масс

$$\begin{aligned}\eta &= \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} (x_1 - x_2), \\ \xi &= \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} \left[\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) - x_3\right],\end{aligned}\quad (1)$$

где  $\{x_1, x_2, x_3\} \in R^1$  - декартовы координаты частиц. В полярных координатах  $\rho$  и  $\theta$ :

$$\eta = \rho \cos \theta, \quad \xi = \rho \sin \theta, \quad -\pi \leq \theta \leq \pi, \quad (2)$$

уравнение для волновой функции системы трех частиц  $\Psi(\rho, \theta)$  имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \Psi(\rho, \theta) + V(\rho, \theta) \Psi(\rho, \theta) = E \Psi(\rho, \theta). \quad (3)$$

Здесь  $E$  - энергия в системе центра масс, а  $m = (m_1 m_2 + m_1 m_3 + m_2 m_3) / (m_1 + m_2 + m_3)$  - эффективная масса, а потенциал  $V(\rho, \theta)$  задан в виде суммы парных потенциалов:

$$V(\rho, \theta) = V(\sqrt{2}\rho|\cos\theta|) + V(\sqrt{2}\rho|\cos(\theta - 2\pi/3)|) + V(\sqrt{2}\rho|\cos(\theta + 2\pi/3)|). \quad (4)$$

Рассмотрим случай притяжения для каждой пары частиц и определим парный потенциал в виде дельта-функции  $V(\sqrt{2}\eta) = g\delta(|\eta|)/\sqrt{2}$  с константой связи  $g = c\bar{\kappa}\sqrt{2}(\hbar^2/m)$  при значении  $\bar{\kappa} = \pi/6$  и  $c = -1$ , имеющий связанное состояние  $\phi_0(\eta) = \sqrt{\bar{\kappa}} \exp(-\bar{\kappa}|\eta|)$  с удвоенной энергией  $\epsilon_0^{(0)} = -\bar{\kappa}^2$ , так что  $2E = q^2 + \epsilon_0^{(0)}$  в единицах  $\hbar = m = 1$ , где  $q$  - импульс относительного движения пары [7].

Определим  $h_\rho$  - параметрический гамильтониан при каждом фиксированном значении  $\rho \in R_+^1$  для уравнения (3):

$$h_\rho = -\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{2c\bar{\kappa}}{\rho} \sum_n \delta(\theta - \theta_n), \quad \theta_n = n\pi/3 + \pi/6, \quad n = 0, 1, \dots, 5. \quad (5)$$

Полный ортогональный набор собственных функций  $B_j(\rho, \theta) \in W_2^1(C)$  гамильтониана (5) определяется решениями задачи на собственные значения на окружности  $C(-\pi/6 \leq \theta \leq 11\pi/6)$ :

$$\begin{aligned}h_\rho B_j(\rho, \theta) &= \epsilon_j(\rho) B_j(\rho, \theta), \\ \langle B_i(\rho, \theta) | B_j(\rho, \theta) \rangle &= \int_{-\pi/6}^{11\pi/6} B_i^*(\rho, \theta) B_j(\rho, \theta) d\theta = \delta_{ij}.\end{aligned}\quad (6)$$

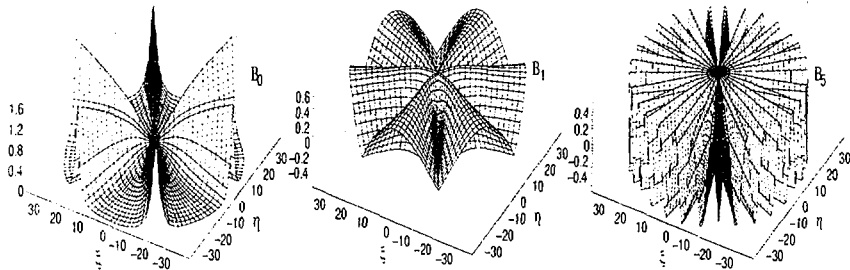


Рис. 1: Ортогональные базисные функции  $B_j(\rho, \theta)$  при  $j = 0, 1, 5$

Соответствующие краевые задачи для вычисления  $\epsilon_j(\rho)$ ,  $B_j(\rho, \theta)$  имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 B_0(\rho, \theta)}{\partial \theta^2} = (\delta y_0(\rho))^2 B_0(\rho, \theta), \\ \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial B_0(\rho, \theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}} = \mp \frac{c\pi}{6} B_0(\rho, \theta) \Big|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}}, \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 B_j(\rho, \theta)}{\partial \theta^2} = (\delta y_j(\rho))^2 B_j(\rho, \theta), \\ \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial B_j(\rho, \theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}} = \mp \frac{c\pi}{6} B_j(\rho, \theta) \Big|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}}. \end{cases} \quad (8)$$

Набор собственных функций, полностью симметричных относительно перестановки тождественных частиц, включающий основное состояние, для шести секторов круга

$$n\pi/3 - \pi/6 \leq \theta \leq n\pi/3 + \pi/6, \quad n = 0, 1, \dots, 5. \quad (9)$$

предложенный в работе [4], имеет вид (см. рис. 1)

$$\begin{aligned} B_0(\rho, \theta) &= \sqrt{\frac{y_0^2 - x^2}{\pi(y_0^2 - x^2) + |x|}} \cosh[\delta y_0(\theta - n\pi/3)], \\ B_j(\rho, \theta) &= \sqrt{\frac{y_j^2 + x^2}{\pi(y_j^2 + x^2) - |x|}} \cos[\delta y_j(\theta - n\pi/3)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Собственные значения  $\epsilon_0(\rho), \epsilon_j(\rho), j = 1, 2, 3, \dots$  задачи (6) (см. рис. 2)

$$\epsilon_0(\rho) = -\left(\frac{\delta y_0(\rho)}{\rho}\right)^2, \quad \epsilon_j(\rho) = \left(\frac{\delta y_j(\rho)}{\rho}\right)^2 \quad (11)$$

определяются через решения  $y_0(\rho), y_j(\rho), j = 1, 2, 3, \dots$ , трансцендентных уравнений, которые следуют из краевых задач (7)-(8)

$$\begin{aligned} y_0(\rho) \tanh(\pi y_0(\rho)) &= -x, \quad 0 \leq y_0(\rho) < \infty, \quad x = c \frac{\pi}{36} \rho, \quad c = -1, \\ y_j(\rho) \operatorname{tg}(\pi y_j(\rho)) &= x, \quad j - \frac{1}{2} < y_j(\rho) < j, \quad j = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (12)$$

При малых  $\rho$  асимптотика  $\epsilon_j(\rho), B_j(\rho, \theta)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \epsilon_0(\rho)|_{\rho \rightarrow 0} &\rightarrow -\frac{1}{\rho} \left( 1 + \frac{\pi^2}{108} \rho + \frac{\pi^4}{14580} \rho^2 \right), \quad \epsilon_j(\rho)|_{\rho \rightarrow 0} \rightarrow \left( \frac{6j}{\rho} \right)^2, \\ B_0(\rho, \theta)|_{\rho \rightarrow 0} &\rightarrow \sqrt{\frac{1}{2\pi}}, \quad B_j(\rho, \theta)|_{\rho \rightarrow 0} \rightarrow \sqrt{\frac{1}{\pi}} \cos[6j(\theta - n\pi/3)]. \end{aligned} \quad (13)$$

а при больших  $\rho$  асимптотика  $\epsilon_j(\rho), B_j(\rho, \theta)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \epsilon_0^{(0)} &= \lim_{\rho \rightarrow \infty} \epsilon_0(\rho) = -\frac{\pi^2}{36}, \quad \epsilon_j(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \left( \frac{6(j-1/2)}{\rho} \right)^2, \\ B_0^{as}(\rho, \theta) &= B_0(\rho, \theta)|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{\sqrt{\pi\rho}}{6} e^{-\pi/6\rho(\pi/6 - |\theta - n\pi/3|)}, \quad |\theta - n\pi/3| < \pi/6 \\ B_j(\rho, \theta)|_{\rho \rightarrow \infty} &\rightarrow \sqrt{\frac{1}{\pi}} \cos[6(j-1/2)(\theta - n\pi/3)]. \end{aligned} \quad (14)$$

Используя краевые задачи (7)-(8), сформулируем двумерную задачу рассеяния для системы трех частиц на прямой ниже трехчастичного порога  $E < 0$ , соответствующую уравнению (3). В представлении стоячих волн  $\Psi(\rho, \theta)$  удовлетворяет уравнению

$$-\left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \Psi(\rho, \theta) = 2E\Psi(\rho, \theta) \quad (15)$$

с краевыми условиями по угловой переменной

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi(\rho, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}} = \mp c\bar{\kappa} \Psi(\rho, \theta) \Big|_{\theta = \pm \frac{\pi}{6} + \frac{\pi n}{3}}, \quad n = 0, 1, \dots, 5, \quad (16)$$

и асимптотическими условиями по радиальной переменной

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho \frac{\partial \Psi(\rho, \theta)}{\partial \rho} = 0, \quad (17)$$

$$\Psi(\rho, \theta) \rightarrow \chi_0^{as}(\rho) B_0^{as}(\rho, \theta) + F(k, \theta) \sqrt{\frac{\pi}{2k\rho}} e^{-k\rho}, \quad \rho \rightarrow \infty, \quad (18)$$

где  $k = \sqrt{-2E}$ . Для задачи рассеяния в открытом канале  $E(q) > \epsilon_0^{(0)}$ , т.е. при  $0 < q < \bar{\kappa}$

$$\chi_0^{as}(\rho) \approx \frac{\sin(q\rho + \delta)}{\sqrt{\rho}}, \quad (19)$$

где  $\delta = \delta(q)$  - искомый фазовый сдвиг, а в случае связанных состояний ( $E(q) \leq \epsilon_0^{(0)}$ )

$$\chi_0^{as}(\rho) \approx \frac{e^{-\bar{q}\rho}}{\sqrt{\rho}}, \quad (20)$$

где  $\epsilon = \bar{q}^2 = -q^2 \geq 0$  - искомая энергия связи трех частиц.

Разложим волновую функцию  $\Psi(\rho, \theta)$  по полному ортогональному набору адиабатических функций  $B_j(\rho, \theta)$ .

$$\Psi(\rho, \theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j(\rho) B_j(\rho, \theta). \quad (21)$$

В результате усреднения уравнения (15) по базису  $B_j(\rho, \theta)$ , методом Канторовича получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами на полуоси  $R_+^1$

$$\left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + 2E - \epsilon_i(\rho) \right) \chi_i(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} \left( -A_{ij}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} A_{ij}(\rho) - \frac{A_{ij}(\rho)}{\rho} + H_{ij}(\rho) \right) \chi_j(\rho), \quad (22)$$

где  $A = \{A\}_{ij}$  - кососимметричная, а  $H = \{H\}_{ij}$  - симметричная матрицы эффективных потенциалов (см. рис. 2)

$$A_{ij}(\rho) = \langle B_i(\rho, \theta) \left| \frac{\partial}{\partial \rho} B_j(\rho, \theta) \right\rangle, \quad H_{ij}(\rho) = \langle \frac{\partial}{\partial \rho} B_i(\rho, \theta) \left| \frac{\partial}{\partial \rho} B_j(\rho, \theta) \right\rangle. \quad (23)$$

Матричные элементы  $\{A\}_{ij} = -\{A\}_{ji}$  и  $\{H\}_{ij} = \{H\}_{ji}$  имеют следующие асимптотики при малых и больших  $\rho$  для конечных значений индексов  $i$  и  $j$ :

$$\begin{aligned} \rho \rightarrow 0, \quad A_{0j} &= -\frac{(-1)^j \sqrt{2}}{j^2} \left[ \frac{1}{36} + \frac{\rho}{j^2} \left( \frac{1}{864} + \frac{\pi^2 j^2}{3888} \right) + \dots \right], \\ \rho \rightarrow 0, \quad A_{ij} &= \frac{(-1)^{i+j}}{i^2 - j^2} \left[ \frac{1}{18} + \rho \frac{1}{1296} \left( \frac{1}{i^2} + \frac{1}{j^2} \right) + \dots \right], \\ \rho \rightarrow 0, \quad H_{00} &= \frac{\pi^4}{58320} + \frac{\pi^6}{2204496} \rho + \frac{31\pi^8}{5952139200} \rho^2 + \dots, \\ \rho \rightarrow 0, \quad H_{jj} &= \frac{1}{j^4} \left( -\frac{1}{1728} + \frac{\pi^2 j^2}{3888} \right) + \frac{\rho}{j^6} \left( -\frac{13}{93312} + \frac{\pi^2 j^2}{17496} \right) + \dots, \\ \rho \rightarrow 0, \quad H_{0j} &= \frac{(-1)^j \sqrt{2}}{j^4} \left[ \frac{7}{2592} - \frac{\pi^2 j^2}{888} + \frac{\rho}{j^2} \left( \frac{17}{62208} + \frac{1\pi^2 j^2}{139968} - \frac{7\pi^2 j^2}{2099520} \right) + \dots \right], \\ \rho \rightarrow 0, \quad H_{ij} &= \frac{(-1)^{(i+j)}}{(i^2 - j^2)^2} \left[ \frac{5}{648} - \frac{1}{1296} \left( \frac{i^2}{j^2} + \frac{j^2}{i^2} \right) + \rho \left( -\frac{\pi^2}{11664} + \frac{1}{3456} \left( \frac{1}{i^2} + \frac{1}{j^2} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

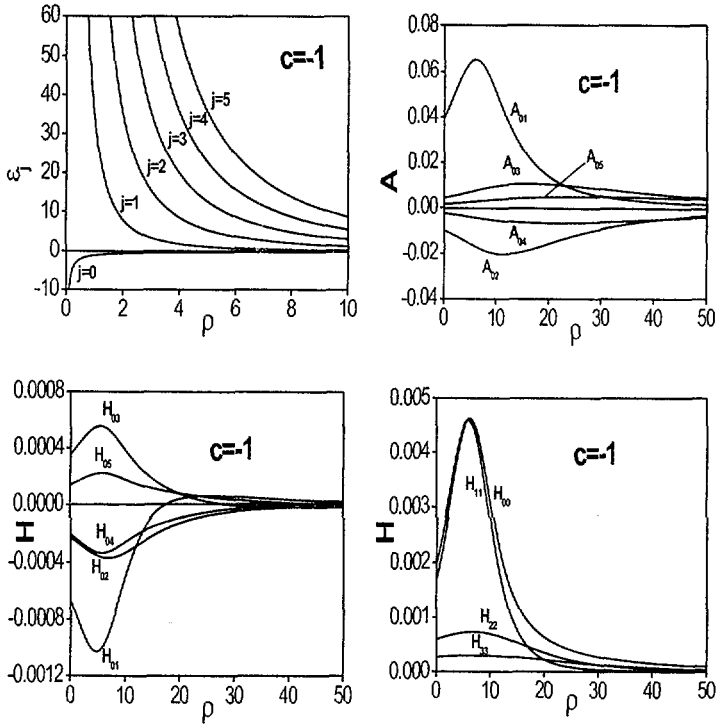


Рис. 2: Термы  $\epsilon_j(\rho)$  и эффективные потенциалы  $A_{ij}(\rho)$ ,  $H_{ij}(\rho)$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{11}{93312} \left( \frac{i^2}{j^4} + \frac{j^2}{i^4} \right) + \frac{\pi^2}{23328} \left( \frac{i^2}{j^2} + \frac{j^2}{i^2} \right) \dots \Big], \\
 \rho \rightarrow \infty, \quad A_{0j} &= \frac{432(-1)^j(j-1/2)}{\pi^2 \rho^2 \sqrt{\rho}} + \frac{23328(-1)^j(j-1/2)}{\pi^4 \rho^3 \sqrt{\rho}} + \dots, \\
 \rho \rightarrow \infty, \quad A_{ij} &= \frac{(-1)^{(i+j)}(j-1/2)(i-1/2)}{(i-1/2)^2 - (j-1/2)^2} \left[ \frac{72}{\pi^2 \rho^2} + \frac{2592}{\pi^4 \rho^3} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{46656}{\pi^6 \rho^4} (2 - \pi^2((j-1/2)^2 + (i-1/2)^2)) + \dots \right], \\
 \rho \rightarrow \infty, \quad H_{00} &= \frac{1}{4\rho^2} + e^{-\frac{\pi^2}{18}\rho} \left( -\frac{\pi^2}{18\rho} - \frac{\pi^4}{324} + \frac{\pi^6}{17496\rho} \right) + \dots, \\
 \rho \rightarrow \infty, \quad H_{jj} &= -\frac{108}{\pi^4 \rho^4} \left( 3 + 4\pi^2(j-1/2)^2 \right) - \frac{7776}{\pi^6 \rho^5} \left( 3 + 16\pi^2(j-1/2)^2 \right) + \dots
 \end{aligned}$$

$$\rho \rightarrow \infty, \quad H_{0j} = \frac{216(-1)^j(j-1/2)}{\pi^2 \rho^3 \sqrt{\rho}} - \frac{11664(-1)^j(j-1/2)}{\pi^4 \rho^4 \sqrt{\rho}} + \dots,$$

$$\rho \rightarrow \infty, \quad H_{ij} = \frac{(-1)^{(i+j)}(i-1/2)(j-1/2)}{(i-j)^2(i+j-1)^2} \left[ \frac{5184}{\pi^4 \rho^4} \left( (j-1/2)^2 + (i-1/2)^2 \right) \right. \\ \left. + \frac{93312}{\pi^6 \rho^5} \left( \pi^2 \left( (i-1/2)^2 - (j-1/2)^2 \right)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + 4 \left( (i-1/2)^2 + (j-1/2)^2 \right) \right) + \dots \right].$$

Как следует из приведенных асимптотических выражений для эффективных потенциалов, асимптотическое поведение ограниченных решений  $\chi_j(\rho)$  системы уравнений (22) на полюсах согласовано с асимптотическими граничными условиями двумерной задачи (15-20).

## 2.1 Одноканальное рассеяние с закрытыми каналами

Рассмотрим задачу упругого рассеяния третьей частицы на паре частиц в основном состоянии 0. Перепишем систему (22), разделяя основное 0 и возбужденные  $j$  состояния

$$\begin{cases} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + q^2 \right) \chi_0(\rho) = \tilde{V}_0(\rho) \chi_0(\rho), \\ \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - k^2 \right) \chi_i(\rho) = \tilde{V}_i(\rho) \chi_i(\rho), \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (24)$$

Здесь  $0 < q^2 = 2E - \epsilon_0^{(0)} < -\epsilon_0^{(0)}$ ,  $q$  - относительный импульс третьей частицы, отсчитанный от двухчастичного порога,  $\epsilon_0^{(0)} = -(\pi/6)^2$ ,  $\epsilon_0^{(0)} < -k^2 = 2E < 0$  - энергия от системы трех частиц ниже трехчастичного порога, а эффективные потенциалы основного  $\tilde{V}_0(\rho)$  и возбужденного  $\tilde{V}_i(\rho)$  состояний заданы соотношениями

$$\begin{aligned} \tilde{V}_0(\rho) \chi_0(\rho) &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( -A_{0j}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} A_{0j}(\rho) - \frac{A_{0j}(\rho)}{\rho} + H_{0j}(\rho) \right) \chi_j(\rho) \\ &+ (H_{00}(\rho) + \epsilon_0(\rho) - \epsilon_0^{(0)}) \chi_0(\rho), \\ \tilde{V}_i(\rho) \chi_i(\rho) &= \sum_{j=0, i \neq j}^{\infty} \left( -A_{ij}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} A_{ij}(\rho) - \frac{A_{ij}(\rho)}{\rho} + H_{ij}(\rho) \right) \chi_j(\rho) \\ &+ (H_{ii}(\rho) + \epsilon_i(\rho)) \chi_i(\rho), \quad i \neq 0. \end{aligned} \quad (25)$$



Формальные решения системы (24)-(25) можно представить в виде интегральных уравнений (74), (81):

$$\begin{cases} \chi_0(\rho) = J_0(q\rho) + \frac{\pi}{2} \int_0^\infty J_0(q\rho_<) Y_0(q\rho_>) \tilde{V}_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \\ \chi_i(\rho) = - \int_0^\infty K_0(k\rho_>) I_0(k\rho_<) \tilde{V}_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (26)$$

Здесь  $\rho_> = \max\{\rho, \rho'\}$ ,  $\rho_< = \min\{\rho, \rho'\}$  и  $J_i(\rho)$ ,  $Y_i(\rho)$  - цилиндрические функции Бесселя первого и второго рода,  $I_i(\rho)$ ,  $K_i(\rho)$  - модифицированные цилиндрические функции Бесселя первого и второго рода.

Заметим, что во втором интегральном уравнении системы (26) подынтегральная функция  $\tilde{V}_i(\rho)\chi(\rho)\rho$ , при  $i \neq 0$  в точке  $\rho = 0$ , как следует из (13), имеет особенность  $\sim 1/\rho$ , которую следует учесть при определении функции Грина. Для этого перепишем систему уравнений (24) в следующем виде:

$$\begin{cases} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + q^2 \right) \chi_0(\rho) = V_0(\rho) \chi(\rho), \\ \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \left( \frac{6i}{\rho} \right)^2 - k^2 \right) \chi_i(\rho) = V_i(\rho) \chi(\rho), \quad i \neq 0, \end{cases} \quad (27)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} V_0(\rho) \chi(\rho) &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( -A_{0j}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} A_{0j}(\rho) - \frac{A_{0j}(\rho)}{\rho} + H_{0j}(\rho) \right) \chi_j(\rho) \\ &\quad + (H_{00}(\rho) + \epsilon_0(\rho) - \epsilon_0^{(0)}) \chi_0(\rho), \\ V_i(\rho) \chi(\rho) &= \sum_{j=0, i \neq j}^{\infty} \left( -A_{ij}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} A_{ij}(\rho) - \frac{A_{ij}(\rho)}{\rho} + H_{ij}(\rho) \right) \chi_j(\rho) \\ &\quad + (H_{ii}(\rho) + \epsilon_i(\rho) - \left( \frac{6i}{\rho} \right)^2) \chi_i(\rho). \end{aligned} \quad (28)$$

Используя представление (74), (81), перепишем систему уравнений (27) в интегральном виде

$$\begin{cases} \chi_0(\rho) = J_0(q\rho) + \frac{\pi}{2} \int_0^\infty J_0(q\rho_<) Y_0(q\rho_>) V_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \\ \chi_i(\rho) = - \int_0^\infty K_{6i}(k\rho_>) I_{6i}(k\rho_<) V_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (29)$$

Как следует из условия (13), подынтегральная функция  $V_i(\rho)\chi(\rho)\rho$  не имеет особенностей в точке  $\rho = 0$ .

Асимптотика решения  $\chi_0(\rho)$  при  $\rho \rightarrow \infty$  имеет вид

$$\chi_0(\rho) \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow J_0(q\rho) + \mu Y_0(q\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{q\pi\rho}} \left( \sin\left(q\rho + \frac{\pi}{4}\right) - \mu \cos\left(q\rho + \frac{\pi}{4}\right) \right), \quad (30)$$

$$\lambda^{-1} = \frac{2}{\pi} \mu = \frac{2}{\pi} \operatorname{tg}(\delta') = \int_0^\infty J_0(q\rho) V_0(\rho) \chi(\rho) \rho d\rho. \quad (31)$$

Тогда искомым фазовый сдвиг  $\delta = \delta(q)$  при каждом фиксированном значении  $0 < q < \pi/6$  согласно определению (19), (65) выражается через  $\delta' = \delta'(q)$  по формуле

$$\delta = \frac{\pi}{4} - \delta' + \pi m \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (32)$$

Используя соотношение (31), в результате тождественных преобразований (29) получим следующую систему интегральных уравнений:

$$\begin{cases} \chi_0(\rho) - \frac{\pi}{2} \int_0^\infty J_0(q\rho<) Y_0(q\rho>) V_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho' \\ \quad = \lambda J_0(q\rho) \int_0^\infty J_0(q\rho) V_0(\rho) \chi(\rho) \rho d\rho, \\ \chi_i(\rho) + \int_0^\infty K_{6i}(k\rho>) I_{6i}(k\rho<) V_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho' = 0, \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (33)$$

Введем матричные интегральные операторы

$$\begin{aligned} C(\rho, \rho') \chi(\rho') &= \begin{cases} \chi_0(\rho) - \frac{\pi}{2} \int_0^\infty J_0(q\rho<) Y_0(q\rho>) V_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \\ \chi_i(\rho) + \int_0^\infty K_{6i}(k\rho>) I_{6i}(k\rho<) V_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \quad i \neq 0, \end{cases} \\ D(\rho, \rho') \chi(\rho') &= \begin{cases} J_0(q\rho) \int_0^\infty J_0(q\rho) V_0(\rho) \chi(\rho) \rho d\rho, \\ 0, \quad i \neq 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (34)$$

где  $\chi(\rho) = (\chi_0(\rho), \chi_1(\rho), \dots)^T$  - вектор-функция.

В обозначениях (34) имеем обобщенную задачу на собственные значения для системы интегральных уравнений (33)

$$(C(\rho, \rho') - \lambda D(\rho, \rho')) \chi(\rho') = 0 \quad (35)$$

относительно пары неизвестных: вектор-функции  $\chi(\rho')$  и спектрального параметра  $\lambda = \frac{\pi}{2} \operatorname{ctg} \delta'$ . Дополним уравнение (35) условием ортогональности

$$\begin{aligned} F(\lambda, \chi) &= (V(\rho) \chi(\rho), (C(\rho, \rho') - \lambda D(\rho, \rho')) \chi(\rho')) = 0, \\ V(\rho) \chi(\rho) &= (V_1(\rho) \chi(\rho), V_2(\rho) \chi(\rho), \dots)^T. \end{aligned} \quad (36)$$

Из условия ортогональности имеем выражение для вычисления спектрального параметра  $\lambda$

$$\lambda = \frac{(V(\rho)\chi(\rho), C(\rho, \rho')\chi(\rho'))}{(V(\rho)\chi(\rho), D(\rho, \rho')\chi(\rho'))}, \quad (37)$$

которое соответствует вариационному функционалу Швингера [16]. Уравнение (35) может быть получено также вариацией этого функционала.

## 2.2 Итерационная схема решения задачи рассеяния

Используя симметричность ядра, уравнение Фредгольма (35) на полуоси  $\Omega = \mathbf{R}_+^1$  сводится к паре уравнений Вольтера на  $\Omega = [0, \rho] \cup [\rho, \infty)$  с заменой переменной  $0 \leq \zeta = \rho/(1 + \rho) < 1$  на интервал  $[0, 1]$ , позволяющей использовать аппроксимации на равномерной сетке узлов  $\Omega_h$  и подобрать подходящее значение  $\rho_{max} \gg 1$ .

При дискретизации на подходящей сетке узлов  $\Omega_h$  задача (35, 37) сводится к обобщенной алгебраической задаче на собственные значения

$$(\bar{C} - \tilde{\lambda}\bar{D})\tilde{\chi} = 0, \quad (38)$$

$$F(\tilde{\lambda}, \tilde{\chi}) = (V\tilde{\chi}, (\bar{C} - \tilde{\lambda}\bar{D})\tilde{\chi}) = 0, \quad (39)$$

где квадратные матрицы  $\bar{C}$  и  $\bar{D}$  имеют размерность  $(Ngrid \times Ndim) \times (Ngrid \times Ndim)$ , а вектор  $\tilde{\chi}$  имеет размерность  $Ngrid \times Ndim$ . Здесь  $Ngrid$  - число узлов сетки  $\Omega_h$  и  $Ndim$  - число уравнений. Для численного дифференцирования решения системы (35) была использована аппроксимация до шестого порядка производных в узлах сетки  $\Omega_h$ .

Представим задачу на собственные значения (38)-(39) в виде нелинейного уравнения

$$\varphi(a, \tilde{\lambda}, \tilde{\chi}) = \begin{pmatrix} (\bar{C} - \tilde{\lambda}\bar{D})\tilde{\chi} \\ F(\tilde{\lambda}, \tilde{\chi}) \end{pmatrix} = 0 \quad (40)$$

относительно пары неизвестных  $z = \{\tilde{\lambda}, \tilde{\chi}\} \in R \times Y$ ,  $Y \subseteq B$  при фиксированном значении параметра  $a = k \in R$ .

Рассмотрим схему решения нелинейного уравнения на основе непрерывного аналога метода Ньютона, которая заключается в замене исходной нелинейной

стационарной задачи (40) эволюционной задачей Коши [18]:

$$\varphi'(a, z(t)) \frac{dz(t)}{dt} = -\varphi(a, z(t)). \quad (41)$$

$$z(0) = z_0. \quad (42)$$

Здесь  $t$  ( $0 \leq t < \infty$ ) - непрерывный параметр, от которого зависит траектория  $z(t)$ :  $\varphi'$  - производная Фреше;  $z_0$  - элемент в окрестности искомого решения  $z^* = (\lambda^*, y^*)$  уравнения (40). Доказательство сходимости непрерывной траектории  $z(t)$  при  $t \rightarrow \infty$  к решению  $z^*$  при условии непрерывности  $\varphi$  и  $\varphi'$  и существовании ограниченного оператора  $(\varphi')^{-1}$  в окрестности  $z^*$  основано на существовании интеграла задачи Коши (41)-(42):

$$\varphi(a, z(t)) = e^{-t} \varphi(a, z_0). \quad (43)$$

Дискретная аппроксимация по параметру  $t$  задачи (41)-(42) на основе метода Эйлера сводит ее к решению последовательности линейных задач:

$$\begin{aligned} \varphi'(a, z_k) \Delta z_k &= -\varphi(a, z_k), \\ z_{k+1} &= z_k + \tau_k \Delta z_k, \end{aligned} \quad (44)$$

причем специальным выбором параметра  $\tau_k$  можно оптимизировать скорость и устойчивость сходимости  $z_k \rightarrow z^*$  [19, 20].

Для численного решения задачи (40) была использована реализация итерационной схемы (44), предложенная в работе [15].

$$\begin{cases} v_n = -\tilde{\chi}^{(n)}, \\ (\bar{C} - \tilde{\lambda}_n \bar{D}) a_n = \bar{D} \tilde{\chi}^{(n)}, \\ \mu_n = \frac{(V \tilde{\chi}^{(n)}, \bar{C} \tilde{\chi}^{(n)})}{(V \tilde{\chi}^{(n)}, \bar{D} \tilde{\chi}^{(n)})} - \tilde{\lambda}_n, \\ \tilde{\chi}^{(n+1)} = \tilde{\chi}^{(n)} + \tau_n (v_n + u_n \mu_n), \\ \tilde{\lambda}_{n+1} = \tilde{\lambda}_n + \tau_n \mu_n, \end{cases} \quad (45)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ ;  $\{\tilde{\lambda}_0, \tilde{\chi}^{(0)}\}$  - начальное приближение из окрестности искомого решения. Для выбора итерационного шага  $\tau_n$  применялась формула  $\tau_n = \Delta(0)/(\Delta(0) + \Delta(1))$  [19], где  $\Delta(t)$  - главная компонента невязки (45) на  $C^2$ . При этом использовалась равномерная сетка узлов  $\Omega_h = \{\zeta_0 = 10^{-5}, \zeta_{i+1} = \zeta_i + h, \zeta_{Ngrid} =$

Таблица 1: Значения фазового сдвига  $\delta$ , в зависимости от импульса  $q$  и числа уравнений  $N$ . В колонке  $\infty$  приведены значения  $\delta$ , полученные экстраполяцией по числу уравнений. Для сравнения в первой колонке даны значения фазового сдвига  $\delta_{BO}$  первого уравнения при  $N = 1$  системы (27) с потенциалом  $V_0^{BO}(\rho) = \epsilon_0(\rho) - \epsilon_0^{(0)}$ , а в десятой колонке - точный фазовый сдвиг  $\delta_{exact} = 3/2\pi - \arctg(8\sqrt{3}q/\pi/(1 - q^2/(\pi/6)^2))$  [7] приведены с 4 значащими шифрами

$q \setminus N$	$\delta_{BO}$	1	2	3	4	5	6	$\infty$	$\delta_{exact}$
0.002	6.539	4.066	4.701	4.704	-	-	-	4.705	4.703
0.10	4.167	4.253	4.277	4.280	4.282	4.283	4.284	4.284	4.283
0.20	3.929	3.869	3.899	3.904	3.907	3.908	3.910	3.911	3.910
0.30	3.647	3.557	3.596	3.604	3.607	3.609	3.610	3.612	3.611
0.40	3.374	3.305	3.353	3.363	3.366	3.368	3.369	3.372	3.373
0.50	3.154	3.097	3.157	3.169	3.172	3.174	3.176	3.179	3.181

0.99.  $h = (\zeta_{Ngrid} - \zeta_0)/Ngrid$ . аппроксимирующая конечный интервал  $0 \leq \zeta = \rho/(1 + \rho) < 1$  при значении  $Ngrid = 840$ ,  $h \approx 0.00125$ . Результаты вычисления фазового сдвига представлены в таблице 1, с увеличением числа уравнений до  $Ndim = 6$  они сходятся к известным аналитическим значениям с точностью  $2 \cdot 10^{-3}$ . При экстраполяции по номеру  $Ndim$  достигается точность  $1 \cdot 10^{-3}$ . Как видно из таблицы 1, при одном и том же числе уравнений значения фазового сдвига получаются тем точнее, чем меньше импульс  $q$ . На рис. 3 показаны собственные функции непрерывного спектра  $\chi_j$ ,  $j = 0, \dots, 5$  при  $q = 0.5$ . Как видно из рис. 3, с увеличением номера  $j$  от  $j = 0$  до  $j = 5$  абсолютные значения функций уменьшаются от величины порядка единицы до величины порядка  $2 \cdot 10^{-4}$ , что демонстрирует сходимость адиабатического разложения (21). Для достижения большей точности  $\delta$  требуется увеличение значения  $\rho_{max}$  до  $\rho_{max} \gg 1000$ .

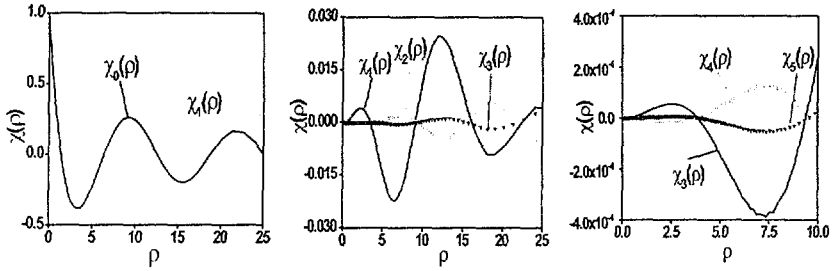


Рис. 3: Собственные функции непрерывного спектра  $j=0, \dots, 5$  при  $q = 0.5$

### 2.3 Задача дискретного спектра в многоканальном приближении

Рассмотрим задачу на связанные состояния системы трех частиц для уравнения (3). Для случая закрытого канала 0 система уравнений (22) принимает следующий вид

$$\begin{cases} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \bar{q}^2 \right) \chi_0(\rho) = V_0(\rho) \chi_0(\rho), \\ \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} - \left( \frac{6i}{\rho} \right)^2 - k^2 \right) \chi_i(\rho) = V_i(\rho) \chi_i(\rho), \quad i \neq 0, \end{cases} \quad (46)$$

где  $\varepsilon = \bar{q}^2(k) = -q^2(k) = -2E + \epsilon_0^{(0)}$  - энергия связи трех частиц, отсчитанная от двухчастичного порога,  $-k^2 = 2E$  - энергия системы трех частиц, эффективные потенциалы  $V_0(\rho)$  и  $V_i(\rho)$  определены соотношениями (28). Решения системы (46) можно представить в виде интегральных уравнений (81):

$$\begin{cases} \chi_0(\rho) = - \int_0^\infty K_0(\bar{q}\rho_>) I_0(\bar{q}\rho_<) V_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \\ \chi_i(\rho) = - \int_0^\infty K_{6i}(k\rho_>) I_{6i}(k\rho_<) V_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (47)$$

Введем матричные интегральные операторы

$$D(\rho, \rho') \chi(\rho') = \begin{cases} - \int_0^\infty K_0(\bar{q}\rho_>) I_0(\bar{q}\rho_<) V_0(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \\ - \int_0^\infty K_{6i}(k\rho_>) I_{6i}(k\rho_<) V_i(\rho') \chi(\rho') \rho' d\rho', \quad i \neq 0. \end{cases} \quad (48)$$

Тогда (47) примет вид задачи на собственные значения относительно пары неизвестных: вектор-функции  $\chi(\rho')$  и спектрального параметра  $k$

$$(\mathbf{I} - D(\rho, \rho')) \chi(\rho') = 0, \quad (49)$$

где  $\mathbf{I}$  - единичный оператор. Собственные функции уравнения (49) удовлетворяют условию ортогональности

$$\begin{aligned} F(k, \chi) &= (V(\rho)\chi(\rho), (\mathbf{I} - D(\rho, \rho'))\chi(\rho')) = 0, \\ V(\rho)\chi(\rho) &= (V_1(\rho)\chi(\rho), V_2(\rho)\chi(\rho), \dots)^T. \end{aligned} \quad (50)$$

## 2.4 Итерационная схема решения задачи дискретного спектра

Задачу на собственные значения (49)-(50) можно представить как нелинейное уравнение (40)

$$\varphi(k, \chi) = \begin{pmatrix} (\mathbf{I} - D)\chi \\ F(k, \chi) \end{pmatrix} = 0 \quad (51)$$

относительно пары неизвестных  $z = \{k, \chi\} \in R \times L_2$ , зависящих от дополнительного параметра  $0 \leq t < \infty$ , т.е.  $z(t) = \{k(t), \chi(t)\}$ . Тогда вместо (49) имеем основное эволюционное уравнение для нахождения траектории  $z(t)$

$$(\mathbf{I} - D) \frac{d\chi}{dt} - D'_k \chi \frac{dk}{dt} = -(\mathbf{I} - D)\chi \quad (52)$$

с начальными условиями  $z(0) = \{k(0) = k_0, \chi(0) = \chi^{(0)}\}$  из окрестности решения, где  $D'_k$  обозначает производную от интегрального оператора  $D$  по  $k$ .

Если оператор  $V(\mathbf{I} - D)\chi$  самосопряженный и выполняется условие

$$(\chi, V(\mathbf{I} - D)\chi) = (V\chi, (\mathbf{I} - D)\chi),$$

то вместо (52) имеем дополнительное эволюционное уравнение

$$\left( V\chi, (\mathbf{I} - D) \frac{d\chi}{dt} \right) + \left( V\chi, (\mathbf{I} - D) \frac{d\chi}{dt} - D'_k \chi \frac{dk}{dt} \right) = -(V\chi, (\mathbf{I} - D)\chi), \quad (53)$$

из которого следует

$$\left( V\chi, (\mathbf{I} - D) \frac{d\chi}{dt} \right) = 0. \quad (54)$$

Используя представление для полной производной

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \chi}{\partial k} \frac{dk}{dt}, \quad (55)$$

получаем систему уравнений для нахождения производных

$$\begin{cases} \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\chi, \\ (\mathbf{I} - D) \frac{\partial \chi}{\partial k} = D'_k \chi. \end{cases} \quad (56)$$

Таблица 2: Значения энергии основного состояния в зависимости от числа уравнений  $N$  и шага  $h$ . В последней колонке приведены значения энергии, полученные экстраполяцией по шагу  $h$ . Экстраполяция по числу уравнений  $N$  даст значение энергии  $2E_b = -1.096\,622\,711 + O(1 \cdot 10^{-10}) = 2E^{exact} = -\pi^2/9$  [7]

$N$	$h$	$h/2$	$h/4$	$h \rightarrow 0$
1	-1.096 514 763	-1.096 460 535	-1.096 447 064	-1.096 442 612
2	-1.096 692 582	-1.096 637 992	-1.096 624 431	-1.096 619 948
3	-1.096 695 093	-1.096 640 489	-1.096 626 924	-1.096 622 440
4	-1.096 695 313	-1.096 640 706	-1.096 627 140	-1.096 622 656
5	-1.096 695 352	-1.096 640 744	-1.096 627 177	-1.096 622 694
6	-1.096 695 362	-1.096 640 755	-1.096 627 178	-1.096 622 705

Подстановка (55) с учетом (56) в соотношение (54) приводит к формуле для вычисления производной

$$\frac{dk}{dt} = \frac{(V\chi, (I - D)\chi)}{(V\chi, D_k^t\chi)}. \quad (57)$$

Функционал правой части (57) совпадает с вариационным функционалом Швингера.

При дискретизации на подходящей сетке узлов  $\Omega_h$  и аппроксимации производных решения задача (49)-(50) сводится к алгебраической задаче на собственные значения

$$(I - \bar{D})\tilde{\chi} = 0, \quad (58)$$

$$F(\tilde{k}, \tilde{\chi}) = (V\tilde{\chi}, (I - \bar{D})\tilde{\chi}) = 0, \quad (59)$$

где  $I$  - единичная матрица. Квадратные матрицы  $I$  и  $\bar{D}$  имеют размерность  $(Ngrid \times Ndim) \times (Ngrid \times Ndim)$ , а вектор  $\tilde{\chi}$  имеет размерность  $Ngrid \times Ndim$ . Здесь  $Ngrid$  - число узлов сетки  $\Omega_h$  и  $Ndim$  - число уравнений.

Для численного решения задачи (58)-(59) была использована следующая ите-



рациональная схема

$$\begin{cases} v_n = -\tilde{\chi}^{(n)}, \\ (I - \bar{D})u_n = \bar{D}'_k \tilde{\chi}^{(n)}, \\ \mu_n = \frac{(V\tilde{\chi}^{(n)}, (I - \bar{D})\tilde{\chi}^{(n)})}{(V\tilde{\chi}^{(n)}, \bar{D}'_k \tilde{\chi}^{(n)})}, \\ \tilde{\chi}^{(n+1)} = \tilde{\chi}^{(n)} + \tau_n(v_n + u_n \mu_n), \\ \tilde{k}_{n+1} = \tilde{k}_n + \tau_n \mu_n. \end{cases} \quad (60)$$

$n = 0, 1, 2, \dots; \{\tilde{k}_0, \tilde{\chi}^{(0)}\}$  - начальное приближение из окрестности искомого решения.

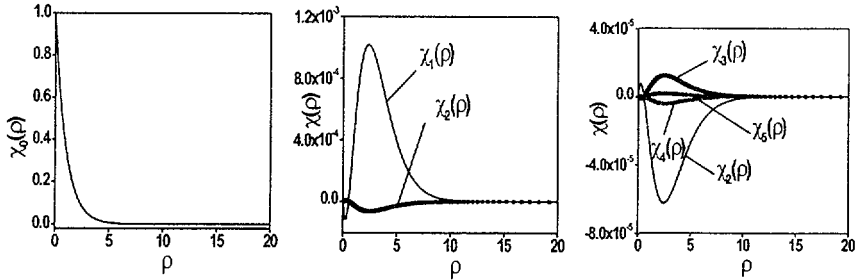


Рис. 4: Компоненты  $\chi_j$   $j = 0, \dots, 5$  собственной функции  $\Psi_b$  основного состояния дискретного спектра

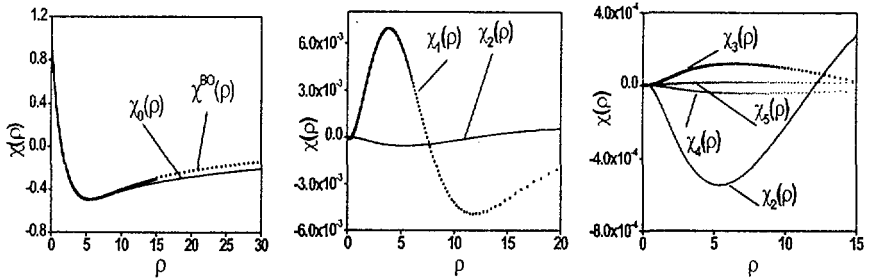


Рис. 5: Компоненты  $\chi_j$   $j = 0, \dots, 5$  собственной функции  $\Psi_{hb}$  состояния со значением импульса  $q = 0$  и пороговой энергией  $2E = -\bar{k}^2$

При этом использовалась равномерная сетка узлов  $\Omega = \{\zeta_0 = 10^{-10}, \zeta_{i+1} = \zeta_i + h, \zeta_{Ngrid} = 0.98, h = (\zeta_{Ngrid} - \zeta_0)/Ngrid\}$ , аппроксимирующая конечный интервал  $0 \leq \zeta = \rho/(1 + \rho) < 1$  при значении  $Ngrid = 200, h \approx 0.005$ .

Результаты вычисления значения энергии основного состояния (b), представлены в таблице 2. Значение энергии  $2E_b = -1.096622711 \dots$  этого состояния, полученное путем экстраполяции результатов из колонки  $h \rightarrow 0$  по числу уравнений, с точностью  $10^{-9}$  совпадает с аналитическим значением энергии  $2E_b^{exact} = -\pi^2/9$  [7]. На рис. 4 показаны собственные функции дискретного спектра  $\chi_j, j = 0, \dots, 5$  основного состояния (b). Как видно из рис. 4, с увеличением номера  $j$  от  $j = 0$  до  $j = 5$  абсолютные значения функций уменьшаются от величины порядка единицы до величины порядка  $10^{-6}$ , что демонстрирует сходимость адиабатического разложения (21).

Результаты вычисления значения энергии состояния (BO) для первого уравнения системы (46) с потенциалом  $V_0^{BO}(\rho) = \epsilon_0(\rho) - \epsilon_0^{(0)}$  дают нижнюю оценку  $2E^{BO} \approx -0.275113$  точного значения энергии системы трех частиц  $2E_{hb}^{exact} = \epsilon_0^{(0)} = -\pi^2/36$  состояния (hb) со значением импульса  $q = 0$ , отсчитанного от парного порога [7]. Собственная функция  $\chi^{BO}(\rho)$  представлена на рис. 5. Ее следует сравнивать с приведенной на том же рисунке первой компонентой собственной функции  $\chi(\rho)$  состояния (hb) с энергией  $2E_{hb} = -0.2739$ , вычисленной из системы (46) по схеме обратных итераций (60) со сдвигом  $\bar{q} = 0.01$  сетки узлов  $\Omega$  при  $\rho_{max} = 60$ . Экстраполяция расчетов для различных значений  $\rho_{max}$  показала, что с увеличением  $\rho_{max}$  компоненты  $\chi_j^{hb}(\rho), j \geq 1$ , представленные качестве примера вычислений при  $\rho_{max} = 60$  на рис. 5, убывают как  $\rho^{-2}$ . Отсюда следует, что пороговое значение  $2E_{hb}^{exact} = -\pi^2/36$  достигается при  $\rho \rightarrow \infty$  и соответствует асимптотическим граничным условиям (20), реализованным в виде  $\lim_{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\rho} \chi_0^{hb}(\rho) = const, \chi_j^{hb}(\rho) \equiv 0$  при  $j \neq 0$ .

При реализации алгоритма (60) на ЭВМ для экономии оперативной памяти была также использована итерационная схема без обращения матриц:

$$\begin{cases} (V\tilde{\chi}^{(m)}, \tilde{\chi}^{(m)}) = (V\tilde{\chi}^{(m)}, \bar{D}_{m+1}\tilde{\chi}^{(m)}), & \bar{D}_{m+1} = \bar{D}(\tilde{k}_{m+1}), \\ \tilde{\chi}^{(m+1)} = \bar{D}_{m+1}\tilde{\chi}^{(m)}, & m = 0, 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (61)$$

которая сходится примерно в 1.5 раза медленнее, чем (60).

### 3 Заключение

В данной работе построены устойчивые ньютоновские итерационные схемы решения с заданной точностью многоканальной спектральной задачи для системы одномерных интегральных уравнений. Двумерная задача рассеяния формулируется с помощью вариационного функционала Швингера и пробных функций в виде адиабатического базиса как спектральная задача для системы одномерных интегральных уравнений относительно пары неизвестных: собственной функции и фазового сдвига в открытых каналах и собственной функции и энергии в закрытых каналах.

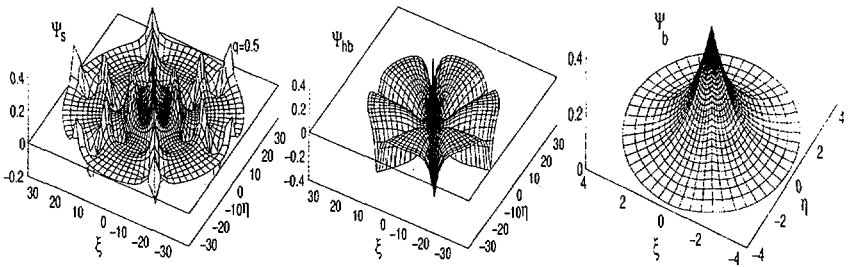


Рис. 6: Волновые функции задачи рассеяния  $\Psi_s$  при  $q = 0.5$ , задачи дискретного спектра  $\Psi_{hb}$  при  $2E_{hb} \approx -\pi^2/36$  ( $q \approx 0$ ) и  $\Psi_b$  при  $2E_b \approx -\pi^2/9$

Эффективность предложенных итерационных схем и сходимость по числу базисных функций продемонстрирована на задаче рассеяния с закрытыми каналами и задаче на связанные состояния для системы трех тождественных частиц на прямой с притягивающими парными потенциалами нулевого радиуса. В качестве примера на рис. 6 показаны волновые функции  $\Psi_s(\rho, \theta)$  задачи рассеяния (15-19) для  $q = 0.5$ , а также  $\Psi_{hb}(\rho, \theta)$  и  $\Psi_b(\rho, \theta)$  задачи на связанные состояния (15-18) и (20), вычисленные в представлении (21) по схемам (45) и (60), соответственно. Заметим, что необходимость исследования состояний типа (hb) возникает, например, в расчетах слабосвязанных состояний, опреде-

ляющих резонансное образование мезомолекул изотопов водорода [10, 13] или тримера атомов гелия [11].

Предложенный подход допускает прямое обобщение на многомерные и многоканальные задачи рассеяния при подходящем выборе базисных функций и аппроксимации решений системы одномерных интегральных уравнений, например, в виде пробных функций с заданными вариационными параметрами в области действия потенциала. Вне этой области задаются асимптотические состояния с искомой амплитудой рассеяния, параметры которой находятся с помощью предложенной итерационной схемы.

Авторы выражают благодарность А. Амайе-Таппе, Дж. Дж. Поппелю, Ф.М. Пенькову, В.В Пуньшеву и Д.В. Проскурину за обсуждение и ценные замечания. Работа поддержана грантами РФФИ № 00-01-00617, № 00-02-16337 и № 00-02-81023-Bel2000\_a.

## 4 Приложение. Построение функции Грина

### 4.1 Задача рассеяния

Рассмотрим задачу рассеяния для дифференциального уравнения

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} + q^2 \right) \chi(\rho) = V(\rho) \chi(\rho) \quad (62)$$

с граничным условием

$$\alpha \chi'(0) + \beta \chi(0) = 0. \quad (63)$$

Пусть функция  $p(\rho) > 0$  положительна и непрерывно дифференцируема на интервале  $[0, \infty)$ , а действительная функция  $V(\rho)$  непрерывна на интервале  $[0, \infty)$  и удовлетворяет условию

$$V(\rho) - \frac{1}{4} \left( \frac{p'(\rho)}{p(\rho)} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{p''(\rho)}{p(\rho)} \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow O(\rho^{-1-\varepsilon}), \quad \varepsilon > 0. \quad (64)$$

Тогда асимптотика решения  $\chi(\rho)$  при  $\rho \rightarrow \infty$  имеет вид

$$\chi(\rho) \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{\sin(q\rho + \delta)}{\sqrt{p(\rho)}}. \quad (65)$$

Здесь  $\delta$  - искомый фазовый сдвиг при фиксированном значении спектрального параметра  $q > 0$ ,  $\delta = \delta(q)$ . Частное решение задачи рассеяния (62), (63), (65) состоит в нахождении пары неизвестных: нетривиального решения  $\chi(\rho)$  и фазового сдвига  $\delta(q)$ . Перепишем уравнение (62) в следующем виде

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} + q^2 - V_1(\rho) \right) \chi(\rho) = V_2(\rho) \chi(\rho), \quad V_2(\rho) = V(\rho) - V_1(\rho), \quad (66)$$

где функция  $V_1(\rho)$  удовлетворяет условиям (64), а  $V_2(\rho)$  удовлетворяет условию

$$V_2(\rho)|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow O(\rho^{-1-\varepsilon}), \quad \varepsilon > 0, \quad (67)$$

причем для уравнения

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} + q^2 - V_1(\rho) \right) y(\rho) = 0 \quad (68)$$

известны фундаментальные решения  $y(\rho) = \{y_1(\rho), y_2(\rho)\}$ .

Найдем функцию Грина для задачи (66) с граничными условиями (63), (65). Для этого построим функцию  $y_1(\rho)$ , являющуюся решением уравнения (68), удовлетворяющего левому краевому условию

$$\alpha y_1'(0) + \beta y_1(0) = 0. \quad (69)$$

Очевидно, в силу сделанных предположений о коэффициентах уравнения, функция  $y_1(\rho)$  всегда может быть построена как решение начальной задачи для уравнения (68) с начальными условиями

$$y_1(0) = C\alpha, \quad y_1'(0) = -C\beta, \quad (70)$$

где  $C$  - произвольная постоянная. Построим удовлетворяющую условию (65) функцию  $y_2(\rho)$ , являющуюся решением уравнения (68), такую, что вронскиан  $W(y_1(\rho), y_2(\rho))$  двух линейно независимых решений  $y_1(\rho), y_2(\rho)$  имеет вид

$$W(y_1(\rho), y_2(\rho)) = 1/p(\rho). \quad (71)$$

Тогда функция Грина

$$G(\rho, \rho') = \begin{cases} y_2(\rho') y_1(\rho), & 0 \leq \rho \leq \rho', \\ y_1(\rho') y_2(\rho), & \rho' \leq \rho \leq \infty \end{cases} \quad (72)$$

удовлетворяет следующим условиям:

- 1) как функция переменной  $\rho$ ,  $G(\rho, \rho')$  удовлетворяет уравнению (68) при  $0 < \rho < \rho'$  и  $\rho' < \rho < \infty$ ;
- 2)  $G(\rho, \rho')$  удовлетворяет граничным и асимптотическим условиям (63) и (65);
- 3)  $G(\rho, \rho')$  непрерывна на интервале  $[0, \infty)$ , а ее первая производная имеет в точке  $\rho = \rho'$  разрыв первого рода с величиной скачка предельных значений, равной

$$\left. \frac{d}{d\rho} G(\rho, \rho') \right|_{\rho'-0}^{\rho'+0} = W(y_1(\rho'), y_2(\rho')) = 1/p(\rho'). \quad (73)$$

О существовании решения исходной задачи (66), (63), (65) указано в [21].

**Теорема 1.** Для любых непрерывных функций  $V_1(\rho)$  и  $V_2(\rho)$ , которые удовлетворяют условиям (64), (67), существует решение задачи рассеяния (66) с граничными условиями (63), (65), которое на интервале  $[0, \infty)$  имеет вид

$$\chi(\rho) = y_1(\rho) + \int_0^\infty G(\rho, \rho') V_2(\rho') \chi(\rho') p(\rho') d\rho'. \quad (74)$$

## 4.2 Задача дискретного спектра

Рассмотрим задачу на собственные значения для дифференциального уравнения

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} - k^2 \right) \chi(\rho) = V(\rho) \chi(\rho) \quad (75)$$

с граничными условиями

$$\alpha_1 \chi'(0) + \beta_1 \chi(0) = 0, \quad \alpha_2 \chi'(\infty) + \beta_2 \chi(\infty) = 0. \quad (76)$$

Пусть функция  $p(\rho) > 0$  положительна и непрерывно дифференцируема на интервале  $[0, \infty)$ , а действительная функция  $V(\rho)$  непрерывна на интервале  $[0, \infty)$  и удовлетворяет условиям (64). Частное решение задачи дискретного спектра (75)-(76) состоит в нахождении пары неизвестных: нетривиального решения  $\chi(\rho)$  и спектрального параметра  $k^2 > 0$ , т.е.  $2E = -k^2 < 0$ .

Это уравнение можно переписать в следующем виде

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} - k^2 - V_1(\rho) \right) \chi(\rho) = V_2(\rho) \chi(\rho), \quad V_2(\rho) = V(\rho) - V_1(\rho), \quad (77)$$

где функция  $V_1(\rho)$  удовлетворяет условиям (64),  $V_2(\rho)$  удовлетворяет условиям (67) и известны фундаментальные решения  $y(\rho) = \{y_1(\rho), y_2(\rho)\}$  уравнения

$$\left( \frac{1}{p(\rho)} \frac{d}{d\rho} p(\rho) \frac{d}{d\rho} - k^2 - V_1(\rho) \right) y(\rho) = 0. \quad (78)$$

В дальнейшем будем рассматривать такие функции  $p(\rho)$ , для которых однородная задача (78) не имеет нетривиальных решений, удовлетворяющих граничным условиям (76). Функция Грина задачи (77)

$$G(\rho, \rho') = \begin{cases} y_2(\rho') y_1(\rho), & 0 \leq \rho \leq \rho', \\ y_1(\rho') y_2(\rho), & \rho' \leq \rho \leq \infty, \end{cases} \quad (79)$$

где  $y_1(\rho)$  и  $y_2(\rho)$  удовлетворяют граничным условиям

$$\alpha_1 y_1'(0) + \beta_1 y_1(0) = 0, \quad \alpha_2 y_2'(\infty) + \beta_2 y_2(\infty) = 0, \quad (80)$$

обладает теми же свойствами, что и функция Грина задачи (66).

О существовании решения исходной задачи (76), (77) указано в [21].

**Теорема 2.** Если функция  $p(\rho)$  такая, что не существует нетривиальных решений уравнения (78), удовлетворяющих граничным условиям (76), то для любых непрерывных функций  $V_1(\rho)$  и  $V_2(\rho)$ , которые удовлетворяют условиям (64), (67) существует решение задачи на собственные значения (77) с граничными условиями (76), которое на интервале  $[0, \infty)$  имеет вид

$$\chi(\rho) = \int_0^\infty G(\rho, \rho') V_2(\rho') \chi(\rho') p(\rho') d\rho'. \quad (81)$$

## Список литературы

- [1] Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., Изд. ЛГУ, 1975.
- [2] А. А. Квицинский и др. // ЭЧАЯ. Т. 176 вып. 2. С. 267 (1986).
- [3] Л. В. Канторович, В. И. Крылов — Приближенные методы высшего анализа. ГИТТЛ, М. 1952
- [4] W. Gibson, S. Y. Larsen, and J. J. Popiel // Phys. Rev.. A 35, 4919 (1987).

- [5] S. I. Vinitsky, B. L. Markovsky, A. A. Suzko // *Yad. Fiz.* 55, 669 (1992); *Sov. J. Nucl Phys*, 55, 371 (1992)
- [6] S. Y. Larsen, J. J. Popiel // *Few-Body Systems*, 15, 129 (1993)
- [7] A. Amaya-Tapia, S. Y. Larsen, J. J. Popiel // *Few-Body Systems*, 23, 87 (1997)
- [8] M. B. Kadomtsev, S. I. Vinitsky // *J. Phys. B*, V. 20, p. 5723 (1987)
- [9] V. V. Pupyshev // *Few-Body Systems*, V. 8, p. 105 (1990)
- [10] I. V. Puzynin, T. P. Puzynina, Yu. S. Simirnov, S. I. Vinitsky // *ЯФ*, Т. 56, Вып. 7, 82 (1993)
- [11] E. Nielsen, A. S. Jensen, D. V. Fedorov // *Few-Body Systems Supl*, 10, 277 (1999)
- [12] С. И. Вилицкий, С. И. Ларсен, Д. В. Павлов, Д. В. Проскурин // *ЯФ*, Т. 64, 29 (2001)
- [13] L. I. Ponomarev, I. V. Puzynin, T. P. Puzynina and L. N. Somov // *Ann. Phys*, V. 110, p 247 (1978)
- [14] С. И. Вилицкий, И. В. Пузынин, Ю. С. Смирнов // *ЯФ*, Т. 52, Вып. 4(10), С. 1176 (1990)
- [15] О. Чулуунбаатар, И. В. Пузынин, С. И. Вилицкий, препринт ОИЯИ, P11-2001-61, Дубна (2000)
- [16] Т. Ю. Ву, Т. Омура, *Квантовая теория рассеяния*, Москва, Наука, 1969.
- [17] А. Л. Зубарев, *Вариационный принцип Швингера в квантовой механике*. М.: Энергоиздат, 1981.
- [18] Т. Жаплав, И. В. Пузынин // *ЖВМиМФ*, Т. 32, N. 1, С. 3 (1992)
- [19] В. В. Ермаков, Н. Н. Калиткин // *ЖВМиМФ*, Т. 21, С. 491 (1981)
- [20] Т. Жаплав, И. В. Пузынин // *ЖВМиМФ*, Т. 32, N. 6, С. 846 (1992)
- [21] А. Н. Тихонов, А. Б. Васильева, А. Г. Свешников, *Дифференциальные уравнения*, Москва, Физматлит, 1998.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 декабря 2001 года.