СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4-5660

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б.Н. Захарьев, О. Лхагва, С.А. Ниязгулов,

Ю.И. Фенин.

ОДНОСТОРОННИЕ ГРАНИЦЫ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ РАССЕЯНИЯ. II

1971

Р4-5660

Б.Н. Захарьев, О. Лхагва, С.А. Ниязгулов,

Ю.И. Фенин.

ОДНОСТОРОННИЕ ГРАНИЦЫ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ РАССЕЯНИЯ. II

Введение

В основе формализма многоканальной связи лежит процедура сведения решения уравнения Шредингера к более простой системе уравнений для коэффициентов F_n разложения волновой функции всей системы в ряд[x/]

$$\Psi = \sum_n F_n \Phi_n \approx \sum_n^N F_n \Phi_n \qquad (1)$$

по некоторому полному набору известных вспомогательных функций Φ_n.

В таком подходе оказывается возможным свести к минимуму количество феноменологических предположений. Например, в ряде случае требуется лишь введение фундаментального двухчастичного взаимодействия для полного описания системы и нет необходимости привлекать такие понятия, как среднее поле, остаточные взаимодействия и т.п.

В последние годы на этом пути были достигнуты значительные успехи: разработаны алгоритмы расчёта реакций самого общего типа (см., например, обзор[/1/]), но до сих пор остается довольно слабо изученным вопрос об оценке погрешностей[/2/], возникающих при обрыве ряда (1) (пренебрежение членами с $n>N$).

В квантовой механике имеется хорошо известный пример, когда такого рода ошибки поддаются строгому контролю. При расчётах вариационным методом уровней связанных состояний их приближенные величины служат верхними границами для точных значений. (Возможны также и двухсто-

---

[x/] В разложении (1) может быть, кроме суммы, еще и интегральная часть (непрерывный спектр состояний Φ).

ронние оценки погрешностей[3]).Это обстоятельство широко используется, т.к. позволяет во многих случаях делать строгие выводы из сравнения теории с экспериментом, несмотря на то, что расчёты могут быть очень грубыми. Если экспериментальное значение энергии оказывается выше теоретической оценки, то делается совершенно определенное заключение, что исходные параметры теории были выбраны, неверно, -любые уточнения в расчётах только увеличат (!) расхождение с экспериментом.

В задачах непрерывного спектра ситуация значительно усложняется. Это связано с тем обстоятельством, что вариационный принцип здесь не имеет характера задачи на минимум, а лишь обеспечивает условие стационарности функционала, дающего значение амплитуды реакции.

Впервые односторонние оценки в задаче рассеяния были получены Като[4] (система 2-х тел). Затем в ряде работ Spruch с сотрудниками[5] показали, как в формализме многоканальной связи для многочастичных систем можно получить строгие границы на K-матрицу для процессов рассеяния при энергии (без перераспределения частиц) ниже порога деления системы на три и более фрагментов. В работе[6] (продолжением которой является данная работа) односторонние границы были получены для реакций с перераспределением частиц в методе выделения асимптотик[7]. В методе K-гармоник такие оценки получены О. Лхагвой[8]. В данной работе теорема об односторонних оценках доказывается для реакций выше порога развала системы на три и более фрагментов.

Основные уравнения

Проведем доказательство теоремы об односторонних оценках на K-матрицу таким образом, чтобы оно годилось для реакций общего типа.

Целесообразно проводить рассуждения на примере простейшей системы, в которой возможны процессы перераспределения частиц и развала системы на 3 фрагмента, а именно, в задаче трех тел, чтобы не загромождать доказательства несущественными деталями.

Будем искать волновую функцию системы в соответствии с процедурой выделения асимптотик[1,7] в виде:

$$\Psi = \Phi_{\text{асс.}} + \Phi_{\text{внутр}} \cdot \tag{2}$$

Здесь $\Phi_{\text{асс}} = \sum\limits_{\alpha n\ell m} F^{(2)}_{\alpha n\ell m} \Phi^{(2)}_{\alpha n\ell m} + \sum\limits_{\bar{k}} F^{(3)}_{\bar{K}} \Phi^{(3)}_{\bar{K}}$ содержит как асимптотику открытых двухфрагментных каналов $F^{(2)}_{\alpha n\ell m}\Phi^{(2)}_{\alpha n\ell m}$, так и каналов с тремя фрагментами $F^{(3)}_{\bar{K}}\Phi^{(3)}_{\bar{K}}$, причём пусть $F^{(2)}_{\alpha n\ell m}$ и $F^{(3)}_{\bar{K}}$ соответствуют аналитическому условию стоячих волн:

$$F^{(2)}_{\alpha n\ell m} = \frac{(a_{\alpha n\ell} \sin k_n R_\alpha + b_{\alpha n\ell} \cos k_n R_\alpha)}{R_\alpha} \cdot g(R_\alpha),$$

$$\Phi^{(2)}_{\alpha n\ell m} = Y_{\ell m}(\Omega_{R_\alpha}) \phi_n(\vec{\rho}_\alpha), \tag{3а}$$

$$F^{(3)}_{\bar{K}} = \frac{a_{\bar{K}} \sin k\rho_6 + b_{\bar{K}} \cos k\rho_6}{\rho_6^{5/2}} \cdot g(\rho_6), \tag{3б}$$

$$\Phi^{(3)}_{\bar{K}} = Y_{\bar{K}}(\Omega_5).$$

Здесь $\vec{\rho}_\alpha$ и $\vec{R}_\alpha$ – радиус-вектора соответственно относительного расстояния частиц в паре (α =12; 23; 32;) и расстояния третьей частицы до пары α ; ρ_6 – модуль шестимерного вектора $\vec{\rho}_6 = \{\vec{R}_\alpha, \vec{\rho}_6\}$, $\rho_6 = \sqrt{\rho_\alpha^2 + R_\alpha^2}$, а Ω_5 – пять его угловых переменных /3,9/; $\phi_n(\vec{\rho}_\alpha)$ – функция внутреннего движения пары α в состоянии n ; $g(r)$ – множитель, например вида $1-e^{-\alpha r}$, равный 1 при больших r и нулю при $r \to 0$, вводимый для того, чтобы устранить сингулярность в поведении $\Phi_{\text{асс}}$ при $R_\alpha \to 0$ и $\rho_6 \to 0$ /7/; константы $a_{\alpha n\ell m}$ и $a_{\bar{K}}$ задаются произвольно, а константы $b_{\alpha n\ell m}$ и $b_{\bar{K}}$ связаны с ними с помощью K –матрицы:

$$b = K a\,, \tag{4}$$

$Y_{\bar K}(\Omega_s)$ – обобщенная сферическая функция/9/, $\bar K$ – набор пяти квантовых чисел.

Особенность функции $\Phi_{\text{внутр}}$, являющейся остатком Ψ после выделения всех асимптотик, заключается в том, что она является квадратично-интегрируемой функцией, быстро затухающей вне области, где отличны от нуля все потенциалы. Поэтому $\Phi_{\text{внутр}}$ удобно приближенно искать в виде суперпозиции нескольких функций из полного набора $\{\Phi_\gamma^{L_2}\}$ пространства L_2 квадратично-интегрируемых функций:

$$\Phi_{\text{внутр}} \approx \Phi^N_{\text{внутр}} = \sum_\gamma^N F_\gamma \Phi_\gamma^{L_2}\ . \tag{5}$$

В качестве $\Phi_\gamma^{L_2}$ можно, например, взять функции свободного движения частиц в поле осциллятора; собственное значение, соответствующее функции $\Phi_\gamma^{L_2}$, будем обозначать ϵ_γ :

$$(T + V_{\text{мод.}})\,\Phi_\gamma^{L_2} = \epsilon_\gamma \Phi_\gamma^{L_2}\ . \tag{5a}$$

Таким образом, уравнение (2) можно рассматривать как разложение по "смешанному базису" $\{\Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{L_2}\}$. Ниже будет показано, что пренебрежение в (5) членами с $\gamma > N$ при достаточно большом N приводит к односторонней погрешности в K-матрице.

Будем в дальнейшем заменять индексом p те γ, для которых $\gamma \le N$, а индексом q остальные γ. Введем теперь для краткости обозначений вектор состояний $\hat\Phi_{L_2}$ с компонентами $\{\Phi^{(2)}_{an\ell m}, \Phi^{(3)}_{\bar K}, \Phi_p^{L_2}\} = \{\Phi_s\}$ и вектор $\hat\Phi_q$ с компонентами $\Phi_q^{L_2}$.

Подставим теперь разложение Ψ в уравнение Шредингера $(H-E)\Psi = 0$, умножим слева на Φ_s и Φ_q, проинтегрируем по переменным, от которых зависят Φ_s, Φ_q (для каждой компоненты свои переменные) :

$$\langle \Phi_s | H-E | \sum_{s'} F_{s'} \Phi_{s'} + \sum_q F_q \Phi_q \rangle_{\Phi_s} = 0, \qquad (6)$$

$$\langle \Phi_q | H-E | \sum_{s'} F_{s'} \Phi_{s'} \rangle + \langle \Phi_q (T+V_{мод}-E) \sum_{q'} F_{q'} \Phi_{q'} \rangle +$$

$$+ \langle \Phi_q (V_{12}+V_{13}+V_{23}-V_{мод}) \sum_{q'} F_{q'} \Phi_{q'} \rangle = 0. \qquad (7)$$

Здесь $\langle \quad \rangle_{\Phi_s}$ означает интегрирование по переменным компонент Φ_s. В системе бесконечного числа уравнений для F мы специально выделили части (7) и (6), чтобы исследовать влияние обрыва уравнений (7) на решение (6). Аналогично работе[5] введем операцию "непрерывного включения" отбрасываемых уравнений. С этой целью в системе уравнений (6), (7) введем в коэффициенты, осуществляющие зацепление (6) с (7), множители $\lambda^{1/2}$. Дополнительный множитель λ вводится перед последним членом в левой части (7):

$$\langle \Phi_s | H-E | \sum_{s'} F_{s'\lambda} \Phi_{s'} \rangle + \lambda^{1/2} \langle \Phi_s | H-E | \sum_{q'} F_{q'\lambda} \Phi_{q'} \rangle_{\Phi_s} = 0, \qquad (6a)$$

$$\lambda^{1/2} \langle \Phi_q | H-E | \sum_{s'} F_{s'\lambda} \Phi_{s'} \rangle + \langle \Phi_q (T+V_{мод}-E) \sum_{q'} F_{q'\lambda} \Phi_{q'} \rangle +$$

$$+ \lambda \langle \Phi_q (V_{12}+V_{13}+V_{23}-V_{мод}) \sum_{q'} F_{q'\lambda} \Phi_{q'} \rangle = 0. \qquad (7a)$$

Если положить $\lambda=1$, то мы вернемся к системе (6), (7), а при $\lambda=0$ (6а) отцепляется от (7а). Меняя λ непрерывно от 1 до 0, мы делаем процедуру отцепления также непрерывной. Это позволяет разбить весь процесс расцепления системы на бесконечное число этапов, на каждом из которых λ меняется на бесконечно малую величину $d\lambda$. Влияние же такого малого изменения можно исследовать, пренебрегая членами более высокой степени по $d\lambda$ (это можно делать, если зависимость F_λ и $F_{q\lambda}$ от λ плавная).

Ниже будет показано, что для каждого значения λ при замене его на $\lambda+d\lambda$ величина $\bar{a}\cdot K_\lambda\,\bar{a}$ будет меняться только в одну сторону. Здесь $\bar{a}$ – вектор произвольно задаваемых амплитуд (см. (3а), (3б)), а K_λ есть K–матрица для системы (6а), (7а). Таким образом, можно сделать вывод, что если $\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}K_\lambda\,\bar{a})$ существует везде на отрезке $0\le\lambda\le 1$, то и при замене $\lambda=0$ на $\lambda=1$ произойдет изменение $\bar{a}\cdot K\bar{a}$ в ту же сторону. Отсюда получаем, что величина $\bar{a}\cdot K_0\,\bar{a}$, соответствующая оборванной системе, является нижней границей для $\bar{a}K\bar{a}$.

Перейдем теперь к доказательству теоремы о положительной определенности величины $\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}K_\lambda\,\bar{a})$. Выразим из системы уравнений (7а) вектор $F_\lambda^{(Q)}$ (с компонентами $F_{q\lambda}$):

$$\vec{F}_\lambda^{(Q)} = \frac{\lambda^{1/2}\,\lambda}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\cdot\vec{J}_\lambda\,, \tag{8}$$

где $\hat{M}$ – матрица с элементами $M_{qq'}=<\Phi_q(T+V_{\text{мод}}-E)\Phi_{q'}>$, $\hat{V}$ – матрица с элементами $V_{qq'}=<\Phi_q(V_{12}+V_{13}+V_{23}-V_{\text{мод}})\Phi_{q'}>$, а вектор $\vec{J}_\lambda$ имеет компоненты $j_{q\lambda}=<\Phi_q|H-E|\sum_{s'}F_{s'\lambda}\Phi_{q'}>$ и подставим его в (6а):

$$<\Phi_s|H-E|\sum_{s'}F_{s'\lambda}\Phi_{s'}>_{\Phi_s}+\lambda<\Phi_s(H-E)\frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\vec{J}_\lambda\,\vec{\Phi}^{(Q)}>=0\,, \tag{9}$$

где $\vec{\Phi}^{(Q)}$ – вектор с компонентами Φ_q.

Умножим теперь уравнение (9) на $F_{s,\lambda+d\lambda}$ и проинтегрируем по переменным, от которых зависят компоненты F_s; вычтем из полученного уравнения такое же уравнение, но с произведенной заменой $\lambda \leftrightarrow \lambda+d\lambda$ и просуммируем по s :

$$<\sum_s F_{s(\lambda+d\lambda)}\,\Phi_s\,|H-E|\,\sum_{s'} F_{s'\lambda}\,\Phi_{s'}>-<\sum F_{s\lambda}\,\Phi_s\,|H-E|\,\sum_{s'} F_{s'(\lambda+d\lambda)}\,\Phi_{s'}>+$$

$$+\lambda<\sum_s F_{s(\lambda+d\lambda)}\,\Phi_s\,|H-E|\,\frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\,\vec{J}_\lambda\,\vec{\Phi}^{(Q)}>- \tag{10}$$

$$-(\lambda+d\lambda)<\sum_s F_{s\lambda}\,\Phi_s\,|H-E|\,\frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\,\vec{J}_{\lambda+d\lambda}\,\vec{\Phi}^{(Q)}>=0.$$

В сумме первых двух членов в (10) отличный от нуля вклад дают лишь "диагональные по s" матричные элементы от операторов кинетической энергии, действующих на F_s. "Недиагональные по s" матричные элементы от операторов T исчезают из-за ортогональности асимптотик для разных каналов.

Сумма первых двух членов в (10) дает нам искомую величину $\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}K_\lambda\bar{a})$. Для доказательства ее знакоопределенности достаточно обнаружить это свойство у двух последних членов в (10). Произведем в них следующие преобразования. Перенесем действие оператора $(H-E)$ налево. Это можно сделать благодаря тому, что функции справа от $(H-E)$ в этих членах убывают на больших расстояниях и, следовательно, при использовании теоремы Грина (интегрировании по частям) поверхностные интегралы по большой сфере (внеинтегральные члены) исчезают:

$$\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}\cdot K_\lambda \bar{a}) = <(H-E)\sum_s F_{s,\lambda+d\lambda}\,\Phi_s \,|\, \frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\,\vec{J}_\lambda \vec{\Phi}^{(Q)}> -$$

$$-<(H-E)\sum_s F_{s,\lambda+d\lambda}\,\Phi_s \,|\, \frac{\lambda+d\lambda}{\hat{M}+(\lambda+d\lambda)\hat{V}}\,\vec{J}_{\lambda+d\lambda}\,\vec{\Phi}^{(Q)}> . \tag{11}$$

Поскольку оператор $\frac{\lambda}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\vec{J}_\lambda$ не зависит от переменных функции M, то можно перенести $\Phi^{(Q)}$ вместе с интегрированием по ее переменным влево:

$$\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}\cdot K_\lambda \bar{a}) = \vec{J}_{\lambda+d\lambda}\,\frac{\lambda}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\cdot\vec{J}_\lambda -$$

$$-\vec{J}_\lambda\,\frac{\lambda+d\lambda}{\hat{M}+(\lambda+d\lambda)\hat{V}}\cdot\vec{J}_{\lambda+d\lambda} . \tag{12}$$

Воспользуемся теперь симметричностью оператора $\frac{\lambda+d\lambda}{\hat{M}+(\lambda+d\lambda)\hat{V}}$ и перенесем его действие во втором члене в правой стороне уравнения (12) справа налево. В результате получаем (имея в виду соотношение

$$\frac{d}{d\lambda}\,\frac{\lambda}{L+\lambda V} = \frac{1}{L+\lambda V}\,L\,\frac{1}{L+\lambda V}) \quad :$$

$$\frac{d}{d\lambda} <\bar{a}\cdot K_\lambda \bar{a}> = \frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\,\vec{J}_\lambda \,|\, T+V_{\text{мод}}-E \,|\, \frac{1}{\hat{M}+\lambda\hat{V}}\,\vec{J}_\lambda . \tag{13}$$

Итак, для положительной определенности $\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}\cdot K_\lambda\bar{a})$ достаточно, чтобы положительно определенным был оператор $T+V_{мод}-E$. Но именно благодаря специальному выбору базиса $\Phi_\gamma^{L_2}$, можно всегда добиться (выбрать такое N), чтобы значения $\epsilon_{\gamma>N}=\epsilon_q$ были больше E: $\epsilon_q-E>0$, а следовательно (см. 5а), и

$$(T+V_{мод}-E)>0. \tag{14}$$

Теорема доказана:

$$\frac{d}{d\lambda}(\bar{a}\cdot K_\lambda\bar{a})>0. \tag{15}$$

Следует еще раз подчеркнуть, что при выводе (15) использовалось предположение о непрерывной зависимости F_λ от λ. Это верно только в том случае, если система отброшенных уравнений не имеет собственных значений ниже E. Правда, можно всегда этого добиться. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен в следующей работе.

Авторы выражают благодарность А. Дуну за полезные дискуссии.

Литература

1. В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Пробл. физ. эл. част. и атомн. ядра, 2, №2 (1971).
2. Б.З. Захарьев, В.Л. Шмонин. Сообщение ОИЯИ, Р4-5168, Дубна, 1970.
3. G. Temple. Proc.Roy.Soc. (London), A119, 276 (1928).
4. T. Kato. Prog.Theor.Phys., 6, 394 (1951).
5. Y. Hahn, T.E.O'Malley and L. Spruch. Phys.Rev., 134, B397 (1964); L. Spruch. The Physics of Electronic and Atomic Collisions: Invited Papers from the Fifth International Conference, Leningrad, July, 1967 (ed. by L.M. Brauscomb, U. of Colorado Press, 1968).

6. Б.Н. Захарьев, В.П. Пермяков, Ю.И. Фенин. Сообщение ОИЯИ, Р4-5332, Дубна, 1970.
7. Т.Г. Ефименко, В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Ann.Phys.,47,275 (1968).
8. О. Лхагва. Сообщение ОИЯИ, Р4-5366, Дубна, 1970.
9. M. Delves. Nucl.Phys., 20, 275 (1960); 29, 268, 326 (1962).

Рукопись поступила в издательский отдел
11 марта 1971 года.