Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1971

УДК 539.17

И. В. АМИРХАНОВ, В. Е. ГРЕЧКО, А. И. ТИТОВ

УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА В КООРДИНАТНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

В работе проводится совершенствование метода многоканальной связи на основе использования фаддеевского формализма. При этом исследуются уравнения Фаддеева в координатном представлении и приводятся методы их решения (прямой и вариационный).

Предлагаемый подход позволяет естественным образом учесть каналы перераспределения и развала, описание которых встречает известные трудности в формализме многоканальной связи. С другой стороны, появляется возможность проследить механизм реакций, использовать локальные потенциалы (в том числе и потенциалы с кором), что не всегда удается при решении уравнений Фаддеева в импульсном представлении.

Введение

Последние достижения в исследовании ядерных реакций и в физике малонуклонных систем связаны, во-первых, с созданием ряда приближенных методов решения уравнения Шредингера [1—4], во-вторых, с разработкой и совершенствованием методов решения систем интегральных уравнений Фаддеева [5—7].

Перечисленные методы успешно применялись для описания определенных типов задач. Так, например, формализм многоканальной связи [1], позволяющий наглядно трактовать механизм реакции и обладающий сравнительной простотой, использовался для описания ядерных реакций. Однако последовательный учет каналов перераспределения, и в особенности канала развала, встречает в рамках этого формализма известные трудности [2, 3, 9].

Уравнения Фаддеева, которые, как правило, решают в импульсном представлении, наиболее эффективны в трехчастичных задачах. Но решение этого круга задач не исчерпывает основных достоинств уравнений Фаддеева. Вполне возможно, что уравнения Фаддеева будут более эффективны для описания сложных систем (например, рассеяние на сложных ядрах в трехчастичном приближении), поскольку уравнения Фаддеева последовательно учитывают каналы перераспределения и развала.

Для рассмотрения такого типа реакций может оказаться полезным исследование уравнений Фаддеева в координатном представлении. В этом случае наряду со строгостью уравнений Фаддеева появляется возможность проследить механизм реакций, последовательно учесть всевозможные каналы. Кроме того, возникает ряд преимуществ в методе решения уравнения Фаддеева по сравнению с методами решения в импульсном представлении.

В первом разделе этой работы кратко обсуждаются уравнения Фаддеева в координатном представлении, во втором — предлагаются методы их решения; в третьем разделе приведен вариационный принцип для уравнений Фаддеева.

Уравнения Фаддеева в координатном представлении

Уравнения Фаддеева в координатном представлении в операторной форме имеют следующий вид [5—6]:

$$\Psi^i = \delta_{i\alpha}\Phi^i + G_i V_i (\Psi^j + \Psi^k), \quad i \neq j \neq k = 1, 2, 3. \tag{1}$$

Здесь $\Psi = \sum_{i=1}^{3} \Psi^i$ — полная волновая функция трехчастичной системы, Φ^i — собственная волновая функция асимптотического гамильтониана $H_i = H_0 + V_i$, V_i — потенциал взаимодействия между частицами j и k, G_i — соответствующая функция Грина

$$G_i = (E - H_i + i\varepsilon)^{-1}. \tag{2}$$

Уравнения (1) описывают рассеяние свободной частицы (α) на двух других частицах, находящихся в связанном состоянии. Аналогичный вид имеет система уравнений, описывающая рассеяние трех свободных частиц [6].

Для исследования системы уравнений (1) используем явный вид функций Грина [8].

$$G_i^{(\pm)} (\vec{R}_i, \vec{\rho}_i; \vec{R}_i', \vec{\rho}_i') = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon G_\varepsilon^{(\pm)} (\vec{R}_i; \vec{R}_i') \, G_{E-\varepsilon}^{(\pm)} (\vec{\rho}_i, \vec{\rho}_i'), \tag{3}$$

где $G_\varepsilon^{(\pm)} (\vec{R}_i; \vec{R}_i')$ и $G_{E-\varepsilon}^{(\pm)} (\vec{\rho}_i, \vec{\rho}_i')$ — функции Грина операторов $\left(-\frac{\hbar^2}{2M_i}\Delta_{\vec{R}_i} - \varepsilon\right)$ и $\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_i}\Delta_{\vec{\rho}_i} + V_i - (E-\varepsilon)\right)$ соответственно. Для $G_{E-\varepsilon}^{(\pm)} (\vec{\rho}_i, \vec{\rho}_i')$ справедливо следующее представление:

$$G_{E-\varepsilon}^{(\pm)} (\vec{\rho}_i, \vec{\rho}_i') = -\frac{2\mu_i}{\hbar^2} \sum_{l_i m_i} \frac{1}{\rho_i \rho_i'} G_{E-\varepsilon, l_i}^{(\pm)} (\rho_i, \rho_i') \, Y_{l_i m_i}\left(\frac{\vec{\rho}_i}{\rho_i}\right) Y_{l_i m_i}^*\left(\frac{\vec{\rho}_i'}{\rho_i'}\right), \tag{4}$$

где

$$G_{E-\varepsilon, l_i}^{(\pm)} (\rho_i, \rho_i') = \sum_n \frac{\chi_{nl_i}(\rho_i)\, \chi_{nl_i}^*(\rho_i')}{[(E-\varepsilon) - k_{nl_i}^2]} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} \chi_{kl_i}^{(\pm)} (\rho_i >) \, \chi_{kl_i} (\rho_i <). \tag{5}$$

Здесь $\rho_i >$ и $\rho_i <$ — это соответственно большее и меньшее из ρ_i и ρ_i', $k = \sqrt{\frac{2\mu_i}{\hbar^2}(E-\varepsilon)}$, $\chi_{kl_i}^{(\pm)}$ и χ_{kl_i} — два линейно независимых решения уравнения

$$\chi_{kl_i}'' + \left[k^2 - \left(V_i + \frac{l_i(l_i+1)}{\rho_i^2}\right)\right] \chi_{kl_i} = 0 \tag{6}$$

и определены своими асимптотическими выражениями

$$\chi^{(\pm)}_{kl_i} \sim e^{\pm\left(k\rho_i - \frac{\pi l_i}{2} + \delta_{l_i}\right)}; \quad \chi_{kl_i}(\rho_i) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(k\rho_i - \frac{\pi l_i}{2} + \delta_{l_i}\right). \tag{7}$$

$\chi_{nl_i}(\rho_i)$ — решение уравнения (6) в дискретном спектре.

Используя соотношения (3—5), уравнения (1) перепишем в виде

$$\Psi^i = \delta_{i\alpha}\Phi^i + \frac{2\mu_i}{\hbar^2}\frac{2M_i}{\hbar^2}\sum_{L_iM_i\, l_im_i}\frac{1}{R_i\rho_i}Y_{L_iM_i}\left(\frac{\vec{R}_i}{R_i}\right)Y_{l_im_i}\left(\frac{\vec{\rho}_i}{\rho_i}\right)\times$$

$$\times\left\{\sum_n \frac{\chi_{nl_i}(\rho_i)}{\sqrt{E-k^2_{nl}}}\int dR_i' G(R_iR_i')\int d\rho_i'\chi_{nl_i}(\rho_i')\, I^i_{L_iM_i\, l_im_i}(\rho_i'R_i') -\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2\pi i}\int d\varepsilon\int dR_i'\int d\rho_i' G_{\varepsilon,L_i}(R_iR_i')\, G_{(E-\varepsilon),l_i}(\rho_i\rho_i')\, I^i_{L_iM_i\, l_im_i}(R_i'\rho_i')\right\}, \tag{8}$$

где

$$I^i_{L_iM_i\, l_im_i}(R_i\rho_i) = \int d\Omega_{\vec{R}_i} d\Omega_{\vec{\rho}_i} Y^*_{L_iM_i}Y^*_{l_im_i}R_i\rho_iV_i(\Psi^k + \Psi^j). \tag{9}$$

Система уравнений (8) позволяет наглядно трактовать механизм реакций. Так, второе слагаемое описывает прямые (перераспределенные) каналы с возбуждением, последнее — описывает канал развала.

Уравнения (8) позволяют естественным образом использовать локальные потенциалы, интерес к которым в последнее время значительно возрос.

Кроме того, в полученных уравнениях нет трудностей в использовании потенциала с кором (бесконечной сердцевиной), которые возникают при решении задач методом многоканальной связи [4]. Действительно, двухчастичный потенциал V_i интегрируется с весом волновой функции $\chi_{nl_i}(\chi_{kl_i})$, которая является решением уравнения (6) с этим же потенциалом. Аналогичные рассуждения справедливы и для кулоновского потенциала, в случае, когда канал развала закрыт [1].

Методы решения уравнений Фаддеева в координатном представлении

Уравнения Фаддеева (8) являются системой многомерных интегральных уравнений, решение которых на первый взгляд весьма сложно. Однако можно воспользоваться тем свойством, что функции $I^i_{L_iM_i\, l_im}$ в (8) являются квадратично интегрируемыми по обеим переменным (R_i и ρ_i), т. е.

$$\int |I^i_{L_iM_i\, l_im_i}|^2 d\rho_i dR_i < \infty. \tag{10}$$

при условии, что при $\rho_i \to \infty$ потенциал V_i спадает быстрее, чем $\frac{1}{\rho_i}$.

Тогда $I^i_{L_iM_i\, l_im_i}$ можно разложить в двойной ряд Фурье:

$$I^i_{iL_iM_i\, l_im_i} = \sum_{\beta\gamma} A^{L_iM_i\, l_im_i}_{\beta\gamma}\varphi_\beta(R_i)\varphi_\gamma(\rho_i). \tag{11}$$

[1] Трудность в использовании кулоновских потенциалов в методах многоканальной связи обсуждалась в работе [3].

Подставляя (11) в (8), мы получим решение уравнений Фаддеева, выраженное через неизвестные константы $A^{L_iM_i\, l_im_i}_{\beta\gamma}$ и комбинацию известных функций. Найденные Ψ^i подставляются в обратное Фурье-преобразование:

$$A^{L_iM_i\, l_im_i}_{\beta\gamma} = \int dR_i d\rho_i \varphi^*_\beta \varphi^*_\gamma \int d\Omega_{\vec{R}_i} d\Omega_{\vec{\rho}_i} R_i \rho_i V_i\,(\Psi^k + \Psi^j). \tag{12}$$

Таким образом, приходим к замкнутой системе алгебраических уравнений на коэффициенты $A^{L_iM_i\, l_im_i}_{\beta\gamma}$.

При практических расчетах удобно перейти к представлению полного момента [9]:

$$I^i_{L_iM_i\, l_im_i} = \sum_{LM} C^{LM}_{L_iM_i\, l_im_i} I^{LM}_{L_i\, l_i}. \tag{13}$$

где $C^{LM}_{L_iM_i\, l_im_i}$ — коэффициенты Клебша—Гордана. В этом случае получаем системы алгебраических уравнений на коэффициенты $A^{LM}_{L_i\, l_i\beta\gamma}$ для каждого фиксированного значения полного момента системы L и его проекции M. Это позволяет значительно расширить эффективность метода, поскольку появляется возможность оставить больше членов в разложении:

$$I^{LM}_{L_i\, l_i} = \sum_{\beta\gamma} A^{LM}_{L_i\, l_i\beta\gamma}\, \varphi_\beta(R_i)\, \varphi_\gamma(\rho_i). \tag{11'}$$

при тех же значениях L_il_i.

Отметим, что поскольку коэффициенты разложения $A^{LM}_{L_i\, l_i\beta\gamma}$ не зависят от числа учитываемых каналов (n), то порядок матриц в системах алгебраических уравнений не зависит от (n). Поэтому нам кажется, что предлагаемый метод окажется более эффективным при расчете сложных систем (с большим числом уровней) в трехчастичном приближении (рассеяние на сложных ядрах).

С другой стороны, такой подход является более практическим при учете канала развала, поскольку в этом случае свойственные уравнениям Фаддеева в импульсном приближении известные трудности отсутствуют.

В заключение заметим, что интегральное уравнение в координатном представлении для задач рассеяния можно переписать в виде уравнений Вольтерра [10], для которых метод последовательных приближений всегда сходится. Подобный прием применим к системе уравнений (8), что дает еще один метод исследования этой системы (см. приложение).

Вариационный принцип для уравнений Фаддеева

При описании процессов рассеяния могут оказаться весьма эффективными вариационные методы. Их отличительной особенностью является то, что погрешность в определении вычисляемых параметров пропорциональна лишь второму порядку от сделанных приближений в волновой функции [11—13].

Для получения стационарного функционала перепишем систему уравнений (1) в матричном виде

$$\widehat{\Psi}^{(+)}_i = \delta_{i\alpha} \widehat{\Phi}_i + \widehat{G}^{(+)} \widehat{V} \widehat{\Psi}^{(+)}_i, \tag{14}$$

где

$$\widehat{\Psi}^{(+)}=\begin{pmatrix}\Psi^{(+)1}\\ \Psi^{(+)2}\\ \Psi^{(+)3}\end{pmatrix};\quad \Phi_1=\begin{pmatrix}\Phi_1\\ 0\\ 0\end{pmatrix};\quad \widehat{G}^{(+)}=\begin{pmatrix}G_1^{(+)} & 0 & 0\\ 0 & G_2^{(+)} & 0\\ 0 & 0 & G_3^{(+)}\end{pmatrix};$$

$$\widehat{V}=\begin{pmatrix}0 & V_1 & V_1\\ V_2 & 0 & V_2\\ V_3 & V_3 & 0\end{pmatrix}.$$

Амплитуда перехода из состояния i в состояние f определяется по формуле

$$\mathrm{T}_{if}=\langle\widehat{\Phi}_f\,|\,\widehat{V}\,|\,\widehat{\Psi}_i^{(+)}\rangle=\langle\widehat{\Psi}_f^{(-)}\,|\,\widehat{V}\,|\,\widehat{\Phi}_i\rangle. \tag{15}$$

Тогда, учитывая (14), стационарный функционал на амплитуду перехода (15) можно записать следующим образом

$$[T_{if}]=\langle\widehat{\Psi}_f^{(-)}\,|\,\widehat{V}\,|\,\widehat{\Phi}_i\rangle+\langle\widehat{\Phi}_f\,|\,\widehat{V}\,|\,\widehat{\Psi}^{(+)}\rangle-\langle\widehat{\Psi}_f^{(-)}\,|\,\widehat{V}-\widehat{V}\,\widehat{G}^{(+)}\,\widehat{V}\,|\,\widehat{\Psi}_i^{(+)}\rangle. \tag{16}$$

Такая формулировка вариационного принципа формально совпадает с вариационным принципом Швингера [12—13].

Для получения однозначных результатов из (16) необходимо правильно выбирать пробные функции. Один из возможных вариантов такого выбора подробно исследовался в работе [12]. В нашем случае явный вид пробных функций можно получить после подстановки (11) или (11′) в (8).

Приложение

Для простоты рассмотрим двухчастичное s-рассеяние, которое описывается следующим интегральным уравнением:

$$\varphi=\sin kr-\frac{1}{k}\left\{e^{ikr}\int_0^r dr'\sin kr'+\sin kr\int_r^\infty dr'e^{ikr'}\right\}V\varphi. \tag{17}$$

Метод последовательных приближений для этого уравнения годится лишь в случае выполнения жестких ограничений на потенциал взаимодействия. Однако, если (17) переписать в виде интегрального уравнения Вольтерра

$$\varphi=\sin kr+Fe^{ikr}+\frac{1}{k}\left\{e^{ikr}\int_r^\infty dr'\sin kr'-\sin kr\int_r^\infty dr'e^{ikr'}\right\}V\varphi, \tag{18}$$

где

$$F=-\frac{1}{k}\int_0^\infty \sin kr V\varphi dr \tag{19}$$

амплитуда рассеяния, то метод последовательных приближений сходится всегда [10].

В этом случае в качестве первого приближения принимается асимптотика волновой функции:

$$\varphi^{(1)}=\sin kr+Fe^{ikr}. \tag{20}$$

Подставляя (20) в (19), получаем амплитуду рассеяния в первом приближении:

$$F^{(1)} = -\frac{1}{k}\int_0^\infty dr \sin krV \sin kr \Big/ \left(1 + \frac{1}{k}\int_0^\infty dr \sin kr \cdot Ve^{ikr}\right). \quad (21)$$

Последующие приближения находятся продолжением этого процесса. Для того чтобы применить метод последовательных приближений к уравнениям Фаддеева, перепишем систему уравнений (8) в следующем виде:

$$\Psi^i = \delta_{i\alpha}\Phi^i + \sum_{L_iM_i\, l_im_i} \frac{1}{R_i\rho_i} Y_{L_iM_i} Y_{l_im_i} \left\{\sum_n F^i_{nL_iM_i\, l_im_i}\chi_{nl_i}(\rho_i)\,\chi^{(+)}_{k_nL_i}(R_i) + \right.$$

$$+\int d\varepsilon F^i_{L_iM_i\, l_im_i}(\varepsilon E)\,\chi^{(+)}_{k_1L_i}(R_i)\chi^{(+)}_{k_2l_i}(\rho_i) + \frac{4M_i\mu_i}{\hbar^4}\times$$

$$\times\left[\sum_n \frac{\chi_{nl_i}(\rho_i)}{\sqrt{E-k^2_{nl_i}}}\int d\rho'\chi_{nl_i}(\rho'_i)\,B_n(R_i, R'_i) + \right.$$

$$+\frac{1}{2\pi i}\int d\varepsilon\left(\int_0^\infty dR'_i\chi_{k_1L_i}(R'_i)\,B_{k_2}(\rho_i, \rho'_i) + \right.$$

$$\left.\left.\left.+\int_0^\infty d\rho'_i\chi_{k_1l_i}(\rho'_i)\,B_{k_1}(R_i, R'_i)\right)\right] I_{L_iM_i\, l_im_i}(R'_i, \rho'_i)\right\}, \quad (22)$$

где

$$B_n(r, r') = \frac{1}{k_n}\left\{\chi^{(+)}_{k_nl_i}(r)\int_r^\infty dr'\chi_{k_nl_i}(r') - \chi_{k_nl_i}(r)\int_r^\infty dr'\chi^{(+)}_{k_nl_i}(r')\right\} \quad (23)$$

есть интегральный оператор

$$F^i_{n_i\, l_iM_i\, l_im_i} = \frac{4M_i\,\mu_i}{\hbar^4\sqrt{E-k^2_{nl_i}}}\int dR_i d\rho_i\chi_{nl_i}(\rho)\,\chi_{k_nl_i}(R_i)\,I^{(k_i\rho_i)}_{L_iM_i\, l_im_i}, \quad (24)$$

$F_{nL_iM_i\, l_im_i}$ — порциальная амплитуда прямых и перераспределенных каналов, $F_{l_iM_i\, l_im_i}$ — амплитуда канала развала,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2}(E-\varepsilon)} \text{ и } k_2 = \sqrt{\frac{2\mu_i}{\hbar^2}\varepsilon}. \quad (25)$$

В качестве первого приближения будем брать асимптотические значения ψ^i в своих каналах.

Подставляя (25) в (24), мы приходим к системе интегро-алгебраических уравнений на амплитуды рассеяния в первом приближении. Если канал развала закрыт, то система уравнений — чисто алгебраическая и зависит только от числа открытых каналов. Если канал развала открыт, то от системы интегральных уравнений можно перейти к системе чисто алгебраических уравнений. Для этого воспользуемся разложением

$$F_{L_i\, l_iM_i\, m_i}(\varepsilon E) = \sum_\beta D^{L_iM_i\, l_i\, m_i}_\beta \bar{\Phi}_\beta(\varepsilon), \quad (26)$$

где $\bar{\Phi}_\beta(\varepsilon)$ — некоторый полный набор известных функций, $D^{L_iM_i\, l_im_i}_\beta$ — неизвестные коэффициенты.

В этом случае порядок системы алгебраических уравнений на амплитуды рассеяния зависит лишь от числа открытых каналов и от числа оставляемых членов в разложении (26).

В заключение заметим, что такой способ решения уравнений Фаддеева возможен только благодаря использованию координатного представления.

Авторы приносят глубокую благодарность Б. Н. Захарьеву, Б. Ахматходжаеву, О. Лхагве, В. Пермякову, В. Шмонину за ценные обсуждения во время работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Feshbach N. Ann. of Phys., **5**, 357, 1958; **19**, 287, 1962.
2. Ефименко Т. Г., Жигунов В. П., Захарьев Б. Н. Ann. of Phys., **47**, 275, 1968; Симонов Ю. А. «Ядерная физика», **3**, 630, 1966; Бадалян А. М., Симонов Ю. А. «Ядерная физика», **3**, 1032, 1966.
3. Амирханов И. В., Смедарчина З. К., Христова Е. Х. Препринт ОИЯИ Р4—4804. Дубна, 1969.
4. Амирханов И. В., Лхагва О., Смердачина З. К. Препринт ОИЯИ Р4—4863. Дубна, 1969.
5. Фаддеев Л. Д. ЖЭТФ, **39**, 1459, 1960.
6. Ситенко А. Г., Харченко Ф. В. Препринт ИТФ АН УССР, 69—72. Киев, 1969; Osborn T. A. Slac. report, No. 79, 1967.
7. Беляев В. Б., Вжециoнко Е. Препринт ОИЯИ Р4—4144. Дубна, 1968; Ball I. S., Chen I. C. Y., Wong D. Y. Physika, **173**, No. 1, 202, 1968.
8. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., «Наука», 1966.
9. Друкарев Г. Ф. Теория столкновений электронов с атомами. М., Физматгиз, 1965.
10. Sasakawa T. Sup. Prog. Their. Phys., No. 27, 1963.
11. Демков Ю. Н. Вариационные принципы в теории столкновений. М., Физматгиз, 1958.
12. Амирханов И. В., Титов А. И. Препринт ОИЯИ Р4. Дубна, 1970.
13. Joachain C. I. Symposia on theoretical physics and mathematics, vol. 8. (Plenum Press), 1968.

Поступила в редакцию
5.10 1970 г.

НИИЯФ