

# ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

В. П. Жигунов, Б. Н. Захарьев

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ, ДУБНА

## А Н Н О Т А Ц И Я

В статье дан обзор современного состояния теории ядерных реакций, использующей формализм сильной связи каналов. Различные методы теории рассматриваются как конкретные реализации единого принципа Бубнова — Галеркина — Петрова. Обсуждается развитие вариационных принципов для задач рассеяния.

## A B S T R A C T

Up-to-date methods of the nuclear reaction theory, which uses the chanal strong coupling formalism, are reviewed. Different approaches of the theory are considered as concrete realization of unified principle by Bubnov—Galerkin—Petrov. The development of variational principles for scattering problem is discussed.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из основных проблем нерелятивистской квантовой теории рассеяния — разработка эффективных методов решения уравнения Шредингера для различных многочастичных систем. Решение этой задачи долгое время существенно затруднялось тем, что отсутствовала такая общая теория дифференциальных уравнений в частных производных, которая могла бы послужить основой для построения алгоритмов их приближенного решения. В последние годы в этом направлении достигнут существенный прогресс, связанный с развитием теории обобщенных функций и методов функционального анализа [1]. Физикам еще предстоит в полной мере воспользоваться возможностями этого нового математического аппарата.

Современные методы непосредственного решения уравнений в частных производных на ЭВМ эффективны лишь при размерности пространства  $\leq 2$  и совершенно бессильны в задачах рассеяния нескольких частиц. Наиболее целесообразно применение вычислительной техники к решению обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений.

В данной работе дается обзор методов решения задач рассеяния, которые приближенно сводят уравнение Шредингера к системе обыкновенных дифференциальных или алгебраических уравнений, и устанавливается их связь с группой прямых методов математической физики решения уравнений в частных производных. Согласно этим методам, приближенное решение ищется в виде линейной комбинации известных вспомогательных функций  $\varphi_m$ :

$$\Psi^N = \sum_m^N F_m \varphi_m. \quad (1)$$

Для нахождения коэффициентов  $F_m$  из исходного уравнения получают систему обыкновенных дифференциальных или алгебраических уравнений, которая допускает непосредственное решение на ЭВМ. Такой подход в сочетании с современными моделями структуры ядра составляет сутьность практических алгоритмов расчетов в так называемой единой теории ядерных реакций.

Прямые методы уже давно используются для изучения связанных состояний (метод Ритца — смешивание конфигураций в модели оболочек). В этой задаче искомая функция квадратично интегрируема, и математическая теория использования прямых методов для этого случая довольно основательно разработана [2—4]. Одна-

ко вопрос о ее применении к задачам непрерывного спектра в ядерной физике вызвал широкий интерес лишь в последние годы, после появления работ Фешбаха [5]. (Правда, в атомной физике это произошло раньше [6, 7].) Сейчас в этой области идет интенсивное накопление информации методического и расчетного характера. К настоящему моменту в рамках формализма сильной \* многоканальной связи разработаны методы описания практически всех возможных реакций, поэтому своевременно подвести определенный итог, проанализировать совокупность всех имеющихся методов.

Нам представляется целесообразным изложить все разнообразие подходов в единой теории ядерных реакций как различные реализации общего принципа Бубнова — Галеркина — Петрова. Это поможет ориентироваться в обширной литературе по данной теме, позволит использовать строгий аппарат функционального анализа, единую терминологию.

Важным критерием при оценке различных методов является чувствительность результатов к ошибкам в выборе пробных функций. Для уменьшения такой чувствительности искомым амплитуд рассеяния используют вариационные принципы, которые тесно связаны с общим принципом Бубнова — Галеркина — Петрова. Описание вариационных принципов для задач рассеяния посвящена монография Ю. Н. Демкова [8]. Со времени ее выхода вариационные принципы были распространены на общий случай реакций с перераспределением частиц [9, 10], на реакции с числом свободных частиц, в начале или в конце процесса большим двух [10, 11] (см. разд. 4), на полюса  $S$ -матрицы [12].

Интересны, но мало исследованы следующие вопросы: какова должна быть последовательность функций  $\varphi_m$  [см. формулу (1)], чтобы можно было сколь угодно точно аппроксимировать  $\Psi$  суммой (1), и к какой погрешности в амплитуде рассеяния приводит такая аппроксимация.

В специальном случае задачи рассеяния (определение длины рассеяния) оказалось возможным по-новому подойти к решению этих вопросов [13]. Например, пространство пробных функций  $\Psi^N$  удастся метризовать так, что «расстояние» от  $\Psi^N$  до точного решения  $\Psi$  приобретает смысл ошибки в длине рассеяния  $\Delta a = a - a_N$ , откуда сразу следует, что для сходимости  $a_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} a$  достаточно

полноты системы  $\{\varphi_m\}$  разложения (1) в пространстве с введенной метрикой (см. разд. 4). Это может служить примером желательной формулировки теории в общем случае.

Значительным успехом теории является доказательство [14] теоремы об односторонних оценках на параметры рассеяния (см. разд. 5). Хотя исследование в этом направлении нельзя считать завершенными, работа Шпруха [14] открывает перед нами очень интересные свойства многоканальных систем.

\* Здесь под *сильной* связью следует понимать случай таких взаимодействий, при которых не оправдано использование теории возмущений.

Единая теория ядерных реакций стала развиваться относительно недавно, и пока не проводилось решения одной и той же задачи различными методами. В данном обзоре мы ограничимся лишь изложением методических вопросов теории. Представляется важным в дальнейшем провести также сравнительный анализ методов на основе конкретных расчетов.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ О РАССЕЯНИИ

Изучение принципиальных вопросов теории рассеяния для многочастичных систем удобно проводить на примере трех тел. Именно начиная с трех тел проявляются многие свойства, характерные и для более сложных задач: появляются каналы неупругого рассеяния, становятся возможными различные реакции с перераспределением частиц и т. д.

Чтобы описать рассеяние трех частиц, нужно найти решение уравнения Шредингера с определенными асимптотическими условиями. В системе центра инерции уравнение имеет вид

$$H\Psi \equiv \left\{ -\frac{1}{2M}\Delta_R - \frac{1}{2\mu}\Delta_\rho + \sum_{i>j}^3 v_{ij}(R, \rho) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (2)$$

где  $(R, \rho)$  — один из трех возможных наборов координат Якоби:

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= r_i - r_j; & R_k &= r_k - \frac{m_i r_i + m_j r_j}{m_i + m_j}; \\ 1/M &= \frac{1}{m_1 + m_2} + \frac{1}{m_3}; & \frac{1}{\mu} &= \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \end{aligned} \quad (3)$$

В системе трех тел в асимптотической области возможна различная группировка частиц:  $1 + (23)$ ;  $2 + (13)$ ;  $3 + (12)$ , где  $(ij)$  — пара частиц, образующих связанное состояние и двигающихся свободно относительно частицы  $k$ . Каждому такому разбиению системы на группы отвечает свой асимптотический гамильтониан  $H_{ij}$ :

$$H = H_{ij} + v_{kj} + v_{ki} \xrightarrow[R_k \rightarrow \infty]{(v_{ki}; v_{kj} \rightarrow 0)} H_{ij} \equiv -\frac{1}{2M}\Delta_{R_k} - \frac{1}{2\mu}\Delta_{\rho_{ij}} + v_{ij}. \quad (4)$$

В асимптотической области, где  $R_k \rightarrow \infty$ , а  $\rho_{ij}$  — величина конечная,  $\Psi$  должна удовлетворять уравнению:

$$H_{ij}\Psi = E\Psi \quad (R_k \rightarrow \infty, \rho_{ij} \text{ конечно}). \quad (5)$$

Согласно (4),  $H_{ij}$  представляет собой сумму оператора  $-\frac{1}{2M}\Delta_{R_k}$  кинетической энергии центра инерции пары  $(ij)$  и гамильтониана  $h_{ij} \equiv -\frac{1}{2\mu}\Delta_{\rho_{ij}} + v_{ij}$  внутреннего движения пары  $(ij)$ . Поэтому функция  $\Psi$  при  $R_k \rightarrow \infty$  представляется в виде

$$\Psi(R_k \rightarrow \infty, \rho_{ij}) \sim \sum_n F_n(R_k) \psi_n(\rho_{ij}), \quad (6)$$

где  $\psi_n$  — собственные функции  $h_{ij}$ :

$$h_{ij}\psi_n = \varepsilon_n\psi_n. \quad (7)$$

Таким образом, асимптотику  $\Psi$  в каналах с различной группировкой частиц удобно описывать с помощью соответствующих систем координат Якоби. Именно в существовании нескольких асимптотических гамильтонианов заключается одно из важнейших отличий задачи рассеяния для системы  $n \geq 3$  частиц от двухчастичной.

В зависимости от конкретного вида потенциалов  $v_{ij}$  и значения энергии  $E$  имеется несколько типов граничных условий.

1. Пусть  $v_{ij}$  и  $E$  таковы, что возможно рассеяние лишь в каналах с одной группировкой частиц. Это реализуется, например, если одна частица рассеивается на паре других ( $ij$ ), связанных бесконечной потенциальной ямой. В таком случае возможны только те конечные состояния системы, которые отличаются от начального лишь возбуждением мишени.

Более реалистичным примером может служить рассеяние позитрона на атоме водорода при энергии ниже порога неупругих столкновений (один открытый канал). Конечным состояниям в таких задачах, как и в случае двух тел, соответствует один асимптотический гамильтониан.

Граничные условия в соответствии с формулами (5) и (7) при этом будут:

$$\Psi(R_k, \rho_{ij}) \sim \begin{cases} \sum_n \left( e^{ik_n R_k} \delta_{nn_0} + f_n(\Omega_{R_k}) \frac{e^{ik_n R_k}}{R_k} \right) \psi_n(\rho_{ij}) \\ \text{при } R_k \rightarrow \infty, \rho_{ij} \text{ конечно,} \\ 0 \text{ при } \rho_{ij} \rightarrow \infty; k_n^2 = 2M(E - \varepsilon_n). \end{cases} \quad (8)$$

Здесь суммирование ведется только по тем  $n$ , для которых  $E - \varepsilon_n > 0$  (открытые каналы), а  $\delta_{nn_0}$  соответствует условию, что падающие волны имеются лишь во входном канале  $n_0$ . Например, для упругого рассеяния  $e^+ + H$  в сумме (8) остается лишь один член  $n = n_0$  и  $\psi_{n_0}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\rho}$  — функция основного состояния водорода.

2. Граничные условия будут более сложные, если возможно перераспределение частиц в процессе рассеяния:

$$1 + (23) \rightarrow \left. \begin{cases} 1 + (23) \text{ рассеяние без перераспределения} \\ 2 + (13) \\ 3 + (12) \end{cases} \right\} \text{реакции с перераспределением.} \quad (9)$$

Граничные условия на  $\Psi$  в различных направлениях конфигурационного пространства ( $R_i \rightarrow \infty$ ;  $\rho_{jk}$  конечно;  $i \neq j \neq k = 1, 2, 3$ ) должны описывать все конечные состояния, которые теперь

отвечают нескольким асимптотическим гамильтонианам:

$$\Psi \sim \begin{cases} \xrightarrow{R_1 \rightarrow \infty} \sum_n' \left( e^{ik_n R_1} \delta_{nn_0} + f_n^{(1)}(\Omega_1) \frac{e^{ik_n R_1}}{R_1} \right) \psi_n(\rho_{23}); \\ \xrightarrow{R_2 \rightarrow \infty} \sum_m' f_m^{(2)}(\Omega_2) \frac{e^{ik_m R_2}}{R_2} \psi_m(\rho_{13}); \\ \xrightarrow{R_3 \rightarrow \infty} \sum_p' f_p^{(3)}(\Omega_3) \frac{e^{ik_p R_3}}{R_3} \psi_p(\rho_{12}). \end{cases} \quad (10)$$

Примером реакций с перераспределением частиц может служить  $e^+ + H$  при энергиях ниже порога ионизации атома водорода или рассеяние нуклона на дейтоне до энергии развала дейтона. Поскольку не существует связанных состояний  $(e^+p)$ ,  $(nn)$ ,  $(pp)$ , то из трех возможных типов конечных состояний в этих примерах реализуются лишь два. В первом примере это будут возбуждения атома водорода ( $\psi_n$  — функции  $H$ ) и образование позитрония в различных состояниях [ $\psi_m$  — функции  $(e^+e^-)$ ]; во втором примере — прямое и обменное рассеяние.

3. До сих пор мы ограничивались рассмотрением реакций, когда в начале и в конце процесса имеется лишь два свободно двигающихся фрагмента:  $a + b \rightarrow c + d$ .

Когда энергия системы выше порога развала на три фрагмента, в асимптотике  $\Psi$  помимо членов, описывающих процессы типа « $2 \rightarrow 2$ » [формула (10)], появится еще член, соответствующий трем свободным частицам в конце реакции:  $1 + (23) \rightarrow 1 + 2 + 3$ .

Такому конечному состоянию отвечает асимптотический гамильтониан, не содержащий взаимодействий частиц 1, 2, 3:

$$\lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \rho \rightarrow \infty}} H = H_0 \equiv -\frac{1}{2M} \Delta_R - \frac{1}{2\mu} \Delta_\rho. \quad (11)$$

Граничные условия для таких состояний удобно записывать в новой системе переменных [15, 16]. В шестимерном пространстве  $\{R\rho\}$  перейдем к гиперсферическим координатам:

$$\rho_6 = \sqrt{|R|^2 + |\rho|^2} \quad (12)$$

и пяти угловым переменным  $\Omega_5$ , выбор которых не является однозначным. Например, этими углами могут быть три угла Эйлера, характеризующие положение треугольника, образованного частицами 1, 2, 3 в пространстве и двух углов  $\alpha$  и  $\beta$ , характеризующих его форму. В этих переменных каналу развала соответствует расходящаяся волна:

$$\Psi \xrightarrow{\rho_6 \rightarrow \infty} f(\Omega_5) \frac{e^{ik_6 \rho_6}}{\rho_6^{5/2}}; \quad k_6^2 = k_\rho^2 + k_R^2, \quad (13)$$

где  $k_6$  — волновое число, соответствующее координате  $\rho_6$ ;  $k_R$  и  $k_\rho$  — волновые числа, отвечающие координатам  $R$  и  $\rho$ .

Особого рассмотрения требует случай тройных столкновений, когда три свободные частицы имеются в начальном состоянии  $1 + 2 + 3 \rightarrow \dots$ . Такие процессы представляют интерес при изучении многочастичных систем (теория газов, плазмы, ядерной материи и т. д.).

Реакции с тремя свободными частицами в начале или в конце процесса будут подробно рассмотрены в разд. 3.

Итак, постановка задачи рассеяния для системы трех и аналогично многих частиц заключается в том, что нужно решить уравнение Шредингера с одним из сформулированных выше типов граничных условий. В дальнейшем нам иногда будет удобно пользоваться эквивалентной, но несколько иной формой постановки задачи. Перенесем неоднородность, связанную с падающей волной, из граничных условий в уравнение. Для этого представим  $\Psi$  в следующем виде:

$$\Psi = \Phi_0 + X, \quad (14)$$

где  $\Phi_0$  — падающая волна, а  $X$  удовлетворяет неоднородному уравнению

$$(H - E)X = (E - H)\Phi_0 = v\Phi_0 \equiv J \quad (15)$$

с однородными граничными условиями, которые получаются из выписанных условий (9), (10) опусканием члена с падающей волной.

### 3. МЕТОД БУБНОВА — ГАЛЕРКИНА — ПЕТРОВА (БГП) В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

Сущность метода БГП, позволяющего обосновать и рассмотреть с единой точки зрения практическое использование формализмов Фешбаха [5], Фано — Блоха [17, 18], адиабатического разложения [19], смешанного базиса [20] и др., состоит в следующем.

Приближенное решение  $X^N$  уравнения (15) ищется в виде суммы:

$$X^N = \sum_m^N c_m \varphi_m, \quad (16)$$

где известные линейно независимые функции  $\varphi_m$ , которые в дальнейшем будем называть *базисными*, выбираются так, чтобы  $X^N$  удовлетворяла нужным граничным условиям. Назовем  $(H - E)X^N - J$  *невязкой* уравнения (15), которая характеризует отклонение  $X^N$  от точного решения  $X$ . Неизвестные коэффициенты  $c_m$  в формуле (16) ищутся из условия, чтобы были равны нулю проекции невязки на  $N$  известных линейно независимых функций  $\chi_n$  из пространства  $D$ , которому принадлежит невязка:

$$((H - E)X^N - J, \chi_n) = 0; \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (17)$$

Под скалярным произведением будем обычно подразумевать умножение слева на  $\chi_n^*$  и интегрирование по всем переменным, от которых зависит функция  $\chi_n$ . Очевидно, что если  $\chi_n$  являются элементами полной системы в пространстве  $D$ , то равенство нулю всех проекций невязки означает, что равна нулю и сама невязка. Поэтому с ростом  $N$  функция  $X^N$  лучше удовлетворяет уравнению (15). Подставляя (16) в (17), получаем систему уравнений для  $c_m$ :

$$\sum_m A_{nm} c_m = b_n, \quad (18)$$

где

$$A_{nm} = ((H - E) \varphi_m, \chi_n); \quad b_n = (J, \chi_n).$$

В частном случае, когда  $\chi_n$  совпадает с  $\varphi_n$ , описанная процедура называется методом Бубнова — Галеркина (БГ). Когда вся координатная зависимость (16) содержится в  $\varphi_m$ , а коэффициенты  $c_m$  являются константами, система (18) представляет собой систему алгебраических уравнений. Если же  $\varphi_m$  не зависят от одной из переменных, коэффициенты  $c_m$  являются функциями от этой переменной, и тогда система (18) будет системой обыкновенных дифференциальных (или интегро-дифференциальных) уравнений. В этом случае граничные условия на  $X$  по выделенной переменной формулируются для  $c_m$ , а по остальным обеспечиваются выбором базиса  $\{\varphi_m\}$ . В практических расчетах нецелесообразно оставлять в неизвестных коэффициентах  $c_m$  зависимость более чем от одной переменной, так как не существует достаточно эффективных методов решения многомерных уравнений (18).

#### 4. МЕТОДЫ СИЛЬНОЙ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СВЯЗИ

Как уже отмечалось, различный выбор базисных функций в методе БГП позволяет получить основные подходы в многоканальной теории ядерных реакций.

Для простоты изложения ограничимся случаем рассеяния частицы 1 мишенью, которая представляет собой частицу 2, находящуюся в связанном состоянии в потенциальной яме  $v_{23}$  (бесконечно тяжелая частица 3).

Предположим сначала, что  $v_{23}$  бесконечно глубока, так что спектр частицы 2 является чисто дискретным [ $\Psi_{nlm}$ , см. (7)]. Тогда возможны лишь реакции без перераспределения частиц. Граничные условия задачи в согласии с формулой (8) запишем с помощью парциальных волн в виде [7]:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \underset{r_1 \rightarrow \infty}{\sim} \sum'_{nl_1 l_2 m_2} \left( \frac{1}{k_n} \sin \left( k_n r_1 - \frac{l_1 \pi}{2} \right) \delta_{nm_0} + \right. \\ \left. + f_{nl_2 m_2}^{l_1} e^{i \left( k_n r_1 - \frac{l_1 \pi}{2} \right)} \right) \frac{\Psi_{nl_2 m_2}(r_2)}{r_1} Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{l_2 m_2}(\Omega_2). \quad (19)$$

Чтобы проще удовлетворить этим условиям, в качестве базисных функций для построения  $\Psi$  выбирают  $\Phi_\alpha \equiv \Phi_{n l_1 m_1 l_2 m_2} = Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \psi_{n l_2 m_2} Y_{l_2 m_2}(\Omega_2)$ :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\alpha} \frac{F_{\alpha}(r_1)}{r_1} \Phi_{\alpha}(\Omega_1, \mathbf{r}_2). \quad (20)$$

Тем самым граничные условия по  $\mathbf{r}_2$  будут автоматически выполнены. Для полного удовлетворения условий (19) останется только потребовать определенное асимптотическое поведение для функции  $F_{\alpha}(r_1)$ . Согласно принципу БГ, будем искать  $F_{\alpha}$  из требования ортогональности невязки уравнения Шредингера базисным функциям:

$$\sum_{\alpha} ((H - E) \Phi_{\alpha}, \Phi_{\beta}) \frac{1}{r_1} F_{\alpha} = 0. \quad (21)$$

Учитывая конкретный вид  $\Phi_{\alpha}$ , перепишем формулу (21)\*:

$$\left[ -\frac{1}{2M} \cdot \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{l_1(l_1+1)}{2Mr_1^2} \right] F_{\alpha \equiv n l_1 m_1 l_2 m_2} + \sum_{\alpha'} v_{\alpha \alpha'} F_{\alpha'} = (E - \varepsilon_{\alpha}) F_{\alpha}; \quad (22)$$

$$v_{\alpha \alpha'} = v_{l_3} \delta_{\alpha \alpha'} + \int \Phi_{\alpha}^* v_{l_2} \Phi_{\alpha'} d\Omega_1 dr_2. \quad (23)$$

Коэффициенты  $F_{\alpha}(r_1)$  можно рассматривать как волновые функции, описывающие движение первой частицы в поле мишени, находящейся в состоянии  $n l_2 m_2$  (канал  $\alpha$ ). Матрица взаимодействия  $v_{\alpha \alpha'}(r_1)$  осуществляет связь уравнений, соответствующую возбуждениям мишени в процессе рассеяния. Вне области взаимодействия, где  $v_{\alpha \alpha'} \rightarrow 0$ , система (22) расщепляется на отдельные уравнения, описывающие свободное движение первой частицы с энергией  $E - \varepsilon_{\alpha}$  относительно мишени в различных состояниях ( $\varepsilon_{\alpha}$ ).

Для состояний мишени, на возбуждение которых достаточно энергии падающей частицы ( $E > \varepsilon_{\alpha}$ ), функции  $F_{\alpha}$  при больших  $r_1$  имеют общий вид линейной комбинации свободных падающих и уходящих волн. Соответствующие каналы называются *открытыми*. Граничные условия для  $F_{\alpha}$  в открытых каналах в соответствии с (19) сводятся к требованию определенной *нормировки* падающей волны во входном канале и *отсутствия* падающих волн в каналах неупругого рассеяния:

$$F_{n l_1 m_1 l_2 m_2} = \frac{1}{k_n} \sin \left( k_n r_1 - \frac{l_1 \pi}{2} \right) \delta_{n n_0} + f_{n l_2 m_2}^{l_1} e^{i(k_n r_1 - \frac{l_1 \pi}{2})}. \quad (24)$$

Состояния с  $\varepsilon_{\alpha} > E$  могут возбуждаться только виртуально: первая частица, отдавая свою энергию на возбуждение мишени, сама остается с отрицательной энергией  $E - \varepsilon_{\alpha}$  и не может в таком

\* Может оказаться удобным представление квантовых чисел  $n L M l_1 l_2$  вместо  $n l_1 l_2 m_1 m_2$ , где  $L$  — полный момент системы, а  $M$  — его проекция. В силу сохранения полного момента система уравнений для  $F_{n L M l_1 l_2}$  распадается на отдельные системы с определенными значениями  $LM$  [7].

состоянии удалиться от мишени (*закрытые каналы*). Для таких  $\alpha$  при больших  $r_1$  общее решение  $F_\alpha$  имеет вид:

$$F_\alpha \sim A_\alpha e^{-\kappa_\alpha r_1} + B_\alpha e^{\kappa_\alpha r_1}; \quad \kappa_\alpha^2 = 2M(\epsilon_\alpha - E). \quad (25)$$

Во всех закрытых каналах требуем равенства нулю коэффициентов  $B_\alpha$  при растущих экспонентах, что соответствует естественному запрету для частицы 1 уходить на бесконечность с отрицательной энергией  $E - \epsilon_\alpha$ .

С различными вариациями этот метод широко используется в теории столкновений и для решения задач более общего типа [5—7].

Для получения более точной волновой функции необходимо увеличивать количество членов в разложении (20). Однако если мишень представляет собой систему частиц, связанных потенциалами конечной глубины и ограниченного радиуса действия, то существует только конечное число дискретных связанных состояний и может потребоваться учет непрерывного спектра мишени. Непосредственное обобщение описанного метода на этот случай привело бы к появлению в формуле (20) наряду с суммой по связанным состояниям интеграла:

$$\Psi = \sum_\alpha + \int d\epsilon F_{\epsilon l_1 m_1 l_2 m_2}(r_1) \Phi_{\epsilon l_1 m_1 l_2 m_2}(\Omega_1, \mathbf{r}_2). \quad (20a)$$

В результате этого вместо обыкновенных дифференциальных уравнений (22) получается система сложных интегро-дифференциальных уравнений. На практике поэтому приходится пренебрегать непрерывной частью разложения. В этом состоит существенная ограниченность использования данной системы базисных функций.

Особенно остро встает вопрос об учете непрерывного спектра в задачах, когда мишень имеет лишь одно слабосвязанное состояние (например, при рассеянии нуклона на дейтоне).

В частном случае упругого рассеяния Ротенбергом [21] был предложен оригинальный способ обойти эту трудность. Он использовал в качестве базиса *чисто дискретный* набор штурмовских функций  $S_{nl}$  [т. е.  $\Phi_\alpha = Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) S_{nl_2}(r_2) Y_{l_2 m_2}(\Omega_2)$ ]:

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \cdot \frac{d^2}{dr_2^2} - \frac{l_2(l_2+1)}{2\mu r_2^2} + \alpha_{nl_2} v_{23} \right] S_{nl_2} = \epsilon_1 S_{nl_2}, \quad (26)$$

где  $S_{nl}$  ортонормированы с весом потенциала ( $-\int S_\alpha v_{23} S_\alpha dr_2 = \delta_{\alpha\alpha'}$ ). Первая штурмовская функция совпадает с функцией основного состояния  $\epsilon_1$  мишени ( $\alpha_{10} = 1$ ), остальные не имеют определенного физического смысла (движение в поле  $\alpha_{nl} v_{23}$ ). Именно поэтому метод годится только для описания упругого рассеяния. Ведь в асимптотике волновой функции  $\Psi$  задачи рассеяния должны фигурировать лишь волновые функции  $\psi_n$  истинных состояний мишени, а не  $S_n$ , которые отличаются от  $\psi_n$  при  $n > 1$ .

**Реакции с перераспределением частиц.** Ограниченность метода, использующего разложение (20), состоит также в том, что неизвестно, как описать реакции с перераспределением частиц. Базисные функции в (20), (20а) соответствуют лишь *одному* асимптотическому гамильтониану для определенного состава частиц и не удобны для описания асимптотического поведения волновой функции в каналах с другим составом частиц, соответствующих другим асимптотическим гамильтонианам.

В принципе этим каналам отвечает интегральный член разложения (20а), однако, как уже говорилось, трудно решать интегро-дифференциальные уравнения для  $F_\alpha$  и неясно, как с помощью функций  $F_\alpha(r_1)$  от одной переменной  $r_1$  сформулировать граничные условия для каналов, описываемых совсем другими переменными (например, каналы «подхвата» частицы 2 из ямы частицей 1, когда связанная пара (12) удаляется на бесконечность, описываются с помощью  $\rho_{12}, R_3$ ).

Если в случае реакций с перераспределением частиц ограничиться все же дискретной частью разложения, то для  $F$  получим систему (22), но в силу свойства этой системы, обеспечивающего сохранение полного потока, поток, падающий во входном канале, распределится лишь по каналам с тем же составом фрагментов. А значит, так перераспределение описать нельзя.

В теорий реакций используется, правда, иногда искусственный прием, когда в матрицу взаимодействия  $v_{\alpha\alpha'}$  системы (22) вводятся мнимые добавки, позволяющие феноменологически учесть изменение потока частиц за счет связи каналов с разным составом частиц [22]. Однако в данном обзоре мы ограничиваемся рассмотрением лишь методов последовательного описания процессов на основе заданных двухчастичных потенциалов.

Представляется довольно естественной попытка описывать реакции с перераспределением частиц, разлагая  $\Psi$  одновременно по наборам базисных функций  $\{\Phi_\alpha\}$ ,  $\{\Phi_\beta\}$ ,  $\{\Phi_\gamma\}$ , отвечающих различным асимптотическим гамильтонианам:

$$\Psi = \left( \sum_{\alpha} + \int \right) F_{\alpha} \Phi_{\alpha} + \left( \sum_{\beta} + \int \right) F_{\beta} \Phi_{\beta} + \left( \sum_{\gamma} + \int \right) F_{\gamma} \Phi_{\gamma}. \quad (27)$$

В этом случае учет интегральной части разложения уже не будет столь принципиально важен, как в случае использования разложения (20а). Пренебрежение интегралами в (27) уже не исключает возможность в некотором приближении описывать перераспределение частиц в процессе реакции.

Но теперь, даже если ограничиться в (27) только дискретными членами, вследствие неортогональности функций  $\Phi$  из разных наборов для коэффициентов разложения  $F_\alpha, F_\beta, F_\gamma$  получаются, согласно принципу БГ, интегро-дифференциальные уравнения:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha} ((H-E) \Phi_{\alpha}, \Phi_{\alpha'})_{\alpha} F_{\alpha} + \sum_{\beta} ((H-E) F_{\beta} \Phi_{\beta}, \Phi_{\alpha'})_{\alpha} + \\
& \quad + \sum_{\gamma} ((H-E) F_{\gamma} \Phi_{\gamma}, \Phi_{\alpha'})_{\alpha} = 0; \\
& \sum_{\alpha} ((H-E) F_{\alpha} \Phi_{\alpha}, \Phi_{\beta'})_{\beta} + \sum_{\beta} ((H-E) \Phi_{\beta}, \Phi_{\beta'})_{\beta} F_{\beta} + \\
& \quad + \sum_{\gamma} ((H-E) F_{\gamma} \Phi_{\gamma}, \Phi_{\beta'})_{\beta} = 0; \\
& \sum_{\alpha} ((H-E) F_{\alpha} \Phi_{\alpha}, \Phi_{\gamma'})_{\gamma} + \sum_{\beta} ((H-E) F_{\beta} \Phi_{\beta}, \Phi_{\gamma'})_{\gamma} + \\
& \quad + \sum_{\gamma} ((H-E) \Phi_{\gamma}, \Phi_{\gamma'})_{\gamma} F_{\gamma} = 0.
\end{aligned} \tag{28}$$

Здесь  $(\cdot, \cdot)_{\alpha}$  означает интегрирование по переменным функций  $\Phi_{\alpha}$ . При больших значениях  $R_{\alpha}, R_{\beta}, R_{\gamma}$  уравнения расцепляются и описывают свободное движение фрагментов. Таким образом, выполнение граничных условий (10) обеспечить довольно просто. Трудность решения интегро-дифференциальных уравнений является основным недостатком такого метода. Решение, например, с помощью итераций требует громоздких расчетов и не всегда сходится (правда, в работе [23] приводится безытерационный метод их решения). К тому же недостаточно ясен вопрос о переполненности системы базисных функций. Одним из следствий такой переполненности может быть неустойчивость процедуры численного решения задачи [24].

**Тожественные частицы.** Частным случаем задачи о перераспределении частиц является учет тождественности падающих частиц и частиц, входящих в состав мишени. Примером задачи с тождественными частицами может служить рассеяние электронов атомом водорода. Чтобы явно обеспечить симметрию волновой функции  $\Psi$  относительно перестановки электронов, можно искать ее в виде разложения, являющегося специальным случаем (27) [ср. с формулой (20)]:

$$\begin{aligned}
\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \sum_{\alpha} \frac{F_{\alpha}(r_1)}{r_1} \Phi_{\alpha}(\Omega_1, \mathbf{r}_2) \pm \right. \\
\left. \pm \sum_{\alpha} \frac{F_{\alpha}(r_2)}{r_2} \Phi_{\alpha}(\Omega_2, \mathbf{r}_1) \right\}.
\end{aligned} \tag{29}$$

Система уравнений (28) при этом будет иметь вид

$$\begin{aligned}
\left[ -\frac{1}{2M} \cdot \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{l_1(l_1+1)}{2Mr_1^2} - (E - \varepsilon_{\alpha}) \right] F_{\alpha}(r_1) + \\
+ \sum_{\alpha'} \left[ v_{\alpha\alpha'} + \int_0^{\infty} dr_2 W_{\alpha\alpha'}^{\pm} \right] F_{\alpha'} = 0.
\end{aligned} \tag{30}$$

По сравнению с системой уравнений (22) здесь имеется дополнительный член, отвечающий обменному взаимодействию:

$$\begin{aligned}
W_{\alpha\alpha'}^{\pm} = \pm r_1 r_2 \int Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \Psi_{n_1 l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) [v_{l_2} + \varepsilon_{n l_2} - E] \times \\
\times \Psi_{n' l_2' m_2'}(\mathbf{r}_1) Y_{l_1' m_1'}(\Omega_2) d\Omega_1 d\Omega_2.
\end{aligned} \tag{31}$$

Замечательно, что решение системы (30) может быть сведено к решению систем обыкновенных дифференциальных [25] или интегральных уравнений типа Вольтерра [26], для решения которых существуют простые безытерационные методы. Правда, с ростом числа членов, учитываемых в разложении (29), квадратично возрастает порядок систем уравнений, к которым сводится задача. При этом метод [26, 25] применим лишь к системам трех тел с кулоновским взаимодействием.

Тейлор [27] и Гайлитис [28] предложили интересный и практически эффективный метод, по которому часть волновой функции  $\Psi$  ищется в виде суммы по открытым каналам [типа (20) или (29)], а остаток  $\Psi$ , являющийся локализованной в ограниченном объеме функцией, представляется в виде корреляционной функции

$$\Psi_i^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = r_1^{p_i} r_2^{q_i} r_{12}^{s_i} \exp\{-1/2K(r_1 + r_2)\} Y_{l_i l_i' 2i}^{LM}(\Omega_{r_1}, \Omega_{r_2})$$

с вариационными параметрами  $p_i, q_i, s_i, K$ .

Выше отмечались трудности, возникающие при описании общего типа реакций с перераспределением частиц в подходе Фешбаха [5]. Теперь перейдем к описанию метода [20], свободного от этих трудностей.

Основная причина специальных осложнений в задаче о реакциях с перераспределением частиц заключается в наличии в асимптотике  $\Psi$  компонент с различным составом фрагментов. Однако можно воспользоваться тем, что именно асимптотическая часть  $\Psi$  хорошо нам известна (с точностью до констант — парциальных амплитуд рассеяния  $f$ ). Поэтому можно выделить из  $\Psi$  «мешающие» разложению компоненты и использовать разложение типа (20) лишь для оставшейся части  $X$  волновой функции [20].

Для описанной выше задачи трех тел с граничными условиями (10), следуя этому рецепту, представим  $\Psi$  в виде

$$\Psi = \sum_m f_m^{(2)} \Phi_m^{\text{acc}(2)}(\mathbf{R}_2, \boldsymbol{\rho}_{13}) + \sum_p f_p^{(3)} \Phi_p^{\text{acc}(3)}(\mathbf{R}_3, \boldsymbol{\rho}_{12}) + \sum_\alpha \frac{F_\alpha(R_1)}{R_1} \Phi_\alpha(\boldsymbol{\rho}_{23}, \Omega_1), \quad (32)$$

где

$$\Phi_m^{\text{acc}(2)}(\mathbf{R}_2, \boldsymbol{\rho}_{13}) \xrightarrow{R_2 \rightarrow \infty} \frac{1}{R_2} e^{ik_m R_2} \psi_m(\boldsymbol{\rho}_{13}) Y_{l_m m_m}(\Omega_2) \quad (33)$$

и аналогично для  $\Phi_p^{\text{acc}(3)}$ .

В области малых  $R$  можно определить  $\Phi^{\text{acc}}$  произвольным образом, нужно лишь позаботиться, чтобы они не имели сингулярности при  $R \rightarrow 0$ , например

$$\Phi_m^{\text{acc}(2)}(\mathbf{R}_2, \boldsymbol{\rho}_{13}) = \frac{e^{ik_m R_2}}{R_2} (1 - e^{-aR_2}) \psi_m(\boldsymbol{\rho}_{13}) Y_{l_m m_m}(\Omega_2) \quad (34)$$

и аналогично для  $\Phi_p^{\text{acc}(3)}$ .

Здесь множитель  $(1 - e^{-aR})$  обеспечивает регулярность  $\Phi_m^{\text{acc}}$  (2) при  $R = 0$ . Константа  $a$  выбирается порядка обратного радиуса области взаимодействия. Нужно отметить, что произвол в выборе этого множителя компенсируется при определении  $X$ , так что при достаточном числе членов, учитываемых в разложении  $X$ , результат не должен зависеть от конкретного вида  $\Phi_m^{\text{acc}(2)}$  в области малых  $R$ . Суммирование по  $m$  и  $p$  в (32) ведется, естественно, только по открытым каналам. Можно рассматривать (32) как разложение по «смешанному» базису  $\{\Phi_m^{\text{acc}}, \Phi_p^{\text{acc}}, \Phi_\alpha\}$ , часть функций которого зависит от координат  $(\mathbf{p}$  и  $\mathbf{R})$ , а часть — только от  $\mathbf{p}_{23}, \Omega_1$ ; соответственно неизвестные коэффициенты такого разложения при первых функциях являются константами  $f$  (парциальными амплитудами рассеяния), а при остальных — функциями  $F_\alpha(R_1)$ . Согласно принципу БГ, получаем для  $F_\alpha$  и  $f$  систему обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений [20]:

$$\left. \begin{aligned} & \sum_{m; j=2, 3} ((H - E) \Phi_m^{\text{acc}(j)}, \Phi_n^{\text{acc}(i)}) f_m^{(j)} = \\ & = \sum_{\alpha} \left( (E - H) \frac{1}{R} F_\alpha \Phi_\alpha, \Phi_n^{\text{acc}(i)} \right), \\ & \left[ -\frac{1}{2M} \cdot \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{l_2(l_2 + 1)}{2Mr_1^2} - E + \varepsilon_\alpha \right] F_\alpha + \sum_{\alpha'} v_{\alpha\alpha'} F_{\alpha'} = \\ & = \sum_{m; j=2, 3} ((E - H) \Phi_m^{\text{acc}(i)}, \Phi_\alpha) f_m^{(j)} \equiv J_\alpha. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Дифференциальные уравнения для  $F_\alpha$  в (35) отличаются от системы (21), (22) для задачи без перераспределения частиц наличием членов  $J_\alpha$ , зависящих от  $f$ . Эти члены можно рассматривать как источники (стоки), определяющие связь каналов  $\alpha$  с каналами другого состава фрагментов.

Решить систему (35) можно следующим образом [20]. Найдем общее решение системы дифференциальных уравнений. Воспользуемся тем, что неизвестные парциальные амплитуды  $f_m^{(2)}, f_p^{(3)}$  входят в источники  $J$  линейно. Подставим найденные функции  $F_\alpha$  (они линейно зависят от амплитуд  $f_m^{(2)}, f_p^{(3)}$  и констант общего решения  $c_n$ ) в оставшуюся систему алгебраических уравнений и добавим к ней уравнения, следующие из граничных условий для  $F_\alpha$ . Получим полную систему алгебраических уравнений на  $f_m^{(2)}, f_p^{(3)}$  и константы  $c_n$ . Решив ее, получим амплитуды  $f_\alpha^{(1)}$  из асимптотического вида  $F_\alpha$ .

Заметим, что при решении системы дифференциальных уравнений не следует определять сразу  $c_n$  из граничных условий для  $F_\alpha$ , так как при этом численные расчеты могут привести к появлению нефизических особенностей в искомым амплитудах. Величины  $f_m^{(2)}, f_p^{(3)}$  и  $c_n$  следует находить *одновременно* из единой системы алгеб-

раических уравнений\*. Если аналогично описанному способу выделить из  $\Psi$  все асимптотики [29], то оставшуюся (локализованную) часть волновой функции можно разлагать по какому-либо чисто дискретному полному набору квадратично интегрируемых функций. При этом уже не возникает проблемы учета непрерывного спектра виртуальных возбуждений, о которой говорилось выше.

В работе [30] было предложено использовать для разложения такой локализованной части  $\Psi$  гиперсферические функции  $Y_K$  ( $K$ -гармоники), которые с успехом использовались для описания связанных состояний (см. ссылку в докладе Ю. А. Симонова [32]). Хотя оригинальные работы на эту тему читаются довольно трудно, в основе метода гиперсферических гармоник лежит простая идея. И поскольку данное направление продолжает интенсивно развиваться [33], остановимся на нем несколько подробнее.

Как уже отмечалось, чтобы свести уравнение Шредингера для  $n$  тел к системе уравнений с одной переменной, нужно выбрать переменную  $\rho$  из их общего числа  $3n - 3$  (в системе центра инерции) и разложить искомую функцию  $\Psi$  (или  $X$ ) по системе известных базисных функций от остальных  $3n - 4$  переменных. Для коэффициентов такого разложения  $F(\rho)$  получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Какую координату  $\rho$  выбрать в качестве такой единственной переменной? Для системы тождественных частиц удобно иметь разложение, обладающее в явном виде определенными свойствами симметрии относительно перестановки координат частиц. Выделить указанным образом одну переменную  $\rho$  и не нарушить симметрию можно, если  $\rho$  — инвариант относительно всех перестановок частиц.

В задаче двух тел таким инвариантом является модуль вектора  $\rho_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , а в качестве базиса выбираются шаровые функции

$$Y_{lm}(\Omega_\rho): \Psi(\rho_{12}) = \sum_{lm} \frac{1}{\rho_{12}} F_{lm}(\rho_{12}) Y_{lm}(\Omega_\rho)$$

(суммирование ведется по функциям требуемой симметрии). Для трех тел ситуация оказывается сложнее. Теперь для описания движения системы нужны два вектора:  $\rho_{ij}$  и  $\mathbf{R}_K$  [см. формулу (3)]. Ни  $\rho_{12}$ , ни  $\mathbf{R}_K$  не являются инвариантами относительно всех перестановок частиц. Если, однако, вместо  $\rho$  и  $\mathbf{R}$  ввести гиперсферические координаты (перейти к одному шестимерному вектору  $\rho_6 \equiv \equiv \{\mathbf{R}, \rho\}$ ), то его модуль  $\rho_6 = \sqrt{|\mathbf{R}|^2 + |\rho|^2}$  как раз и будет требуемым инвариантом. Координата  $\rho_6$  характеризует размер системы, в качестве пяти остальных координат можно, например, использовать пять углов  $\Omega_5$ , которые вводились в разд. 1 при описании трехчастичных конечных состояний. Аналогично  $Y_{lm}$  вводятся обобщенные шаровые (гиперсферические) функции  $Y_K(\Omega_5)$ , где под  $K$  следует понимать набор пяти квантовых чисел  $KLM\nu\Omega$  [32].

\* Этот факт был выяснен в дискуссии с Л. Д. Фаддеевым.

Непривычное шестимерное пространство, новые квантовые числа не должны смущать тех, кто сталкивается с ними впервые: обращение с  $Y_{\mathbf{K}}$  в принципе аналогично случаю обычных шаровых функций  $Y_{lm}$ . При разложении по  $Y_{\mathbf{K}}(\Omega_5)$  функций, локализованных в конечной области, на коэффициенты разложения  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6)$  накладывается простое граничное условие  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6) \xrightarrow{\rho_6 \rightarrow \infty} 0$ . Количество  $K$ -гармоник, необходимое для удовлетворительного описания искомых функций, определяется характерной угловой скоростью изменения последних [30, 32] (так же как и при разложении по  $Y_{lm}$  в задаче двух тел). Именно поэтому по  $Y_{\mathbf{K}}$  в задачах рассеяния целесообразно раскладывать лишь ту часть  $X$  волновой функции  $\Psi$ , которая не содержит асимптотических компонент, соответствующих двучастичным каналам. Угловая скорость изменения функции внутри кластера, удаляющегося на бесконечность от центра инерции системы, неограниченно возрастает, и поэтому для его описания требуется бесконечное число гармоник  $Y_{\mathbf{K}}$ .

Итак, ищем  $\Psi$  в виде, аналогичном (32), только с выделением *всех* двучастичных асимптотик:

$$\Psi = \Phi_0 + \sum_{i=1, 2, 3; m} f_m^{(i)} \Phi_m^{\text{acc}(i)} + \sum_{\mathbf{K}} \frac{1}{\rho_6^{5/2}} F_{\mathbf{K}}(\rho_6) Y_{\mathbf{K}}(\Omega_5). \quad (36)$$

Здесь  $\Phi_0 = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi_0(\boldsymbol{\rho})$  — падающая волна, а для  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6)$  и  $f_m^{(i)}$  имеем

$$\left[ -\frac{d^2}{d\rho_6^2} + \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho_6^2} - 2ME \right] F_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}'} 2Mv_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} F_{\mathbf{K}'} = \\ = \sum_{i; m} 2Mf_m^{(i)} ((E-H) \Phi_m^{\text{acc}(i)}, Y_{\mathbf{K}}) \equiv J_{\mathbf{K}};$$

$$\sum_{i=1, 2, 3; m} f_m^{(i)} ((H-E) \Phi_m^{\text{acc}(i)}, \Phi_n^{\text{acc}(j)}) = \sum_{\mathbf{K}} \left( (E-H) \frac{1}{\rho_6^{5/2}} F_{\mathbf{K}}(\rho_6) \times \right. \\ \left. \times Y_{\mathbf{K}}(\Omega_5), \Phi_n^{\text{acc}(j)} \right),$$

где

$$v_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} = \int Y_{\mathbf{K}}^* \sum_i v_{ij} Y_{\mathbf{K}'} d\Omega_5. \quad (37)$$

Решается система (37) так же, как (35), только с граничным условием  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6) \xrightarrow{\rho_6 \rightarrow \infty} 0$ .

**Реакция типа  $A + B \rightarrow C + D + E$ .** До сих пор рассматривались процессы  $A + B \rightarrow C + D$ , когда частицы до и после реакции группируются в два фрагмента — полная энергия  $E$  была недостаточна для распада системы на большее число фрагментов. В этом случае  $E$  делится на две части: энергией  $\epsilon_n$  внутреннего, квантованного движения частиц в фрагментах и энергией их относительного движения. В силу сохранения полной энергии относительное движение фрагментов будет при фиксированном значении  $E$  осуществляться с дискретными значениями энергии  $E - \epsilon_n$ . Поэтому мы имели дело с дискретным числом открытых каналов и соответствующими парциальными амплитудами.

Выше порога развала системы на три части полная энергия может делиться уже *непрерывным* образом между фрагментами. Казалось бы, это делает неизбежным использование базисного набора с непрерывно меняющимися квантовыми числами для разложения  $\Psi$ . Но, аналогично тому как в случае задачи двух тел, угловое распределение описывается с помощью дискретного набора сферических функций  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , угловое и *энергетическое* распределение нескольких свободных частиц ( $n \geq 3$ ) можно описывать с помощью счетного набора гиперсферических функций  $Y_{\mathbf{K}}(\Omega_{3n-4})$ . И именно для свободного движения частиц  $\mathbf{K}$  являются хорошими квантовыми числами. При описании процессов развала асимптотично  $\Psi$ , соответствующую всем свободным частицам, даже не нужно выделять: разложение  $\Psi$  и уравнения для его коэффициентов совпадают с (36) и (37). Отличие состоит лишь в новых асимптотических условиях на  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6)$ . Поскольку выше порога полного развала  $E$  положительна, а коэффициенты смешивания  $v_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$  и источники  $J_{\mathbf{K}}$  в (37) исчезают при больших  $\rho_6$ ,  $F_{\mathbf{K}}(\rho_6)$  имеет асимптотический вид:

$$F_{\mathbf{K}}(\rho_6) \xrightarrow{\rho_6 \rightarrow \infty} A_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\rho_6} + B_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\rho_6}. \quad (38)$$

Если входной канал двухфрагментный, то следует потребовать отсутствия падающих волн в (38) ( $A_{\mathbf{K}} = 0$ ), а  $B_{\mathbf{K}}$  будут *парциальными амплитудами развала*. Выбирая  $A_{\mathbf{K}} \neq 0$ , можно описывать процессы с числом свободных частиц  $n \geq 3$  в начальном состоянии. Другой метод описания таких реакций предложен И. В. Амирхановым с сотрудниками [23]. На его основе была, например, рассчитана модель катализа [34].

Важно отметить, что при небольших энергиях  $E$  нужно ограниченное число  $Y_{\mathbf{K}}$  для описания развала. Это связано с тем, что центробежный барьер  $\frac{(K + 3/2)(K + 5/2)}{\rho_0^2}$  мешает выходу на бесконечность волн с большими значениями  $K$ .

*Метод Фано — Блоха* [17, 18] является прямым распространением на случай рассеяния известного формализма «смешивания конфигураций», используемого в современной ядерной модели оболочек. Вся координатная зависимость в разложении выделяется в базисные функции. Например, для задачи двух тел во внешнем поле (третья частица)  $\Psi$  ищется в виде линейной комбинации функций  $\Phi_{ij} = \varphi_i(\mathbf{r}_1) \varphi_j(\mathbf{r}_2)$  независимого движения частиц в поле третьей\*:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{ij} c_{ij} \Phi_{ij} + \sum_i \int dk_j c_i(k_j) \Phi_{ij} + \sum_j \int dk_i c_j(k_i) \Phi_{ij}. \quad (39)$$

Здесь интегрирование ведется по непрерывному спектру одночастичных состояний. Причем не учитываются конфигурации, соот-

\* В случае системы  $n > 3$  частиц от разложения по  $\Phi_{ijk\dots} = \varphi_i \varphi_j \varphi_k \dots$  переходят к разложению по функциям, приближенно учитывающим взаимодействия внутри фрагментов в начальном и конечном состояниях [18, 35].

ветствующие двум частицам в непрерывном спектре. Для тождественных частиц вводится соответствующая симметризация относительно перестановок частиц. Легко получить уравнения для коэффициентов  $c$ , пользуясь принципом Бубнова—Галеркина:

$$c_{mn}(\varepsilon_m + \varepsilon_n) + \sum_{ij} c_{ij} v_{mnij} + \sum_i \int dk_j c_i(k_j) v_{mni}(k_j) + \\ + \sum_j \int dk_i c_j(k_i) v_{mnj}(k_i) = E c_{mn}; \quad (40)$$

$$c_m(k_n)(\varepsilon_m + \varepsilon_n) + \sum_{ij} c_{ij} v_{mij}(k_n) + \\ + \sum_i \int dk_j v_{mi}(k_n, k_j) + \sum_j \int dk_i c_j(k_i) v_{mj}(k_n, k_i) = E c_m(k_n).$$

Выбор правила интегрирования в (40) вблизи особенностей  $E = \varepsilon_n + \varepsilon_m$  задает определенные граничные условия [18]. По вычисленным  $c(k)$  просто определяются амплитуды рассеяния. Как и в методе, основанном на разложении (20), подход Фано—Блоха не позволяет описывать реакции с перераспределением частиц и развал системы на три и более фрагмента.

В. В. Балашов с сотрудниками [36] (см. также более поздние работы [37]) предложили интересную модификацию метода Фано—Блоха. Суть ее состоит в том, что в области взаимодействия одночастичная функция  $\varphi$  непрерывного спектра в «резонансном» приближении записывается в факторизованном виде (разделяются энергетическая и координатная зависимость  $\varphi$ ):

$$\varphi_\varepsilon(\mathbf{r}) \sim G(\varepsilon) F(\mathbf{r}). \quad (41)$$

Оправданием такого дополнительного приближения служит соображение, что основной вклад в  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  должны давать конфигурации непрерывного спектра, соответствующие нижним (оптическим) резонансам в сечении рассеяния частиц 1 (2) в поле  $v_{13}(v_{23})$ .

Использование (41) в (39) приводит к вырождению ядер в интегральных уравнениях (40), благодаря чему эти уравнения сводятся к системе алгебраических уравнений, а это существенно упрощает расчеты.

## 5. ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

Описанным выше методам можно придать вариационную формулировку для ослабления чувствительности результатов расчетов физических величин к погрешностям пробных функций. Действительно, сопоставляя искомой амплитуде рассеяния  $f$  определенный функционал  $I(\Psi)$ , обладающий свойством стационарности  $\delta I = 0$ , получим, что ошибка  $\delta f$  в  $f = I(\Psi)$  является малой величиной более высокого порядка по отношению к ошибке  $\delta\Psi = \Psi - \Psi^N$

пробной функции  $\Psi^N$ . Прямые методы в задачах рассеяния тесно связаны с вариационным принципом Коона [38] (мы не будем здесь касаться принципа Швингера [39]; см. также работу [40]).

Принцип Коона уже сравнительно давно используется для описания рассеяния без перераспределения частиц [8]. Для реакций с изменением состава частиц и реакции типа  $A + B \rightarrow C + D + E$  и пр. вариационные методы были сформулированы в работах [9—11]. Функционал для амплитуды  $f^{(a)}$  в методе Коона имеет общий вид:

$$I^{(a)} = f^{(a)} - \frac{k_a}{4\pi} \int \Psi_2^{(a)} (H - E) \Psi_1 d\tau, \quad (42)$$

где  $\Psi_1$  — пробная функция, соответствующая исследуемой реакции;  $k_a$  — волновое число относительного движения в канале  $a$ . Выбор вспомогательной функции  $\Psi_2^{(a)}$  зависит от того, для какой конкретной амплитуды  $f^{(a)}$  ищется стационарное значение.  $\Psi_2^{(a)}$  удовлетворяет тому же уравнению Шредингера, что и  $\Psi_1$ , только со специальными граничными условиями: в  $\Psi_2^{(a)}$  падающая волна имеется именно в том канале  $a$ , по которому в  $\Psi_1$  расходится волна с интересующей нас амплитудой  $f^{(a)}$ . Если вычисляется парциальная амплитуда  $f_{lm}^{(a)}$ , то в  $\Psi_2^{(a)}$  должна быть только соответствующая  $(lm)$ , сходящаяся сферическая волна. Для расчета же  $f^{(a)}(\theta, \varphi)$  функция  $\Psi_2^{(a)}$  выбирается с падающей плоской волной по направлению  $\theta, \varphi^*$  в канале  $a$ . Естественно, строится столько же функционалов  $I^{(a)}$ , сколько нам нужно вычислить амплитуд.

Доказательство стационарности функционалов  $I^{(a)}$  в общем случае проводится аналогично тому, как это делается в задачах без перераспределения [8] (нужно только помнить, что каналы с разным составом частиц на асимптотике не перекрываются, и поэтому дополнительные поверхностные интегралы, «не диагональные» по составу частиц, исчезают).

Для вычисления стационарных значений амплитуд  $f_{\text{stat}}^{(a)}$  пробные функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  берутся в виде одного из разложений, наиболее подходящих для данной задачи: (20), (27), (29), (32), (36), (39). Уравнения на коэффициенты  $c_n$  этих разложений получаются из условия стационарности  $I$ , которое сводится к

$$\int \delta \Psi_2 (H - E) \Psi_1 d\tau = 0, \quad (43)$$

что равносильно системе уравнений  $\frac{\delta I}{\delta c_n} = 0$ . Оказывается, эти уравнения совпадают с (22), (28), (30), (35), (37), (40). Новое при расчете стационарных значений амплитуд заключается в добавлении к приближенным амплитудам  $f^{(a)}$ , вычисленным обычным образом, поправочных членов [интегральный член в (42)]. Практически для расчета этих поправок не нужно даже знать  $\Psi_2^{(a)}$ , Благодаря тому что коэффициенты в  $\Psi_1$  ищутся из условия (43),

\* Напомним, что в  $\Psi_1$  плоская волна распространяется вдоль оси  $z$ .

отличный от нуля вклад в поправку к  $f^{(a)}$  будет лишь в случае, если  $\Psi_2^{(a)}$  содержит выделенное, явно независимое от коэффициентов (вариационных параметров) слагаемое — падающую волну  $\Phi_0^{(a)}$  [см. (36)]. Только  $\Phi_0^{(a)}$  из всей  $\Psi_2^{(a)}$  дает вклад в интеграл:

$$f_{\text{stat}}^{(a)} = f^{(a)} - \frac{k_a}{4\pi} \int \Phi_0^{(a)} (H - E) \Psi_1 d\tau. \quad (44)$$

Таким образом, при выборе пробных функций (20), (27), (29), (39) стационарные значения амплитуд получаются сразу без дополнительных поправок, а использование (32) требует поправок лишь для тех амплитуд  $f^{(2)}$ ,  $f^{(3)}$ , которые входят в выделенные асимптотики. В случае реакций с числом свободных фрагментов  $n \geq 3$  в начальном или конечном состоянии такие поправки возникают лишь в амплитудах каналов, не связанных с полным развалом системы (асимптотика последних не выделяется явно в разложении  $\Psi$ ).

## 6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ РАССЕЯНИЯ

Важным вопросом теории является сходимость приближенных решений  $\Psi^N$  (или  $X^N = \Psi^N - \Phi_0$ ) к точному  $\Psi$  (или  $X = \Psi - \Phi_0$ ) при расширении набора функций, которые используются для построения  $\Psi^N$  (или  $X^N$ ). Эта очень сложная проблема еще мало исследована (см., однако, [23]). В данном обзоре не представляется возможным обсудить ее с достаточной полнотой, и в этом разделе мы рассмотрим лишь ее решение для задачи определения длины рассеяния. Предел  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  ( $\mathbf{k}$  — волновой вектор относительного движения сталкивающихся частиц) представляет специальный интерес, поскольку в этом случае задача допускает постановку в терминах теории нормированных пространств [13], что позволяет привлечь к исследованию идеи и методы функционального анализа.

Вообще говоря, само понятие сходимости для функций является относительным, и нужно сначала определить, в каком смысле сходимость  $X^N \rightarrow X$  нам требуется, т. е. прежде всего ввести соответствующую меру близости  $X^N$  и  $X$  («расстояние»  $\Delta X = X - X^N$ ).

Для нахождения длины рассеяния  $a$  желательно, чтобы «расстоянием» между  $X^N$  и  $X$  служила разница  $\Delta a = a^N - a$ . Оказывается, что при некоторых условиях можно рассматривать функции  $X^N$  и  $X$  как точки некоторого бесконечномерного пространства с такой метрикой, что норма  $\|\Delta X\|$  как раз и характеризует ошибку в длине рассеяния. В пространствах квадратично интегрируемых функций в качестве нормы  $\|\cdot\|$  обычно используется  $\|X\| = \left( \int |X|^2 d\tau \right)^{1/2}$ . К сожалению, в задачах рассеяния функции не являются квадратично интегрируемыми. А нам еще нужно, чтобы норма была связана с длиной рассеяния. Тот же интеграл с «весом» оператора  $H - E$ :  $\int X^* (H - E) X d\tau$  уже не расходится, поскольку в асимптотической области  $(H - E) X \rightarrow 0$ , и, кроме

того, он связан с длиной рассеяния [см. формулы (15), (14)].

$$\begin{aligned} ((H-E)X, X) &= (X, (H-E)X) = (X, J) = -(X, v\Phi_0) = \\ &= -(\Psi - \Phi_0, v\Phi_0) = (\Phi_0, v\Phi_0) - (\Psi, v\Phi_0) = -a + a_B, \end{aligned} \quad (45)$$

где  $a_B$  — борновское значение длины рассеяния. Чтобы член  $((H-E)X, X)^{1/2}$  можно было использовать как норму  $\|X\|$ , необходима его положительность, а также выполнение определенных условий (аксиомы тождественности, треугольника и симметрии [41]) для вводимого с помощью этой нормы «расстояния» между  $X$  и  $X^N$ :  $\|\Delta X\| = ((H-E)(X - X^N), (X - X^N))^{1/2}$ . Для этого нужно, чтобы оператор  $H - E$  был положителен на рассматриваемых функциях. Оказывается, что если система не имеет связанных состояний, то при  $k = 0$  оператор  $H - E$  положителен.

Естественно теперь искать коэффициенты разложения функции

$$X^N = \sum_m^N c_m \varphi_m$$

из условия минимума  $\|\Delta X\|$ , которое в данном случае совпадает с условием ортогональности невязки уравнения к функциям  $\varphi_m$  ( $m = 1 \dots N$ ) (см. (17), (18)):

$$\sum_m A_{nm} c_m = b_n, \quad (46)$$

где

$$A_{nm} = ((H-E)\varphi_m, \varphi_n); \quad b_n = (J, \varphi_n). \quad (47)$$

Можно показать, что если  $c_m$  определены из (46), то  $\|\Delta X\|$  будет равно ошибке в длине рассеяния  $\Delta a$ , к чему мы и стремились [здесь воспользуемся (45), (16) и (46)]:

$$\begin{aligned} \|\Delta X\|^2 &= \|X - X^N\|^2 = ((H-E)X, X) + ((H-E)X^N, X^N) - \\ &\quad - ((H-E)X^N, X) - ((H-E)X, X^N) = -(a - a_B) + \\ &+ \left( \sum_m^N (H-E)\varphi_m c_m, \sum_n^N c_n \varphi_n \right) - (X^N, (H-E)X) - \left( J, \sum_n^N c_n \varphi_n \right) = \\ &= -(a - a_B) + \sum_n^N c_n b_n - a^N - a_B - \sum_n^N c_n b_n = -a + a^N = \Delta a. \end{aligned} \quad (48)$$

Итак, в пространстве с введенной выше метрикой из сходимости  $X^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} X$  следует  $a^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} a$ , и достаточным условием такой сходимости является полнота набора  $\varphi_n$  в данном пространстве.

Рассмотрим для примера рассеяние частицы в положительном потенциальном поле (одномерная задача двух тел), убывающем на бесконечности быстрее чем  $1/r^2$ . Построим для этого случая систему, полную в метрике (48). Воспользуемся тем, что норма  $\|\cdot\|$

эквивалентна норме  $\|\cdot\|_B$ , соответствующей более простому оператору  $B: Bu \equiv u''$  (см. [3] § 46). Интегрированием по частям получаем

$$\|u\|_B \equiv (u'', u)^{1/2} = (u', u')^{1/2}.$$

Отсюда следует, что сходимость по норме  $\|\cdot\|$  совпадает со сходимостью для производных в пространстве  $L_2$  квадратично интегрируемых функций. Поскольку примеры полных наборов  $\{\varphi^{L_2}\}$  в  $L_2$  нам хорошо известны, то в качестве набора полного в пространстве с метрикой  $\|\cdot\|$  можно взять:

$$\varphi_n = \int_0^r \varphi_n^{L_2}(t) dt.$$

Выбор таких базисных функций обеспечивает устойчивость системы (18) относительно погрешностей в ее коэффициентах [3].

**Метод наименьших квадратов (МНК).** В общей задаче рассеяния, когда  $k \neq 0$ ,  $H - E$  перестает быть положительным оператором, и  $\|\Delta X\|$ , определяемое согласно (48), не будет обладать свойствами расстояния. Можно, однако, определить расстояние между функциями иначе [3, 13]:

$$\|\Delta X\|_{\text{МНК}} = ((H - E)(X - X^N), (H - E)(X - X^N))^{1/2}. \quad (49)$$

Если искать коэффициенты  $c_m$  разложения (16) из условия минимума  $\|\Delta X\|_{\text{МНК}}$ , то получим систему уравнений метода наименьших квадратов в задаче рассеяния:

$$\sum_m A_{nm} c_m = b_n; \quad A_{nm} = ((H - E) \varphi_m, (H - E) \varphi_n); \\ b_n = (J, (H - E) \varphi_n). \quad (50)$$

Для сходимости  $\Psi^N \rightarrow \Psi$  в смысле метрики (49) достаточно полноты системы  $\{\varphi_m\}$  в пространстве с этой метрикой. К сожалению, в МНК норма  $\|X\|_{\text{МНК}}$  уже не связана непосредственно с амплитудой рассеяния.

## 7. ВАРИАЦИОННЫЕ ГРАНИЦЫ НА ПАРАМЕТРЫ РАССЕЯНИЯ

При получении приближенных величин, характеризующих систему частиц, интересно знать:

1) с какой стороны лежит приближенное значение от истинного;

2) будет ли оно монотонно приближаться к истинному при улучшении пробной функции?

Хорошо известно, что вариационный метод в задачах на связанные состояния дает значение энергии, монотонно приближающееся к точному. Это объясняется возможностью поставить задачу на минимум функционала, имеющего смысл искомой энергии.

В задачах рассеяния вариационные методы носят лишь характер условия стационарности [8] функционала, дающего амплитуду рассеяния.

Причина такого различия заключается в том, что в первом случае функционал обладает знакоопределенностью в пространстве пробных функций, а во втором — нет. Знакоопределенность функционалов зависит от следующего: лежат ли значения энергии  $E$  всех существующих состояний системы только с одной стороны от  $E_0$ , при которой мы ищем решение, или с обеих сторон. В первом случае при переборе пространства пробных функций мы не будем уходить из области одного знака функционала, во втором случае переход в область другого знака оказывается возможным. Из изложенного следует, что положительная определенность функционала будет достигнута, если пространство пробных функций ортогонально всем состояниям, лежащим ниже искомого, так как тем самым из разложения  $\Psi^N$  исключаются состояния, дающие отрицательный вклад в функционал.

В свете изложенного выше определение длины рассеяния ( $k = 0$ ) является наиболее близким случаем к задаче на связанные состояния: ниже состояния с  $k = 0$  располагается лишь дискретный спектр, если он существует. Поэтому вначале мы рассмотрим, как получаются оценки на длину рассеяния  $a$  [42]. Для простоты мы предположим, что связанные состояния у всей системы отсутствуют. Рассмотрим функционал:

$$\mathcal{F} = -\|X\|^2 + \|X - X^N\|^2 + a_B. \quad (51)$$

При  $X^N = X$  функционал  $\mathcal{F}$ , согласно (45), дает точное значение длины рассеяния, а в точке минимума  $\|\Delta X\|$  по параметрам  $X^N$  имеем [см. (48)]:

$$\mathcal{F}(X^N) = a^N \geq a, \text{ так как } \|X - X^N\|^2 \geq 0.$$

Таким образом минимум функционала  $\mathcal{F}$  дает вариационную границу сверху для длины рассеяния.

В методах, в которых коэффициенты разложения являются функциями одной переменной (см. (20), метод адиабатического разложения), для  $k = 0$  можно также искать коэффициенты из условия минимума функционала  $\mathcal{F}$ . И при этом будет также получаться односторонняя граница на длину рассеяния.

При нахождении минимума функционала  $\mathcal{F}$  нужно решать систему уравнений на параметры пробной функции  $X^N$ . Любопытно, что, используя положительность оператора  $H - E$  в пространстве  $X^N$ , можно получить границу на длину рассеяния и без решения каких-либо уравнений.

Рассмотрим выражение  $(X^N, J) = (X^N, (H - E)X) = ((H - E)X^N, X)$ . Это скалярное произведение векторов  $X^N$  и  $X$  в пространстве с метрикой (48). Воспользовавшись неравенством Шварца, получим

$$|(X^N, J)| = |((H - E)X^N, X)| \leq ((H - E)X^N, X^N)^{1/2} ((H - E)X, X)^{1/2},$$

т. е. [см. (45)]

$$|(X^N, J)|^2 / ((H - E) X^N, X^N) \leq ((H - E) X, X) = -a + a_B,$$

что дает границу на длину рассеяния. Причем для получения границы достаточно подставить в левую часть вместо  $X^N$  любую функцию, удовлетворяющую граничным условиям задачи.

При  $k > 0$  ситуация существенно усложняется тем, что ниже рассматриваемого состояния предполагается бесконечное число состояний (часть непрерывного спектра). И следует рассматривать как очень важное достижение то, что Шпрух с сотрудниками [14] значительно продвинулись в решении этой задачи. Остановимся кратко на основных моментах этой работы. Пусть  $\Psi$  разложена по бесконечному набору функций мишени (см. 20). Введем два

проекционных оператора [5]:  $P = \sum_n^N |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|$ , который при действии на  $\Psi$  оставляет из всего разложения первые  $N$  членов и оператор  $Q = 1 - P$ , для которого  $Q\Psi$  есть оставшая часть разложения ( $P^2 = 1$ ;  $PQ = QP = 0$ ). Пусть полный гамильтониан системы имеет вид:  $H = T + H_T + V$ , где  $H_T$  — гамильтониан мишени;  $T$  — оператор кинетической энергии падающей частицы и  $V$  — ее взаимодействие с мишенью. Подставляя в уравнение Шредингера  $\Psi = P\Psi + Q\Psi$ , получаем систему уравнений для  $P\Psi$  и  $Q\Psi$  [5]:

$$\begin{cases} P(H - E)P\Psi + PVQ\Psi = 0; \\ Q(H - E)Q\Psi + QVP\Psi = 0, \end{cases} \quad (52)$$

так как

$$P(T + H_T - E)Q\Psi = Q(T + H_T - E)P\Psi = 0.$$

Систему (52) можно записать в виде одного уравнения для  $P\Psi$ , в котором влияние  $Q\Psi$  будет сведено к некоторому нелокальному потенциалу  $\hat{V}$ , если  $Q\Psi$  выразить из второго уравнения и подставить в первое. Авторы предложили для исследования влияния  $Q\Psi$  (обрыва системы) на физические величины ввести множитель  $\lambda$  в потенциал  $\hat{V}$  таким образом, чтобы при  $\lambda = 1$  уравнение на  $P\Psi$  было точным (с учетом  $Q\Psi$ ), а при  $\lambda = 0$  — приближенным (только  $N$  членов в разложении  $\Psi$ ):

$$\left\{ PH + \left[ \hat{V}_\lambda \equiv \lambda PVQ \frac{1}{Q(E - H_T - T)Q - \lambda QVQ} QV \right] - \right. \\ \left. - E - E_T \right\} P\Psi = 0. \quad (53)$$

Непрерывно меняя  $\lambda$  от 1 до 0, мы делаем непрерывной процедуру обрыва  $Q\Psi$  в разложении  $\Psi$ . Благодаря этому удается свести изучение влияния такого обрыва не к исследованию знакоопределенности оператора, связанного с исследуемой физической величиной (например, матрицы реакций  $K$ ), а лишь к его производной по  $\lambda$

$\left(\frac{dK_\lambda}{d\lambda}\right)$ . Последняя задача проще, так как  $-\frac{dK_\lambda}{d\lambda}$  легко связать с производной  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda}$  [14]. Используя явный вид  $\hat{V}_\lambda$ , получаем

$$\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda} = M^+ Q (E - H_T - T) Q M, \quad (54)$$

где

$$M = \frac{1}{Q (E - H_T - T_\lambda V) Q} Q V.$$

Благодаря тому что  $M$  и  $M^+$  сопряженные операторы, среднее от оператора  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda}$  по некоторым функциям  $\phi$  сводится к среднему от  $Q (E - H_T - T) Q$  по функциям  $M\phi$ . Тем самым достаточно установить знакоопределенность простого оператора  $Q (E - H_T - T) Q$ , чтобы сделать аналогичный вывод для  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda}$  (а значит,

и для  $-\frac{dK_\lambda}{d\lambda}$ ). Отсюда видно, что если  $Q$  проектирует лишь на закрытые каналы, то  $Q (E - H_T - T) Q$  — отрицательно определен,  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda} \leq 0$ , а  $\frac{dK_\lambda}{d\lambda} \geq 0$ . Следовательно,  $K_\lambda$  есть монотонно возрастающая функция от  $\lambda$  (там, где существует  $\frac{dK_\lambda}{d\lambda}$ !) при изменении  $\lambda$  от 0 до 1, если  $Q$  проектирует только на закрытые каналы ( $\langle K_0 \rangle \leq \langle K_1 \rangle$ ). Этот результат был обобщен в работах [43] на реакции с перераспределением частиц и развалом на три (и более) фрагмента.

Тот факт, что  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda} \leq 0$ ,  $0 \leq \lambda \leq 1$  допускает наглядное толкование [44]. Действительно, включение закрытых каналов означает, что системе даются дополнительные степени свободы (например, для чисто упругого рассеяния, когда мы оставляем лишь одно уравнение в (22), что соответствует «замораживанию» мишени в основном состоянии; когда учитываем все уравнения, частицы мишени максимально свободно реагируют на возмущение налетающей частицы). Как воспользуются частицы системы этой дополнительной свободой? Естественно, что при «размораживании» они постараются занять положение с меньшей потенциальной энергией (в этом направлении на них действуют силы), следовательно, рассеивающаяся частица будет испытывать большее притяжение. Этому и соответствует  $\frac{d\hat{V}_\lambda}{d\lambda} \leq 0$ .

Проблему односторонних оценок в случае  $k > 0$  нельзя еще считать решенной в полной мере. Так, например, утверждение, что при чисто упругом рассеянии фазовый сдвиг только возрастает при подключении новых закрытых каналов [14], не имеет строгого физического смысла, так как фазу мы знаем лишь с точностью до  $\pi$ . В этой области нужны дальнейшие исследования.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитие теории рассеяния с учетом сильной связи каналов прошло первую стадию, когда были устранены основные трудности, мешавшие в принципе описывать реакции общего типа. Разработан математический аппарат, позволяющий последовательно, исходя из заданных двухчастичных потенциалов, описывать процессы рассеяния в системе многих тел. Таким образом, без привлечения феноменологии, предположения о малости взаимодействия и использования теории возмущений удается описать столь разные явления, как «оптические» резонансы, резонансы, отвечающие компаунд-состояниям различной степени сложности, реакции передачи и выбивания нуклонов и т. п. На основе многоканальных функций могут быть рассчитаны всевозможные процессы, вызываемые дополнительными электромагнитными и слабыми взаимодействиями — уже с использованием теории возмущений, что в данном случае вполне оправдано.

Но эта «единая» теория реакций еще далека от совершенства. Остаются чрезвычайно актуальными исследования по дальнейшему упрощению алгоритмов численного решения: методы, разработанные до сих пор, требуют очень громоздких расчетов.

В начальной стадии находится еще изучение вопроса об оптимизации выбора базисных функций на основе критериев сходимости и устойчивости процедуры решения.

Авторы благодарят И. В. Амирханова, Т. Г. Ефименко, С. И. Гришанову, О. Лхагву, Ю. И. Фенина, А. И. Титова, В. Л. Шмонию, в интересных дискуссиях с которыми они изучали вопросы, относящиеся к теме обзора.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Березанский Ю. М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов. Киев, «Наукова думка», 1965.
2. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике. М., Гостехиздат, 1957.
3. Михлин С. Г. Численная реализация вариационных методов. М., «Наука», 1966.
4. Красносельский М. А. и др. Приближенное решение операторных уравнений. М., «Наука», 1969.
5. Фешбах Г. *Ann. phys.*, **5**, 357 (1958); **19**, 287 (1962).
6. Мотт Н. Ф., Мессии Г. Теория атомных столкновений. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1951.
7. Друкарев Г. Ф. Теория столкновений электронов с атомами. М., Физматгиз, 1963.
8. Демков Ю. Н. Вариационные принципы в теории рассеяния. М., Физматгиз, 1958.
9. Ом ура Т. и др. *Progr. Theoret. Phys.*, **41**, 391 (1969); **43**, 347 (1970); *Nasegawa K. Progr. Theoret. Phys.*, **42**, 799 (1969).
10. Ефименко Т. Г. и др. Препринт ОИЯИ Р4-4923, Дубна, 1970.
11. Ridge M. R. H., Seaton M. J. *Proc. Roy. Soc.*, **283**, 262 (1965); *Nuttall J. Phys. Rev. Lett.*, **19**, 473 (1967).
12. Рудаков В. С. Препринт ОИЯИ Р4-4934, Дубна, 1970.

13. Ефименко Т. Г. и др. Препринт ОИЯИ Р4-4099, Дубна, 1968.
14. Srguch L. et al. Phys. Rev., **134**, В397 (1964); см. также Гайлитис М. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **47**, 160 (1964).
15. Delves L. M. Nucl. Phys., **9**, 391 (1959); **20**, 275 (1960); **29**, 268, 326 (1962).
16. Rudge M. R. H. Rev. Mod. Phys., **40**, No. 3, 564 (1968).
17. Fano U. Phys. Rev., **124**, 1866 (1961).
18. Bloch C. Many-Body Description of Nuclear Structure and Reactions. N.Y., Acad. Press., 1966.
19. Давыдов А. С. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
20. Ефименко Т. Г. и др. Ann. phys., **47**, 275 (1968); **7**, 76 (1968); Захарьев Б. Н. Лекции в школе физиков. Триест, 1971.
21. Ротенберг М. Ann. phys., **19**, 252 (1962).
22. Вибике Х. и др. Препринт ОИЯИ Р-2-4887, Дубна, 1969.
23. Амирханов И. В., Касымжанов М. А. Препринт ОИЯИ Р4-4335, Дубна, 1969.
24. Захарьев Б. Н., Шмонин В. Л. Сообщение ОИЯИ Р4-5168, Дубна, 1970.
25. Mariott R. Proc. Phys. Soc., **72**, 121 (1958).
26. Друкарев Г. Ф. «Ж. эксперим. и теор. физ.», **25**, 139 (1953).
27. Burke P. G., Taylor A. J. Proc. Phys. Soc., **88**, 549 (1966).
28. Гайлитис М. Physics of Electronics and Atomic Collisions. N.Y., 1965.
29. Жигунов В. П., Лупашина И. С. Препринт ИФВЭСВМ 67-61-К, Серпухов, 1967.
30. Захарьев Б. Н., Пустовалов Б. В., Эфрос В. Д. «Ядерная физика», **8**, 406 (1968); Zickendraht W. Phys. Rev., **159**, 1448 (1967).
31. Симонов Ю. А. «Ядерная физика», **3**, 630 (1966); Бадалян А. М., Симонов Ю. А. «Ядерная физика», **5**, 88 (1967); **6**, 473 (1967). Zickendraht W. Ann. phys., **35**, 18 (1965); Phys. Rev., **159**, 1448 (1967).  
Fabre M. Препринт Orsay IPNO/TH 157, 1969.  
Levy-Leblond M., Levy-Nahas M. J. Math. Phys., **6**, 1571 (1965).
32. Симонов Ю. А. Труды проблемного симпозиума по физике ядра. Тбилиси, ротапринт ИТЭФ, 1967.
33. Базь А. И., Жуков М. В. Лекции в школе физиков. Л., 1970.
34. Амирханов И. В. и др. «ЖТМФ», **3**, 392 (1970).
35. Mahaux C., Weidenmuller H. A. Подход модели оболочек к ядерным реакциям. Amsterdam, North Holl. Publ. Comp., 1969.
36. Балашов В. В. и др. «Ядерная физика», **2**, 643 (1965).
37. Hüfner J., Lemmer R. H. Phys. Rev., **175**, 1394 (1968); Birkholz J. Phys. Lett., **34B**, 1 (1971).
38. Kohn W. Phys. Rev., **74**, 1763 (1948).
39. Schwinger J. Phys. Rev., **72**, 742 (1947).
40. Амирханов И. В., Титов А. И. Препринт ОИЯИ Р4-4907, Дубна, 1970.
41. Люстерник Л. А., Соболев В. И. Элементы функционального анализа. М., «Наука», 1965.
42. Srguch L. et al. Phys. Rev., **119**, 164 (1960).
43. Захарьев Б. Н. и др. Препринт ОИЯИ Р4-5168, Дубна, 1970; Захарьев Б. Н. и др., Препринт ОИЯИ Р4-5660. Дубна, 1971.
44. Srguch L. Доклад на Международной конференции по электронным и атомным столкновениям. Л., 1967.
45. Захарьев Б. Н., Шмонин В. Л. Сообщение ОИЯИ Р4-5149, Дубна, 1970.