

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЙНИЯ (конечно-разностный подход)

*Б. Н. Захарьев, В. Н. Мельников, Б. В. Рудяк,
А. А. Сузько*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Показано, что основные логические моменты формализма обратной задачи становятся особенно ясными в рамках R -матричной теории рассеяния в конечно-разностном приближении для уравнения Шредингера. Согласно единой схеме излагаются различные методы восстановления взаимодействия по данным рассеяния в одноканальных, многоканальных и многочастичных системах, для которых построены точно решаемые конечномерные модели обратной задачи.

It is shown that the main logical points of the inverse problem become especially clear in the framework of R -matrix scattering theory in the finite-difference approximation for the Schrödinger equation. In accordance with the unified scheme different methods of interaction reconstruction from scattering data for single-channel, multi-channel and many particle systems are presented. Exactly solvable finite dimensional models of the inverse problem are constructed.

ВВЕДЕНИЕ

Более полувека физиками решается прямая задача: $V \rightarrow S$ — по заданному взаимодействию V из уравнения Шредингера находят волновую функцию Ψ конкретного исследуемого объекта, которая определяет любые его свойства (символически обозначенные S , в частности это может быть матрица рассеяния). Однако, силы, действующие в изучаемой системе, заранее неизвестны и требуется по заданным S , полученным из эксперимента *, восстановить V . Это обратная задача: $S \rightarrow V$.

Лишь спустя 25 лет после появления уравнения Шредингера И. М. Гельфанд, Б. М. Левитан, В. А. Марченко [1, 2] заложили основы теории обратной задачи (ОЗ). И хотя к настоящему времени здесь достигнуты большие успехи [3], до сих пор потенциалы

* Предполагается, что фазовый анализ экспериментальных данных выполнен и нам известна матрица рассеяния или эквивалентные величины (фазы, R -матрица и т. п.). Связанные с этим проблемы здесь рассматривать не будут.

восстанавливают с помощью прямой задачи (методом проб и ошибок).

Можно назвать ряд причин существующего положения. Математический аппарат ОЗ довольно громоздок. Для однозначного определения V в классической постановке ОЗ требуется знать фазы рассеяния при энергиях $E \rightarrow \infty$. Недостаточно ясен еще вопрос об устойчивости процедуры $S \rightarrow V$. Все это создает определенный психологический барьер, мешающий широкому кругу физиков овладеть основами теории.

Недавно, однако, было показано *, что сочетание R -матричной теории рассеяния с обычным при решении дифференциальных уравнений на ЭВМ конечно-разностным приближением позволяет существенно облегчить изложение и понимание методов ОЗ. Более того, позднее был найден способ восстановления взаимодействия по данным рассеяния (также в КР-приближении для уравнений движения), сравнимый по простоте с решением прямой задачи.

В данном обзоре используются эти результаты, чтобы сначала наглядно продемонстрировать главные моменты ОЗ (в первую очередь, фундаментальную роль свойства полноты системы собственных функций). Затем по единой схеме излагаются основные методы ОЗ. Таким образом становятся легко доступными идеи теории ОЗ, которые могут оказаться полезными каждому изучающему квантовые явления.

Замечательно, что в КР R -матричной теории для нахождения V требуется лишь конечное число параметров рассеяния (положений резонансов E_λ и их приведенных ширин γ_λ), определяемых из экспериментальных данных на ограниченном энергетическом интервале. Следовательно, в данном случае автоматически снимается упомянутая выше трудность учета состояний с $E \rightarrow \infty$. Вместе с тем в такой постановке ОЗ устанавливается точная связь данных рассеяния с взаимодействием и нужно выполнить конечное число чисто алгебраических операций для восстановления V по $E_\lambda, \gamma_\lambda$. Поэтому указанный метод очень удобен для использования в качестве модели при исследовании ряда сложных вопросов квантовой теории. В частности, это касается вопроса о минимуме необходимой информации для определения V — проблемы полного эксперимента и связей между различными данными рассеяния.

В обзоре рассматривается одномерный случай движения частиц во внешнем поле, приводится обобщение ОЗ для систем с сильной связью каналов. Используемый в обзоре новый подход позволяет затем просто перейти даже к многомерному случаю, ОЗ для кото-

* Конечно-разностный (КР) аналог методов ОЗ Гельфанда — Левитана — Марченко был предложен Кейзом и Кацем [4, 5] и для R -матричной КР теории в работе [6].

рого долгое время не поддавалась решению [3]. Обсуждаются примеры восстановления взаимодействия трех (и более) частиц.

Данный обзор не может заменить другие обзоры [3, 8—13], он может лишь дополнить их новым пониманием теории ОЗ. При этом часть результатов, полученных авторами, публикуется здесь впервые.

1. ЭЛЕМЕНТАРНЫЙ ПРИМЕР РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Основной трудностью, с которой встречается физик, начинающий изучать ОЗ, является ускользающая в традиционных подходах логическая связь многих этапов построения V по данным рассеяния S . Тому, кто не знаком со спектральной теорией операторов, может быть неясно, зачем, например, в подходе Гельфанда — Левитана сначала по данным рассеяния строится так называемая спектральная функция ρ . Почему для вычисления V по ρ и специальным вспомогательным функциям f нужно предварительно находить некоторую функцию двух переменных, которая служит лишь ядром интегрального уравнения для новой промежуточной функции K , связанной, наконец, с искомым V (см. разд. 3).

Традиционные подходы будут обсуждаться в следующих разделах, а здесь рассматривается элементарный пример ОЗ, который особенно удобен для первого знакомства с теорией. Здесь, например, сразу же отчетливо видна роль свойства полноты набора решений уравнения Шредингера как важного дополнительного соотношения для нахождения V .

Будут продемонстрированы два варианта решения КР обратной задачи, использующих разные типы соотношений полноты (для волновых функций Ψ , заданных на полуоси $(0, \infty)$ и для вспомогательных функций u_λ , определенных в интервале $[0, a]$ — в области взаимодействия конечного радиуса).

Восстановление V и Ψ по асимптотике Ψ

Запишем одномерное уравнение Шредингера для волновой функции Ψ , определенной условиями

$$\Psi(E, 0) = 0; \quad \Psi(E, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (1/k) [\exp(-ikr) - S \exp(ikr)],$$

в виде

$$-\frac{1}{2} \Psi''(E, r) + V(r) \Psi(E, r) = E \Psi(E, r). \quad (1)$$

$(\hbar = m = 1)$

Конечно-разностным аналогом (1) является следующее уравнение:

$$-\frac{1}{2\Delta^2} [\Psi(E, n+1) - 2\Psi(E, n) + \Psi(E, n-1)] + V(n) \Psi(E, n) = E \Psi(E, n), \quad (2)$$

где первый член слева есть вторая КР производная от $\Psi(E, n)$;

$\Delta \equiv r_{n+1} - r_n$ — шаг КР дифференцирования; $\Psi(E, r_n) \equiv \Psi(E, n)$; $V(r_n) \equiv V(n)$.

Пусть искомым потенциал имеет конечный радиус действия a : $V(r_n \geq a = N\Delta) \equiv V(n \geq N) = 0$. Предположим сначала, что в поле $V(n)$ отсутствуют связанные состояния. Вне области действия потенциала волновая функция имеет вид комбинации свободных падающей I и рассеянной O волн [переходящих в пределе $\Delta \rightarrow 0$ в $\exp(\pm ikr)$, см. (45) — (48)]:

$$\Psi(E, n \geq N) = A [I(E, n) - S(E) O(E, n)]; \quad (\Psi(E, 0) = 0), \quad (3)$$

где $S(E)$ — матрица рассеяния; $A^2 = (2E - E^2\Delta^2)^{-1/2} \xrightarrow{\Delta \rightarrow 0} 1/k$.

В ОЗ требуется восстановить $V(n)$ по заданной $S(E)$, или, что эквивалентно, по асимптотике $\Psi(E, n \geq N)$, так как $I(E, n)$, $O(E, n)$ в (3) — известные решения. Асимптотика же Ψ однозначно определяется значениями волновой функции $\Psi(E, N)$ и ее КР производной $[\Psi(E, N + 1) - \Psi(E, N)]/\Delta$ на границе области взаимодействия. Следовательно, ОЗ можно сформулировать еще и так:

найти $V(n)$ по заданным $\Psi(E, N)$ и $\Psi(E, N + 1)$.

Рекуррентные соотношения. Уравнение (2) связывает при каждом фиксированном n волновую функцию в трех соседних точках $(n, n \pm 1)$. При $n = N$ можно выразить $\Psi(E, N - 1)$ с помощью (2) через известные $\Psi(E, N)$ и $\Psi(E, N + 1)$, учитывая, что $V(N) = 0$:

$$\Psi(E, N - 1) = 2\Delta^2 [V(N) - E + 1/\Delta^2] \Psi(E, N) - \Psi(E, N + 1). \quad (4)$$

Таким образом, найдено Ψ в точке, где V неизвестно. Положим теперь в уравнении (2) $n = N - 1$

$$\begin{aligned} &(-1/2\Delta^2) [\Psi(E, N - 2) - 2\Psi(E, N - 1) + \Psi(E, N)] + \\ &+ V(N - 1) \Psi(E, N - 1) = E\Psi(E, N - 1). \end{aligned} \quad (5)$$

Это одно уравнение для двух неизвестных $\Psi(E, N - 2)$ и $V(N - 1)$. Чтобы избавиться от лишней неизвестной, воспользуемся соотношением ортогональности волновых функций, но не по пространственной переменной n

$$\frac{1}{2\pi} \sum_n \Delta \Psi^*(E, n) \Psi(E', n) = \delta(E - E'), \quad (6)$$

а по энергии

$$\frac{1}{2\pi} \int \Psi(E, m) \Psi^*(E, n) dE = \delta_{mn}/\Delta, \quad (7)$$

которое обычно называют условием полноты* (или равенством Парсеваля; δ_{mn}/Δ — КР эквивалент δ -функции). Умножим обе стороны уравнения (5) на $\Psi^*(E, N-1)$, вычисленную ранее, и проинтегрируем по энергии. Это приведет к исчезновению неизвестной $\Psi(E, N-2)$ вследствие ортогональности $\Psi(E, N-1)$ и $\Psi(E, N-2)$. В результате получим выражение для $V(N-1)$ через известные величины:

$$V(N-1) = (\Delta/2\pi) \int E |\Psi(E, N-1)|^2 dE - 1/\Delta^2. \quad (8)$$

Итак, по $\Psi(E, N)$ и $\Psi(E, N+1)$ определены $\Psi(E, N-1)$, $V(N-1)$, т. е. мы продвинулись на один шаг вглубь области искомого взаимодействия — выполнен первый этап решения ОЗ.

Повторяя описанную процедуру в следующих точках, получаем рекуррентные соотношения:

$$\Psi(E, n) = 2\Delta^2 [V(n+1) - E + 1/\Delta^2] \Psi(E, n+1) - \Psi(E, n+2); \quad (9)$$

$$V(n) = (\Delta/2\pi) \int E |\Psi(E, n)|^2 dE - 1/\Delta^2. \quad (10)$$

Используя их, находим волновую функцию и потенциал во всей области $n < N$ по известным $\Psi(E, N)$, $\Psi(E, N+1)$. Таким образом, процедура решения, поставленной выше ОЗ, не намного сложнее, чем в случае прямой задачи.

Обрезание по энергии. В ходе вывода рекуррентных соотношений (9) и (10) не было отмечено то важное обстоятельство, что спектр состояний Ψ , образующий полный набор, ограничен сверху в КР приближении для уравнения Шредингера. Интегрирование по E в (7), (8) и (10) ведется от 0 до $E_{\text{макс}} = 2/\Delta^2$. Этот строгий математический факт можно пояснить простым примером свободного движения. Полный набор решений (1) с $V = 0$ образуют реальные осциллирующие функции со всеми возможными частотами от нулевой до бесконечной [они линейно-независимы — ортогональны согласно (6)]. Но в КР случае вообще не существует частот выше максимальной $k = 2/\Delta$. Этой наибольшей частоте как раз и соответствует $E = E_{\text{макс}} = 2/\Delta^2$. Значит, полный набор

* Действительно, из (7) следует, что любую функцию $f(m)$ можно разложить по набору волновых функций $\Psi(E, m)$. Умножая обе стороны (7) на $f(n)$ и суммируя по n , получаем

$$f(m) = \int C(E) \Psi(E, m) dE,$$

где

$$C(E) = \sum_n \Delta \Psi^*(E, n) f(n).$$

состояний со всеми допустимыми уравнением (2) частотами исчерпывается при $E \leq E_{\text{макс}} = 2/\Delta^2$.

Связанные состояния. До сих пор предполагалось отсутствие связанных состояний в системе. Если же в потенциале $V(n)$ имеется M дискретных уровней с $E = E_i$ ($i = 1, 2, \dots, M$), то к интегралам по энергии в (7) — (10) следует добавить суммы по связанным состояниям. Их функции $\Psi(E_i, n)$ нормированы на единицу:

$$\sum_{n=1}^N \Delta \Psi^2(E_i, n) = 1. \quad (11)$$

Для решения ОЗ в этом случае нужно кроме $\Psi(E, N)$, $\Psi(E, N+1)$ ($0 \leq E \leq E_{\text{макс}}$) знать еще $\Psi(E_i, N)$, $\Psi(E_i, N+1)$ ($i = 1, 2, \dots, M$). Асимптотика $\Psi(E_i, n \geq N)$ представляет собой убывающее с ростом n свободное решение (2) с $V = 0$, имеющее амплитуду A_i . Таким образом, задание $\Psi(E_i, N)$, $\Psi(E_i, N+1)$ эквивалентно заданию значений энергий связанных состояний E_i и соответствующих констант A_i , которые можно найти из эксперимента [14].

Потенциалы с известным «хвостом». Выше предполагалось, что $V(n \geq N) = 0$. Но предложенная процедура решения ОЗ распространяется и на случай, когда V имеет при $n \geq N$ отличные от нуля, но известные значения $V(n) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Так как волновые функции известны при $n \geq N$, можно по E_i и заданным $S(E)$ и A_i определить значения Ψ в точках N и $N+1$, которые используются в качестве исходной информации в описанной выше ОЗ.

Обратная задача в КР R -матричной теории (полнота на $(0, a]$)

Предельной простоты процедура решения ОЗ достигает в рамках КР формализма R -матричной теории рассеяния. Хотя выше и предполагалось, что искомый потенциал имеет конечный радиус действия, эта априорная информация не была пока использована в полной мере. Оказывается, благодаря ей можно существенно сократить объем необходимых исходных данных для определения $V(n)$.

Если опираться на полноту набора решений (2) не на всей полуоси $(0; \infty)$, а лишь на ее участке $(0, a]$, где ищется потенциал, то вместо непрерывного спектра получится дискретный спектр собственных состояний гамильтониана в конечном числе энергетических точек $E = E_i$ ($i = 1, \dots, N$). Выберем для этого вспомогательные решения $u(E, n)$ уравнения (2), используемые в R -матричной теории рассеяния в качестве базисных (КР вариант этой

теории изложен в приложении 1). Функции $u(E, n)$ задаются однородными граничными условиями на концах интервала $[0, a]$:

$$u(E, 0) = 0; \quad u(E, N + 1) = u(E, N) (1 + \Delta B/a). \quad (12)$$

Второе условие в (12) соответствует равенству некоторой константе B/a КР логарифмической производной $[u(E, n + 1) - u(E, n)]/\Delta u(E, n)$ в точке $n = N^*$.

Как известно, такая система имеет решения лишь при N значениях энергии $E = E_\lambda$ ($\lambda = 1, 2, \dots, N$). Соотношения ортогональности и полноты для $u_\lambda(n) \equiv u(E_\lambda, n)$ являются дискретным по энергии аналогом (6) и (7) и имеют вид (вывод дается в приложении 2):

$$\sum_{n=1}^N \Delta u_\lambda(n) u_{\lambda'}(n) = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad (13)$$

$$\sum_{\lambda=1}^N u_\lambda(n) u_\lambda(m) = \delta_{mn}/\Delta, \quad (14)$$

R -матричная теория рассеяния позволяет параметризовать непрерывную энергетическую зависимость S -матрицы с помощью дискретных E_λ (положения резонансов) и значений собственных функций u_λ на границе взаимодействия (приведенные ширины резонансов). В КР приближении таких параметров всего $2N$: $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$. R -матрица, однозначно связанная с $S(E)$ (см. приложение 1), имеет простой вид:

$$R(E) = \sum_{\lambda}^N [\gamma_\lambda^2 / (E_\lambda - E)]. \quad (15)$$

Итак, получаем новую формулировку ОЗ:

найти $V(n)$ по заданным $E_\lambda, \gamma_\lambda$ ($\lambda = 1, \dots, N$).

Рекуррентные соотношения. В указанной выше постановке решение ОЗ можно свести к использованию рекуррентных соотношений, которые отличаются от (9) и (10) лишь заменой интегралов конечными суммами:

$$u_\lambda(n) = 2\Delta^2 [V(n+1) - E_\lambda + 1/\Delta^2] u_\lambda(n+1) - u_\lambda(n+2); \quad (16)$$

$$V(n) = \Delta \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda u_\lambda^2(n) - 1/\Delta^2. \quad (17)$$

В этом случае для определения $V(n)$ при $n < N$ требуется выполнять чисто алгебраические операции и строго конечное их число! Формулы (16) и (17) устанавливают точное однозначное соответствие параметров рассеяния $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$ и значений $V(n)$.

* Условия (12) позволяют исключить из (2) для $u(E, n)$ значения $u(E, 0)$ и $u(E, N + 1)$ и выделить замкнутую систему N однородных алгебраических уравнений для $u(E, 1), u(E, 2), \dots, u(E, N)$.

В отличие от прямой задачи, где решение уравнения Шредингера можно получить при одной отдельной энергии, в ОЗ необходимо при вычислении V находить $u(E, n)$ одновременно при всех значениях E , соответствующих полному набору собственных функций.

Контрольные расчеты. Алгоритм решения ОЗ по (16) и (17) очень удобен для реализации на ЭВМ (многократно повторяется небольшое число операций). Для проверки метода сначала для нескольких потенциалов $V(n)$ разной формы (притяжения, отталкивания, знакопеременных) были вычислены параметры $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$. Эта прямая задача выполняет здесь роль эксперимента по рассеянию. Затем полученные значения $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$ использовались в качестве исходных данных для обратной задачи. Восстановленные потенциалы $\tilde{V}(n)$ оказались с точностью до восьми значащих цифр совпадающими с $V(n)$, что подтвердило точное соответствие $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\} \leftrightarrow V(n)$. Незначительная разница V и \tilde{V} объясняется заданным конечным пределом точности вычислений на ЭВМ (10-м знаком). По отношению к «погрешностям машины» расчет довольно устойчив (при $N = 20$ после цикла — прямая и обратная задача — погрешность выросла не более чем на два порядка).

Связи на параметры рассеяния. Класс данных рассеяния $\{E_\lambda, \gamma_\lambda\}$, отвечающих КР уравнению Шредингера и потенциалам конечного радиуса действия, сильно ограничен. (Число независимых параметров рассеяния должно быть равно числу точек, где $V \neq 0$.) Они должны удовлетворять N нелинейным уравнениям [согласно (12)]:

$$u_\lambda(0) = 0, \tag{18}$$

где вместо $u_\lambda(0)$ нужно подставить выражения для них через $E_\lambda, \gamma_\lambda$, получающиеся с помощью соотношений (16) и (17).

Другие $N(N-1)/2$ связей хотя и следуют из (18), но могут оказаться более удобными для использования. Они получаются из уравнения Шредингера для $u_\lambda(n)$ умножением на $u_\lambda(n+m)$ и суммированием по λ с учетом (14):

$$\left. \begin{aligned} -1/2\Delta^3 &= \sum_\lambda E_\lambda u_\lambda(n) u_\lambda(n+1) \text{ при } n = 1, 2, \dots, (N-1); \\ 0 &= \sum_\lambda E_\lambda u_\lambda(n) u_\lambda(n') \text{ при } n' > n+1. \end{aligned} \right\} \tag{19}$$

Более интересные (разрешимые относительно γ) соотношения между данными рассеяния получаются в многомерных задачах (см. разд. 5).

2. АЛГЕБРАИЧЕСКИЙ АНАЛОГ ТЕОРИИ ГЕЛЬФАНДА — ЛЕВИТАНА — МАРЧЕНКО

Методы ОЗ Гельфанда — Левитана — Марченко возникли как континуальное обобщение соответствующих результатов теории матриц Якоби. Непосредственно эта алгебраическая теория, каза-

лось бы, не могла быть использована для задач рассеяния: она оперировала чисто дискретными величинами, в то время как столкновения частиц описываются непрерывными волновыми функциями, отвечающими состояниям сплошного спектра гамильтониана взаимодействия физических систем.

Однако, как уже отмечалось выше, в случае сил конечного радиуса действия данные рассеяния удается параметризовать дискретным набором констант — положений резонансов E_λ и их приведенных ширин γ_λ (в рамках R -матричной теории). В сочетании же с КР приближением для уравнения Шредингера, которое переходит в систему алгебраических уравнений с матрицей Якоби для коэффициентов, можно получить имеющий физический смысл чисто алгебраический аналог теории Гельфанда — Левитана — Марченко.

Обратная задача в R -матричной теории (КР приближение, метод ортогонализации полиномов)

В зависимости от выбора граничных условий получают различные решения одного и того же уравнения Шредингера с тем же искомым потенциалом V . Выше для построения V уже использовались два типа решений (2): волновые функции Ψ , удобные тем, что матрица рассеяния S явно входит в значения Ψ на границе области взаимодействия (3), и отвечающие условиям (12) собственные функции $u_\lambda(n)$, достоинство которых заключается в конечности числа решений $u_\lambda(n)$, образующих полный набор.

Рассмотрим новый тип решений $\phi(E, n)$, имеющих замечательную энергетическую зависимость, которая позволяет просто связать $\phi(E, n)$ с известными свободными решениями $\dot{\phi}(E, n)$ уравнения (2) с $V(n) \equiv 0$:

$$(-1/2\Delta^2) [\dot{\phi}(E, n+1) - 2\dot{\phi}(E, n) + \dot{\phi}(E, n-1)] = E\dot{\phi}(E, n). \quad (20)$$

Определив $\phi(E, n)$, нетрудно найти и $V(n)$ из (2).

Вспомогательные решения. Для ϕ и $\dot{\phi}$ выбираются не однокродные граничные условия в точке $r = a$:

$$\left. \begin{aligned} \phi(E, N) = \dot{\phi}(E, N) = \sqrt{2a}; \quad \phi(E, N+1) = \\ = \phi(E, N)(1 + \Delta B/a); \quad \dot{\phi}(E, N+1) = \dot{\phi}(E, N)(1 + \Delta B/a), \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

с тем, чтобы решения ϕ и $\dot{\phi}$ существовали при любых E , т. е. имели непрерывную энергетическую зависимость.

Одно из граничных условий для ϕ специально взято таким же, как и для собственных функций $u_\lambda(n)$ (12), чтобы $\phi(E, n)$ отличалась от $u_\lambda(n)$ при $E = E_\lambda$, где u_λ определены, лишь на постоянный множитель $\gamma_\lambda \equiv u_\lambda(N)/\sqrt{2a}$:

$$u_\lambda(n) = \gamma_\lambda \phi(E_\lambda, n). \quad (22)$$

Это позволяет соотношение полноты собственных функций u_λ использовать и для φ [подставим (22) в (14)]:

$$\sum_\lambda \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, m) = \delta_{mn}/\Delta, \tag{23}$$

т. е. $\varphi(E_\lambda, n)$ ортогональны по энергетической переменной *, как и u_λ , только с другим весом γ_λ^2 .

Покажем теперь, что из-за специального вида зацепления значений решений в КР уравнении Шредингера (2), при переходе вглубь области взаимодействия, с каждым шагом будут возрастать на единицу степени полиномиальной зависимости φ от E (в точке N $\varphi(E, N) = \text{const}$ согласно (21), т. е. представляет собой полином нулевой степени по E). Это наглядно демонстрируется, если записать (2) для φ в матричной форме, учитывая (21):

$$\begin{pmatrix} \left[\frac{1-\Delta B/a}{2\Delta^2} + V(N) \right] & -\frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2\Delta^2} & \left[\frac{1}{\Delta^2} + V(N-1) \right] & -\frac{1}{4\Delta^2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2\Delta^2} & \left[\frac{1}{\Delta^2} + V(N-2) \right] & -\frac{1}{2\Delta^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\Delta^2} & \left[\frac{1}{\Delta^2} + V(N-3) \right] & -\frac{1}{2\Delta^2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \varphi(N) \\ \varphi(N-1) \\ \varphi(N-2) \\ \varphi(N-3) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi(N) \\ \varphi(N-1) \\ \varphi(N-2) \\ \varphi(N-3) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{26}$$

* Можно переписать (23) в другом виде, заменяя сумму на интеграл по спектральной мере

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \sum_\lambda \Theta(E-E_\lambda) \gamma_\lambda^2; \\ d\rho(E) &= \sum_\lambda \delta(E-E_\lambda) \gamma_\lambda^2 dE, \end{aligned} \tag{24}$$

где ступенчатая функция $\Theta(x) = \{0 \text{ при } x < 1; 1 \text{ при } x \geq 0\}$:

$$\int \varphi(E, n) \varphi(E, m) d\rho(E) = \delta_{mn}/\Delta. \tag{25}$$

Благодаря тридиагональности матрицы уравнений (26), где V имеется лишь на диагонали, и тому, что согласно (21) $\varphi(E, N) = \overset{\circ}{\varphi}(E, N)$, имеем $K(n, n) = 1/\Delta$.

Действительно, как нетрудно проследить при последовательном решении алгебраических уравнений в (26), потенциал V никогда не входит в множитель при высшей степени E в полиномах $\varphi(E, n)$, так как этот множитель в основном формируется в правой части (26) [в точке n он равен $\sqrt{2a}(-2\Delta^2)^{N-n}$]. Следовательно, коэффициенты при высших степенях E в $\varphi(E, n)$ и $\overset{\circ}{\varphi}(E, n)$ попарно равны при всех n в области взаимодействия, т. е. $K(n, n) = 1/\Delta$:

$$\varphi(E, n) = \overset{\circ}{\varphi}(E, n) + \sum_{m=n+1}^N \Delta K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E, m). \tag{28}$$

Алгебраический аналог интегральных уравнений ОЗ. Полиномы φ должны быть ортогонализированы по энергетической переменной согласно соотношениям (23), являющимся модификацией условия полноты (14). Поэтому $K(n, m)$ в (27) можно рассматривать как коэффициенты ортогонализации полиномов, построенных из $\overset{\circ}{\varphi}$ по новой мере $\rho(E)$. Сами же $\overset{\circ}{\varphi}$ ортогональны по мере $\overset{\circ}{\rho}(E)$:

$$\int \overset{\circ}{\varphi}(E, n) \overset{\circ}{\varphi}(E, m) d\overset{\circ}{\rho}(E) = \delta_{mn}/\Delta. \tag{29}$$

Чтобы получить линейные уравнения для K , удобно пользоваться не самими соотношениями (23), а эквивалентными им условиями ортогональности $\varphi(E, n)$ ко всем $\overset{\circ}{\varphi}(E, m)$ с $m > n$:

$$\sum_{\lambda} \gamma_{\lambda}^2 \varphi(E, n) \overset{\circ}{\varphi}(E, m) \equiv \int \varphi(E, n) \overset{\circ}{\varphi}(E, m) d\rho(E) = 0. \tag{30}$$

Действительно, чтобы иметь $\varphi(E, N-1) \perp \varphi(E, N)$, согласно второму уравнению в (27) нужно обеспечить $\varphi(E, N-1) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, N)$; чтобы $\varphi(E, N-2)$ была ортогональна $\varphi(E, N-1)$ и $\varphi(E, N)$, достаточно добиться ортогональности $\varphi(E, N-2)$ к $\overset{\circ}{\varphi}(E, N-1)$ и $\overset{\circ}{\varphi}(E, N)$, из которых строятся $\varphi(E, N-1)$ и $\varphi(E, N)$, и т. д.

Подставляя φ в форме (27) в (29), получаем линейные алгебраические уравнения для $K(n, m)$:

$$Q(n, m) + \sum_{p=n+1}^N \Delta K(n, p) Q(p, m) = 0, \tag{31}$$

где

$$Q(n, m) = \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda}^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m). \tag{32}$$

Уравнения (31) играют здесь ту же роль, что и в классическом формализме ОЗ интегральные уравнения Гельфанда — Левитана — Марченко (см. разд. 3). Точный алгебраический аналог последних получается, если незначительно изменить обозначения *

$$\bar{Q}(n, m) = Q(n, m) - \delta_{nm}/\Delta;$$

$$K(n, m) + \bar{Q}(n, m) + \sum_{p=n+1}^N \Delta K(n, p) \bar{Q}(p, m) = 0, \quad m > n. \quad (34)$$

Итак, по исходным $\{E_{\lambda}, \gamma_{\lambda}\}$ и известным $\overset{\circ}{\phi}$ согласно (32) определяются $Q(n, m)$ [или $\bar{Q}(n, m)$]. Затем, решая (31), находим $K(n, m)$. Подставляя эти величины в (27), получаем ϕ . А зная решение ϕ уравнения Шредингера (2), легко найти и потенциал V .

Связь V с K . Подставим ϕ в виде (28) в (2), умножим обе части уравнения на $\overset{\circ}{\phi}(E, n)$ и проинтегрируем по мере $\overset{\circ}{\rho}(E)$. Учитывая (20) и (29), имеем

$$V(n) = -[K(n, n+1) - K(n-1, n)]/2\Delta. \quad (35)$$

Эта формула в пределе $\Delta \rightarrow 0$ переходит в известное выражение (70) теории Гельфанда — Левитана — Марченко для связи потенциала с ядром преобразования $\overset{\circ}{\phi}$ в ϕ .

Сравнение с методом рекуррентных соотношений. Грубая оценка увеличения числа операций (с ростом N), необходимых для решения уравнения ОЗ, дает для рассмотренного здесь способа восстановления $V(n)$ зависимость, пропорциональную N^4 (или $\sim \Delta^{-4}$), а для метода, использующего рекуррентные соотношения (16) и (17), эта зависимость получается $\sim N^2$. Контрольные расчеты на ЭВМ показали, что примерно в тех же пропорциях возрастает машинное время, необходимое для нахождения $V(n)$ (за вычетом времени трансляции) **.

Кстати, используя вспомогательные функции ϕ , $\overset{\circ}{\phi}$, можно предложить еще один вариант уравнения ОЗ с рекуррентными

* Коэффициенты \bar{Q} можно представить в виде:

$$\bar{Q}(n, m) = \int \overset{\circ}{\phi}(E, n) \overset{\circ}{\phi}(E, m) d[\overset{\circ}{\rho}(E) - \overset{\circ}{\rho}(E)]. \quad (33)$$

** Формулу (35) для потенциала можно получить из (17) подстановкой в последнюю $u_{\lambda}(n) = \gamma_{\lambda}\phi(E_{\lambda}, n)$ и $\phi(E_{\lambda}, n)$ в виде (28) с учетом (20), (30) и равенства $K(n, n-1) = (1/\Delta) \int \phi(E, n) \overset{\circ}{\phi}(E, n-1) d\rho$, вытекающего из (27).

соотношениями:

$$\varphi(E_\lambda, n) = 2\Delta^2 [V(n+1) - E_\lambda + 1/\Delta^2] \varphi(E_\lambda, n+1) - \varphi(E_\lambda, n+2); \quad (36)$$

$$\begin{aligned} V(n) = & (1/2\Delta) \sum_{\lambda=1}^N \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n+1) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) - \\ & - (1/2\Delta) \sum_{\lambda=1}^N \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n-1). \end{aligned} \quad (37)$$

Выражение (37) для $V(n)$ получается умножением (2) для $\varphi(E_\lambda, n)$ на $\gamma_\lambda^2 \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n)$, суммированием обеих сторон равенства по λ с учетом (30), (20) и

$$\sum_{\lambda=1}^N \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \varphi(E_\lambda, n) = \sum_{\lambda=1}^N \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, n) = 1/\Delta, \quad (38)$$

что следует из (23) и (28).

Соотношение (37) можно записать еще в виде

$$V(n) = [\tilde{K}(n+1, n) - \tilde{K}(n, n-1)]/2\Delta, \quad (39)$$

где

$$\tilde{K}(n, m) = (1/\Delta) \sum_{\lambda} \gamma_\lambda^2 \varphi(E_\lambda, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_\lambda, m) \quad (40)$$

— коэффициенты преобразования от $\overset{\circ}{\varphi}$ к φ [обратного (27)]. Таким образом, $\tilde{K}(n, n-1)$ ($n = N, N-1, \dots, 1$), соседние с диагональными $\tilde{K}(n, n) = 1/\Delta$, можно найти с помощью рекуррентных соотношений (36), (39), (40). Непрерывный аналог этой процедуры получается последовательным дифференцированием преобразования от φ к $\overset{\circ}{\varphi}$: $\overset{\circ}{\varphi} = \varphi + \int_r^a \tilde{K} \varphi dr'$ и его ядра $\tilde{K}(r, r') = \int \varphi(E, r) \overset{\circ}{\varphi}(E, r') d(\rho - \overset{\circ}{\rho})$. В результате вычисляются $\frac{d^n}{dr^n} V(r) |_{r=a}$, по которым определяется $V(r)$ в области сходимости ряда Тейлора для потенциала.

Потенциалы, зависящие от скорости. В ядерной физике для эффективного учета отгалкивания частиц на малых расстояниях используется иногда взаимодействие типа

$$V(\hat{p}) = V_0(r) + [\hat{p}^2 V_1(r)/2 + V_1(r) \hat{p}^2/2]/2, \quad (41)$$

где $p = -i\nabla$ — оператор импульса. Такой потенциал приводит к появлению в уравнении Шредингера переменного коэффициента,

зависящего от координаты r , перед оператором кинетической энергии (второй производной). В КР приближении такое уравнение Шредингера имеет вид *

$$\begin{aligned} & - \{ \Psi(E, n+1) - 2\Psi(E, n) + \Psi(E, n-1) \} \times \\ & \quad \times [1 + V_1(n)/2] / 2\Delta^2 + V_0(n) \Psi(E, n) - \\ & - \{ V_1(n+1) \Psi(E, n+1) - 2V_1(n) \Psi(E, n) + \\ & \quad + V_1(n-1) \Psi(E, n-1) \} / 4\Delta^2 = E \Psi(E, n). \end{aligned} \quad (42)$$

Будем, как и выше, предполагать, что силы имеют конечный радиус действия $V_0(r \geq a) = V_1(r \geq a) = 0$ (или что V_0 и V_1 известны при $r > a$). Как и в случае обычного потенциала, решения $u(E_\lambda, n) \equiv u_\lambda(n)$, удовлетворяющие однородным граничным условиям (12), образуют полный ортонормированный набор: выполняются (13) и (14) (доказательство проводится так же, как в приложении 2). Остаются также верны соотношения (27), (29), (30) и (32). Коэффициенты ортогонализации находятся вместо (31) из системы уравнений:

$$\begin{aligned} \Delta K(n, n) Q(n, m) + \sum_{p=n-1}^N \Delta K(n, p) Q(p, m) &= 0, \quad n > m; \\ Q(n, n) + \sum_{p=n+1}^N K(n, p) Q(p, n) K^{-1}(n, n) &= K^{-2}(n, n) / \Delta^3, \end{aligned}$$

где имеется дополнительное уравнение для $K(n, n)$, полученное подстановкой (27) в (23) при $n = m$. Это небольшое усложнение системы уравнений для K вызвано тем, что в случае потенциала $V(\hat{p}^2)$ коэффициенты при высших степенях по E в полиномах $\phi(E, n)$ и $\psi(E, n)$ уже не равны, т. е. $K(n, n) \neq 1/\Delta$.

Связь V с K определяется вместо (35) рекуррентными соотношениями:

$$\begin{aligned} V_1(n-1) &= 2K(n, n) / K(n-1, n-1) - 2 - V_1(n); \\ V_0(n) &= -(1/2\Delta^2) [K(n, n+1) / K(n, n) - \\ & - K(n-1, n) / K(n-1, n-1)] - V_1(n) / \Delta^2. \end{aligned} \quad (43)$$

* При выводе (42) следует иметь в виду специфику КР дифференцирования произведения [23] («расположение» аргументов). Обозначим операторы правого и левого КР дифференцирования δ_{\pm} :

$$\begin{aligned} \delta_+ f(n) &= [f(n+1) - f(n)] / \Delta; \\ \delta_- f(n) &= [f(n) - f(n-1)] / \Delta. \end{aligned}$$

Тогда $\delta_- [f(n) g(n)] = f(n-1) \delta_- g(n) + g(n) \delta_- f(n)$;

$$\delta_+ [f(n) g(n)] = f(n+1) \delta_+ g(n) + g(n) \delta_+ f(n).$$

Вторая производная имеет вид

$$\begin{aligned} \delta_+ \delta_- [f(n) g(n)] &= \{ f(n+1) g(n+1) - 2g(n) f(n) + g(n-1) f(n-1) \} / \Delta^2 = \\ & = \delta_- \delta_+ [f(n) g(n)]. \end{aligned}$$

Первое уравнение (43) получается умножением (42) для $\varphi(E, n)$ на $\dot{\varphi}(E, n - 1)$ и интегрированием по $\dot{\rho}$ с использованием (27). Второе уравнение в (43) получается умножением (42) для $\varphi(E, n)$ на $\dot{\varphi}(E, n)$ и интегрированием по $\dot{\rho}$ с учетом (27).

В работе [15] даны другие рекуррентные соотношения:

$$\begin{aligned} V_1(n-1) &= -[1/2\Delta^2 + V_1(n)/4\Delta^2 + H_{n, n-1}]4\Delta^2; \\ V_0(n) &= H_{nn} - 1/\Delta^2 - V_1(n)/\Delta^2, \end{aligned} \tag{44}$$

где

$$H_{nn} = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \gamma_{\lambda}^2 \varphi(E_{\lambda}, n) \varphi(E_{\lambda}, m).$$

Решение рассмотренной ОЗ для потенциалов, зависящих от скорости, может представить интерес при построении КР гамильтониана, фазово-эквивалентного дифференциальному оператору *, соответствующему уравнению (1). Дело в том, что, хотя в общем случае не существует КР потенциала $V(n)$, дающего те же параметры рассеяния, что и $V(r)$, всегда можно найти соответствующий ему КР потенциал $V(\hat{p}^2)$. Пока, однако, не исследован вопрос о том, насколько близок такой КР потенциал $V(\hat{p}^2)$ к $V(r)$: велико ли «возмущение» $V_1(n)$ и $V_0(n) - V(r_n)$.

Конечно-разностный метод Гельфанда — Левитана

Поскольку изложенный выше формализм ОЗ в КР R -матричной теории [6, 16] близок КР-аналогу метода Гельфанда — Левитана [4], не будем здесь останавливаться подробно на последнем. Укажем лишь на отдельные моменты, отличающие этот подход в случае потенциала конечного радиуса действия от его R -матричной модификации.

Вспомогательные функции $\varphi(E, n)$ и $\dot{\varphi}(E, m)$ задаются граничными условиями не в точке N , а в начале координат:

$$\varphi(E, 0) = \dot{\varphi}(E, 0) = 0; \quad \varphi(E, 1) = \dot{\varphi}(E, 1) = \Delta. \tag{45}$$

Функции $\varphi(E, n)$, $\dot{\varphi}(E, n)$ также являются полиномами по E , но степени $n - 1$, а не $N - n$ (степень полинома возрастает при удалении от точки $n = 1$). В качестве собственных функций могут использоваться те же функции $u_{\lambda}(n)$, что и выше [см. (12) — (14)]. Тогда спектральная функция, связанная с данными рассеяния, будет определяться E_{λ} и значениями $u_{\lambda}(1)$, а не $u_{\lambda}(N)$. Вместо

* Как показано в книге Березанского [20, с. 525], любой спектральной функции $\rho(E)$, удовлетворяющей условию $\int d\rho(E) = 1$, однозначно соответствует КР выражение слева в (42).

(27) связь φ с $\overset{\circ}{\varphi}$ определяется соотношениями

$$\varphi(E, n) = \overset{\circ}{\varphi}(E, n) + \sum_{m=1}^{n-1} \Delta K(n, m) \overset{\circ}{\varphi}(E, m). \quad (46)$$

Как и в (30), $\varphi(E, n) \perp \overset{\circ}{\varphi}(E, m)$, но при $m < n$. Уравнения для $K(n, m)$ — аналог уравнений Гельфанда — Левитана и формула связи потенциала с $\overset{\circ}{K}(n, m)$ подобны (31) и (35):

$$\left. \begin{aligned} K(n, m) + \bar{Q}(n, m) + \sum_{p=1}^{n-1} \Delta K(n, p) \bar{Q}(p, m) &= 0; \\ \bar{Q}(n, m) &= \sum_{\lambda} \Delta u_{\lambda}(1) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, n) \overset{\circ}{\varphi}(E_{\lambda}, m) - \delta_{mn}/\Delta; \\ V(n) &= [K(n+1, n) - K(n, n-1)]/2\Delta. \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

Алгебраический аналог метода Марченко [5]

В методе Марченко вместо вспомогательных решений φ и $\overset{\circ}{\varphi}$ используются решения φ_{\pm} , $\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}$ с асимптотическим поведением, соответствующим в пределе $\Delta \rightarrow 0$ свободным волнам $\exp(\pm i kr)$. Специфика этого подхода заключается в том, что φ_{\pm} просто связаны с физической волновой функцией:

$$\Psi(E, n) = A[\varphi_{-}(E, n) - S(E)\varphi_{+}(E, n)], \quad (48)$$

и здесь Ψ и V восстанавливаются по S без промежуточного этапа введения спектральной функции.

При выводе преобразования (27) от φ к $\overset{\circ}{\varphi}$ использовалась полиномиальная зависимость этих функций от энергии и тот факт, что число членов с разными степенями E в этих полиномах возрастало на каждом шаге при переходе от точки N вглубь области взаимодействия. Здесь аналогичную роль играет полиномиальная зависимость φ_{\pm} и $\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}$ относительно новой переменной $z^{\pm 1}$, связанной с E .

Конечно-разностными аналогами $\exp(\pm ikr)$ являются [5] решения $\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}$ уравнения (20):

$$\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, n) = z^{\pm n}, \quad (49)$$

где $z \equiv \lambda - \sqrt{\lambda^2 - 1}$, а $\lambda \equiv 1 - E\Delta^2 \equiv (z + 1/z)/2$.

Действительно, с одной стороны, $\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}$ удовлетворяют (20), в чем легко убедиться, переписывая свободное КР уравнение Шредингера (20) в виде

$$\overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, n+1) + \overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, n-1) = (z + 1/z) \overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, n). \quad (20a)$$

С другой стороны, поскольку при изменении E в интервале энергий $0 \leq E \leq \leq 2/\Delta^2$ параметр λ меняется в пределах $-1 \leq \lambda \leq 1$, можно положить

$\lambda = \cos \theta$; $z = \lambda - \sqrt{\lambda^2 - 1} = \cos \theta - i \sin \theta = \exp(-i\theta)$, т. е. $\sin^2 \theta/2 = = k^2 \Delta^2/4$. Согласно же соотношению $\lambda \equiv 1 - E \Delta^2 \equiv 1 - k^2 \Delta^2/2 = \cos \theta$, имеем

$$z^{\pm n} \xrightarrow[\Delta n \rightarrow r]{\Delta \rightarrow 0} \exp(\pm ikr). \tag{49a}$$

Будем, как и раньше, полагать для простоты рассуждений, что отсутствуют связанные состояния и $V(n \geq N) = 0$. В точках $n = N + 1, N$, по определению (49):

$$\varphi_{\pm}(z, N + 1) = \overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, N + 1) = z^{\pm(N+1)}; \tag{50}$$

$$\varphi_{\pm}(z, N) = \overset{\circ}{\varphi}_{\pm}(z, N) = z^{\pm N}. \tag{51}$$

Запишем теперь уравнение Шредингера (2) в матричной форме [ср. с (26)]:

$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 1 & -2V(N-1)\Delta^2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & -2V(N-2)\Delta^2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2V(N-3)\Delta^2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{\pm}(z, N + 1) = z^{\pm(N+1)} \\ \varphi_{\pm}(z, N) = z^{\pm N} \\ \varphi_{\pm}(z, N - 1) \\ \psi_{\pm}(z, N - 2) \\ \varphi_{\pm}(z, N - 3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \left(z + \frac{1}{z}\right) \begin{pmatrix} \vdots \\ \varphi_{\pm}(z, N) = z^{\pm N} \\ \varphi_{\pm}(z, N - 1) \\ \varphi_{\pm}(z, N - 2) \\ \varphi_{\pm}(z, N - 3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{52}$$

Это система алгебраических уравнений с тридиагональной матрицей коэффициентов. Из уравнения, связывающего известные $\varphi_{\pm}(z, N + 1)$, $\varphi_{\pm}(z, N)$ с $\varphi_{\pm}(z, N - 1)$, находим, что $\varphi_{\pm}(z, N - 1) = z^{\pm(N-1)}$. Из следующего уравнения в (52) видно, что $\varphi_{\pm}(z, N - 2)$ содержит кроме $z^{\pm(N-2)}$ еще член с $z^{\pm(N-1)}$. Далее получаем для $\varphi_{\pm}(z, N - 3)$ полином, содержащий $z^{\pm(N-3)}$, $z^{\pm(N-2)}$, $z^{\pm(N-1)}$, $z^{\pm N}$. На каждом следующем шаге число членов с разными степенями $z^{\pm 1}$ в полиномах $\varphi_{\pm}(z, N - n)$ увеличивается на два за счет появления членов с $z^{\pm(N-n)}$ и $z^{\pm(2N-n-3)}$.

Таким образом, аналогично (27) можно построить φ_{\pm} в виде линейной комбинации известных $\dot{\varphi}_{\pm}(z, m) = z^{\pm m}$:

$$\varphi_{\pm}(z, n) = \dot{\varphi}_{\pm}(z, n) + \sum_{m=n+1}^{2N-n-3} \Delta K(n, m) \dot{\varphi}_{\pm}(z, m), \quad (53)$$

где $K(n, m)$ обеспечивают равенство коэффициентов при $z^{\pm m}$ с обеих сторон.

Из вспомогательных функций φ_{\pm} построим волновую функцию Ψ :

$$\Psi(E, n) = \Psi(z, n) = A [\varphi_{-}(z, n) - S(E) \varphi_{+}(z, n)]. \quad (54)$$

Согласно (53) можно и Ψ представить в виде линейной комбинации свободных решений $\dot{\Psi} = A (\dot{\varphi}_{-} - S \dot{\varphi}_{+})$:

$$\Psi(z, n) = \dot{\Psi}(z, n) + \sum_{m=n+1}^{2N-n-3} \Delta K(n, m) \dot{\Psi}(z, m), \quad (55)$$

где

$$\dot{\Psi}(z, n) = \dot{\varphi}_{-}(z, n) - S(E) \dot{\varphi}_{+}(z, n) = A (z^{-n} - S z^{+n}).$$

Коэффициенты K находим с помощью условия полноты (ортогональности по E) для волновых функций, нормированных согласно (54):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2/\Delta^2} \Psi(E, n) \Psi^{*}(E, m) dE = \\ & = \frac{1}{2\pi i} \oint \Psi(z, n) \Psi^{*}(z, m) \frac{dz}{\Delta A^2 z} = \frac{\delta_{mn}}{\Delta}, \end{aligned} \quad (56)$$

где контур интегрирования — окружность единичного радиуса. Согласно (55), из (56) следует ортогональность (по E) $\Psi(E, n)$ ко всем $\dot{\Psi}(E, m)$ с $m > n$ [ср. с (30)]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2/\Delta^2} \Psi(E, n) \dot{\Psi}^{*}(E, m) dE = \frac{1}{2\pi i} \oint \Psi(z, n) \times \\ & \times \dot{\Psi}^{*}(z, m) \frac{dz}{\Delta A^2 z} = 0 \quad \text{при } m > n. \end{aligned} \quad (57)$$

Подставляя Ψ в виде (55) в (57), получаем систему линейных уравнений для K :

$$K(n, m) + \bar{F}(n, m) + \sum_{p=n+1}^{2N-n-3} \Delta K(n, p) \bar{F}(p, m) = 0, \quad (58)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{F}(n, m) &= F(n+m) - \frac{\delta_{mn}}{\Delta} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{r/\Delta^2} \dot{\psi}(z, n) \dot{\psi}^+(z, m) \times \\ &\times \frac{dz}{\Delta A^2 z} - \frac{\delta_{mn}}{\Delta} = \frac{1}{2\pi i} \oint (1 - S(z)) z^{n+m} \frac{dz}{\Delta A^2 z} - \frac{\delta_{mn}}{\Delta}. \end{aligned} \quad (59)$$

Уравнение (58) является алгебраическим аналогом интегрального уравнения метода Марченко.

Искомый потенциал связан с K обычным [ср. (35)] соотношением (вывод дан в приложении 3):

$$V(n) = -[K(n, n+1) - K(n-1, n)]/2\Delta. \quad (60)$$

3. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ ПРИ $\Delta = 0$)

После ознакомления с КР формализмом ОЗ переход к случаю непрерывной координатной зависимости едва ли воспринимается как нетривиальная операция. В качестве примера приведем вариант ОЗ в рамках R -матричной теории рассеяния. Методы Гельфанда — Левитана и Марченко (при $\Delta = 0$) неоднократно и подробно излагались в литературе [1—3, 8—12] и повторять их в данном обзоре нецелесообразно.

Для упрощенной ориентации среди различных методов ОЗ подчеркнем еще раз универсальность приема ортогонализации (свойства полноты) решений уравнения Шредингера при их построении из известных функций. Интересно, что даже метод ОЗ при фиксированной энергии может рассматриваться как один из таких методов, хотя обычно излагается без видимой связи с ними.

Восстановление потенциала по $E_\lambda, \lambda_\lambda$. Приведем здесь основные формулы метода, ссылаясь на соответствующие КР соотношения. Собственные функции $u(E_\lambda r) \equiv u_\lambda(r)$, отвечающие граничным условиям при $r = 0$ и $r = a$ [ср. (12)]:

$$u_\lambda(0) = 0; \quad u'_\lambda(a)/u_\lambda(a) = B/a, \quad (61)$$

образуют бесконечный дискретный ортонормированный полный набор [ср. (13) и (14)]:

$$\int_0^a u_\lambda(r) u_{\lambda'}(r) dr = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad (\lambda, \lambda' = 1, 2 \dots \infty); \quad (62)$$

$$\sum_{\lambda=1}^{\infty} u_\lambda(r) u_\lambda(r') = \delta(r - r') \quad (63)$$

Для вспомогательных решений φ и $\overset{\circ}{\varphi}$ уравнения Шредингера (1) выбираются граничные условия [ср. (21)]:

$$\left. \begin{aligned} \varphi(E, a) = \overset{\circ}{\varphi}(E, a) = \sqrt{2a}; \\ \varphi'(E, a)/\varphi(E, a) = \overset{\circ}{\varphi}'(E, a)/\overset{\circ}{\varphi}(E, a) = B/a. \end{aligned} \right\} \quad (64)$$

Как и в КР случае, $u_\lambda(r) = \varphi(E_\lambda, r) \gamma_\lambda$ и, согласно (63), [ср. (23) и (25)]:

$$\sum_{\lambda=1}^{\infty} \varphi(E_\lambda, r) \varphi(E_\lambda, r') \gamma_\lambda^2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(E, r) \varphi(E, r') d\rho(E) = \delta(r - r'). \quad (65)$$

Решения φ и $\overset{\circ}{\varphi}$ связаны аналогично (28):

$$\varphi(E, r) = \overset{\circ}{\varphi}(E, r) + \int_r^a K(r, r') \overset{\circ}{\varphi}(E, r') dr'. \quad (66)$$

Для ядра $K(r, r')$ получаем уравнения Гельфанда—Левитана—Марченко, ортогонализируя φ по мере $\rho(E) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \Theta(E - E_\lambda) \gamma_\lambda^2$, или из эквивалентного требования [ср. (30)]:

$$\int \varphi(E, r) \overset{\circ}{\varphi}(E, r') d\rho(E) = 0 \quad \text{при } r' > r. \quad (67)$$

Подставляя (66) в (67), имеем [ср. (34)]:

$$K(r, r') + Q(r, r') + \int_r^a K(r, r'') Q(r'', r') dr'' = 0, \quad (68)$$

где [ср. (32)]:

$$Q(r, r') = \int \overset{\circ}{\varphi}(E, r) \overset{\circ}{\varphi}(E, r') d[\rho(E) - \overset{\circ}{\rho}(E)]. \quad (69)$$

Искомый потенциал определяется производной от ядра $K(r, r')$ при равных аргументах [ср. (35)]:

$$V(r) = -\frac{d}{dr} K(r, r'). \quad (70)$$

Комплексный (оптический) потенциал. Если в искомом потенциале имеется мнимая составляющая $\text{Im } V(r) \neq 0$, то нарушается самосопряженность оператора, отвечающего уравнению Шредингера с граничными условиями (61). Для собственных функций $u_\lambda(r)$ перестают соблюдаться условия ортонормировки и полноты. Однако вместо ортогональности по координатной и энергетической

переменным следует воспользоваться *биортогональностью* * наборов $\{u_\lambda(r)\}$ и $\{u_\lambda^*(r)\}$. Благодаря тому что $[u_\lambda^*(r)]^* = u_\lambda(r)$, вид формул (62) — (70) не изменяется, когда $V(r)$ перестает быть действительным, только нужно учитывать, что входящие в них величины $[\varphi(E, r), \dot{\varphi}(E, r), u_\lambda(r), E_\lambda, \gamma_\lambda, K(r, r'), Q(r, r')]$ становятся комплексными.

Обратная задача при $E = \text{const}$. Обычно формализм ОЗ при $E = \text{const}$ [10] излагается иначе, чем при $l = \text{const}$. Возможен, однако, и единый подход. Как было показано в работе [18], полный набор образуют решения уравнения Шредингера с непрерывно изменяющимся значением орбитального момента l при фиксированной энергии E (см. также [34]). Соответствующее равенство Парсевалья имеет вид [ср. (65)]:

$$\int \frac{f(\lambda, -k, r)}{r} \frac{f(\lambda, -k, r')}{r} d\rho_k(\lambda) = \delta(r - r'), \quad (71)$$

где $\lambda \equiv l - 1/2$; f — решение Иоста уравнения:

$$-f''(\lambda, \pm k, r) + (\lambda^2 - 1/4) f(\lambda, \pm k, r)/r^2 + V(r) f(\lambda, \pm k, r) = k^2 f(\lambda, \pm k, r), \quad (72)$$

удовлетворяющие асимптотическому условию $\lim_{r \rightarrow \infty} f \exp(\pm ikr) = 1$, а $\rho_k(\lambda)$ — спектральная функция.

Можно записать связь f с соответствующими решениями \dot{f} уравнения (72) с $V=0$ [ср. с (66)]:

$$\frac{f(\lambda, -k, r)}{r} = \frac{\dot{f}(\lambda, -k, r)}{r} + \int_r^\infty \frac{K_k(r, r')}{r} \frac{\dot{f}(\lambda, -k, r')}{r'} dr'. \quad (73)$$

Интегральное уравнение для K_k имеет вид [ср. с (68)]:

$$\frac{K_k(r, r')}{r} + \frac{Q(k, r, r')}{r'} + \int_r^\infty \frac{K_k(r, r'')}{r} \frac{Q(k, r'', r')}{r'} dr'' = 0, \quad (74)$$

где [ср. с (69)]

$$\frac{Q(k, r, r')}{r'} = \int \frac{\dot{f}(\lambda, -k, r)}{r} \frac{\dot{f}(\lambda, -k, r')}{r'} d[\rho_k(\lambda) - \dot{\rho}_k(\lambda)], \quad (75)$$

а для искомого потенциала

$$V(r) = -\frac{d}{dr} K(r, r'). \quad (76)$$

* В случае релятивистских уравнений пользуются еще *квазиортогональностью* [17].

Таким образом, потенциал восстанавливается по спектральной функции $\rho_k(\lambda)$, которая определяется матрицей рассеяния S , зависящей от непрерывной переменной l .

Поскольку из эксперимента известны S_l лишь при целых значениях l , то имеется семейство потенциалов, отвечающих различным способам продолжения S_l на всю ось l (при фиксированной энергии E).

4. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МНОГОКАНАЛЬНОМ СЛУЧАЕ

Уравнения движения для связанных каналов имеют вид ($\hbar = 1$, $m = 1$):

$$-(1/2)F''_{\alpha}(E, r) + \sum_{\alpha'} V_{\alpha\alpha'}(r) F_{\alpha'}(E, r) = E F_{\alpha}(E, r); \quad (77)$$

здесь $F_{\alpha}(E, r)$ — каналовые функции, образующие векторное решение $F(E, r) \equiv \{F_1(E, r), F_2(E, r) \dots\}$; $V_{\alpha\alpha'}(r)$ — матрица взаимодействия, осуществляющая связь каналов. В общем случае в правой части (77) стоит $E_{\alpha}F_{\alpha}$. Соответствующая ОЗ рассматривается ниже. Конечно-разностным аналогом (77) является система алгебраических уравнений

$$-\frac{1}{2\Delta^2} \{F_{\alpha}(E, n+1) - 2F_{\alpha}(E, n) + F_{\alpha}(E, n-1)\} + \sum_{\alpha'} V_{\alpha\alpha'}(n) F_{\alpha'}(E, n) = E_{\alpha} F_{\alpha}(E, n). \quad (78)$$

Будем полагать радиус действия $V_{\alpha\alpha'}$ ограниченным [$V_{\alpha\alpha'}(n \geq N) = 0$], а число каналов конечным ($\alpha = 1, 2, \dots, M$). В качестве базисных функций выберем векторные собственные функции $u_{\alpha\lambda}(n)$, удовлетворяющие однородным граничным условиям типа (12):

$$u_{\alpha}(E, 0) = 0; \quad u_{\alpha}(E, N+1) = u_{\alpha}(E, N) (1 + B_{\alpha}\Delta/a). \quad (79)$$

Вместе с (78) они дают систему $N \times M$ однородных алгебраических уравнений для $u_{\alpha}(E, n)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, M$; $n = 1, 2, \dots, N$). Эта система имеет решения при $N \times M$ значениях энергии $E = E_{\lambda}$ ($\lambda = 1, 2, \dots, N \times M$), образующие ортонормированный полный набор векторных функций $u(E_{\lambda}, n) \equiv u_{\lambda}(n) = \{u_{1\lambda}(n), u_{2\lambda}(n), \dots\}$:

$$\sum_{\alpha=1}^M \sum_{n=1}^N \Delta u_{\alpha\lambda}(n) u_{\alpha\lambda'}(n) = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad (80)$$

$$\sum_{\lambda=1}^{N \times M} u_{\alpha\lambda}(n) u_{\beta\lambda}(m) = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} / \Delta. \quad (81)$$

Вывод этих соотношений приведен в приложении 2.

Для сравнения соотношений (14) и (15) в одноканальном случае с (80) и (81) рассмотрим пример двух каналов ($M = 2$) в пределе исчезающей связи между ними $V_{12}(n) \equiv V_{21}(n) \equiv 0$. При этом (78) распадается на две независимые системы уравнений для $F_1(E, n)$ и $F_2(E, n)$. Вместе с граничными условиями (79) имеем две отдельные системы по N однородных алгебраических уравнений для $u_1(E, n)$ и $u_2(E, n)$ типа (13) — каждая для своего канала. Одна из них имеет решения при $E = E_{1\lambda_1}$ ($\lambda_1 = 1, 2, \dots, N$), а другая — при $E = E_{2\lambda_2}$ ($\lambda_2 = 1, 2, \dots, N$). Решения каждой из них образуют полный ортонормированный набор в пространстве КР функции в интервале $0 < n \leq N$ аналогично (14) и (15) [ср. с (80) и (81)]:

$$\left. \begin{aligned} \sum_n^N \Delta u_{\alpha\lambda\alpha}(n) u_{\alpha\lambda\alpha}'(n) &= \delta_{\lambda\alpha\lambda\alpha}' \\ \sum_{\lambda\alpha}^N u_{\alpha\lambda\alpha}(n) u_{\alpha\lambda\alpha}(m) &= \delta_{mn}/\Delta \end{aligned} \right\} \text{при } \alpha = 1, 2. \tag{82}$$

В то же время $u_{1\lambda_1}(n)$ и $u_{2\lambda_2}(n)$ вместе составляют в пространстве векторных функций полный ортонормированный набор:

$$\begin{pmatrix} u_{1\lambda}(n) \\ u_{2\lambda}(n) = 0 \end{pmatrix} (\lambda = \lambda_1 = 1, 2 \dots N)$$

и

$$\begin{pmatrix} u_{1\lambda}(n) = 0 \\ u_{2\lambda}(n) \end{pmatrix} (\lambda = \lambda_2 + N = N + 1, N + 2 \dots 2N)$$

и удовлетворяют соотношениям (80) и (81).

Значения собственных функций на границе $u_{\alpha\lambda}(N) \equiv \gamma_{\alpha\lambda} \sqrt{2a}$ — парциальные приведенные ширины, и E_λ — положения резонансов R -матрицы образуют набор параметров рассеяния, определяющих R -матрицу (см. вывод в приложении 1):

$$R_{\alpha\alpha'}(E) = \sum_{\lambda} [\gamma_{\alpha\lambda} \gamma_{\alpha'\lambda} / (E_\lambda - E)]. \tag{83}$$

В многоканальном случае ОЗ можно сформулировать следующим образом: найти $V_{\alpha\alpha'}(n)$ по набору

$$\{\gamma_{\alpha\lambda}, E_\lambda\} (\alpha = 1, 2 \dots M, \lambda = 1, 2 \dots N \times M). \tag{84}$$

Рекуррентные соотношения. Из системы многоканальных уравнений (78) и условий полноты (81) получается матричное обобщение рекуррентных соотношений (17) и (18):

$$\begin{aligned} u_{\alpha\lambda}(n) &= 2\Delta^2 \sum_{\alpha'=1}^M V_{\alpha\alpha'}(n+1) u_{\alpha\lambda}(n+1) + \\ &+ 2(1 - \Delta^2 E_\lambda) u_{\alpha\lambda}(n+1) - u_{\alpha\lambda}(n+2); \end{aligned} \tag{85}$$

$$V_{\alpha\alpha'}(n) = \Delta \sum_{\lambda=1}^{N \times M} E_\lambda u_{\alpha\lambda}(n) u_{\alpha'\lambda}(n) - \delta_{\alpha\alpha'} / \Delta^2. \tag{86}$$

Число операций, которые требуется выполнить для решения многоканальной ОЗ с помощью (85), (86) меняется с M и N как $M^3 \times N^2$.

В прямой задаче для того, чтобы удовлетворить граничным условиям на двух концах интервала интегрирования, необходимо решать систему многоканальных уравнений M раз (с линейно-независимыми граничными условиями в одной точке) и из полученных вспомогательных решений строить искомое [19]. В ОЗ решение получается за один «прогон».

Определение исходного потенциала по $V_{\alpha\alpha'}$. Если $V_{\alpha\alpha'}(r)$ являются матричными элементами потенциальной энергии $V(r, \xi)$ по функциям некоторого известного базисного набора $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$:

$$V_{\alpha\alpha'}(r) = \int \Phi_\alpha^*(\xi) V(r, \xi) \Phi_{\alpha'}(\xi) d\xi, \quad (87)$$

то представляет интерес определение $V(r, \xi)$ по $V_{\alpha\alpha'}(r)$, восстановленным в ОЗ. Предполагая ортонормированность и полноту набора $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$, такую связь легко установить. Действительно, $V_{\alpha\alpha'}(r)$ являются коэффициентами разложения произведения $V(r, \xi) \Phi_{\alpha'}(\xi)$ в ряд по $\Phi_\alpha(\xi)$:

$$V(r, \xi) \Phi_{\alpha'}(\xi) = \sum_{\alpha} V_{\alpha\alpha'}(r) \Phi_\alpha(\xi). \quad (88)$$

В свою очередь, значения $V \Phi_\alpha$ определяют коэффициенты разложения $V(r, \xi)$ по Φ_α :

$$V(r, \xi) = \sum_{\alpha'} \left\{ \int V(r, \xi) \Phi_{\alpha'}^*(\xi') d\xi' \right\} \Phi_{\alpha'}(\xi). \quad (89)$$

Подставляя (88) в (89), получаем

$$V(r, \xi) = \sum_{\alpha'} C_{\alpha'}(r) \Phi_{\alpha'}(\xi), \quad (90)$$

где

$$C_{\alpha'}(r) = \sum_{\alpha''} V_{\alpha'\alpha''}(r) \int \Phi_{\alpha''}^*(\xi') d\xi'. \quad (91)$$

Приведенные рассуждения и (87) — (91) верны в случае непрерывных и дискретных значений координатной переменной r .

Решение ОЗ методом ортогонализации. Роль вспомогательных функций — полиномов φ (и $\dot{\varphi}$) — в многоканальном случае играют матрицы решений $\Phi(E, n) = \|\varphi_{\alpha\beta}(E, n)\|$. Каждый вектор-столбец из Φ — решение системы (78) с неоднородными граничными условиями при $r = a$ [ср. с (21)]:

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha\beta}(E, N) &= \delta_{\alpha\beta} \sqrt{2a}; \\ \varphi_{\alpha\beta}(E, N+1) &= \varphi_{\alpha\beta}(E, N) (1 + B_\alpha \Delta \delta_{\alpha\beta}/a). \end{aligned} \quad (92)$$

Подобно (22) собственные вектор-функции $\{u_{\alpha\lambda}(n)\}$ можно получить умножением матрицы Φ на вектор парциальных ширин

$\{u_{\alpha\lambda}(N)\} \equiv \{\gamma_{\alpha\lambda} \sqrt{2a}\}$ (теперь важен порядок умножения):

$$u_{\beta\lambda}(n) = \sum_{\alpha} \varphi_{\beta\alpha}(E_{\lambda}, n) \gamma_{\alpha\lambda}. \tag{93}$$

Подставляя (93) в условие полноты для собственных функций (81), получаем соотношения ортонормировки $\varphi_{\alpha\beta}$ как функций от энергии с весом спектральной функции, являющейся матрицей $\rho_{\alpha\beta} = \sum_{\lambda} \Theta(E - E_{\lambda}) \gamma_{\alpha\lambda} \gamma_{\beta\lambda}$:

$$\sum_{\lambda\delta\eta} \varphi_{\alpha\delta}(E_{\lambda}, n) \gamma_{\delta\lambda} \gamma_{\eta\lambda} \varphi_{\eta\beta}(E_{\lambda}, m) = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} / \Delta. \tag{94}$$

В полиномиальной зависимости $\varphi_{\alpha\beta}$ от энергии можно убедиться так же, как в одноканальной задаче, только теперь матрица коэффициентов системы (78) является не просто тридиагональной, как в (26), а *блочнотридиагональной*. Каждому матричному элементу в (26) теперь соответствует матрица по индексам каналов: $\|V_{\alpha\beta}(n)\|$ вместо $V(n)$; $\hat{I}(1/\Delta^2)$ вместо $1/\Delta^2$ и т. д. Поэтому $\Phi(E, n) = \|\varphi_{\alpha\beta}\|$ и $\hat{\Phi}(E, n) = \|\dot{\varphi}_{\alpha\beta}\|$ являются полиномами по E , но с матричными коэффициентами. Благодаря этому можно искать Φ в виде линейных комбинаций $\hat{\Phi}$, аналогично (27) и (28):

$$\varphi_{\alpha\beta}(E, n) = \dot{\varphi}_{\alpha\beta}(E, n) + \sum_{n' > n}^N \Delta \sum_{\delta} K_{\alpha\delta}(n, n') \dot{\varphi}_{\delta\beta}(E, n'). \tag{95}$$

Для коэффициентов K получаем систему уравнений [см. (31), (34)]:

$$K_{\alpha\beta}(n, n') + \bar{Q}_{\alpha\beta}(n, n') + \sum_{p=n+1}^N \Delta \sum_{\delta} K_{\alpha\delta}(n, p) \bar{Q}_{\delta\beta}(p, n') = 0, \tag{96}$$

где

$$\bar{Q}_{\alpha\beta}(n, n') = \sum_{\lambda} \dot{\varphi}_{\alpha\alpha}(E_{\lambda}, n) \gamma_{\alpha\lambda} \gamma_{\beta\lambda} \dot{\varphi}_{\beta\beta}(E_{\lambda}, n') - \delta_{nn'} \delta_{\alpha\beta} / \Delta. \tag{97}$$

Подобно одноканальному случаю выводится связь искомой матрицы взаимодействия с K :

$$V_{\alpha\beta}(n) = -\frac{1}{2\Delta} \{K_{\alpha\beta}(n, n+1), -K_{\alpha\beta}(n-1, n)\}. \tag{98}$$

5. МНОГОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ

Системы с взаимодействием V , зависящим от нескольких переменных, являются хотя и трудным, но чрезвычайно интересным объектом исследований. При отсутствии симметрии в V переменные в уравнении Шредингера не разделяются, а уравнение с частными производными имеет бесконечное число линейно-независи-

мых решений при каждой энергии вместо двух для одномерного уравнения движения.

Наиболее обещающим представляется использование многомерной ОЗ для решения проблемы о минимуме экспериментальной информации, необходимой для восстановления V , и о выявлении связей между данными рассеяния.

В случае качественно более сложной многомерной теории особенно целесообразно предварительное рассмотрение дискретных вариантов ОЗ.

Конечно-разностное уравнение Шредингера. Для того чтобы почувствовать специфику многомерных задач, вполне достаточно ограничиться двумя измерениями. Алгебраическим аналогом уравнения Шредингера в частных производных ($\hbar = \mu = 1$)

$$\begin{aligned}
 & -[\Psi_{xx}(E, x, y) + \Psi_{yy}(E, x, y)]/2 + \\
 & + V(x, y) \Psi(E, x, y) = E\Psi(E, x, y)
 \end{aligned} \quad (99)$$

является уравнение в конечных разностях [ср. (2) и (78)]:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2\Delta^2} [\Psi(E, n, m+1) + \Psi(E, n+1, m) - 4\Psi(E, n, m) + \\
 & + \Psi(E, n, m-1) + \Psi(E, n-1, m)] + \\
 & + V(n, m) \Psi(E, n, m) = E\Psi(E, n, m).
 \end{aligned} \quad (100)$$

Пусть искомым потенциал $V(n, m)$ отличен от нуля в ограниченной области G ($1 < n < N$; $1 < m < M$):

$$V(n, m) = 0 \quad (101)$$

при $n \leq 1$; $n \geq N$; $m \leq 1$; $m \geq M$.

Определим собственные функции $u_\lambda(n, m)$, удовлетворяющие однородным условиям на границе S области G . В качестве таких условий выберем требование независимости от энергии логарифмической производной в направлении внешней нормали к поверхности в каждой точке s на S [ср. (12) и (79)]:

$$\left. \begin{aligned}
 & u(E, n, M+1) = u(E, n, M)(1 + \Delta B_{nM}) \\
 & u(E, n, 0) = u(E, n, 1)(1 + \Delta B_{n1}) \\
 & u(E, N+1, m) = u(E, N, m)(1 + \Delta B_{Nm}) \\
 & u(E, 0, m) = u(E, 1, m)(1 + \Delta B_{1m})
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{при } n = 1, 2, \dots, N; \\ \text{при } m = 1, 2, \dots, M. \end{array} \quad (102)$$

Условия (102) позволяют выделить из бесконечной системы однородных алгебраических уравнений (100) систему $N \times M$ уравнений для $N \times M$ неизвестных $u(E, n, m)$ с n и m из области G . Существует $N \times M$ решений $u_\lambda(n, m) \equiv u(E_\lambda, n, m)$ при $E = E_\lambda$, $\lambda = 1, 2, \dots, N \times M$, образующих ортонормированный

и полный набор (вывод аналогичен данному в приложении 2):

$$\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M u_{\lambda}(n, m) u_{\lambda'}(n, m) \Delta^2 = \delta_{\lambda\lambda'}; \quad (103)$$

$$\sum_{\lambda=1}^{N \times M} u_{\lambda}(n, m) u_{\lambda}(n', m') = \delta_{nn'} \delta_{mm'} / \Delta^2. \quad (104)$$

Рекуррентные соотношения. Покажем, как по E_{λ} и значениям собственных функций на границе $u_{\lambda}(s)$ можно восстановить $V(n, m)$. Зная $u_{\lambda}(s)$, находим из граничных условий (102) функции u_{λ} в точках s^+ , соседних с границей S с внешней стороны.

При любых фиксированных $(n, m) = g_0$ алгебраическое уравнение (100) связывает значение $u_{\lambda}(g_0)$ с u_{λ} в четырех ближайших точках g_1, g_2, g_3, g_4 . Таким образом, из (100) можно определить u_{λ} в точках соседних с S с внутренней стороны (где $V \neq 0$) по известным значениям u_{λ} на S и S^+ , пользуясь формулой аналогичной (85) [по известным значениям u_{λ} в четырех точках g_1, g_2, g_3, g_0 на S и S^+ находим $u_{\lambda}(g_4)$]:

$$u_{\lambda}(g_4) = 2\Delta^2 [V(g_0) - E_{\lambda} + 2/\Delta^2] u_{\lambda}(g_0) - u_{\lambda}(g_1) - u_{\lambda}(g_2) - u_{\lambda}(g_3), \quad (105)$$

учитывая, что $V(s) = 0$.

Потенциал рядом с границей находим из уравнения Шредингера с помощью условия полноты (104). Умножая уравнение (100) для $u_{\lambda}(g_4)$ на $u_{\lambda}(g_4)$ и суммируя по λ , получаем с учетом (104) [ср. (17) и (86)]:

$$V(g_4) = \Delta^2 \sum_{\lambda=1}^{N \times M} E_{\lambda} u_{\lambda}^2(g_4) - 2/\Delta^2, \quad (106)$$

где $u_{\lambda}(g_4)$ определяются из (105).

Пользуясь рекуррентными соотношениями (105) и (106), последовательно восстанавливаем $V(g)$ и $u_{\lambda}(g)$ во всей области G по заданным E_{λ} и $u_{\lambda}(s)$.

Связи между E_{λ} , $u_{\lambda}(s)$. Рассмотренный пример позволяет легко убедиться в том, что для решения ОЗ достаточно задать значения $u_{\lambda}(s)$ лишь на части границы S . Так, в случае прямоугольной области G необходимо знать u_{λ} на одной из четырех сторон. Действительно, по этим $u_{\lambda}(s)$ и (102) определяются $u_{\lambda}(s^+)$ на линии, параллельной выбранной стороне. Согласно (105) по u_{λ} на двух параллельных отрезках S^+ и S находим u_{λ} на соседнем интервале следующей линии, внутри G . Только для определения u_{λ} в двух крайних точках отрезка (на S) требуется воспользоваться еще и (102). С помощью второго рекуррентного соотношения (106) вычисляем затем соответствующие значения V . Продолжая описанную процедуру, восстанавливаем u_{λ} и V во всей области G , включая границу S .

Замечательно, что по E_λ и $u_\lambda(s)$, заданным на одной из сторон S , определяются $u_\lambda(s)$ на всей остальной части границы*.

Двумерная ОЗ в КР R -матричной теории (метод ортогонализации полиномов). Уравнение в частных разностях (100) имеет некоторые общие черты с системой одномерных многоканальных уравнений (78); если рассматривать одну из переменных, например m , как индекс канала, а другую — n , — как единственную координату. Правда, в отличие от (78) зацепление каналов в (100) осуществляется не с помощью взаимодействия, а за счет оператора кинетической энергии.

Введем вспомогательные решения φ уравнения (100) и соответствующие решения $\dot{\varphi}$ свободного ($V(n, m) \equiv 0$) уравнения Шредингера, задавая граничные условия [ср. (92)]:

$$\left. \begin{aligned} \varphi_s(E, 1, m) &= \dot{\varphi}_s(E, 1, m) = \delta_{ms}; \\ [\varphi_s(E, 0, m) - \varphi_s(E, 1, m)] &= \Delta\varphi_s(E, 1, m) B_s; \\ [\dot{\varphi}_s(E, 0, m) - \dot{\varphi}_s(E, 1, m)] &= \dot{\varphi}_s(E, 1, m) \Delta B_s, \end{aligned} \right\} \quad (107)$$

где s — точка на $(1, m)$.

Будем полагать, что линии $n = 0, 1$, где задаются φ и $\dot{\varphi}$, проходят рядом (слева) с областью G , где отличен от нуля потенциал $V(n, m)$.

Полиномиальная зависимость φ и $\dot{\varphi}$ от E . Согласно условиям (107), функции φ_s и $\dot{\varphi}_s$ равны нулю на линиях $n = 0, 1$, кроме точек с $m = s$ на линиях $n = 1, 0$. По этим значениям можно, решая соответствующие уравнения в частных разностях, найти φ_s и $\dot{\varphi}_s$ во всех других узлах координатной сетки, причем отличными от нуля оказываются φ_s и $\dot{\varphi}_s$ (рис. 1) в точках внутри конуса с вершиной в $(0, s)$. В каждом фиксированном узле (m, n) функции $\varphi_s(E, n, m)$ и $\dot{\varphi}_s(E, n, m)$ являются полиномами по E степени $n - |s - m|$. Рассуждая так же, как Ю. А. Березанский [20], строим полиномы $\varphi_s(E, n, m)$ в виде линейной комбинации извест-

* Кроме того, можно написать нелинейные связи типа (19):

$$\begin{aligned} -1/2\Delta^4 &= \sum_{\lambda} E_{\lambda} u_{\lambda}(n, m) u_{\lambda}(n, m \pm 1); \\ -1/2\Delta^4 &= \sum_{\lambda} E_{\lambda} u_{\lambda}(n, m) u_{\lambda}(n \pm 1, m); \\ 0 &= \sum_{\lambda} E_{\lambda} u_{\lambda}(n, m) u_{\lambda}(n', m'), \end{aligned}$$

где

$$(n', m') \neq (n, m), \quad (n \pm 1, m), \quad (n, m \pm 1).$$

ных полиномов $\dot{\varphi}_s(E, n', m')$:

$$\varphi_s(E, n, m) = \sum_{n'=1}^n \sum_{m'=m-n+n'}^{m+n-n'} \Delta^2 K(n, m; n', m') \dot{\varphi}_s(E, n', m'). \quad (108)$$

При $s = t$ коэффициенты при высших степенях E в $\varphi_m(E, n, m)$ не зависят от V и, следовательно, совпадают в $\varphi_m(E, n, m)$ и $\dot{\varphi}_m(E, n, m)$, поэтому $K(n, m; n, m) = 1/\Delta^2$.

Для определения остальных коэффициентов K в (108) выберем такой полный набор функций $u_\lambda(n, m)$, чтобы u_λ и φ были

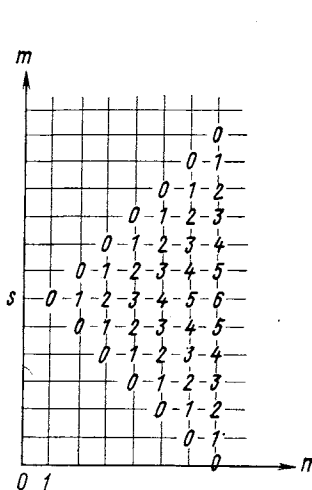


Рис. 1. Область, где отличны от нуля $\varphi_s(E, n, m)$ — полиномы по E ; цифры в узлах сетки обозначают степени этих полиномов [20]

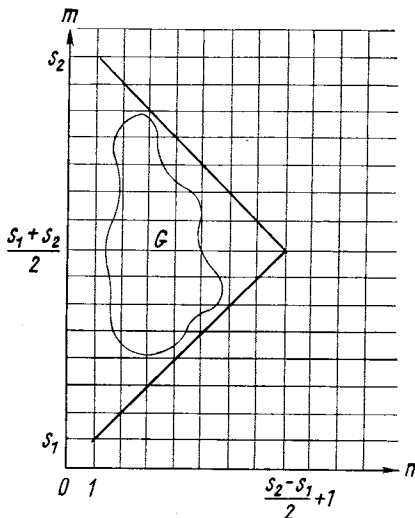


Рис. 2. В точках, где $V \neq 0$, отличны от нуля лишь φ_s с s в интервале $[s_1, s_2]$

связаны соотношением типа (93). Зададим однородные граничные условия для $u_\lambda(n, m)$ в узлах сетки, лежащих на сторонах равнобедренного треугольника с вершинами $(1, s_1)$; $(1, s_2)$; $(\frac{s_2-s_1}{2} + 1, \frac{s_2+s_1}{2})$. Величины s_1, s_2 должны быть такими, чтобы область G (рис. 2), где отличен от нуля искомый потенциал, целиком помещалась в указанном треугольнике. Пусть совпадают КР логарифмические производные функций u_λ и φ_s в точках $(1, s)$, $s_1 \leq s \leq s_2$:

$$\{u_\lambda(0, m) - u_\lambda(1, m)\} / u_\lambda(1, m) = \Delta B_s; \quad (109)$$

тогда аналогично (93) получим

$$u_\lambda(n, m) = \sum_{s=s_1}^{s_2} \Delta \varphi_s(E_\lambda, n, m) \gamma_{s\lambda}, \quad (110)$$

где

$$\gamma_{s\lambda} = u_\lambda(1, s). \quad (111)$$

Действительно, значения любого решения (100) в точках $(0, s)$ и $(1, s)$ с $s_1 \leq s \leq s_2$ однозначно задают его во всем треугольнике $(1, s_1); (1, s_2); \left(\frac{s_2-s_1}{2} + 1, \frac{s_2+s_1}{2}\right)$, а сумма в правой части (110) совпадает с u_λ в этих точках границы и удовлетворяет (100), так как представляет собой линейную комбинацию решений φ уравнения (100).

Уравнения Гельфанда — Левитана. Поскольку $u_\lambda(n, m)$ удовлетворяют условию полноты типа (104):

$$\sum_\lambda u_\lambda(n, m) u_\lambda(n', m') = \delta_{nn'} \delta_{mm'} / \Delta^2 \quad (112)$$

в точках (n, m) , ограниченных треугольником, для φ получаем условие ортогональности типа (94), подставляя (110) в (112):

$$\sum_\lambda \sum_{s=m-n+1}^{m+n-1} \sum_{s'=m'-n'+1}^{m'+n'-1} \Delta^2 \varphi_s(E_\lambda, n, m) \gamma_{s\lambda} \gamma_{s'\lambda} \varphi_{s'}(E_\lambda, n', m') = \delta_{nn'} \delta_{mm'} / \Delta^2. \quad (113)$$

Из (113) и преобразования обратного (108) следует $(n' < n; m - n + n' \leq m' \leq m + n - n')$

$$\sum_\lambda \sum_{s=m-n+1}^{m+n-1} \sum_{s'=m'-n'+1}^{m'+n'-1} \Delta^2 \varphi_s(E_\lambda, n, m) \gamma_{s\lambda} \gamma_{s'\lambda} \overset{\circ}{\varphi}_{s'}(E_\lambda, n', m') = 0 \quad (114)$$

Подставляя (108) в (114), получаем многомерный аналог КР уравнений Гельфанда — Левитана [ср. с (96)]:

$$K(n, m; n', m') + \bar{Q}(n, m; n', m') + \sum_{n''=1}^{n-1} \sum_{m''=m-n+n''}^{m+n-n''} \Delta^2 K(n, m; n'', m'') \bar{Q}(n'', m''; n', m') = 0, \quad (115)$$

где $n' < n; m - n + n' \leq m' \leq m + n - n'$, а

$$\bar{Q}(n, m; n', m') = \sum_\lambda \sum_{ss'} \Delta^2 \overset{\circ}{\varphi}_s(E_\lambda, n, m) \gamma_{s\lambda} \gamma_{s'\lambda} \overset{\circ}{\varphi}_{s'}(E_\lambda, n', m'). \quad (116)$$

Связь потенциала $V(n, m)$ с K находим, следуя процедуре вывода (32) и (98):

$$V(n, m) = (1/2\Delta) \{K(n, m; n-1, m) - K(n+1, m; n, m)\}. \quad (117)$$

6. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ МНОГИХ ТЕЛ

Ранее были рассмотрены различные типы движения частицы во внешнем поле (задача двух тел). Начиная с трех тел физические системы приобретают ряд качественно новых многочастичных свойств. Это расширяет круг проблем, стоящих перед теорией ОЗ. Так, уже в простейшем примере рассеяния мишенью, обладающей внутренней степенью свободы, мы встречаемся с понятием закрытых каналов, и возникает вопрос о принципиальной возможности получить полную информацию о системе по данным рассеяния, отвечающим одним лишь открытым каналам. Использование методов ОЗ должно способствовать выяснению роли многочастичных сил в квантовых явлениях.

Из данных о сложных системах имеет смысл извлекать сведения даже о взаимодействии двух частиц (например, из нейтрон-дейтонных экспериментов о нейтрон-нейтронных силах), если другим путем по каким-либо причинам они оказываются недоступными.

Гиперсферические координаты. Особенно прост случай трех тел с трехчастичным потенциалом, обладающим гиперсферической симметрией, когда обычные парные силы отсутствуют. Это значит, что потенциальная энергия зависит лишь от модуля ρ_6 гиперсферического шестимерного радиуса-вектора * $\rho_6 \equiv \{\rho_6, \Omega_5\}$:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = V(\rho_6) = V(\rho_6). \quad (118)$$

Переменные в уравнении Шредингера с такой потенциальной энергией $V(\rho_6)$ разделяются в гиперсферической системе координат, т. е. уравнения движения сводятся к одномерным дифференциальным уравнениям для парциальных гиперсферических волн:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho_6^2} + \frac{\mathcal{K}(\mathcal{K}+1)}{2\rho_6^2} - E \right] F_{\mathbf{K}}(\rho_6) + V(\rho_6) F_{\mathbf{K}}(\rho_6) = 0, \quad (119)$$

где $\mathcal{K} = K + 3/2$; $F_{\mathbf{K}}(\rho_6)$ — коэффициенты разложения волновой функции трех частиц $\Psi(\rho_6)$ по гиперсферическим функциям $Y_{\mathbf{K}}(\Omega_5)$:

$$\Psi(\rho_6) = \sum_{\mathbf{K}} F_{\mathbf{K}}(\rho_6) Y_{\mathbf{K}}(\Omega_5), \quad (120)$$

K — набор пяти квантовых чисел.

* Вектор ρ_6 характеризует относительное положение трех частиц в системе центра масс. Его модуль $\rho_6 = \sqrt{R^2 + \rho^2}$, где ρ — относительное расстояние между двумя частицами; а R — расстояние от центра масс этой пары до третьей частицы. Из пяти гиперсферических углов Ω_5 два могут определять форму треугольника, в вершинах которого располагаются частицы, а три других характеризуют ориентацию этого треугольника в пространстве. Подробнее о гиперсферических координатах см., например, в работе [19].

Обратная задача формулируется здесь как для одномерного движения одной частицы во внешнем поле. По фазовому сдвигу $\delta_{\mathbf{k}}(E)$ парциальной гиперсферической волны и параметрам связанных состояний восстанавливается $V(\rho_6)$ (применимы методы, изложенные в разд. 1—3).

Если потенциал конечного радиуса действия $V(\rho_6)$ не обладает гиперсферической симметрией, для $F_{\mathbf{k}}(\rho_6)$ получается система зацепленных уравнений

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho_6^2} + \frac{\mathcal{K}(\mathcal{K}+1)}{2\rho_6^2} - E \right] F_{\mathbf{k}}(\rho_6) + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\rho_6) F_{\mathbf{k}'}(\rho_6) = 0, \quad (121)$$

где

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\rho_6) = \int Y_{\mathbf{k}}^*(\Omega_5) V(\rho_6) Y_{\mathbf{k}'}(\Omega_5) d\Omega_5. \quad (122)$$

Тогда в приближении конечного числа гармоник в (120) по матрице рассеяния $S_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E)$ нужно восстановить матрицу взаимодействия $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\rho_6)$, а по ней определить $V(\rho_6)$ согласно (90).

Проблема закрытых каналов. Рассмотрим другой пример задачи трех тел: рассеяние частицы сложной мишенью, представляющей собой пару частиц, связанных бесконечной потенциальной ямой $V_{12}(\rho)$. Ограничимся для простоты одномерным случаем.

Если известны функции $\Phi_{\alpha}(\rho)$ состояний пары $-\Phi_{\alpha}^2/2 + V_{12}(\rho)\Phi_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha}\Phi_{\alpha}$, то можно разложить волновую функцию системы $\Psi(R, \rho)$ по полному набору $\{\Phi_{\alpha}(\rho)\}$:

$$\Psi(R, \rho) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(R) \overline{\Phi_{\alpha}(\rho)}. \quad (123)$$

Коэффициенты $F_{\alpha}(R)$ — функции каналов α — описывают движение частицы в поле мишени, находящейся в состоянии α . Они удовлетворяют системе связанных одномерных уравнений (см., например, [19]):

$$-F_{\alpha}''(R)/2 + \sum_{\alpha'} V_{\alpha\alpha'}(R) E_{\alpha'} = (E - \varepsilon_{\alpha}) F_{\alpha}, \quad (124)$$

где

$$V_{\alpha\alpha'}(R) = \int \Phi_{\alpha}(\rho) (V_{13} + V_{23} + V_{123}(R, \rho)) \Phi_{\alpha'}(\rho) d\rho. \quad (125)$$

$(E - \varepsilon_{\alpha})$ — энергия частицы в канале α , равная разнице полной энергии системы E и энергии мишени ε_{α} .

В отличие от случая системы многоканальных уравнений (78) в (124) наряду с открытыми каналами ($E - \varepsilon_{\alpha} > 0$) возможны и каналы закрытые ($E - \varepsilon_{\alpha} < 0$).

Рассмотрим матрицу решений $\| F_{\alpha\beta} \|$ системы (124), имеющую вне области взаимодействия вид [пусть $V_{\alpha\alpha'}(R \geq a) = 0$]:

$$F_{\alpha\beta}(E, R > a) = \delta_{\alpha\beta} \exp[-i\sqrt{2(E - \varepsilon_\alpha)}R] - S_{\alpha\beta}(E) \exp[i\sqrt{2(E - \varepsilon_\alpha)}R], \quad (126)$$

где индекс β указывает, в каком канале есть падающая волна (в закрытых каналах роль падающей волны играет $\exp[i\sqrt{2(\varepsilon_\alpha - E)}R]$).

Для восстановления $V_{\alpha\alpha'}(R)$ требуется, например в многоканальном варианте метода Марченко, задать всю (!) матрицу рассеяния. Если матричные элементы $S_{\alpha\beta}(E)$, отвечающие открытым каналам α и β , предполагаются известными из фазового анализа экспериментальных данных, то возникает вопрос об определении остальной части S . Так, для энергий E , при которых закрыт канал β , решения $F_{\alpha\beta}(R)$ вообще не соответствуют никакому физическому процессу.

Покажем, что в модельном случае КР аналога системы уравнений (124) с ограниченным числом M каналов достаточно информации об открытой подматрице $S(E)$ для нахождения всей $S(E)$. Матрицы решений Иоста $\Phi_{\pm}(E, n)$, имеющие при $n \geq N$ вид

$$\Phi_{\alpha\beta\pm}(E, n) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha^{\pm n}, \quad (127)$$

где

$$z_\alpha = 1 - (E - \varepsilon_\alpha) \Delta^2 - \sqrt{(E - \varepsilon_\alpha)^2 \Delta^4 - 2(E - \varepsilon_\alpha) \Delta^2},$$

являются полиномами по степеням диагональной матрицы $\| \delta_{\alpha\beta} z_\alpha^{\pm 1} \|$ с матричными же коэффициентами [ср. с (52)]:

$$\Phi_{\alpha\beta\pm}(E, n) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha^{\pm n} + \sum_{n'=n+1}^N \Delta K_{\alpha\beta}(n, n') z_\beta^{\pm n'}. \quad (128)$$

Следовательно, для КР аналога матричных решений (126), учитывая, что $F_{\alpha\beta}(E, 0) = 0$, имеем

$$F_{\alpha\beta}(E, 0) = \delta_{\alpha\beta} - S_{\alpha\beta} + \sum_{n=1}^{2N-n-3} \Delta K_{\alpha\beta}(0, n) z_\beta^{-n} - \sum_{n=1}^{2N-n-3} \Delta \sum_{\delta} K_{\alpha\delta}(0, n) z_\delta^n S_{\delta\beta}(E) = 0. \quad (129)$$

Из M^2 алгебраических уравнений (129) можно выразить $S_{\alpha\beta}$

$$S_{\alpha\beta}(E) = \left\| \left\| \sum_{n=1}^{2N-n-3} \Delta \| K(0, n) \| \| z^n \| + I \right\|^{-1} \times \right. \\ \left. \times \left\| I + \sum_{n=1}^{2N-n-3} \Delta \| K(0, n) \| \| z^{-n} \| \right\| \right\|_{\alpha\beta}, \quad (130)$$

т. е. аналитический вид энергетической зависимости S известен нам с точностью до конечного числа постоянных коэффициентов. Поскольку $S_{\alpha\beta}(E)$ известны при $E > \varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta$, можно найти эти коэффициенты из (130).

Приведенные рассуждения можно распространить и на предельный случай $\Delta \rightarrow 0$. Тогда вместо (129) получается интегральное уравнение.

7. КРАТКИЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ ОБ ОТДЕЛЬНЫХ РАБОТАХ ПО ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ

Литература обзорного характера. Монография [8] содержит подробное изложение многоканального формализма метода Марченко. В книге [10] в гл. 20 описаны метод одноканальной ОЗ в подходе Гельфанда — Левитана и метод восстановления сферически-симметричного потенциала по фазам рассеяния δ_l ($l = 0, 1, \dots, \infty$) при фиксированной энергии (без использования свойства полноты решений уравнения Шредингера); в гл. 5, § 9 рассматривается метод ОЗ в классической механике. В монографии [11] подробно освещаются вопросы устойчивости методов ОЗ Гельфанда — Левитана и Марченко.

Во втором обзоре Фаддеева [3] (первый см. [9]) основное внимание уделяется многомерной теории ОЗ.

К обзорной литературе следует отнести серию статей [12], где метод ОЗ излагается с помощью волновых операторов.

Использование методов ОЗ для решения нелинейных уравнений дано в обзорах [3, 13].

Метод ОЗ в КР приближении. Восстановление КР операторов по спектральным характеристикам обсуждается в гл. 7 книги [20], хотя в ней непосредственно задача рассеяния не рассматривается. Дается обобщение метода на случай КР уравнений с операторными коэффициентами и на случай двух измерений.

Методы многомерной КР ОЗ рассеяния излагаются в работах [21, 22]; а ее R -матричный вариант впервые публикуется в данном обзоре.

Конечно-разностный аналог теории Гельфанда — Левитана — Марченко был предложен в работах [4, 5] * (только одноканальный случай).

Одно-и многоканальная КР R -матричная ОЗ рассеяния сформулирована в работе [6]. Рекуррентные соотношения, приведенные в разд. 1, 4, 5 для реконструкции V , получены в работе [7]. Можно рекомендовать математическую литературу [23—25, 29], где освещаются различные вопросы, касающиеся КР уравнений: сходимость и устойчивость методов решения при $\Delta \rightarrow 0$ [23]; метод сеток для уравнений в частных разностях [29]; доказательство полноты собственных функций с помощью КР подхода [24]; установление параллелей в решении дифференциальных и КР уравнений [25].

Различные типы потенциалов. Восстановление комплекснозначных потенциалов дано в работах [26, 27]; взаимодействия, зависящие от энергии, — в работе [28] и $V(p^2)$ — в работе [15]. Метод ОЗ для периодических потенциалов рассмотрен в работе [43].

Имеется класс потенциалов (Баргмана), для которых ОЗ решается аналитически [10] (обобщение на многоканальный случай дано в работе [30]).

Специфические проблемы ОЗ, связанные с кулоновским взаимодействием, исследованы в работах [31, 32].

* Формулы этого подхода отличаются от соответствующих уравнений данного обзора. Так, вместо уравнения Шредингера (2) рассматривается уравнение $[\Psi(E, n+1) + \Psi(E, n-1)]/2 = (1 - E\Delta^2) \exp[\Delta^2 V(n)] \Psi(E, n)$, а вместо уравнений (31), (47) и (58) получены более сложные (это относится и к работе [6], где не учитывалось, что $K(n, n) = 1/\Delta$).

В работе [15] показано, что по данным рассеяния (поляризационные эксперименты) можно определить поле вращающейся мишени. Решение ОЗ для релятивистских уравнений (Дирака, Клейна—Гордона) дано в работе [33].

Другие подходы. Восстановлению сферически-симметричных потенциалов по фазам рассеяния при фиксированной энергии посвящены работы [10, 34]. Непрерывный аналог метода Ньютона использован для решения ОЗ в работе [35]. В ряде исследований [36] рассматривалось квазиклассическое приближение для нахождения V .

Все производные $\frac{d^n}{dr^n} V(r)$ при $r = 0$ можно вычислить методом, предложенным в работе [37], что эквивалентно информации о $V(r)$ в области, где сходится ряд Тейлора для $V(r)$. В случае симметричных (одномерных) потенциалов для определения V достаточно задать лишь E_λ [38] (без γ_λ) благодаря использованию теоремы о двух спектрах [39]. Информацию о восстановлении так называемых сепарабельных потенциалов можно найти в работе [42].

Авторы благодарны И. В. Амирханову, А. Г. Высоцкому, В. П. Жигунову, Е. П. Жидкову, Б. М. Левитану, В. А. Марченко, С. А. Ниязгулову, Рейналу, Я. А. Смородинскому, И. Б. Ушакову, Е. Х. Христову за ценные дискуссии.

Приложение 1

1. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ АНАЛОГ R -МАТРИЧНОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Волновая функция $\Psi(E, n)$ при $n \geq N$, т. е. при $r \geq a$, где $V(r) = 0$ или где V известен, имеет вид [см. (48), (54)]:

$$\Psi(E, n \geq N) = A [I(E, n) - S(E) O(E, n)], \tag{П.1}$$

где I и O — известные падающая и рассеянная волны, которые для свободного КР-уравнения Шредингера ($V = 0$) соответствуют $\exp(\pm ikr)$ [см. (49), (49a)]:

$$I(E, n) = z^{-n}; \quad O(E, n) = z^{+n}. \tag{П.2}$$

Если у потенциала имеется известный хвост при $r \geq a$, то I и O являются решениями с асимптотическим поведением (П.2) и предполагаются известными при $r \geq a$.

Введем функцию $\mathcal{R}(E)$, связанную с КР-логарифмической производной от $\Psi(E, n)$ в точке a :

$$[\Psi(E, N+1) - \Psi(E, N)] / \Delta \Psi(E, N) = (a\mathcal{R})^{-1}. \tag{П.3}$$

Разложим $\Psi(E, n)$ по полному набору функций $u_\lambda(n)$ на интервале $0 < n \leq N$ [см. (14)]*:

$$\Psi(E, n) = \sum_{\lambda=1}^N A_\lambda(E) u_\lambda(n), \tag{П.4}$$

* Разложение (П.4) не справедливо в точке $n = N + 1$, поскольку она находится вне интервала $0 < n \leq N$, где $u_\lambda(n)$ образуют полный набор. Следовательно, к (П.4) нельзя применять правое КР дифференцирование (см. своску на с. 304) в точке $n = N$. Это поясняет тот факт, что в обычной R -матричной теории (когда r — непрерывная координата) разложение $\Psi(E, r) = \sum_\lambda A_\lambda(E) u_\lambda(n)$ сходится в $r = a$ неравномерно и его нельзя там дифференцировать.

где $A_\lambda(E)$ имеют, исходя из (14), вид

$$A_\lambda(E) = \sum_{n=1}^N \Psi(E, n) u_\lambda(n) \Delta \quad (\text{П.5})$$

Умножим (2) на $u_\lambda(n)$, а уравнение для $u_\lambda(n)$ на $\Psi(E, n)$, вычтем второе из первого, просуммируем результат по n и, используя (П.5), получим

$$A_\lambda(E)(E - E_\lambda) = \{-\Psi(E, N+1)u_\lambda(N) + \Psi(N)u_\lambda(N+1)\}/2\Delta. \quad (\text{П.6})$$

Прибавим и вычтем $\Psi(E, N)u_\lambda(N)$ в фигурных скобках формулы (П.6) и подставим $A_\lambda(E)$ из (П.5) в (П.3):

$$\Psi(E, n) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^N \frac{u_\lambda(n)}{E - E_\lambda} \left\{ \Psi(E, N) \frac{u_\lambda(N+1) - u_\lambda(N)}{\Delta} - u_\lambda(N) \times \right. \\ \left. \times \frac{\Psi(E, N+1) - \Psi(E, N)}{\Delta} \right\}. \quad (\text{П.7})$$

Учитывая (П.3) и (12), имеем

$$R(E) \equiv \mathcal{R}(E)/[1 - \mathcal{R}(E)B] = \sum_{\lambda=1}^N [\gamma_\lambda^2 / (E_\lambda - E)], \quad (\text{П.8})$$

где E_λ и γ_λ^2 определяют положения резонансов R -матрицы и их приведенные ширины.

Связь $R(E)$ с матрицей рассеяния устанавливается согласно (П.1), (П.3) и (П.8):

$$R(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E} = \\ = \frac{\Delta}{a} \frac{I(N) - S(E)O(N)}{I(N+1) - I(N) - S(E)[O(N+1) - O(N)] - (B\Delta/a)I(N) + (B\Delta/a)S(E)O(N)}. \quad (\text{П.9})$$

Таким образом, нули известного выражения в знаменателе дроби в правой части (П.9) определяют значения $E = E_\lambda$, а соответствующие γ_λ можно найти согласно (П.8):

$$\gamma_\lambda^2 = \lim_{E \rightarrow E_\lambda} \{R(E)(E - E_\lambda)\}, \quad (\text{П.10})$$

используя (П.9) и правило Лопиталья для вычисления предела (типа 0/0).

Если в искомом потенциале имеются связанные состояния с энергией \mathcal{E}_i , то, выбирая константу B равной $a\sqrt{2\mathcal{E}_1}$, можно совместить основной уровень $(-\mathcal{R}_1)$ с E_1 . Остальные параметры $E_\lambda < 0$ определены с помощью соотношений

$$(\sqrt{2\mathcal{E}_1} - \sqrt{2\mathcal{E}_i})^{-1} = a \sum_{\lambda}^N [\gamma_\lambda^2 / (\mathcal{E}_i - E_\lambda)]. \quad (\text{П.11})$$

В случае M связанных каналов вместо (П.3) имеем [44]

$$F_\alpha(E, N) = \sum_{\alpha'=1}^M R_{\alpha\alpha'} \{ [F_{\alpha'}(E, N+1) - \\ - F_{\alpha'}(E, N)] a/\Delta - B_{\alpha'} F_{\alpha'}(E, N) \}. \quad (\text{П.12})$$

Используя условие полноты (81) решений $u_{\alpha\lambda}(n)$, можно аналогично (П.4) — (П.8) получить

$$R_{\alpha\alpha'}(E) = \sum_{\lambda=1}^{N \times M} [\gamma_{\alpha\lambda} \gamma_{\alpha'\lambda} / (E_{\lambda} - E)]. \quad (\text{П.13})$$

Связь $R_{\alpha\alpha'}$ с матрицей рассеяния S находим, подставляя асимптотику матрицы решений (78) в (П.12).

Приложение 2

УСЛОВИЯ ПОЛНОТЫ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Уравнение (2) является частным случаем многоканальной системы (78), поэтому остановимся лишь на выводе соотношения полноты для собственных функций $u_{\alpha\lambda}(n)$.

Умножим уравнение (78) для $u_{\alpha\lambda}(n)$ на $\Delta u_{\alpha\lambda'}$ (n), а уравнение для $u_{\alpha\lambda'}$ (n) на $\Delta u_{\alpha\lambda}$ (n), вычтем одно уравнение из другого и просуммируем по индексу каналов α от 1 до M . Члены, содержащие элементы матрицы взаимодействия $V_{\alpha\alpha'}(n)$, исчезают при этом благодаря ее симметрии $V_{\alpha\alpha'}(n) = V_{\alpha'\alpha}(n)$. Суммируя обе стороны полученного равенства по n от 1 до N , приводя подобные члены и учитывая граничные условия (79), получаем

$$(E_{\lambda} - E_{\lambda'}) \sum_{\alpha=1}^M \sum_{n=1}^N \Delta u_{\alpha\lambda}(n) u_{\alpha\lambda'}(n) = 0. \quad (\text{П.14})$$

Следовательно, при $\lambda \neq \lambda'$ собственные векторы ортогональны и их можно нормировать на единицу. В результате имеем

$$\sum_{\alpha=1}^M \sum_{n=1}^N \Delta u_{\alpha\lambda}(n) u_{\alpha\lambda'}(n) = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (\text{П.15})$$

Условие полноты для $u_{\alpha\lambda}$ получаем, умножая обе части (П.15) на $u_{\alpha'\lambda'}(m)$, суммируя по λ' и меняя порядок интегрирования:

$$\sum_{\alpha=1}^M \sum_{n=1}^N \left\{ \Delta \sum_{\lambda'=1}^N u_{\alpha'\lambda'}(m) u_{\alpha\lambda'}(n) \right\} u_{\alpha\lambda}(n) = u_{\alpha'\lambda}(m). \quad (\text{П.16})$$

Действительно, выражение в фигурных скобках слева в (П.16) действует подобно $\delta_{mn} \delta_{\alpha\alpha'}$, т. е. имеем равенство Парсевалю (81):

$$\sum_{\lambda=1}^N u_{\alpha'\lambda}(m) u_{\alpha\lambda}(n) = \delta_{mn} \delta_{\alpha\alpha'} / \Delta. \quad (\text{П.17})$$

Условиям ортогональности (П.15) и полноты (П.17) можно придать более симметричный вид, если объединить решения u при разных энергиях в матрицы \hat{u} размерности $(N \times N)$ в одноканальном и $(N \cdot M \times N \cdot M)$ в M -канальном случаях:

$$\hat{u}^* \hat{u} = \hat{1}; \quad \hat{u} \hat{u}^* = \hat{1}. \quad (\text{П.18})$$

Здесь $\hat{1}$ — единичные матрицы. Сопряженными индексами матричных элементов служат для одного канала λ и n , а для многих каналов — λ и двойной индекс αn .

Приложение 3

ВЫВОД ФОРМУЛЫ СВЯЗИ $V(n)$ С $K(m, n)$

Будем рассуждать аналогично случаю непрерывной координаты (см. [41] с. 410. Подставим ϕ_+ в форме (53) в КР уравнение Шредингера (2), (52). Воспользуемся (20) и (20а) для того, чтобы сократить в полученном равенстве часть членов и выразить $E\dot{\phi}_+(n)$ через $\dot{\phi}_+(n)$, $\dot{\phi}_+(n \pm 1)$. После простых преобразований получаем, учитывая $\dot{\phi}_+(n) = \exp(i\theta n)$:

$$\sum_{m=n+1}^N \Delta A(m) \exp(i\theta m) + B \exp(i\theta n) + C = 0, \quad (\text{П.19})$$

где

$$A(m) = -[K(n-1, m) - 2K(n, m) + K(n+1, m)]/2\Delta^2 - \\ - [K(n, m-1) - 2K(n, m) + K(n, m+1)]/2\Delta^2 + V(n)K(n, m); \quad (\text{П.20})$$

$$B = -[K(n-1, n) - K(n, n+1)]/2\Delta + V(n); \quad (\text{П.21})$$

$$C = K(n, N+1) \exp(i\theta N/2\Delta) - K(n, N) \exp[i\theta(N+1)]/2\Delta. \quad (\text{П.22})$$

Поскольку (П.19) выполняется при всех θ , должны обращаться в нуль коэффициенты при $\exp(i\theta m)$ с различными значениями m , т. е.

$$A(m) = 0; \quad C = 0; \quad B = 0. \quad (\text{П.23})$$

Из первого и второго равенства в (П.23) получаются уравнение в частных разностях и одно граничное условие для $K(n, m)$:

$$[K(n+1, m) - 2K(n, m) + K(n-1, m)]/2\Delta^2 + V(n)K(n, m) - \\ - [K(n, m+1) - 2K(n, m) + K(n, m-1)]/2\Delta^2 = 0; \quad (\text{П.24})$$

$$[K(n, N+1) - K(n, N)]/K(n, N) = \\ = [\dot{\phi}_+(E, N+1) - \dot{\phi}_+(E, N)]/\dot{\phi}_+(E, N). \quad (\text{П.25})$$

Из третьего равенства в (П.23) имеем выражение (60) для

$$V(n) = [K(n, n+1) - K(n-1, n)]/2\Delta. \quad (\text{П.26})$$

В многоканальном случае аналогично получаются матричные обобщения (П.19) — (П.26).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гельфанд И. М., Левитан Б. М. «Докл. АН СССР», 1951, т. 77, с. 557; «Изв. АН СССР, сер. ат.», 1951, т. 15, с. 309.
2. Марченко В. А. «Докл. АН СССР», 1950, т. 72, с. 457; 1955, т. 104, с. 695; «Труды ММО», 1952, т. 1, с. 327; 1953, т. 2, с. 3.
3. Фаддеев Л. Д. Современные проблемы математики. Т. 3. М., ВИНТИ, 1974, с. 93.
4. Case K. M., Кас М. «J. Math. Phys.», 1973, v. 14, p. 594.
5. Case K. M. «J. Math. Phys.», 1973, v. 14, p. 916; 1974, v. 16, p. 2166.
6. Захарьев Б. Н., Ниязгулов С. А., Сузько А. А. «Ядерная физика», 1974, т. 20, с. 1273.
7. Захарьев Б. Н. и др. «Ядерная физика», 1976, т. 24, вып. 6; Case K. M. «Phys. Fluids», 1973, v. 16, N 10, p. 1607.

8. Агранович З. С., Марченко В. А. Обратная задача рассеяния. Харьков, Изд. ХГУ, 1960.
9. Фаддеев Л. Д. «УМН», 1959, т. 14, вып. 4, с. 57.
10. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит. 1960.
11. Марченко В. А. Спектральная теория операторов Штурма — Лиувилля. Киев, «Наукова думка», 1972.
12. Kay I., Moses H. E. «Nuovo cimento», 1955, v. 2, p. 917; 1956, v. 3, p. 66; 1956, v. 3, p. 276; 1961, v. 22, p. 689; «Nuovo cimento Suppl.», 1957, v. 5, p. 270.
13. Scott A. C. e.a. «Proc. IEEE», 1973, v. 61, N 10, p. 1443; Kim Y. E., Tubis A. «Ann. Rev. Nucl. Sci.», 1974, v. 24, p. 69.
14. Ахизер Н. И. Классическая проблема моментов. М., Физматгиз, 1961.
15. Захарьев Б. Н., Сузько А. А. «Ядерная физика», 1975, т. 22, с. 289.
16. Жигунов В. П. и др. Препринт Р4-7815, Дубна, 1974.
17. Degasperis A. «J. Math. Phys.», 1970, v. 11, p. 551.
18. Burdet G., Giffon M., Predazzi E. «Nuovo cimento», 1965, v. 36, p. 1337; 1966, v. 44, p. 138.
19. Жигунов В. П., Захарьев Б. Н. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. М., Атомиздат, 1974.
20. Березанский Ю. М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов. Киев, «Наукова думка», 1965.
21. Эскина М. С. В кн.: Труды семинара по функциональному анализу. Ин-т математики АН УССР. Т. 2. Киев, 1970, с. 207.
22. Андрощук А. А. В кн.: Труды Ин-та математики АН УССР. Киев, 1973.
23. Ладженская. Краевые задачи математической физики. М., «Наука», 1973.
24. Левитан Б. М., Саргсян И. С. Введение в спектральную теорию. М., «Наука», 1970.
25. Бахвалов Н. С. Численные методы. М., «Наука», 1973.
26. Марченко В. А. «Мат. сб.», 1960, т. 52, с. 739.
27. Лянце В. Добавление I в [41].
28. Jaulent M. «Comm. Math. Phys.», 1972, v. 28, p. 177.
29. Крылов В. И., Бобков В. В., Монастырский П. И. Вычислительные методы высшей математики. Т. 2. Минск, «Высшая школа», 1975.
30. Cox J. R. «J. Math. Phys.», 1964, v. 5, p. 1065; 1975, v. 16, p. 1403, 1410.
31. Маляров В. В. и др. «ЖЭТФ», 1975, т. 68, с. 432.
32. Guqushvili N. I., Mentkovsky Y. L. «Nuovo cimento», 1972, v. 40, N 2, p. 277, 292; Coz M., Rochus P. «J. Math. Phys.», 1975, v. 15, p. 1237.
33. Corbella. «J. Math. Phys.», 1970, v. 11, p. 1695.
34. Cornille H. «Nuovo cimento A», 1973, v. 14, p. 141 и литература, указанная в этой статье.
35. Жидков Е. П., Малышев Р. В., Христов Е. Х. Сообщение ОИЯИ Р5-9063, Дубна, 1975.
36. Miller. «J. Chem. Phys.», 1969, v. 51, p. 3631; Vollmer G. «Z. Phys.», 1969, Bd 226, S. 423; Худяков С. В. «ЖЭТФ», 1971, т. 60, с. 2040.
37. Calogero F., Degasperis A. «J. Math. Phys.», 1968, v. 9, p. 90.
38. Захарьев Б. Н. и др. Сообщение ОИЯИ Р4-8640, Дубна, 1975.
39. Левитан Б. М., Гасымов М. Г. «УМН», 1964, т. 19, вып. 2, с. 3.
41. Наймарк М. А. Линейные дифференциальные операторы. М., «Наука», 1969.
42. Tabakin F. «Phys. Rev.», 1969, v. 177, N 4, p. 1443.
43. Марченко В. А., Островский И. В. «Мат. сб.», 1975, т. 97, вып. 4.
44. Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1960.