ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 4505

И.В.Амирханов

# О КОРРЕКТНОСТИ МЕТОДОВ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СВЯЗИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИИ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

Специальность 055 - физика атомного ядра и космических лучей

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1969

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук Б.Н.Захарьев

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук А.И.Базь

кандидат физико-математических наук Р.В.Джолос

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Московский государственный университет, физический факультет.

Автореферат разослан 12 " VI " 1969 г.

Защита диссертации состоится " VII " 1969 г. на заседании Учёного совета Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Учёный секретарь Совета

Р.А.Асанов

4 - 4505

И.В.Амирханов



# О КОРРЕКТНОСТИ МЕТОДОВ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СВЯЗИ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИИ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

Специальность 055 - физика атомного ядра и космических лучей

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Целый ряд проблем квантовой механики требует решения задач многих тел. Сложность описания многочастичных систем состоит в том (если считать силы, действующие между частицами, известными), что уравнение Шредингера для $N$ тел является уравнением в частных производных, которое не может быть непосредственно решено даже на самых современных ЭВМ.

В настоящее время широко используются многочисленные приближенные методы решения задач, основанные на различных вариантах теории возмущений. Но во многих задачах теорией возмущений пользоваться нельзя, так как оказываются немалыми параметры, по степеням которых ведется разложение.

Весьма перспективным является направление теории, основанное на прямых методах математической физики: сведение уравнения Шредингера к системам алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений путем разложения $\Psi$ функции в ряд по собственным функциям вспомогательной задачи. Для применимости таких методов малость обычных параметров не является принципиально важной. К этому направлению относятся методы сильной связи каналов в теории рассеяния.

Настоящая диссертация посвящена вопросам многоканальной теории реакций в нерелятивистской квантовой механике для систем $N \geq 3$ тел. Наибольшее внимание уделено корректной постановке задачи и исследованию сходимости приближенных методов. В основном исследуются системы трех тел.

Задача трех тел является простейшим примером задачи многих тел, который позволяет изучать многие важные свойства, присущие многочастичным системам.

Многие прямые реакции (например, дейтонный срыв или подхват ) представляются как ядерные процессы с участием, по крайней мере, трех частиц. Поэтому для выяснения механизма прямых процессов большой интерес представляет возможно более строгое решение задачи трех тел. Решение этой задачи особенно усложняется, когда открыты каналы перераспределения и канал развала.

В решении проблемы трех и более тел существует два основных подхода – интегральный и дифференциальный.

Впервые корректная интегральная формулировка уравнения Шредингера для задачи трех тел с короткодействующими потенциалами была дана Г.В.Скорняковым и К.А.Тер-Мартиросяном /1/ и в общем случае Л.Д.Фаддеевым /2/.

Уравнения Фаддеева представляют собой систему трех многомерных интегральных уравнений. Для решения этой системы необходимо знать амплитуды рассеяния двух тел $t(\vec{k},\vec{k}',\epsilon)$ вне энергетической поверхности, поскольку последние входят в ядра уравнений Фаддеева. Практическое решение этих уравнений возможно лишь тогда, когда зависимость амплитуды $t(\vec{k},\vec{k}',\epsilon)$ от аргументов факторизуется. В таком случае уравнения Фаддеева сводятся к системе одномерных интегральных уравнений, которая может быть решена численно.

Если для решения задачи трех тел используются интегральные уравнения /3/, то их можно решить численным путем, заменяя интегралы суммами и обращая полученную матрицу. Но известно, что ядра этих уравнений обладают рядом особенностей, обусловленных наличием порогов для различных процессов. Наличие сингулярностей в ядре уравнения сильно усложняет задачу, поскольку в этом случае ядро не является больше плавным, и требуется большое число узлов при замене интегралов



суммами, а, следовательно, и большой объем памяти вычислительной машины. При энергии, превышающей порог реакции расщепления на три фрагмента, в ядрах уравнения появляется логарифмическая сингулярность. В этом случае численное решение системы интегральных уравнений путем непосредственного обращения матрицы становится затруднительным, и для такого решения обычно используют метод смещения пути интегрирования в комплексную плоскость /4/.

Для численных расчётов на ЭВМ более удобным (экономнее используется оперативная память машин) является подход к задаче, основанный на многоканальном формализме. В этом случае поиск решения уравнения Шредингера осуществляется путем разложения искомой функции по подходящему базису, в качестве которого можно выбирать либо функции двухцентровой задачи – метод Борна-Оппенгеймера /5/, либо одночастичные функции – метод смешивания конфигурации /6/, либо обобщенные угловые функции – метод гармонических функций /7/, либо волновые функции ядра-мишени – метод сильной связи каналов /8,9/ и т.д.

Так, например, применение метода сильной связи каналов к задаче трех тел заключается в том, что функция всей системы $\Psi$ разлагается по собственным функциям $\Phi$ двухчастичного гамильтониана.

$$\psi = \sum_{n=1}^{a} \chi_n(\vec{R}_1)\Phi_n(\vec{\rho}_{23}) + \int d\epsilon\, \chi(\vec{R}_1\epsilon)\Phi(\vec{\rho}_{23},\epsilon), \qquad (1)$$

где $\vec{R}_1$, $\vec{\rho}_{23}$ – координаты Якоби.

Подставляя разложение (1) в уравнение Шредингера, можно стандартным образом получить систему интегро-дифференциальных уравнений для коэффициентов разложения.

Успеху метода разложения способствует соответствие между граничными условиями задачи и базисом, т.е. базисные функции отвечают тем же самым граничным условиям. Но, если мы будем рассматривать реакции, когда открыты следующие каналы:

$$
\begin{aligned}
(2{+}3) + 1 &\longrightarrow (2{+}3) + 1 \quad \mathrm{I} \\
&\longrightarrow (1{+}3) + 2 \quad \mathrm{II} \qquad\qquad (2)\\
&\longrightarrow (1{+}2) + 3 \quad \mathrm{III} \\
&\longrightarrow 1{+}2 + 3 \quad \mathrm{IV},
\end{aligned}
$$

где скобки объединяют частицы, образующие связанные состояния, то разложение (1) оказывается неудобным для удовлетворения граничных условий в каналах II, III и IV. Каждый канал хорошо описывать своими переменными ($\vec{R}_i, \vec{\rho}_k$, $i \neq j \neq k = 1,2,3$). Так, например, чтобы удовлетворить граничному условию в канале I, удобно искать $\Psi$ в виде (1) (переменные $\vec{R}_1, \vec{\rho}_{23}$), но в этом случае трудно удовлетворить граничному условию в других каналах.

Предложенные в ряде работ [10] попытки обойти указанные трудности по пути использования формализма проекционных операторов, пока нельзя считать полностью успешными, так как различные предлагаемые уравнения для проекционных операторов очень трудно решить.

В работе [11] был предложен метод усеченных асимптотик (МУА), позволяющий обойти указанную трудность описания реакций с перераспределением частиц. Позднее этот метод был усовершенствован в работах [12]. Поскольку разложению типа (1) мешает наличие в $\Psi$ компонент, соответствующих асимптотике каналов с составом фрагментов, отличным от состава частиц для канала I, то разложение (1) заменяется следующим (например, если открыты каналы I и II):

$$\Psi = \Phi + \sum_{n=1}^{\alpha} \chi_n (\vec{R}_1) \phi_n (\vec{\rho}_{23}) + \int d\epsilon \; \chi (\vec{R}_1 \epsilon) \phi (\vec{\rho}_{23} \epsilon), \qquad (2)$$



где явно выделена мешающая разложению часть $\Phi$ функции $\Psi$, известная с точностью до констант (парциальных амплитуд), регулярная в нуле и при $R_2 \to \infty$ совпадающая с асимптотикой в канале II. В этом случае вместо системы однородных уравнений получаем систему неоднородных уравнений.

Может быть предложен иной подход [13], основанный на использовании более общего разложения, а именно:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} \sum_{n_i=1}^{\alpha_i} \chi_{n_i} (\vec{R}_i) \phi_{n_i} (\vec{\rho}_{jk}) + X (\vec{R}_1, \vec{\rho}_{23}) \; (i \neq j \neq k), \qquad (4)$$

где $\phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk})$ – волновые функции двух частиц в связанном состоянии, $n_i$ – квантовые числа, характеризующие эти состояния. Граничные условия в каналах (I, II, III) налагаются на функции $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$ ($n_i = 1,2,..,\alpha_i$, $i = 1,2,3$), а граничные условия в каналах (IV) налагаются на функцию $X(\vec{R}_1, \vec{\rho}_{23})$.

в §1 главы I с использованием (4) получена система уравнений, позволяющая описывать упругое и неупругое рассеяния, каналы с перераспределением частиц, канал развала. Эти уравнения свободны от принципиальных трудностей, которые имеются в обычном методе многоканальной связи [8].

Полученные уравнения, однако, представляют собой систему интегро-дифференциальных уравнений, в которые под знаком интеграла входят операторы дифференцирования по $\vec{R}_i$, $\vec{\rho}_{jk}$ ($i \neq k \neq j = 1,2,3$) от неизвестных функций $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$ ($i = 1,2,3$) и $X(\vec{R}_1, \vec{\rho}_{23})$. Поэтому для такой системы необходимо было разработать специальный численный метод решения (известные нам методы представляются непригодными).

В §3 главы I предлагается метод решения полученных уравнений. При этом исходная система заменяется системой алгебраических уравнений. Эта система, будучи значительно более простой, чем система интегро-дифференциальных уравнений, сохраняет все достоинства исходной системы уравнений. Предлагаемый метод носит общий характер и может быть применен при решении других систем интегро-дифференциальных уравнений или систем интегральных уравнений, например, уравнений с нелокальным взаимодействием.

Здесь же предлагается приближенный способ решения уравнений. При этом приближенные решения получаются в аналитическом виде, что может оказаться очень удобным при их практическом использовании.

В приложениях 1,1 , 1.2 и 1.3 рассматриваются некоторые частные примеры.

Во второй главе на основании единого подхода проведено исследование корректности ряда приближенных методов. Многие методы приводят к решению бесконечной системы дифференциальных уравнений или системы интегро-дифференциальных уравнений. При приближенном решении бесконечная система уравнений заменяется конечной. Возникает вопрос о правомерности такой замены и об оценке погрешностей, которые при этом допускаются. Аналогичные вопросы для алгебраических уравнений изучены в функциональном анализе[/15/]. Поэтому, используя метод, предложенный в работе[/14/] (рассмотренный в §3 первой главы), мы сначала переходим от системы дифференциальных или системы интегро-дифференциальных уравнений к системе алгебраических уравнений. Тогда уже удобно воспользоваться имеющимися теоремами из функционального анализа.

В работах[/16–18/] рассматривались вопросы сходимости метода сильной связи каналов и были выявлены факторы, влияющие на сходимость метода. В диссертации предлагается подход[/13/], который позволяет с единой точки зрения исследовать корректность многих приближенных методов. Кроме того, этот подход может служить одновременно алгоритмом решения исследуемых уравнений, что особенно удобно для системы интегро-дифференциальных уравнений, решение которых обычным способом вызывает большие трудности.



В §1 и §2 второй главы в общем виде доказывается сходимость метода сильной связи каналов и метода усеченных асимптотик (корректность обрыва бесконечных систем). Получены некоторые оценки погрешностей приближенных решений.

В приложении (П.1) выявляется ряд факторов, которые влияют на сходимость приближенных методов. Такой сходимости способствует убывание коэффициентов $W_{nm} = \int \phi_n V \phi_m d\rho_{ij}$ при $n \to \infty$ и $m \to \infty$. Другой фактор возникает из-за недостаточности полной энергии для возбуждения высших виртуальных состояний, поскольку движение в состояниях с отрицательной энергией по законам квантовой механики сильно затруднено.

Этот фактор равен $\dfrac{1}{k_n^2 + \alpha_i^2}$, т.е. квадратично убывает с ростом $k_n$ ($k_n = \sqrt{2M(E-\epsilon_n)}$).

В третьей главе рассматривается несколько модельных задач. §1 посвящен изучению одной задачи движения сложной частицы (из двух тел) во внешнем поле (третье тело). Для простых частиц проницаемость любых барьеров в противоположных направлениях строго одинакова. Но для сложной частицы при энергии, достаточной для реального возбуждения высших состояний внутреннего движения, коэффициенты прохождения $D^+$ и $D^-$ через несимметричные барьеры в различные стороны могут сильно различаться[/19/]. Этот эффект качественно исследуется и проводятся численные расчёты для конкретного потенциального барьера (см. рис. 1). Расчёты проводились для различных значений ширины барьера методом Борна-Оппенгеймера[/5/]. Зависимость коэффициентов прохождения через потенциальный барьер (при энергии $E = 6{,}01$) от величины $\Delta = b - a$ представлена на рис. 2. Полученные результаты хорошо согласуются с качественными предсказаниями[/19/].

С ростом полной энергии $E$ разница в коэффициентах прохождения в разные стороны уменьшается.

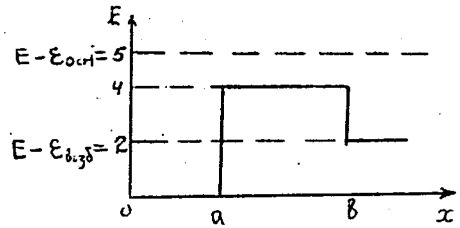


Рис. 1.

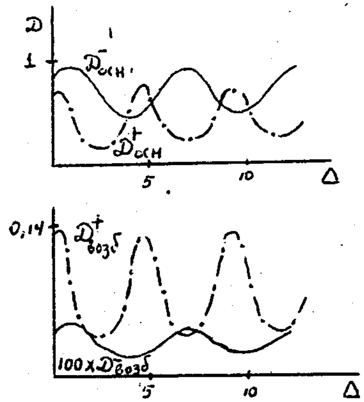


Рис. 2. Зависимость от ширины барьера $\Delta=(b-a)$ коэффициентов прохождения $D^+_{осн.}$ ( $D^-_{осн.}$) для частиц в основном состоянии, падающих на барьер справа (слева); $D^+_{возб.}$ ( $D^-_{возб.}$) – коэффициенты прохождения для частиц, падающих на барьер в возбужденном состоянии.

В §2 рассмотрен один механизм каталитического ускорения реакций. При этом требуется рассчитывать трехчастичные столкновения, в которых третья частица играет роль катализатора. В расчётах использовалась система уравнений, полученная в первой главе диссертации. При этом сравниваются сечения следующих реакций без катализатора:

$$a + a + a \to a + a + a \qquad \mathrm{I}$$

$$\to (a + a) + a \qquad \mathrm{II}$$

и с катализатором

$$a + a + b \to a + a + b \qquad \mathrm{III}$$

$$\to (a + a) + b \qquad \mathrm{IV}$$

для различной формы потенциалов $V_{aa}$, $V_{ab}$ и при различных значениях энергии всей системы.



Потенциалы $V_{aa}$ и $V_{ab}$ выбирались в виде, изображенном на рисунке 3.

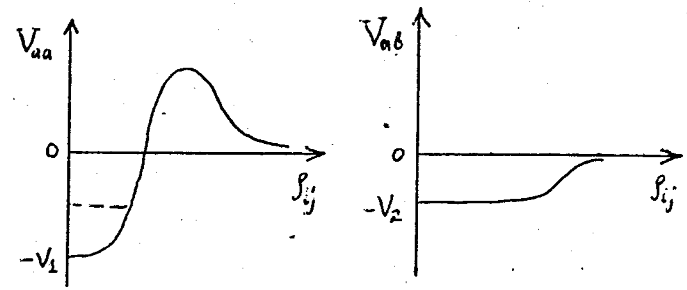


Рис. 3.

В потенциале $V_{aa}$ имеется, по крайней мере, одно связанное состояние для системы $(a + a)$. Отталкивающий барьер затрудняет соединение частиц в реакции II.

Каталитическое действие частицы "b" в реакции IV заключается в том, что при столкновении трех частиц (когда все они оказываются рядом) притягивающий потенциал эффективно увеличивает относительную энергию столкновения двух частиц "a". Это должно облегчать для них преодоление барьера.

В §3 рассматривается многократное рассеяние сложных частиц системой неподвижных силовых центров /20/, области взаимодействия которых с налетающей частицей не перекрываются между собой. Показано, что задача сводится к решению простой системы алгебраических уравнений.

Основные результаты, изложенные в диссертации, опубликованы в работах /11, 13, 14, 16, 17, 19, 20/ и докладывались на всесоюзных конференциях.

## Литература


1. Г.В.Скорняков, К.А.Тер-Мартиросян, ЖЭТФ 31, 775 (1956).
2. Л.Д.Фаддеев, ЖЭТФ 39, 1459 (1960). Труды математического института имени Стеклова XXI , 1963.
3. А.Г.Ситенко, В.Ф.Харченко. Препринт ИТФ АН УССР, 68-11, Киев, 1968.
4. Hetherington I.H., Schick L.H., Phys. Rev., 137, B935 (1965). Shanley P.E., Aaron R. Ann. of Phys., 44, 363(1967).
5. Н.Мотт, Г.Месси. Теория атомных столкновений, Москва,ИИЛ, 1951. С.С.Герштейн, Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина, ЖЭТФ, 48, 632 (1965). Б.Н.Захарьев, С.Н.Соколов. Препринт ОИЯИ Р-1593, Дубна, 1964.
6. Fano U., Phys. Rev., 124, 1866 (1961). Bloch C. Gilet V. Phys. Lett., 16, 62 (1965). Bloch C. Лекции XXXVI курса школы Энрико Ферми. Варенна, 1965.
7. Ю.А.Симонов, ЯФ 3, 630 (1965). А.М.Бадалян, Ю.А.Симонов, ЯФ 3, 1032 (1966).
8. Feshbach H. Ann. of Phys., 5, 357 (1958); 19, 287(1962). В.В.Балашов, П.Долежал, Г.Я.Коренман, В.А.Коротких, В.Н.Фетисов. Препринт ФИАН А-52, 1965.
9. Г.Ф.Друкарев. Теория столкновений электронов с атомами. Физматгиз, Москва, 1963.
10. M.Coz. Ann. of Phys., 35, 53 (1966). Y.Hahn. Phys. Rev., 142, 603 (1966). M. Mittelman. Ann. of Phys., 28, 430 (1964 ).
11. И.В.Амирханов, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. Препринт ОИЯИ Р4-2983, Дубна, 1966. Тезисы докладов на XVII совещании по ядерной спектроскопии, Харьков, 1967.
12. Т.Г.Ефименко, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев, ЯФ 7, 1968. Ann. of Phys., 47, 275 (1968).
13. И.В.Амирханов, М.А.Касымжанов. Препринт ОИЯИ Р4-4335, Дубна, 1969.





14. И.В. Амирханов, В.С.Гурьянов. Препринт Р4-3741, Дубна, 1968. Phys. Letters, 28A, N.5, 346 (1968).
15. Л.В.Канторович, Г.П.Акилов. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, 1959, Б.З.Вулих. Введение в функциональный анализ, "Наука", Москва, 1967.
16. И.В.Амирханов, Л.Г.Заставенко, Б.Н.Захарьев, Препринт ОИЯИ Р-2310, Дубна, 1965.
17. И.В.Амирханов. Тезисы докладов на XVIII совещании по ядерной спектроскопии, Рига, 1967.
18. Б.Н.Захарьев, С.Н.Соколов. Препринт ОИЯИ Р-1593, Дубна, 1964. И.С.Лупашина, С.Н.Соколов. Препринт Р-2418, Дубна, 1965.
19. И.В.Амирханов, Б.Н.Захарьев. Препринт ОИЯИ Р-1906, Дубна, 1964. ЖЭТФ, 49, 1097 (1965).
20. И.В.Амирханов, В.Ф.Демин, Б.Н.Захарьев, Н.Н.Кузьмин. Препринт ОИЯИ Р-2554, Дубна (1966). ЯФ, 6, вып. 1 194 (1967).


Рукопись поступила в издательский отдел
26 мая 1969 года.