ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 5545

О. Лхагва

ОПИСАНИЕ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ОБЩЕГО ТИПА В ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СВЯЗИ

Специальность 055 - физика атомного ядра и космических лучей

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1970

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук Б.Н. Захарьев.

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук Т.И. Копалейшвили,
кандидат физико-математических наук И.И. Кузьмин.

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Научно-исследовательский институт ядерной физики Московского государственного университета.

Автореферат разослан "   " 1971 г.
Защита диссертации состоится "   " 1971 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 - 5545

О. Лхагва

ОПИСАНИЕ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ОБЩЕГО ТИПА В ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СВЯЗИ

Специальность 055 - физика атомного ядра и космических лучей

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

В атомной и ядерной физике широко используются методы сильной многоканальной связи [1,2]. Они основаны на формализме проекционных методов математической физики [3], которые, в свою очередь, опираются на аппарат функционального анализа [4].

Диссертация посвящена некоторым вопросам описания сложных процессов рассеяния с изменением состава сталкивающихся частиц (фрагментов). Простейшим примером такого рода процессов является рассеяние в системе трех частиц, сопровождающееся реакциями, которые можно схематически представить так:

1 + (2 + 3)	1 + (2 + 3)	группа каналов	a
	2 + (1 + 3)	– " –	b
	3 + (1 + 3)	– " –	c
	1 + 2 + 3	– " –	d .

Здесь скобки объединяют частицы, образующие связанную систему. Индексом α (α = a, b, c ...) мы будем обозначать группы каналов с определенным составом фрагментов.

Изложим кратко сущность проекционных методов. Пусть нам нужно решать операторное уравнение

$$\hat{L}\Psi = f , \tag{1}$$

где $\hat{L}$ – некоторый линейный оператор.

Заметим, что в частном случае $\hat{L} = H - E$ и $f = 0$ уравнение (1) переходит в уравнение Шредингера

$$(H - E)\Psi = 0 \tag{2}$$

с соответствующим граничным условием для Ψ.

С точки зрения функционального анализа уравнение (1) представляет собой векторное уравнение в бесконечномерном пространстве F, а функция Ψ – вектор некоторого бесконечномерного пространства E x/. Оператор $\hat{L}$, действуя на вектор Ψ, преобразует его в некоторый вектор $\hat{L}\Psi$ пространства F, к которому относится и вектор f.

Приближенно волновая функция Ψ отыскивается в виде линейной комбинации N базисных функций ϕ_n из полного набора $\{\phi_n\}$ в пространстве E:

$$\Psi^N = \sum_n^N \chi_n \phi_n . \tag{3}$$

Конечно, с помощью Ψ^N нельзя точно удовлетворить векторному уравнению (1). Однако можно потребовать, чтобы коэффициенты χ_n выбирались из условия равенства соответствующих проекций векторов $L\Psi^N$ и f на N базисных функций Φ_m из пространства F, т.е.:

$$(\hat{L}\Psi^N - f, \Phi_m) = 0 . \tag{4}$$

---

x/ F – область значений оператора $(H - E)$, а E – область его определения.

Величина $\hat{L}\Psi^N - f$ называется невязкой уравнения (1). Для уравнения Шредингера формула (4) имеет вид:

$$\sum_n^N ((H-E)\chi_n \phi_n, \Phi_m) = 0 . \tag{5}$$

Как видно из (4) и (5), Ψ^N удовлетворяет уравнению лишь в проекционном (усредненном) смысле. Такие решения называются обобщенными. При $N \to \infty$ приближенное решение сходится к Ψ в среднем. В зависимости от выбора базисных функций ϕ_n и Φ_m получаются разновидности проекционного подхода (методы Бубнова-Галеркина-Петрова) /3/.

Удобство проекционных методов состоит в том, что уравнение Шредингера для многих тел (дифференциальное уравнение в частных производных) сводится к системам алгебраических обыкновенных дифференциальных или интегральных уравнений, которые можно решать на ЭВМ. Этот подход к решению уравнений в сочетании с современными моделями структуры ядра составляет сущность алгоритмов расчётов в так называемой единой теории ядерных реакций.

Когда вся координатная зависимость содержится в ϕ_n, а коэффициенты χ_n не зависят от координат, уравнения (5) являются системой алгебраических (метод смешивания конфигураций /5/) или интегральных (метод Фано-Блоха /6/) уравнений.

Если ϕ_n не зависят от одной из переменных (R), коэффициенты разложения χ_n являются функциями $(\chi_n(R))$ от этой переменной и (5) будет системой дифференциальных (или интегродифференциальных) уравнений (метод Фешбаха /2/). Граничные условия физической задачи по переменной R налагаются на эти функции, а по другим переменным они удовлетворяются подходящим выбором базисных функций ϕ_n. Функции $\chi_n(R)$ описывают движение частицы (фрагмента) относительно ядра мишени в n -ом канале. $\chi_n(R)$ при больших R осциллирует для тех каналов, в которых энергия этого относительного движения положительна. Такие каналы называются открытыми. Если кинетическая энергия частицы в канале n отрицательна, то $\chi_n(R)$ должна убывать экспоненциально при $R \to \infty$. В этом случае говорим, что каналы n закрыты.

Существенным моментом рассматриваемых в диссертации прямых методов является обрыв бесконечной системы уравнений, поэтому представляет интерес вопрос о принципиальной сходимости этих методов. Он исследовался в работах/3,7,8/.

Определенным достоинством обсуждаемых методов многоканальной связи является то, что физическому процессу соответствует очень наглядная картина, позволяющая проследить за деталями механизма реакции. В этом подходе оказывается возможным свести к минимуму количество феноменологических предположений. Например, в ряде случаев требуется лишь ввести фундаментальное двухчастичное взаимодействие (нуклон-нуклонное в ядерной физике) и нет необходимости привлекать такие понятия как среднее поле, остаточные взаимодействия, радиус реакции и т.д. Кроме того, эти методы позволяют описывать в рамках единого формализма столь различные явления, как "оптическое" рассеяние, пороговые особенности, узкие резонансы, вызываемые компаунд-состояниями различной степени сложности.

На основе функций, получаемых в теории многоканальной связи, могут быть рассчитаны всевозможные переходы, вызываемые дополнительными электромагнитными и слабыми взаимодействиями, уже с использованием теории возмущений.

За такую общность описываемые методы часто называются "едиными" теориями ядерных реакций. Но несмотря на эти привлекательные стороны теории многоканальной связи, она еще далека от совершенства.

В ядерной физике обычно в качестве ϕ_n используют оболочечные волновые функции подсистемы, являющиеся собственными функциями определенных асимптотических гамильтонианов[x/] H_α ($\alpha = a,b,c\ldots$).

Одной из существенных трудностей формализма многоканальной связи является корректный учет непрерывного спектра этих базисных функций.

Особенно остро встает вопрос об учёте непрерывного спектра в задачах, когда мишень имеет лишь одно слабо связанное состояние (например, реакции $n + d \to n + d$).

В системе $N \geq 3$ тел возникают качественно новые типы процессов, которые отсутствуют в задаче двух тел.

Такими являются, например, реакции с перераспределением частиц и развал системы на $N \geq 3$ фрагментов и т.д. Оказывается, при этом существует несколько различных асимптотических гамильтонианов (H_α) (в случае трех тел их четыре), собственные функции (ϕ_{n_α}) которых естественно описывают лишь "свои" каналы. Однако при различных α (см. выше) эти функции не являются ортогональными и зависят от разных внутренних координат $\vec{r}_\alpha$.

[x/] Асимптотический гамильтониан для различных каналов получается из полного гамильтониана при стремлении к ∞ радиуса относительного движения фрагментов в данном канале $\lim\limits_{R_\alpha \to \infty} H \to H_\alpha$.

Следовательно, разлагая волновую функцию Ψ по одному из этих наборов $\{\phi_{n_a}\}$, нельзя удовлетворить всем ее граничным условиям, соответствующим группам каналов (a, b, c...).

Известные трудности [9] представляет описание процессов с фрагментами $N \geq 3$ до или после столкновения.

Оригинальный способ учёта непрерывного спектра, когда используется полностью дискретный набор собственных функций задачи Штурма-Лиувилля, был предложен в работе [10]. К сожалению, этот метод имел ограниченную применимость – он годился только для описания упругих процессов. В § 2.3 этот подход распространяется [11] на случай столкновений как с возбуждением мишени, так и с изменением состава сталкивающихся комплексов. В приложении I метод применяется к частному случаю – задаче рассеяния электронов на атоме водорода.

Как известно, важным критерием эффективности приближенных методов служит чувствительность результатов расчётов к погрешностям, допускаемым в вычисляемых функциях.

Цели обеспечить слабую чувствительность вычисляемых амплитуд рассеяния к ошибкам в пробных функциях служит вариационная формулировка метода усеченных асимптотик [9], которая дана [12] в § 2.2. Важным моментом при формулировке вариационного принципа является построение стационарного функционала для определенной физической величины и доказательство его стационарности. Для процессов без перераспределения частиц этот вопрос подробно рассмотрен в [13]. Однако вследствие сложности граничных условий для реакций с перераспределением частиц долгое время было неясно, как доказать стационарность функционала Коона в общем случае.

В § 2.2 проведено доказательство стационарности функционала Коона для амплитуд реакций с изменением состава сталкивающихся фрагментов.

При этом получен рецепт вычисления поправок к приближенному значению амплитуды рассеяния, делающих ее стационарной относительно вариаций пробных функций.

В предлагаемом подходе описание реакций с перераспределением частиц сводится к системе обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений, которая допускает непосредственное решение на ЭВМ.

Развитие вариационного подхода для реакций с перераспределением частиц позволило установить важный факт [14], что широко используемый в теории дейтронного стриппинга метод искаженных волн (DWBA) может рассматриваться как первое приближение в вариационном методе. Это может послужить дополнительным обоснованием использования метода искаженных волн (DWBA) для указанных реакций. DWBA позволяет с помощью эксперимента извлекать данные о структуре ядер в форме определенных спектроскопических факторов [15].

В § 2.4-5 проведены расчёты структурных факторов [16] реакций (^3He, P), (^9Be, ^7Li) и (^{11}B, ^9Be) с передачей двух нуклонов в приближении одноступенчатого процесса передачи и показано, что промежуточные состояния группы передаваемых нуклонов из 1p оболочек могут заметно влиять на спектр возбуждения конечного ядра.

Проблема описания реакций с передачей нуклонов тесно связана с учётом тождественности частиц, входящих в состав сталкивающихся фрагментов.

Метод гиперсферических функций $Y_{K\gamma}$, развитый в работах [17], не только дает возможность корректно учесть тождественность частиц, но и позволяет характеризовать систему полностью дискретными квантовыми числами K, в случае реакций с более чем двумя свободными фрагментами.

В § 3.2 на основе метода K - гармоник предложено обобщение [12] вариационного принципа Коона, на случай реакции с более чем двумя свободными частицами до или после столкновения.

Например, в случае трех частиц отыскивается пробная функция в виде:

$$\Psi = \sum_{K\gamma} \frac{\chi_{K\gamma}(\rho)}{\rho^{5/2}} Y_{K\gamma}(\Omega_5) + \Phi , \qquad (6)$$

где ρ, Ω_5 - шесть координат, характеризующих внутреннее движение системы трех частиц, а функция Φ, известная с точностью парциальных амплитуд $f_{n\ell m}$ ($\Phi = \sum f_{n\ell m} \Phi_{n\ell m}$), описывает асимптотическое поведение Ψ в двухчастичных каналах.

В таком разложении по K -гармоникам следует оставлять лишь члены с $K \le K_{max}$, где K_{max} определяется максимальной угловой скоростью изменения Ψ.

При больших ρ $\chi_{K\gamma}(\rho)$ имеет асимптотический вид:

$$\chi_{K\gamma}(\rho) \to F_{K\gamma} e^{iQ\rho} , \qquad (7)$$

где $Q = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Дифференциальное сечение процесса с несколькими ($N \ge 3$) свободными частицами до или после столкновения выражаются через парциальные амплитуды $F_{K\gamma}$ следующим образом

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_5} = \frac{Q}{\pi k_0} \sum_{\substack{K K' \\ \gamma,\gamma'}}^{K_{max}} F^*_{K\gamma} F_{K'\gamma'} Y^*_{K\gamma}(\Omega_5) Y_{K'\gamma'}(\Omega_5) , \qquad (8)$$

где k_0 - волновой вектор в "падающем" канале.

Для коэффициентов разложения $\chi_{K\gamma}(\rho)$ в (6) и двухчастичных парциальных амплитуд $f_{n\ell m}$, которые являются вариационными параметрами метода, получена система обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений. Эти уравнения свободны от трудностей учёта непрерывного спектра базисных функций разложения Ψ, а также трудностей описания реакций с перераспределением частиц и с более чем двумя фрагментами до или после столкновения.

Предложен всегда сходящийся итерационный метод решения полученной системы, который может облегчить численные расчёты на ЭВМ. При этом решение системы уравнений можно получить в приближенно аналитическом виде.

Вариационный принцип в задачах непрерывного спектра хорош тем, что он дает такой алгоритм расчёта амплитуд рассеяния, что ошибка в вычисляемых ее значениях имеет второй порядок малости относительно погрешностей в пробных функциях.

Однако, в отличие от проблем на связанные состояния, неизвестно как рассчитываемые значения величин с улучшением пробных функций будут приближаться к истинному значению, т.е. оказывается неопределенным знак ошибки искомых величин[x/].

В теории столкновений исключительно важное значение имеет создание таких вариационных принципов, которые приводят к одно- или двусторонним границам для параметров рассеяния, чтобы из сравнения с экспериментальными данными можно было делать уверенные выводы о структуре ядра, о характере NN – взаимодействия и т.д.

Вопрос получения строгих границ сверху или снизу на параметры рассеяния рассматривался в работах[18,19].

В данной диссертации проведено дальнейшее исследование в этом направлении.

В § 3.3 доказана[20] положительная определенность изменения ΔK (матрицы реакций) в методе K –гармоник. При этом показано, что полученные оценки справедливы, начиная уже с первого члена разложения по гиперсферическим функциям.

Метод K –гармоник оказался полезным для обобщения теории временных задержек[20] на случай реакций с тремя или большим числом свободных частиц до или после столкновения. Использование энергетической зависимости амплитуд рассеяния, полученных с помощью стационарной постановки задачи, дает[21] возможность проследить за развитием процесса во времени. Например, можно вычислить временную задержку Δt –частицы в поле взаимодействия по сравнению с временем ее свободного

[x/] При расчёте энергии связанных состояний, благодаря положительной определенности оператора H, по мере улучшения пробных функций Ψ_t приближенные значения E стремятся к точному значению E_0 с одной стороны – сверху.

пролета. Непосредственное обобщение теории временных задержек для процессов с участием более чем двух свободных частиц до или после процесса столкновения встретилось с определенной трудностью. Было неясно, как построить волновые пакеты, когда система характеризуется несколькими векторами относительного движения. В этом отношении одно из удобств метода K –гармонических функций заключается в том, что он позволяет свести задачу к системе уравнений для функций $\chi_{K\gamma}(\rho)$, зависящих от одной переменной (радиуса гиперсферы – ρ), аналогично тому, как это делается в задаче двух тел, при разложении по шаровым гармоникам $Y_{\ell m}$. Это обстоятельство позволяет образовать пакет по переменной ρ в каналах реакций с числом фрагментов $N \geq 3$ и тем самым обобщить[20] теорию временных задержек для таких процессов. Эти вопросы излагаются в § 3.4.

Формализм сильной многоканальной связи, обладающий целым рядом достоинств, отмеченных выше, оказывается неприменимым к системам, взаимодействующим с помощью двухчастичных потенциалов, содержащих твердые коры. Уже в задаче трех тел многоканальный подход встречается с трудностью учёта твердого кора в двухчастичных потенциалах. Поясним, в чем состоит эта трудность. Базисные функции $\phi_{n\alpha}$, в виде линейной комбинации которых представляется Ψ – функция всей системы, соответствуют определенному асимптотическому гамильтониану H_α. В H_α отсутствуют некоторые потенциалы V_α, входящие в полный гамильтониан H. Поэтому $\phi_{n\alpha}$ могут отличаться от нуля в тех областях, где эти потенциалы V_α обращаются в бесконечность (твердый кор).

Это приводит к тому, что произведения $V_\alpha \;\; \phi_{n_\alpha}$ оказываются неинтегрируемыми функциями. И, следовательно, элементы матрицы взаимодействия $(\phi_{n_\alpha} \;\; V_\alpha \;\; \phi_{n'_\alpha})$ обращаются в бесконечность. Тем самым переход от уравнения Шредингера к системе уравнений для коэффициентов разложения χ_n по ϕ_n может оказаться бессмысленным.

В §§ 4.1-2 диссертации рассматриваются два новых способа[22,23] учёта твердого кора в формализме сильной многоканальной связи.

Один из них связан с обобщенным проекционным методом, разработанным в математической физике[24].

Граничное условие для Ψ в (1) можно писать в виде уравнения на поверхности S, т.е.

$$\hat{\mathfrak{L}} \; \Psi = g / S \; , \qquad (9)$$

где $\hat{\mathfrak{L}}$ - соответствующий линейный дифференциальный оператор.

Если трудно подобрать базисные функции ϕ_n соответствующими граничным условиям, то коэффициенты разложения χ_n можно искать из требования ортогональности базисным функциям суммы невязок как уравнения, так и граничных условий:

$$((\hat{L} \; \Psi^N - f \, , \Phi_m)) + (\hat{\mathfrak{L}} \; \Psi^N - g \, , \Phi_m)_S = 0 \, . \qquad (10)$$

Интегрирование в $(\quad)_S$ ведется лишь по границе.

Этот обобщенный проекционный метод применяется к проблеме учёта твердого кора.

Волновая функция Ψ обращается в нуль в области, где парные потенциалы $V_{ij} \to \infty$.

Можно рассматривать обращение Ψ в нуль на границе этой области как дополнительное граничное условие. Используя уравнения (10), имеем[22]

$$((H - E)\, \Psi^N , \Phi_m)_V + (\Psi^N , \Phi_m)_\sigma = 0 \, , \qquad (11)$$

где $(\quad)_V$ означает интегрирование по области вне коров, а $(\quad)_\sigma$ - интегрирование по поверхности коров. Таким образом, можно, например, описывать системы с бесконечным отталкиванием в методах K - гармоник и сильной многоканальной связи.

В приложении "В" дана вариационная формулировка обобщенного проекционного метода. Построен функционал J , имеющий смысл амплитуды рассеяния, для которого условия стационарности эквивалентны уравнениям (1), (9) или (10).

В § 3.2 рассматривается другой способ[23] учёта твердого кора. Благодаря тому, что в уравнении Шредингера (2) потенциалы входят лишь в виде произведений $V_{ij} \; \Psi$, которые не обращаются в бесконечность в области кора, можно использовать разложение $V_{ij} \; \Psi$ по полному набору функций $\phi_{n_{ij}}$ и свести задачу к интегродифференциальному уравнению, свободному от трудностей твердого кора. Разработан алгоритм расчёта полученного уравнения.

Основные результаты, изложенные в диссертации, опубликованы в работах [11,12,16,20,22,23] и докладывались на всесоюзных конференциях.

Литература

1. Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений. "Мир", Москва 1969.
2. H. Feshbach. Ann. of Phys., 5, 357 (1958), 19, 28(1962).
3. М.А. Красносельский, Г.М. Вайникко, П.П. Забрейко, Я.Ю., Рутицкий, В.Я. Стеценко. Приближенное решение операторных уравнений. "Наука", Москва, 1969.
4. Б.З. Вулих. Введение в функциональный анализ. "Физматгиз", Москва, 1967.
5. Р. Натаф. Модели ядер и ядерная спектроскопия. "Мир", Москва, 1968.
6. U. Fano. Phys.Rev., 124, 1866 (1961). C. Bloch. Лекции XXXVI курса школы "Энрико Ферми", Варенка, 1965.
7. И.В. Амирханов, М.А. Касымжанов. Препринт ОИЯИ, Р4-4335, Дубна, 1969.
8. J. Nuttal. Ann. of Phys., 52, 428 (1969).
9. Т.Г. Ефименко, В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев. Ann. of Phys., 47, 275 (1968).
10. M. Rotenberg. Ann. of Phys., 19, 262 (1962).
11. Б.Н. Захарьев, О. Лхагва. Изв. АН СССР, 32 264 (1968).
12. Т.Г. Ефименко, Б.Н. Захарьев, О. Лхагва. Изв. АН СССР, 34, 1796 (1970). Препринт ОИЯИ Р4-4923, Дубна, 1970.
13. Ю.И. Демков. Вариационные принципы в теории столкновений. Физматгиз, Москва, 1958.

14. Y. Tikochinsky. Ann. of Phys., 59, 74 (1970).
15. М.А. Жусупов, О. Лхагва, И. Роттер. Изв. АН СССР, 32, 1715 (1968). Препринт ОИЯИ, Р4-3681, Дубна, 1968.
16. О. Лхагва, И. Роттер. ЯФ 11, 1037 (1970). Препринт ОИЯИ Р4-4569, Дубна, 1969.
17. Ю.А. Симонов. ЯФ 3, 630 (1966), 7, 1210 (1968).
18. Y. Hahn, T.P. O'Malley and L. Spruch. Phys.Rev., 134, B397 (1964).
19. Б.Н. Захарьев, В.П. Пермяков, Ю.И. Фенин. Сообщение ОИЯИ Р4-4934, Дубна, 1970.
20. О. Лхагва. Сообщение ОИЯИ Р4-5366, Дубна, 1970.
21. T. Ohmura. Suppl. of Prog. Theor.Phys., 29, 108(1964).
22. Б.Н. Захарьев, О. Лхагва, Ю.И. Фенин. Тезисы докладов XX ежегодного совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Ленинград, 1970.
23. И.В. Амирханов, О. Лхагва, З.К. Смедарчина. Препринт ОИЯИ Р4-4863, Дубна, 1969.
24. Н.И. Польский. ДАН 167, 290 (1966).

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1970 года.