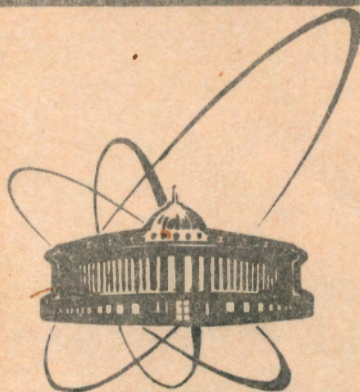


92-126



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P11-92-126

С. И. Виноцкий, И. В. Пузынин, Ю. С. Смирнов

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ РЕШЕНИЯ  
МНОГОКАНАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

1992

## 1. Введение

В работе [1] предложена многопараметрическая ньютоновская итерационная схема решения N-канальной задачи рассеяния для системы радиальных уравнений Шредингера

$$(L+k^2)\psi = \left(1 - \frac{d^2}{dr^2} - 1 \frac{l(l+1)}{r^2} - P(r) - 2Q(r) \frac{d}{dr} + k^2\right) \psi(r, k, l) = 0. \quad (1)$$

В N-канальной задаче рассеяния с  $N_0$  открытыми каналами полный набор решений  $\psi(r) = \{\psi_1^{(\nu)}(r)\}$  есть прямоугольная матрица размерностью  $N_0 \times N$ , где число компонент вектор-столбца решений  $i=1, \dots, N$ , а номер решения  $\nu=1, \dots, N_0$  соответствует открытому каналу реакции  $i=\nu$  со значением квадрата импульса  $k_1^2 > 0$ ,  $i=1, \dots, N_0$ . Значение  $k_1^2 < 0$  отвечает закрытому каналу реакции при  $i=N_0+1, \dots, N$ .

Граничные условия для системы уравнений (1) строятся таким образом, чтобы они соответствовали условию регулярности

$$\psi(r) \sim r^{l+1} \text{ при } r \rightarrow 0 \quad (2)$$

и отражали в асимптотической области  $kr \gg 1$  поведение волновых функций  $\psi(r)$  в виде

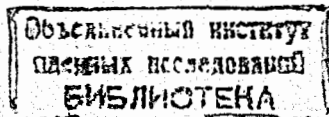
$$\psi_1^{(\nu)} \sim A_1^{(\nu)} (\delta_{1\nu} (\cos \delta_{1\nu} J_l(k_1 r) - \sin \delta_{1\nu} n_l(k_1 r)) + (1 - \delta_{1\nu}) n_l(k_1 r)),$$

при значениях  $i=1, \dots, N_0$  (3)

$$\psi_1^{(\nu)} \sim A_1^{(\nu)} \exp(-|k_1| r), \quad (4)$$

при значениях  $i=N_0+1, \dots, N$ .

Здесь  $P(r)$  и  $Q(r)$  - заданные матрицы коэффициентов, обеспечивающие существование решений задачи (1)-(4),  $\delta_{1\nu}$  - искомая фаза рассеяния в открытом канале при заданном значении импульса  $k_\nu^2 = k_{1\nu}^2 \geq 0$ ,  $A_1^{(\nu)} = \delta_{1\nu} + (1 - \delta_{1\nu}) K_{1\nu}^l \cos \delta_{1\nu} (k_\nu/k_1)^{1/2}$  - амплитуда,  $J_l(k_1 r)$  и  $n_l(k_1 r)$  - сферические функции Бесселя и Неймана. Парциальная матрица реакции  $K=K^l(E)$  выражается следующим образом:



$$K_{11}^L = \text{tg} \delta_1,$$

$$K_{1V}^L = -(k_1/k_V)^{1/2} \frac{\psi_1^{(V)}(r_{\max}) [\cos \delta_V j_1(k_V r_{\max}) - \sin \delta_V n_1(k_V r_{\max})]}{\psi_V^{(V)}(r_{\max}) n_1(k_V r_{\max}) \cos \delta_V}.$$

Данная постановка была дополнена интегральными условиями на волновые функции  $\psi(r, k, l)$ , для построения которых используется вариационный функционал

$$\mathcal{F}(\psi) = (\psi, (L + K^2)\psi). \quad (5)$$

В предложенной схеме была использована разностная аппроксимация задачи (1)-(5) второго порядка точности относительно шага  $h$  квазиравномерной сетки  $\Omega_h$ .

В настоящей работе проводится обобщение этой схемы путем введения аппроксимации  $n$ -го порядка точности ( $n > 2$ ) на квазиравномерной сетке  $\Omega_h$ , где  $h$  - характерный шаг сетки. Особенностью предлагаемого подхода является представление <sup>/2/</sup> разностного оператора  $D_h^{(n)}$  в виде суммы

$$D_h^{(n)} = D_h^{(2)} + (D_h^{(n)} - D_h^{(2)}) = D_h^{(2)} + \Delta_h^{(n)}. \quad (6)$$

Итерационный процесс строится таким образом, что на каждой итерации обращается лишь простой трехдиагональный оператор  $D_h^{(2)}$ , а слагаемое  $\Delta_h^{(n)}$  рассматривается как возмущение этого оператора. Оно включается в ходе итерационного процесса постепенно с помощью введения в представление (6) функции управления  $g(t)$

$$D_h^{(n)}(t) = D_h^{(2)}(t) + g(t)\Delta_h^{(n)}(t), \quad (7)$$

удовлетворяющей граничным условиям  $g(0)=0$  и  $g(t \rightarrow \infty)=1$ . Здесь  $0 < t < \infty$  - дополнительный параметр в эволюционном уравнении непрерывного аналога метода Ньютона <sup>/3/</sup>.

В качестве приложения рассмотрена задача рассеяния мезоатомов в рамках простого адиабатического подхода. Проведены расчеты сечений мезоатомных процессов упругого и неупругого рассеяния <sup>/4/</sup>

$$(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d, \quad t + (d\mu)_{1s}. \quad (8a)$$

$$(d\mu)_{1s} + t \rightarrow d + (t\mu)_{1s}, \quad (d\mu)_{1s} + t. \quad (8b)$$

$$p\mu(F=0) + p \rightarrow p\mu(F=0) + p, \quad p\mu(F=1) + p. \quad (9a)$$

$$p\mu(F=1) + p \rightarrow p\mu(F=0) + p, \quad p\mu(F=1) + p. \quad (9b)$$

Дано сравнение полученных результатов с другими работами.

## 2. Итерационная схема

Система уравнений (1) на отрезке  $r_{\min} \leq r \leq r_{\max}$

$$\phi^{(1)} = (L + K^2)\phi(r) = 0, \quad (10)$$

с приближенными граничными условиями

$$\phi^{(2)} = (A_1 \frac{d}{dr} + B_1)\phi(r) \Big|_{r=r_{\min}} = 0, \quad (11)$$

$$\phi^{(3)} = (A_2 \frac{d}{dr} + B_2)\phi(r) \Big|_{r=r_{\max}} = 0, \quad kr_{\max} \gg 1, \quad (12)$$

аппроксимирующими асимптотические условия (2)-(4), доопределенная двумя интегральными условиями <sup>/1/</sup>:

$$\phi^{(4)} = (\psi, \phi^{(1)}(k, \psi)) = 0, \quad (13)$$

$$\phi^{(5)} = (\psi, \phi^{(1)}(k_*, \psi)) = 0, \quad (14)$$

может быть рассмотрена как нелинейное функциональное уравнение

$$\Phi(z) = 0, \quad (15)$$

где  $\Phi = \{\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \phi^{(3)}, \phi^{(4)}, \phi^{(5)}\}$  - пятикомпонентная нелинейная функция, а неизвестный элемент  $z$  представляет собой вектор  $z = \{k, \psi, \delta\}$ .

Для отыскания решения  $z_*$  уравнения (15) при заданном векторе импульсов  $k_*$  используется обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона:

$$\begin{cases} \Phi'_1(t, z(t)) + \Phi'_2(t, z(t))z'(t) = -\Phi(t, z(t)), \\ z(0) = z_0, \quad 0 \leq t < \infty, \end{cases} \quad (16)$$

где  $z_0$  - начальное приближение к искомому решению  $z_* = \{k_*, \psi_*, \delta_*\}$ .

Представим оператор  $\Phi$  в виде суммы двух операторов  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  посредством функции включения возмущения  $g(t)$

$$\Phi(t, z(t)) = \Phi_1(z(t)) + g(t)\Phi_2(z(t)), \quad (17)$$

где  $g(t)$  - непрерывная функция, удовлетворяющая условиям:  $g(0) = 0, g(\infty) = 1$ . Заметим, что при решении задачи (10)-(14) в работе <sup>/5/</sup> в качестве  $\Phi_1$  выбиралась квазидиагональная часть



$$\begin{cases} (D_h^{(n)} + \lambda_k - P(r_1)) v_k^{(2)}(r_1) = -\phi_k(r_1); \quad 1=2, \dots, N-1; \\ (A_1 d_h^{(2)} + B_1) v_k^{(2)}(r_1) = [-\frac{\partial A_1}{\partial \lambda} d_h^{(2)} - \frac{\partial B_1}{\partial \lambda}] \phi_k(r_1); \\ (A_2 d_h^{(2)} + B_2) v_k^{(2)}(r_N) = [-\frac{\partial A_2}{\partial \lambda} d_h^{(2)} - \frac{\partial B_2}{\partial \lambda}] \phi_k(r_N); \end{cases} \quad (24)$$

$$\begin{cases} (D_h^{(2)} + \lambda_k - P(r_1)) v_k^{(3)}(r_1) = 0; \quad 1=2, \dots, N-1; \\ (A_1 d_h^{(2)} + B_1) v_k^{(3)}(r_1) = [-\frac{\partial A_1}{\partial \delta} d_h^{(2)} - \frac{\partial B_1}{\partial \delta}] \phi_k(r_1); \\ (A_2 d_h^{(2)} + B_2) v_k^{(3)}(r_N) = [-\frac{\partial A_2}{\partial \delta} d_h^{(2)} - \frac{\partial B_2}{\partial \delta}] \phi_k(r_N). \end{cases} \quad (25)$$

Функция включения возмущения на полюсе  $0 < t < \infty$  выбрана следующим образом:

$$g(t) = 1 - \exp(-t).$$

Краевые задачи (23)–(25) в процессе итераций решаются методом трехточечной прогонки. Соответствующие системы линейных алгебраических уравнений на каждой итерации отличаются лишь правыми частями, что позволяет экономить ресурсы ЭВМ. В результате решения трех краевых задач (23)–(25) на  $k$ -ой итерации получаем значения итерационных поправок  $v_k^{(1)}$ ,  $v_k^{(2)}$ ,  $v_k^{(3)}$ . Остальные неизвестные параметры находятся по формулам, следующим из интегральных условий (13)–(14):

$$\eta_k = \eta_{1k} + \eta_{2k} \mu_k, \quad (26)$$

$$\mu_k = -\frac{\phi^{(5)}(\psi_k) + \phi^{(5)}_\psi(-\psi_k + v_k^{(1)}) + \phi^{(5)}_\psi(v_k^{(3)}) \eta_k}{\phi^{(5)}_\psi(v_k^{(3)}) \eta_{2k} + \phi^{(5)}_\psi(v_k^{(2)})}, \quad (27)$$

$$\eta_{1k} = -\frac{\phi^{(4)}(\psi_k) + \phi^{(4)}_\psi(-\psi_k + v_k^{(1)})}{\phi^{(4)}_\psi(v_k^{(3)})}, \quad (28)$$

$$\eta_{2k} = -\frac{\phi^{(4)}(\psi_k) + \phi^{(4)}_\psi(v_k^{(2)})}{\phi^{(4)}_\psi(v_k^{(3)})}. \quad (29)$$

Тогда итерационная поправка  $V_k$  к решению  $\phi_k$  определяется следующим образом:

$$V_k = v_k^{(1)} + v_k^{(2)} \mu_k + v_k^{(3)} \eta_k - \phi_k.$$

В функционалах  $\phi^{(4)}$  и  $\phi^{(5)}$  применяется разностная аппроксимация

дифференциальных операторов порядка  $O(h^n)$  и соответствующая квадратурная формула интегрирования.

Сходимость итерационного процесса контролируется по значениям невязки

$$\varepsilon_k = \max \left\{ \|\phi_k^{(1)}\|_{C^2}, |\phi_k^{(2)}|, |\phi_k^{(3)}|, |\phi_k^{(4)}|, |\phi_k^{(5)}| \right\}.$$

Ньютоновский итерационный процесс заканчивается при выполнении условия  $\varepsilon_k < \varepsilon$ , где  $\varepsilon > 0$  – наперед заданное достаточно малое число. Проверку выполнения этого условия для  $|\phi_k^{(4)}|$  и  $|\phi_k^{(5)}|$ , как следует из вариационного принципа Хюльтена, можно заменить условиями на соответствующие итерационные поправки /1/:

$$|\mu_k| \approx \left| \frac{d\mu}{dt} \right|_{t=t_k} < \varepsilon \quad \text{и} \quad |\eta_k| \approx \left| \frac{d\eta}{dt} \right|_{t=t_k} < \varepsilon.$$

Для выбора итерационного шага  $\tau_k$  было использовано обобщение алгоритма /7/.

Представленная итерационная схема при  $n=6$  была всесторонне протестирована в случае одноканального рассеяния в работе /6/. Явный вид операторов численного дифференцирования порядка  $O(h^6)$  в зависимости от выбора узла сетки  $r_1$  приводится в работах /6, 8/. Соответственно при вычислении скалярных произведений в интегральных условиях (13)–(14) и в выражениях (27)–(29) использовалась квадратура Боде /9/ точности  $O(h^6)$ . В расчетах задавалось  $\varepsilon = 10^{-10} \div 10^{-12}$ .

В данной работе рассматривается применение предложенного алгоритма в двухканальной задаче рассеяния как с одним, так и с двумя открытыми каналами, для расчета параметров реакций (8)–(9). Вычисления были выполнены на персональной ЭВМ типа IBM PC AT-386 под управлением системы MS-DOS.

#### 4. Расчеты характеристик мезоатомных процессов рассеяния

В настоящее время задача мезоатомных столкновений в смеси изотопов водорода является предметом интенсивных исследований /10–14/. Знание сечений этих реакций в интервале энергии столкновения от 0.001эВ до 50эВ необходимо для описания кинетики процессов мюонного катализа ядерных реакций синтеза /15/. Первые систематические расчеты сечений процессов рассеяния мезоатомов

типа (8)-(9) были выполнены в работе /4/ в "простом" двухуровневом адиабатическом приближении /16/.

Однако при малых энергиях в диапазоне от 0.001эВ до 0.1эВ, весьма интересном для физики мезоатомных столкновений, разработанные ранее численные процедуры не позволяют получить надежные результаты. Поэтому для нас представляет особый интерес проверить работу предложенной вычислительной схемы в указанном диапазоне.

В уравнениях (1), соответствующих двухуровневому простому подходу, потенциалы  $P(r)$  и  $Q(r)$  вычислены в работе /17/.

В случае процессов типа (8а), (9а), т.е. при решении задачи рассеяния с одним открытым каналом ( $N_0=1$ ), парциальные сечения  $\sigma_{11}^l$  вычисляются по формуле:

$$\sigma_{11}^l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(K_{11}^l)^2}{1+(K_{11}^l)^2}.$$

Для задачи рассеяния типа (8б), (9б) с двумя открытыми каналами ( $N_0=2$ ) используется следующая формула для вычисления парциальных сечений:

$$\sigma_{1j}^l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\delta_{1j} D_l^2 + (K_{1j}^l)^2}{(D_l - 1)^2 + (K_{11}^l + K_{22}^l)^2}, \quad \text{где } D_l = K_{11}^l K_{22}^l - (K_{12}^l)^2.$$

Из теории одноканального рассеяния /18/ известно разложение, из которого можно определить длину рассеяния  $a$ :

$$kK^{-1} = -a^{-1} + 3M\pi(2a^2)^{-1}k + 3Ma^{-1}k^2 \ln\left(\frac{9Mk^2}{32}\right), \quad (30)$$

где  $M$  - эффективная масса, определение которой для реакций (8) и (9) дано в работе /16/. С другой стороны, длину рассеяния при помощи представленного алгоритма легко найти следующим образом:

$$a \approx -\partial\delta/\partial k \text{ при достаточно малых } k.$$

При проведении расчетов была выбрана система единиц  $m_a = e = \hbar = 1$ ,  $m_a^{-1} = m_\mu^{-1} + M_b^{-1}$ ,  $M_a \geq M_b$ ,  $a, b = t, d, p$ , и использованы следующие значения масс мюона, дейтрона и трития:  $m_\mu = 206.769 m_e$ ,  $M_p = 1836.152 m_e$ ,  $M_d = 3670.481 m_e$ ,  $M_t = 5496.918 m_e$  (здесь  $m_e$  - масса электрона), а также константы Ридберга  $Ry = 13.6058$  эВ. Решение системы двух уравнений проводилось на квазиравномерной сетке  $\Omega_n$  следующего вида:  $\{0.1(0.1)20(0.5)r_{\max}\}$ . С уменьшением значения энергии  $E_1 = k_1^2/2M$  и ростом орбитального момента  $l$  было

необходимо увеличивать значение правой границы радиальной переменной  $r_{\max}$  с целью сохранения требуемой точности вычислений.

В таблице 1 приведены результаты расчета парциальных сечений  $\sigma_{11}^l$ , фаз рассеяния  $\delta = \delta_1$  и матричных элементов  $K_{11}^l = \text{tg}\delta$  для реакции упругого рассеяния мезоатомов трития на дейтронах:

$$(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d, \quad (31)$$

т.е. задачи с одним открытым каналом при значениях полного орбитального момента  $l = 0, 1, 2, 3$  в диапазоне энергии  $E = E_1$  от 0.001эВ до 46.0эВ. Граница интервала  $r_{\max}$  выбирается согласно известному соотношению:

$$r_{\max} \gg (\frac{\pi l}{2} + 1) / k.$$

Оценки снизу для  $r_{\max}$  при различных  $k$  (соответствующая энергия столкновения  $0.001\text{эВ} \leq E \leq 0.3\text{эВ}$ ) и  $l=0, 1, 2, 3$  приведены в таблице 2. В скобках указаны значения  $r_{\max}$ , используемые нами в расчетах параметров рассеяния реакции (31), которые выбирались из условия установления требуемого числа значащих цифр в фазе рассеяния. Такое установление происходит в случае, когда длина интервала интегрирования  $[0; r_{\max}]$  сравнима или превышает период асимптотического решения  $\psi_1^{(\nu)}(r)$ ;  $1, \nu=1, 2$ . Из таблицы 2 видно, что для расчета параметров рассеяния при  $l \geq 1$  и энергиях  $E \leq 0.05\text{эВ}$  с точностью порядка  $10^{-4} \div 10^{-5}$  необходимо увеличивать область интегрирования вплоть до  $r_{\max} = 6000$ . Результаты вычислений совпадают с расчетами /4/ для энергий:  $E \geq 0.005\text{эВ}$  при  $l=0$ ,  $E \geq 0.05\text{эВ}$  при  $l=1$ ,  $E \geq 0.3\text{эВ}$  при  $l=2, 3$ . Правильное монотонное поведение парциальных матричных элементов  $K^l$  получено нами в интервале энергии столкновения  $0.001\text{эВ} \leq E \leq 0.3\text{эВ}$  для значений полного орбитального момента  $l=0, 1, 2, 3$ . Количественные и качественные отличия с работой /4/ в поведении матричных элементов  $K_{11}^l$  и фаз рассеяния  $\delta$  при более низких энергиях связаны либо с недостаточной областью интегрирования по радиальной переменной, либо с погрешностью использованного там метода. Приведенные нами значения парциальных сечений при низких энергиях для малых значений полного орбитального момента ( $l=0, 1$ ) согласуются с результатами многоканального расчета /14/.

При  $l=0$  было определено значение длины рассеяния  $a$  двумя способами: а) по формуле (30) получено:  $a \approx 3.48$ , и б)  $a \approx -\partial\delta/\partial k \approx 3.44 \div 3.52$  при  $E \in 0.0001 \div 0.001\text{эВ}$ . Зависимость производной  $\partial\delta/\partial k$  фазы рассеяния от энергии столкновения  $E(\text{эВ})$  для упругого рассеяния (31) при нулевом полном орбитальном моменте  $l=0$

представлена на рис. 1. Длине рассеяния здесь соответствует предел  $\lim -\delta\delta/\delta k$  при  $E \rightarrow 0$ .

Зависимость парциальных сечений  $\sigma_{11}^l$  ( $10^{-20}$  см<sup>2</sup>) упругого рассеяния (31) от энергии столкновения  $E$  (эВ) при значениях полного орбитального момента  $l=0,1,2,3$  изображена на рис.2, а на рис.3 показано соответствующее поведение элементов  $K_{11}^l$  матрицы упругого рассеяния (31) в зависимости от энергии столкновения  $E$  (эВ) при  $l=0,1,2,3$ . Как видно из этих рисунков, определяющий вклад в сечение при малых энергиях вносят величины, вычисленные при значениях полного орбитального момента  $l=0$  и 1.

В таблицах 3,4 представлены расчеты матричных элементов  $K_{1j}^l$  и соответствующих парциальных сечений  $\sigma_{1j}^l$ ,  $j=1,2$  реакций (8а,б), т.е. задачи рассеяния с двумя открытыми каналами выше второго порогового значения  $E_2 - E_1 = \Delta E = 48.0419$  эВ мезомолекулярной системы  $(t, d, \mu)$  при  $l=0$  и 1. Все сказанное выше относительно выбора границы области интегрирования справедливо и в этом случае. Графики волновых функций  $\psi_1^{(1)}(r)$ ,  $\psi_2^{(1)}(r)$ ,  $\psi_1^{(2)}(r)$ ,  $\psi_2^{(2)}(r)$  системы уравнений (10)-(14), соответствующих рассеянию (8а,б) с двумя открытыми каналами при энергии столкновения  $E = E_2 = 0.3$  эВ, отсчитанной от порогового значения  $\Delta E = 48.0419$  эВ,  $l=0$ , приведены на рис.4 и 5. На рис.5а) изображены волновые функции реакции  $d\mu + t$ , вычисленные при значениях  $E = 0.005$  эВ,  $l=1$ ,  $r_{\max} = 1200$ . Из сравнения рис.5 и 5а) можно сделать вывод о том, что область интегрирования должна быть сопоставима с периодом соответствующей асимптотической волновой функции.

В таблице 5 приведены значения  $K_{11}^0$  и  $\sigma_{11}^0$  при полном орбитальном моменте  $l=0$  в реакции упругого рассеяния  $p\mu(F=0) + p \rightarrow p\mu(F=0) + p$ ,  $s=1/2$  - значение полного спина. В таблице 6 представлены соответствующие параметры рассеяния реакций (9а,б) упругого рассеяния и переворота спина (spin-flip) системы  $p, p, \mu$   $s=1/2$  выше порога сверхтонкого расщепления  $\Delta E_{\text{hfs}} = 0.182$  эВ. Полученные результаты совпадают с расчетами /4/ с относительной точностью  $10^{-3} \div 10^{-4}$ . Зависимость парциального сечения  $\sigma_{11}^0$  ( $10^{-19}$  см<sup>2</sup>) упругого рассеяния (9а) с одним открытым каналом и реакции (9а) с двумя открытыми каналами от энергии столкновения  $E$  (эВ) приведена в логарифмическом масштабе на рис.6. Графики волновых функций  $\psi_1^{(1)}(r)$ ,  $\psi_2^{(1)}(r)$ ,  $\psi_1^{(2)}(r)$ ,  $\psi_2^{(2)}(r)$  системы уравнений (10)-(14), описывающие рассеяние (9а,б) с двумя открытыми каналами при энергии столкновения  $E = E_2 = 10.0$  эВ, отсчитанной от порогового значения  $\Delta E_{\text{hfs}} = 0.182$  эВ,  $l=0$ , изображены на рис.7 и 8.

Таблица 1. Параметры рассеяния, рассчитанные для реакции  $(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d$ ,  $l=0,1$

E (эВ)	параметр рассеяния	l = 0		l = 1	
		наст. раб.	/4/	наст. раб.	/4/
0.001	$K_{11}^l$	-0.7279e-2		0.1913e-4	
	$\delta$	-0.7279e-2	-0.729e-2	0.1913e-4	0.142e-3
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	11.366e-20		2.3538e-24	
0.005	$K_{11}^l$	-0.1680e-1		-0.5319e-4	
	$\delta$	-0.1680e-1	-0.168e-1	-0.5319e-4	-0.629e-4
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	12.115e-20		3.6410e-24	
0.01	$K_{11}^l$	-0.2429e-1		-0.3223e-3	
	$\delta$	-0.2429e-1	-0.243e-1	-0.3223e-3	-0.356e-3
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	12.651e-20		6.6866e-23	
0.05	$K_{11}^l$	-0.5861e-1		-0.5574e-2	
	$\delta$	-0.5861e-1	-0.587e-1	-0.5574e-2	-0.557e-2
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	14.719e-20		3.9989e-21	
0.10	$K_{11}^l$	-0.8670e-1		-0.1545e-1	
	$\delta$	-0.8692e-1	-0.869e-1	-0.1545e-1	-0.155e-1
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	16.082e-20		1.5357e-20	
0.30	$K_{11}^l$	-0.1632		-0.6133e-1	
	$\delta$	-0.1647	-0.165	-0.6141e-1	-0.614e-1
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	18.879e-20		8.0581e-20	
1.0	$K_{11}^l$	-0.3279		-0.1906	
	$\delta$	-0.3402	-0.340	-0.1906	-0.193
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	22.249e-20		23.084e-20	
10.0	$K_{11}^l$	0.1151e+1		-0.7806	
	$\delta$	0.2242e+1	-0.224e+1	-0.9905	-0.990
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	3.5857e-20		16.029e-20	
40.0	$K_{11}^l$	0.9575		-0.1511e+1	
	$\delta$	0.1421e+1	0.142e+1	-0.1664e+2	-0.166e+2
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	3.5857e-20		16.029e-20	
46.0	$K_{11}^l$	0.8276		0.1536e+1	
	$\delta$	0.1088e+1	0.109e+1	0.2906e+2	0.290e+2
	$\sigma^l$ (см <sup>2</sup> )	2.5282e-20		13.972e-20	

Таблица 1. Параметры рассеяния, рассчитанные для  
(продолжение) реакции  $(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d$ ,  $l=2,3$

E (эВ)	параметр рассеяния	l = 2		l = 3	
		наст. раб.	/4/	наст. раб.	/4/
0.001	$K_{11}^l$	0.6218e-5		0.2055e-5	
	$\delta$	0.6218e-5	0.153e-3	0.2055e-5	0.153e-3
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	4.1482e-25		6.3413e-26	
0.005	$K_{11}^l$	0.3119e-4		0.1039e-4	
	$\delta$	0.3119e-4	0.718e-4	0.1039e-4	0.686e-4
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	2.0859e-24		3.2425e-25	
0.01	$K_{11}^l$	0.6238e-4		0.2080e-4	
	$\delta$	0.6238e-4	0.646e-4	0.2080e-4	0.492e-4
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	4.1731e-24		6.4935e-25	
0.05	$K_{11}^l$	0.3121e-3		0.1040e-3	
	$\delta$	0.3121e-3	0.311e-3	0.1040e-3	0.867e-4
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	2.0888e-23		3.2447e-24	
0.10	$K_{11}^l$	0.6246e-3		0.2079e-3	
	$\delta$	0.6246e-3	0.623e-3	0.2079e-3	0.211e-3
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	4.1837e-23		6.4912e-24	
0.30	$K_{11}^l$	0.1879e-2		0.6241e-3	
	$\delta$	0.1879e-2	0.188e-2	0.6241e-3	0.624e-3
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	1.2625e-22		1.9951e-23	
1.0	$K_{11}^l$	0.6330e-2		0.2085e-2	
	$\delta$	0.6330e-2	0.633e-2	0.2085e-2	0.209e-2
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	4.2982e-22		6.5573e-23	
10.0	$K_{11}^l$	0.7017e-1		0.2637e-1	
	$\delta$	0.7028e-1	0.703e-1	0.2638e-1	0.264e-1
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	5.2718e-21		1.0442e-21	
40.0	$K_{11}^l$	0.3620		-0.1224	
	$\delta$	0.3786	0.379	-0.1230	-0.123
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	3.3618e-20		5.5973e-21	
46.0	$K_{11}^l$	0.4409		-0.1323	
	$\delta$	0.4719	0.472	-0.1330	-0.133
	$\sigma^l(\text{см}^2)$	4.2464e-20		5.6760e-21	

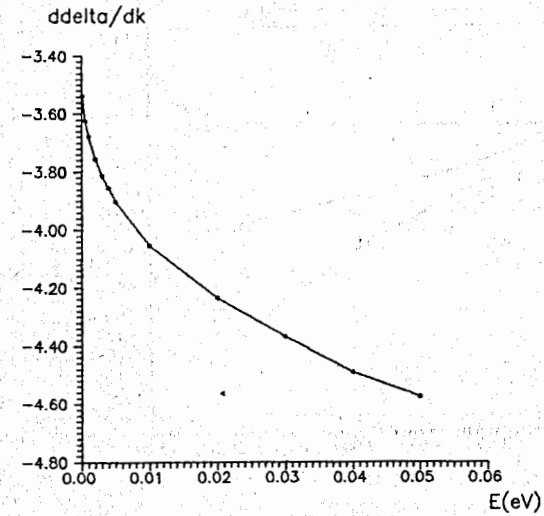


Рис.1. Зависимость производной фазы рассеяния  $\delta\delta/\delta k$  от энергии столкновения  $E$  (эВ) для упругого рассеяния  $(t\mu)_{1s} + d \rightarrow (t\mu)_{1s} + d$  (31) при нулевом полном орбитальном моменте  $l=0$ .

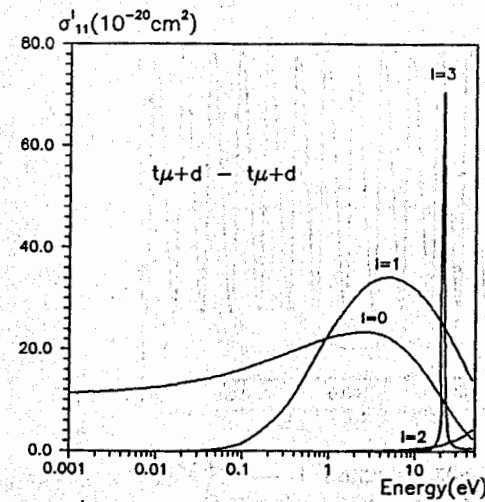


Рис.2. Зависимость парциальных сечений  $\sigma_{11}^l (10^{-20} \text{см}^2)$  упругого рассеяния (31) от энергии столкновения  $E$  (эВ) при значениях полного орбитального момента  $l=0, 1, 2, 3$ .



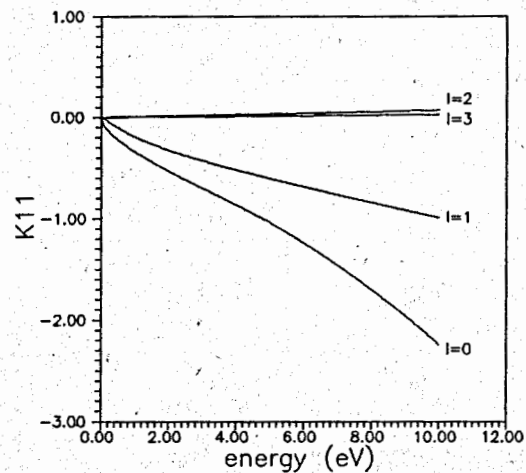


Рис.3. Зависимость элементов  $K_{11}^l$  матрицы упругого рассеяния (31) от энергии столкновения  $E$  (эВ) при значениях полного орбитального момента  $l=0, 1, 2, 3$ .

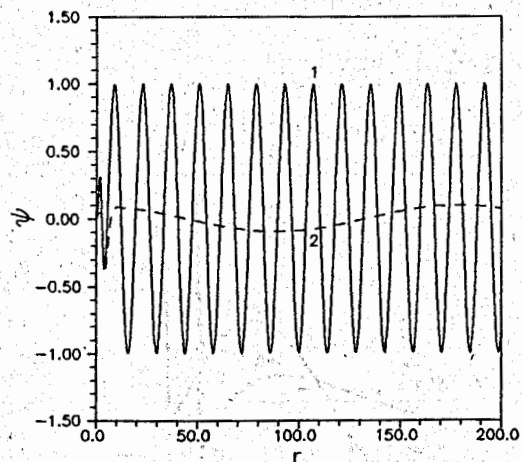


Рис.4. Графики радиальных функций 1 —  $\psi_1^{(1)}(r)$  и 2 —  $\psi_2^{(1)}(r)$  системы уравнений (10)–(14), соответствующих рассеянию  $t\mu + d$  (8a) с двумя открытыми каналами при энергии столкновения  $E=0.3\text{эВ}$ ,  $l=0$ .

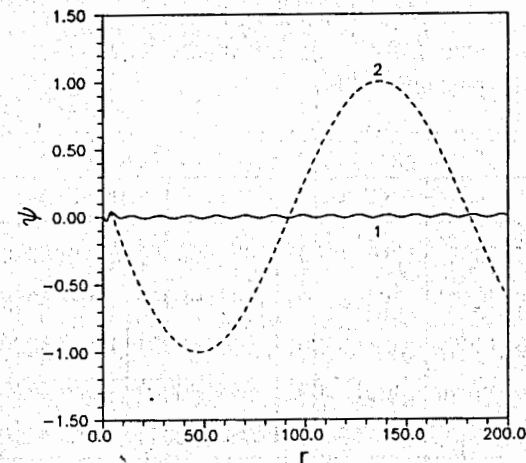


Рис.5. Графики радиальных функций 1 —  $\psi_1^{(2)}(r)$  и 2 —  $\psi_2^{(2)}(r)$  системы уравнений (10)–(14), соответствующих рассеянию  $d\mu + t$  (8б) с двумя открытыми каналами при той же энергии столкновения  $E=0.3\text{эВ}$  (отсчитанной от второго порога),  $l=0$ .

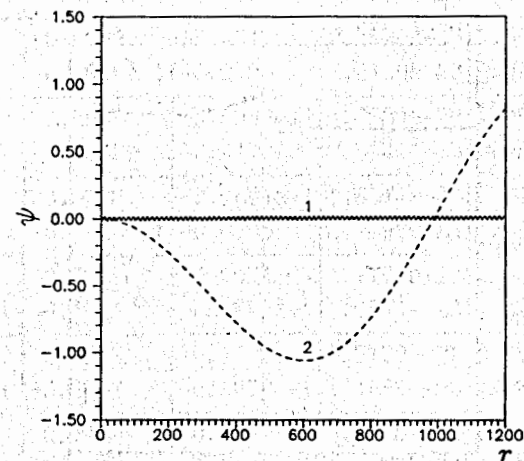


Рис.5а. Графики радиальных функций 1 —  $\psi_1^{(2)}(r) \times 10$  и 2 —  $\psi_2^{(2)}(r)$  системы уравнений (10)–(14), соответствующих рассеянию  $d\mu + t$  (8б) с двумя открытыми каналами при энергии столкновения  $E=0.005\text{эВ}$  (отсчитанной от второго порога),  $l=1$ .

Таблица 2. Зависимость нижней границы  $r_{\max}$  от энергии  $E$  (эВ) и орбитального момента  $l$  для реакций ( 8а, б )

E (эВ)	l			
	0	1	2	3
0.001	492(2000)	1265(4000)	2037(6000)	2810(6000)
0.002	348(2000)	894(3000)	1441(6000)	1987(6000)
0.005	220(1500)	566(3000)	911(6000)	1257(6000)
0.010	156(1500)	400(2000)	644(4000)	889(5000)
0.050	70(1500)	179(2000)	288(4000)	397(4000)
0.100	49(1000)	126(1500)	204(2000)	281(3000)
0.300	28(1000)	73(1500)	118(2000)	162(2000)

В скобках указаны значения  $r_{\max}$ , использованные в расчетах реакции ( 31 )

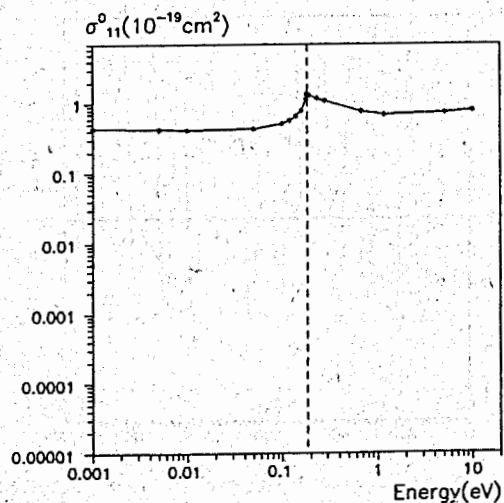


Рис. 6. Зависимость парциального сечения  $\sigma_{11}^0$  ( $10^{-19} \text{cm}^2$ ) упругого рассеяния ( 9а ) с одним открытым каналом и реакции ( 9а ) с двумя открытыми каналами от энергии столкновения  $E$  (эВ) (отсчитанной от первого порога).

Таблица 3. Параметры рассеяния для реакций ( 8а, б ) при  $l=0$

E (эВ)	$K_{11}^l, K_{12}^l$ ;	$K_{21}^l, K_{22}^l$	$\sigma_{11}^l, \sigma_{12}^l$ ;	$\sigma_{21}^l, \sigma_{22}^l$
0.001	0.1004e+1	-0.9540e-2	2.2413e-20	9.7185e-20
	-0.9541e-2	-0.3079e-2	2.0236e-24	2.0949e-20
0.005	0.1004e+1	-0.1425e-1	2.2406e-20	4.3335e-20
	-0.1425e-1	-0.7152e-2	4.5109e-24	2.2569e-20
0.01	0.1004e+1	-0.1691e-1	2.2398e-20	3.0539e-20
	-0.1691e-1	-0.1054e-1	6.3584e-24	2.4484e-20
0.05	0.1002e+1	-0.2503e-1	2.2334e-20	1.3392e-20
	-0.2503e-1	-0.2865e-1	1.3928e-23	3.5941e-20
0.10	0.1000e+1	-0.2950e-1	2.2259e-20	9.3064e-21
	-0.2950e-1	-0.4523e-1	1.9340e-23	4.4600e-20
0.30	0.9918	-0.3789e-1	2.1975e-20	5.1194e-21
	-0.3789e-1	-0.9524e-1	3.1778e-23	6.5151e-20
0.50	0.9837	-0.4236e-1	2.1698e-20	3.8338e-21
	-0.4236e-1	-0.1354	3.9501e-23	7.8104e-20
1.0	0.9639	-0.4915e-1	2.1026e-20	2.5563e-21
	-0.4915e-1	-0.2186	5.2139e-23	9.8652e-20
3.0	0.8898	-0.6342e-1	1.8533e-20	1.3601e-21
	-0.6342e-1	-0.4172	7.9943e-23	1.0646e-19
5.0	0.8228	-0.7421e-1	1.6314e-20	9.4797e-22
	-0.7421e-1	-0.6895	8.9392e-23	1.3835e-19
10.0	0.6783	-0.1051	1.1704e-20	6.1004e-22
	-0.1051	-0.1277e+1	1.0514e-23	1.2358e-19
20.0	0.4477	-0.2737	5.5732e-21	3.9073e-22
	-0.2737	-0.3972e+1	1.1489e-22	1.0021e-19
40.0	0.1739	0.2292	5.9376e-22	2.4844e-22
	0.2292	0.3156e+1	1.1292e-22	4.8255e-20
50.0	0.4596e-1	0.1441	3.0225e-23	2.1440e-22
	0.1441	0.1764e+1	1.0938e-22	3.2129e-20

Таблица 4. Параметры рассеяния для реакций (  $\alpha, \beta$  ) при  $l=1$

E (эВ)	$K_{11}^l, K_{12}^l; K_{21}^l, K_{22}^l$	$\sigma_{11}^l, \sigma_{12}^l; \sigma_{21}^l, \sigma_{22}^l$
0.002	0.1588e+2 0.6520e-2	0.6520e-2 0.5863e-4
0.005	0.1588e+2 0.1296e-1	0.1296e-1 0.2313e-3
0.01	0.1586e+2 0.2176e-1	0.2176e-1 0.4757e-3
0.05	0.1575e+2 0.7214e-1	0.7214e-1 0.2210e-2
0.10	0.1559e+2 0.1198e-1	0.1198e-1 0.4393e-2
0.30	0.1501e+2 0.2598	0.2598 0.1283e-1
0.50	0.1446e+2 0.3619	0.3619 0.2060e-1
1.0	0.1322e+2 0.5357	0.5357 0.3566e-1
3.0	0.9642e+1 0.7711	0.7711 0.4776e-1
5.0	0.7471e+1 0.7765	0.7765 0.1402e-2
10.0	0.4713e+1 0.6658	0.6658 -0.1322
20.0	0.2687e+1 0.5298	0.5298 -0.4664
40.0	0.1392e+1 0.5276	0.5276 -0.1308e+1
50.0	0.1071e+1 -0.6285	-0.6285 -0.2012e+1

Таблица 5. Параметры рассеяния для реакции  $p\mu(F=0)+p \rightarrow p\mu(F=0)+p, s=1/2, l=0$

E (эВ)	$K_{11}^l$	$\sigma_{11}^l$
0.001	0.2963e-2	4.3489e-20
0.005	0.6534e-2	4.2296e-20
0.01	0.9181e-2	4.1751e-20
0.05	0.2093e-1	4.3374e-20
0.10	0.3234e-1	5.1741e-20
0.12	0.3736e-1	5.7528e-20
0.14	0.4318e-1	6.5859e-20
0.16	0.5069e-1	7.9353e-20
0.18	0.6473e-1	11.484e-20
0.182	0.7089e-1	13.610e-20

Таблица 6. Параметры рассеяния для реакций (  $\alpha, \beta$  ) при  $s=1/2, l=0$

E (эВ)	$K_{11}^l, K_{12}^l; K_{21}^l, K_{22}^l$	$\sigma_{11}^l, \sigma_{12}^l; \sigma_{21}^l, \sigma_{22}^l$
0.001	0.7101e-1 0.6607e-1	0.6607e-1 0.2672e-1
0.005	0.7148e-1 0.9914e-1	0.9914e-1 0.5947e-1
0.01	0.7205e-1 0.1184e-1	0.1184 0.8372e-1
0.05	0.7604e-1 0.1825e-1	0.1825e-1 0.1820
0.10	0.7980e-1 0.2233	0.2233 0.2500
0.50	0.8543e-1 0.3640	0.3640 0.4648
1.0	0.6900e-1 0.4353	0.4353 0.5470
5.0	-0.1482e 0.5374	0.5374 0.4676
10.0	-0.3897 0.5664	0.5664 0.2623

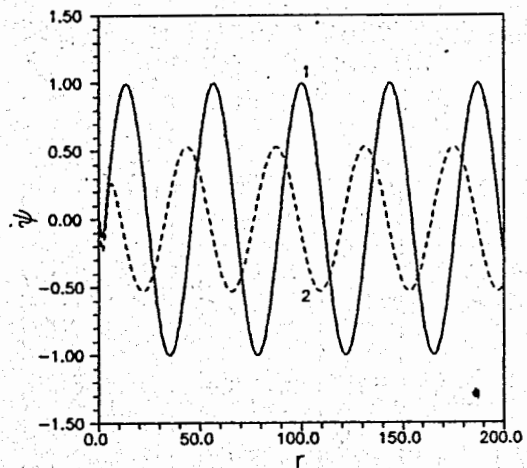


Рис.7. Графики радиальных функций 1 —  $\psi_1^{(1)}(r)$  и 2 —  $\psi_2^{(1)}(r)$  системы уравнений (10)–(14), соответствующих рассеянию  $p\mu + p$  (9a) с двумя открытыми каналами при энергии столкновения  $E=10.0\text{эВ}$  (отсчитанной от второго порога),  $l=0$ .

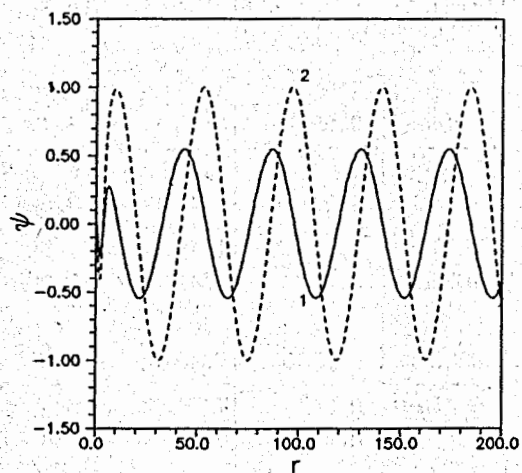


Рис.8. Графики радиальных функций 1 —  $\psi_1^{(2)}(r)$  и 2 —  $\psi_2^{(2)}(r)$  системы уравнений (10)–(14), соответствующих рассеянию  $p\mu + p$  (9б) с двумя открытыми каналами при той же энергии столкновения  $E=10.0\text{эВ}$ ,  $l=0$ .

Проведенные расчеты показывают, что в задачах упругого рассеяния предложенный подход позволяет воспроизвести трудоемкие расчеты с большим числом закрытых каналов /14/.

## 5. Заключение

В данной работе представлена итерационная схема решения многоканальной задачи рассеяния для системы дифференциальных уравнений, использующая аппроксимацию дифференциального оператора высокого порядка точности  $O(h^n)$  относительно шага разностной сетки  $\Omega_h$ . Приложения развитой вычислительной схемы к задаче рассеяния (8)–(9) мезоатомов на ядрах изотопов водорода позволяют устойчиво вычислять с относительной точностью  $\sim 10^{-4}$  сечения реакций как при низких, так и при высоких энергиях в диапазоне  $0.001 \div 50\text{эВ}$ . Применение аппроксимации шестого порядка для дифференциального оператора позволяет достичь требуемой точности при использовании таблично заданных потенциалов /17/ на сетках со сравнительно небольшим числом узлов. Дальнейшее применение метода связано прежде всего с развитием эффективного адиабатического подхода для системы трех тел, учитывающего неадиабатические поправки /19/. Такой подход представляется перспективным, поскольку он позволяет избежать решения задачи рассеяния с большим числом закрытых каналов /14/, которая возникает в традиционном адиабатическом подходе /20/.

## Литература

1. Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. - ЯФ, 1990, т.52, 4(10), с.1176.
2. Виноцкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. Сообщения ОИЯИ, P11-82-314, Дубна, 1982.
3. Puzynin I.V., Vinitzky S.I. - Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.307.
4. Bubak M., Faifman M.P. Communications JINR, E4-87-469, 1987, Dubna.
5. Смирнов Ю.С. Сообщения ОИЯИ, P11-88-912, Дубна, 1988.
6. Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Сообщения ОИЯИ, P11-91-327, Дубна, 1991.
7. Ермаков В.В., Калиткин Н.Н. - ЖВМ и МФ, 1981, т.21, 2, с.491.
8. Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Смирнов Ю.С. Сообщения ОИЯИ, P11-91-141, Дубна, 1991.
9. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стигана И., М.: Наука, 1979.
10. Melezhik V.S. - Muon Catalyzed Fusion, 1987, v.1, p.205.
11. Kobayashi K., Ishihara T., Toshiba N. - Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.2, p.191.
12. Kamimura M. - Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.335.
13. Cohen J.S., Struensee M.S. - Phys.Rev.A, 1991, v.43, 7, p.3460.
14. C.Chiccoli et al. INFN/BE-91/09, Bologna, 1991.
15. Герштейн С.С. и др. - ЖЭТФ, 1981, т.80, с.1990.
16. Пономарев Л.И., Сомов Л.Н., Файфман М.П. - ЯФ, 1979, т.29, 1, с.133.
17. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. Communications JINR E4-83-778, Dubna, 1983.
18. Мотт Н.Ф., Месси Г.Ю. Теория атомных столкновений М.: Мир, 1969.
19. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., Vukailovich F.R. - J.Phys.B, 1980, v.13, p.847.
20. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И. - ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.556.

Рукопись поступила в издательский отдел  
23 марта 1992 года.