

4481

Экз. чит. зала

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



P4 - 4481

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

МЕДЛЕННЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ
В СИСТЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ
ПО ЗАКОНУ КУЛОНА

II. Симметричная перезарядка

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1969

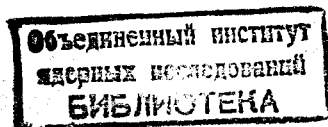
P4 - 4481

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

**МЕДЛЕННЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ
В СИСТЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ
ПО ЗАКОНУ КУЛОНА**

II. Симметричная перезарядка

Направлено в ЖЭТФ



В в е д е н и е

Задача о рассеянии протона на атоме водорода



является простейшим примером рассеяния в системе 3-х тел, взаимодействующих по закону Кулона. Реакция (1) представляет самостоятельный интерес, но помимо этого на ее примере можно проследить особенности более общих задач подобного типа^{/1/}.

При вычислении сечений для процесса (1) наиболее последовательным является метод парциальных волн^{/2,3,4/}, который особенно хорош при малых энергиях столкновений, когда число волн, дающих вклад в сечение, сравнительно невелико. В рамках этого приближения парциальные амплитуды и фазы вычисляют обычно по формулам квазиклассики^{/5,6/}, либо же, если фазы малы, используют борновское приближение^{/7/}.

В более ранних работах использовали также метод прицельного параметра^{/2,8/}. При естественных оговорках оба метода дают разумное приближение, не определяя, однако, его границ.

При медленных столкновениях наиболее последовательной реализацией метода парциальных волн является метод возмущенных стационарных состояний (В.С.С.)^{/2,3/}, корректное применение которого для процессов типа (1) стало возможным после точного решения задачи двух центров^{/9,10,16/}. В данной работе в рамках метода В.С.С. без каких-либо дальнейших приближений вычислены фазы и сечения для реакции (1). При вычислениях использован метод фазовых функций, разработанный сравнительно недавно. Этот метод интенсивно развивается, ему посвящены уже две монографии^{/11,12/}, однако, в практических расчетах он применяется пока сравнительно редко.

Метод возмущенных стационарных состояний

В задаче трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, переменные в уравнении Шредингера полностью разделяются в координатах Якоби^{/1,14/}, что позволяет выделить движение центра инерции системы как целого, относительное движение ядер M_1 и M_2 (вектор \vec{R}) и движение третьей частицы M_3 (электрона) относительно центра тяжести ядер M_1 и M_2 (вектор \vec{r}). После отделения движения центра инерции в методе В.С.С. волновая функция

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{\{n\}} \chi_n(\vec{R}) \phi_n(\vec{R}; \vec{r}) \quad (2)$$

разлагается по полной системе $\{n\}$ собственных функций $\phi_n(\vec{R}; \vec{r})$ задачи двух центров, т.е. задачи о движении частицы M_3 в поле двух неподвижных ядер M_1 и M_2 , удаленных на расстояние R . В случае симметричной перезарядки при малых энергиях столкновения

резонансный характер процесса позволяет ограничиться двухуровневым приближением, т.е. в сумме (2) оставить только два нижних состояния системы $N_2^+ 1s \sigma$ (gerade) и $2p \sigma$ (ungerade) /15/.

В этих предположениях сечение процесса (1) вычисляется по формуле /3,4/:

$$\sigma_{\text{ex}}^{\ell}(k) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell}^{\ell}(k) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2(\delta_{\text{g}}^{\ell} - \delta_{\text{u}}^{\ell}), \quad (3)$$

где $\sigma_{\ell}^{\ell}(k)$ - парциальные сечения резонансной перезарядки, а δ_{g}^{ℓ} и δ_{u}^{ℓ} - парциальные фазы рассеяния, которые определяются из уравнений

$$\frac{d^2}{dR^2} \chi_{\text{g,u}}^{\ell}(R) + [k^2 - V_{\text{g,u}}^{\ell}(R)] \chi_{\text{g,u}}^{\ell}(R) = 0. \quad (4)$$

Здесь $k^2 = 2ME$

$$V_{\text{g,u}}^{\ell}(R) = 2M[W_{\text{g,u}}(R) - W_{\text{g,u}}(\infty)] + [K_{\text{g,u}}(R) - K_{\text{g,u}}(\infty)] + \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} \quad (5a)$$

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}$$

$W_g(R)$ и $W_u(R)$ — термы задачи двух центров в системе единиц $\hbar = c = m = 1$.

$$K_{g,u}^{\ell}(R) = \int d\vec{r} \phi_{g,u}^{\ell}(R; \vec{r}) (-\Delta_{\vec{R}}) [\phi_{g,u}^{\ell}(R; \vec{r})]$$

диагональные матричные элементы оператора ядерного движения по волновым функциям задачи двух центров /10, 16/.

Асимптотика потенциалов $V(R)$ при $R \rightarrow 0$

$$V_g^{\ell}(R) = \frac{2M}{R} + \frac{\ell(\ell+1)}{R^2}, \quad (56)$$

$$V_u^{\ell}(R) = \frac{2M}{R} + \frac{2 + \ell(\ell+1)}{R^2}, \quad (5b)$$

при $R \rightarrow \infty$

$$V(R) = \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} - \frac{9M}{2R^4}.$$

Метод расчёта

При вычислении парциальных фазовых сдвигов $\delta_{g,u}^{\ell}$ использован метод фазовых функций /12, 13/, который позволяет линейное уравнение второго порядка (4) для волновой функции $\chi(R)$ свести к нелинейному уравнению первого порядка для фазовой функции $\delta(R)$

$$\frac{d}{dR} \delta_{g,u}^{\ell} (R) = -\frac{1}{k} V_{g,u}^{\ell} (R) \sin^2 [kR + \delta_{g,u}^{\ell} (R)] \quad (6)$$

с начальными условиями при $R \rightarrow 0$, которые получаются из уравнения (6) с учетом асимптотики потенциалов (55).

$$\delta_{g,u}^{\ell} (R) = k R (a + b R),$$

$$a = -\frac{(2S+1) + \sqrt{4S-1}}{2S}, \quad (7)$$

$$b = -\frac{M(1+a^2)}{1+(1+a)S},$$

$$S = \ell(\ell+1).$$

Для $\delta_{g,u}^{\ell} (R)$ в разложении (7) нужно сделать замену

$$S = \ell(\ell+1) \rightarrow S = 2 + \ell(\ell+1).$$

Искомые фазы рассеяния $\delta_{g,u}^{\ell}$ определяются соотношением

$$\delta_{g,u}^{\ell} = \delta_{g,u}^{\ell} (\infty) + \frac{\pi \ell}{2}. \quad (8)$$

Уравнения (6) интегрировались в интервале энергий $E = 10^{-5} + 5$ эв, особенности вычислений обсуждаются в Приложении.

Обсуждение результатов

1. На рис. 1 и 2 представлены фазы рассеяния δ_g^ℓ и δ_u^ℓ при различных энергиях столкновений. Это гладкие функции, подобные тем, которые обсуждаются в работах /3,17/. При малых энергиях столкновений ($E \leq 0,1$ эв) фаза $\delta_g^\ell = \delta_g(\ell)$ становится разрывной функцией орбитального момента ℓ : от своего первоначального значения $\delta_g^0 \approx 18\pi$ с ростом ℓ она уменьшается до нуля скачками, равными $k\pi$, причем $k=0, 1$.

Причину такого поведения $\delta_g(\ell)$ легко понять, если воспользоваться асимптотическими разложениями фаз рассеяния δ_ℓ для потенциала $V(R) = \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} - \frac{a}{R^4}$ /3,7/ (а - длина рассеяния) при $\ell=0$

$$k \operatorname{ctg} \delta_g^0 = -\frac{1}{a} + \frac{\pi a}{3a^2} k + \frac{2a}{3a} k^2 \ln \frac{ak^2}{16}, \quad (9a)$$

при $\ell \neq 0$

$$k^2 \operatorname{ctg} \delta_\ell = \frac{(2\ell+3)(2\ell+1)(2\ell-1)}{\pi a}. \quad (9b)$$

^{x/} При $\ell=0$ и $k=0$ по теореме Левинсона /12,13/ $\delta_g^0 = n\pi$, где n - число связанных состояний электрона в потенциале V_g . Для симметричного терма системы H_2^+ $n=18$.

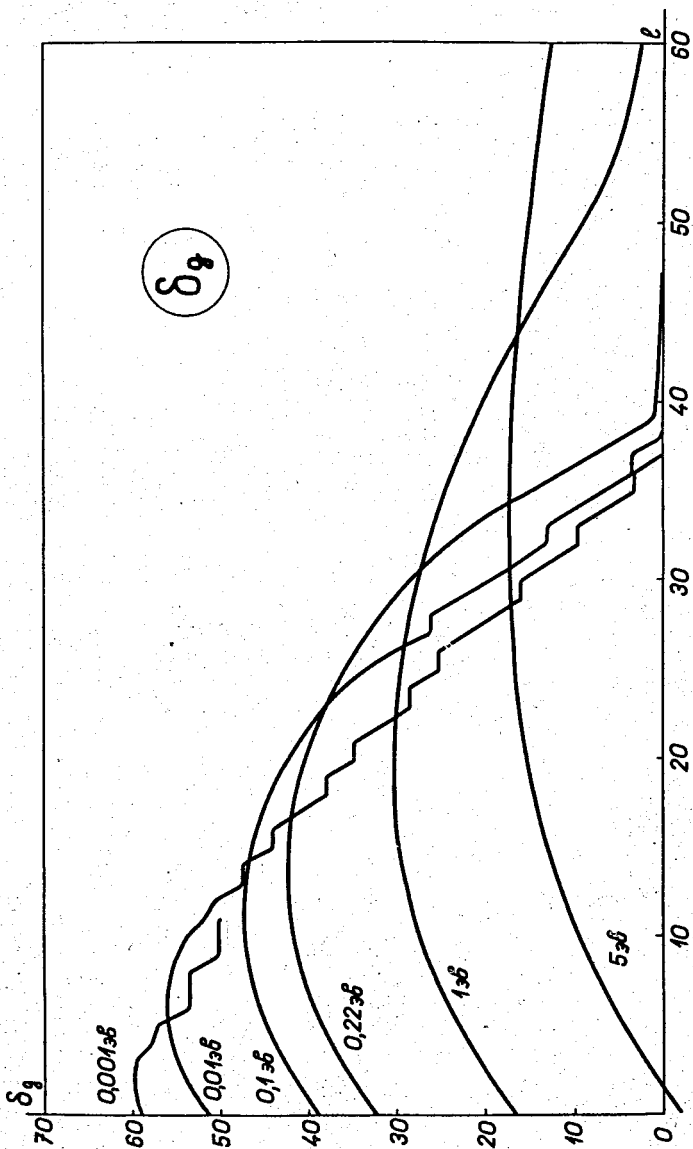


Рис. 1. Фазы рассеяния $\delta_q(\ell)$ в четном канале при различных энергиях столкновений E . При $E < 0,1$ эВ функция $\delta_q(\ell)$ становится ступенчатой.

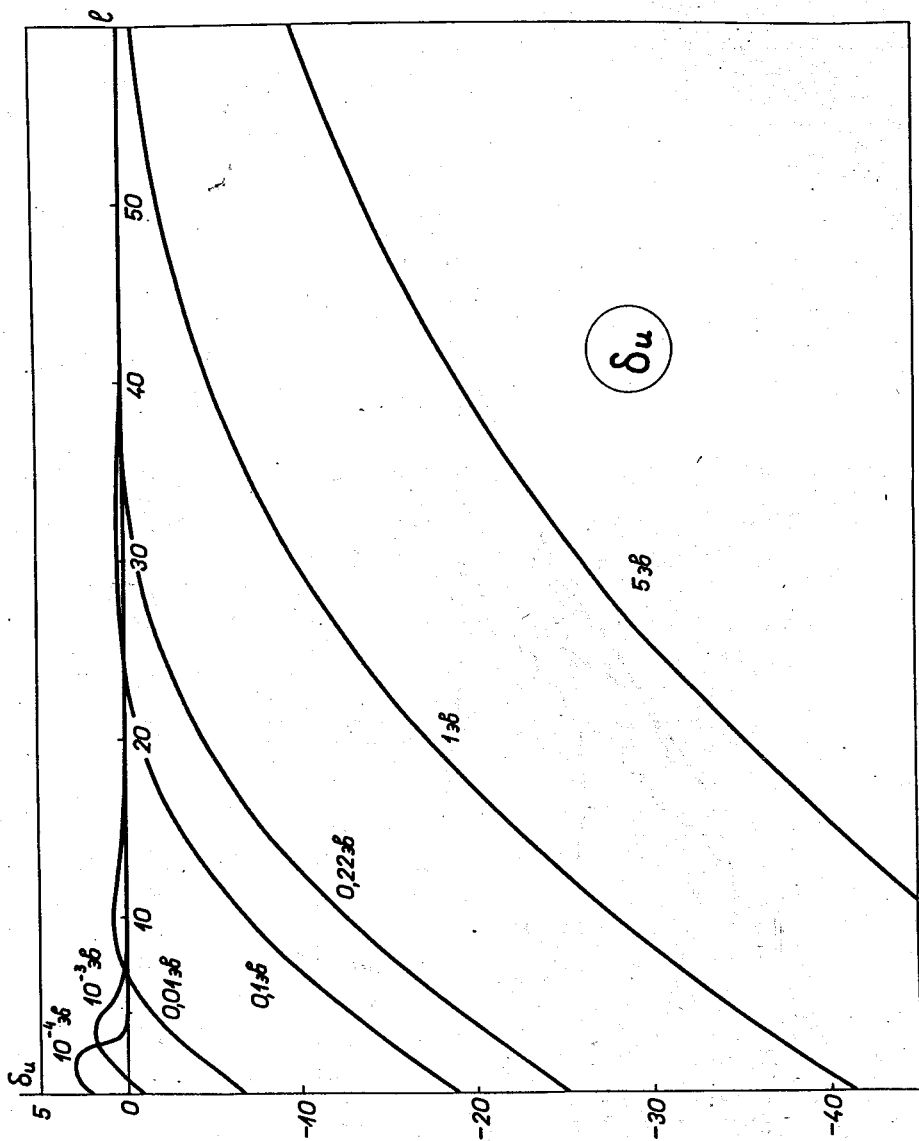


Рис. 2. Фазы рассеяния $\delta_u(\ell)$ в нечётном канале при различных энергиях столкновений E . При $E \rightarrow 0$ слабый положительный максимум функции $\delta_u(\ell)$ смещается в область малых ℓ .

Из (96) следует, что при $k \rightarrow 0$ фаза $\delta_g(\ell)$ может принимать только значения, кратные π . С другой стороны, при $\ell \rightarrow \infty$ по общему правилу $\delta_g(\ell) \rightarrow 0$. Оба эти требования можно совместить лишь в том случае, если, начиная с некоторого $\ell = L$ (которое определяется областью применимости формулы (96)), фаза $\delta_g(\ell)$ будет уменьшаться скачками, кратными π .

Еще резче эта тенденция заметна на графике $\Delta_\ell = \delta_g(\ell) - \delta_u(\ell)$, поскольку в нулевом приближении фазовые сдвиги Δ_ℓ соответствуют рассеянию на экспоненциально убывающем потенциале. Результаты вычислений при $E = 10^{-3}$ эв приведены в Таблице 1.

2. Графики $\delta_u(\ell)$ при различных k обнаруживают характерные особенности другого типа, которые определяются видом потенциала $V_u(R)$. Антисимметричный терм $V_u(R)$ почти везде носит отталкивательный характер - за исключением слабого минимума при $R_0 = 12,55$ глубиной $D = 6,079 \cdot 10^{-5}$ а.е. = $1,6 \cdot 10^{-3}$ эв. В соответствии с этим фазы $\delta_u(\ell)$ при малых ℓ отрицательны^{x/}, но в области больших ℓ имеют слабый положительный максимум. При уменьшении k этот максимум повышается и сдвигается в область малых ℓ . При $E = 10^{-5}$ эв $\delta_u^0 = 3,748$. Согласно теореме Левинсона, это означает, что в антисимметричном состоянии $2p\sigma$ молекулярного тона водорода H_2^+ существует слабосвязанное состояние при больших расстояниях между ядрами. Этот факт может быть интересен химикам и раньше, по-видимому, не отмечался. В приближении потенциала Морса энергия связи J этого уровня равна^{xx/}

^{x/}Связь между знаком фазы δ и знаком потенциала V хорошо видна из уравнения (6).

^{xx/}Этот уровень метастабилен, поскольку переход с него на высоковозбужденные колебательные уровни системы H_2^+ в состоянии $1s\sigma$ сильно затруднен из-за малого перекрытия волновых функций ядерного движения. Представляется интересным выяснить роль этого уровня в биологических молекулах, для структуры которых характерен дальний порядок.

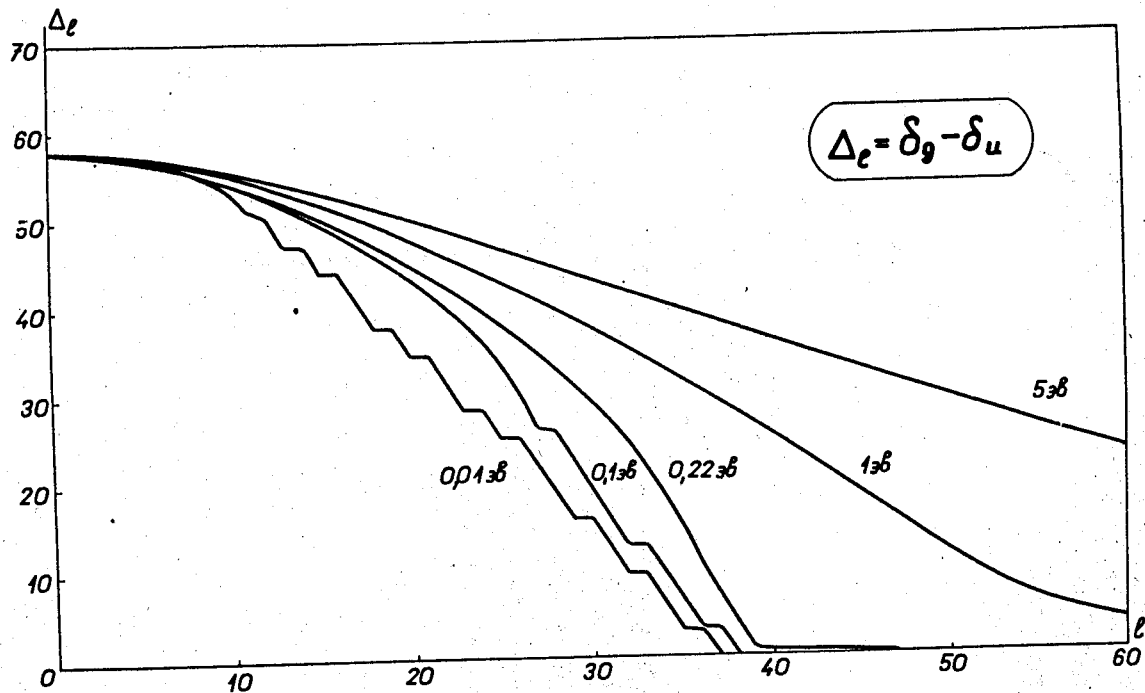


Рис. 3. Функции $\Delta_\ell = \delta_g^\ell - \delta_u^\ell$. Отчётливо виден ступенчатый характер функций при малых энергиях столкновений.

Таблица I

l	δ_g^l	δ_u^l	δ_B	Δ_l	σ_l
0	$18\pi + 1,132$	$-0,721$	—	$19\pi - 1,288$	42,9
1	$19\pi - 0,841$	$0,519$	—	$19\pi - 1,360$	134
2	$19\pi - 0,088$	$1,413$	—	$19\pi - 1,501$	232
3	$19\pi + 0,222$	$\pi - 1,228$	—	$18\pi + 1,450$	321
4	$19\pi + 0,011$	$\pi - 1,276$	—	$18\pi + 1,286$	389
5	$18\pi + 1,404$	$1,077$	—	$18\pi + 0,327$	52,6
6	$18\pi + 0,515$	$0,513$	—	$18\pi + 0,002$	0,002
7	$17\pi + 0,301$	$0,297$	—	$17\pi + 0,004$	0,009
8	$17\pi + 0,194$	$0,194$	—	$17\pi + 10^{-5}$	$\sim 10^{-6}$
9	$17\pi + 0,135$	$0,135$	—	$17\pi + 10^{-6}$	$\sim 10^{-8}$
10	$16\pi + 0,099$	$0,099$	0,095	$16\pi + 10^{-6}$	$\sim 10^{-8}$
11	$16\pi + 0,074$	$0,074$	0,072	$16\pi + 10^{-6}$	$\sim 10^{-8}$
12	$15\pi + 0,058$	$0,058$	0,056	$15\pi + 10^{-7}$	$\sim 10^{-11}$

Результаты вычислений при энергии столкновений $E = 10^{-3}$ эв.

Борновская фаза δ_B вычислена по формуле (96).

Парциальные сечения σ_l даны в естественных единицах площади $\left(\frac{\hbar}{mc^2}\right)^2 = 0,28 \cdot 10^{-16}$ см².

$$J \approx 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ а.е.} = 4 \cdot 10^{-4} \text{ эв.} \quad (10)$$

3. На рис. 4-8 представлены графики парциальных сечений $\sigma_{\ell}(k)$ при различных значениях k . Из них следует, что в общем случае существуют две области ℓ , в которых $\sigma_{\ell}(k)$ зависит от ℓ существенно различным образом. При $\ell < \ell_0$ это ступенчатая функция, имеющая 18 максимумов, при $\ell > \ell_0$ - гладкая функция, имеющая максимум и характерный спад. Для $k < 3$ вторая область вырождается, а при дальнейшем уменьшении k уменьшается также число максимумов ступенчатой функции. В пределе $k \rightarrow 0$ сохранится единственное парциальное сечение $\sigma_0(k)$, и мы придем к чистому s -рассеянию.

Наоборот, с ростом k увеличивается вклад парциальных сечений $\sigma_{\ell}(k)$ от области $\ell > \ell_0$. Одновременно с этим в области $\ell < \ell_0$ скачки функции $\sigma_{\ell}(k)$ упорядочиваются и начинают больше походить на периодическую функцию, чем на гистограмму (рис. 8).

Приведенные графики позволяют наглядно проследить особенности перехода от малых энергий столкновения к большим. Из них, в частности, следует, что при $E > 5$ эв полное сечение $\sigma(k)$ можно оценить следующим образом:

$$\sigma(k) \approx \frac{\pi(\ell_0 + 1)^2}{2k^2} + \int_{\ell_0}^{\infty} \sigma_{\ell} d\ell, \quad (11)$$

т.е. усредняя по области $0 \leq \ell \leq \ell_0$ и интегрируя по области $\ell > \ell_0$. В прежних работах так и поступали /5,6/, причем σ_{ℓ} вычисляли методом В.К.Б.

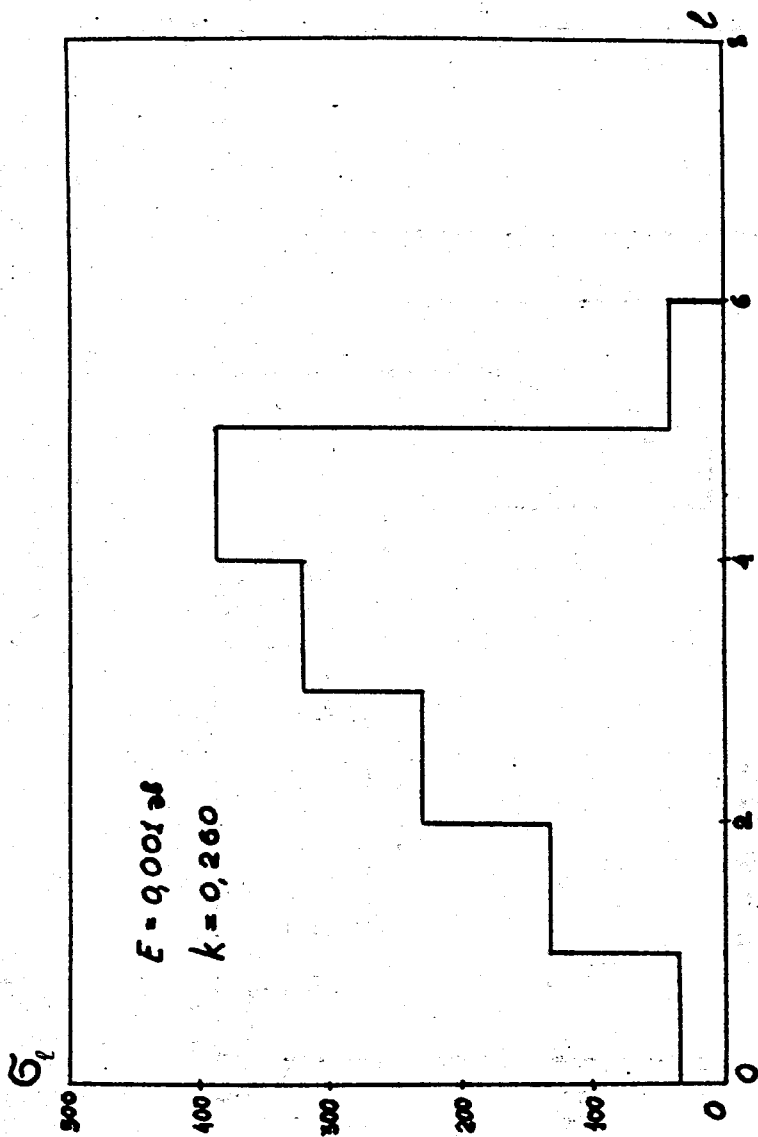


Рис. 4. Вклад различных частичных сечений σ_i в полное сечение.

Обсуждение рис. 4-8 на стр. 14.

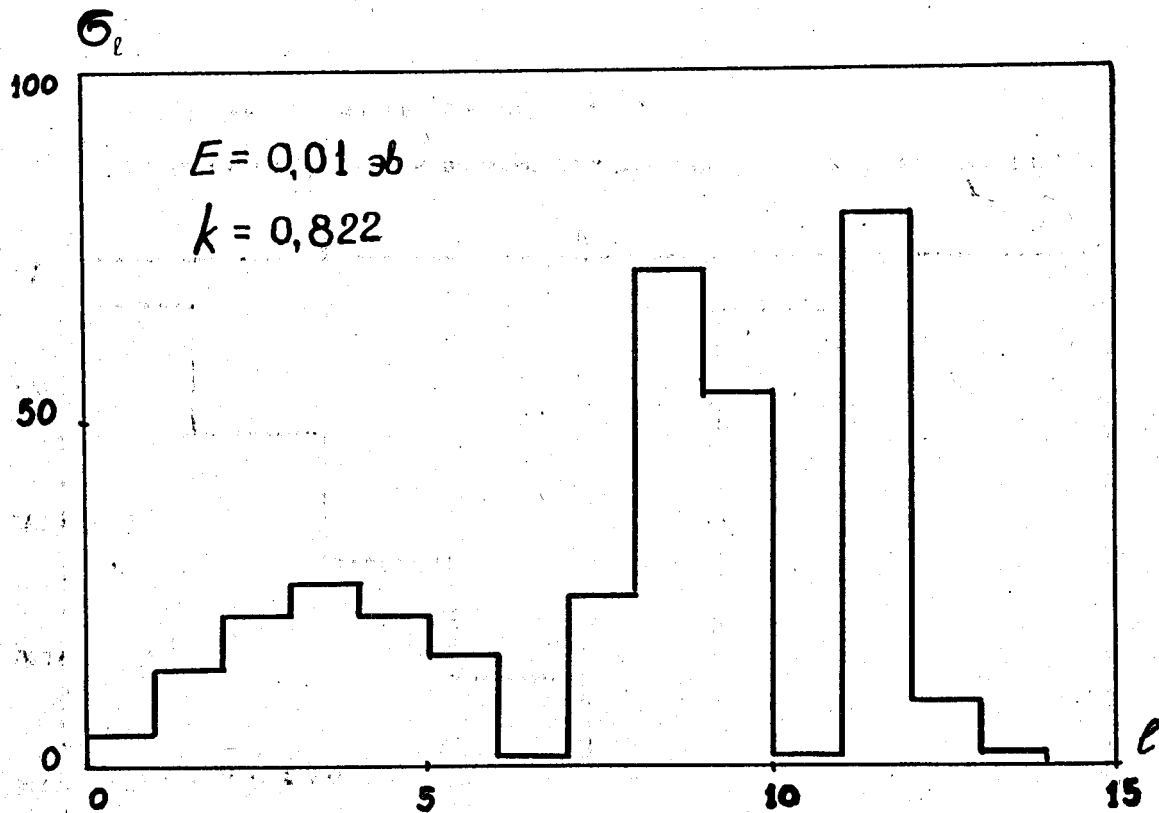


Рис. 5. То же, что и на рис.4.

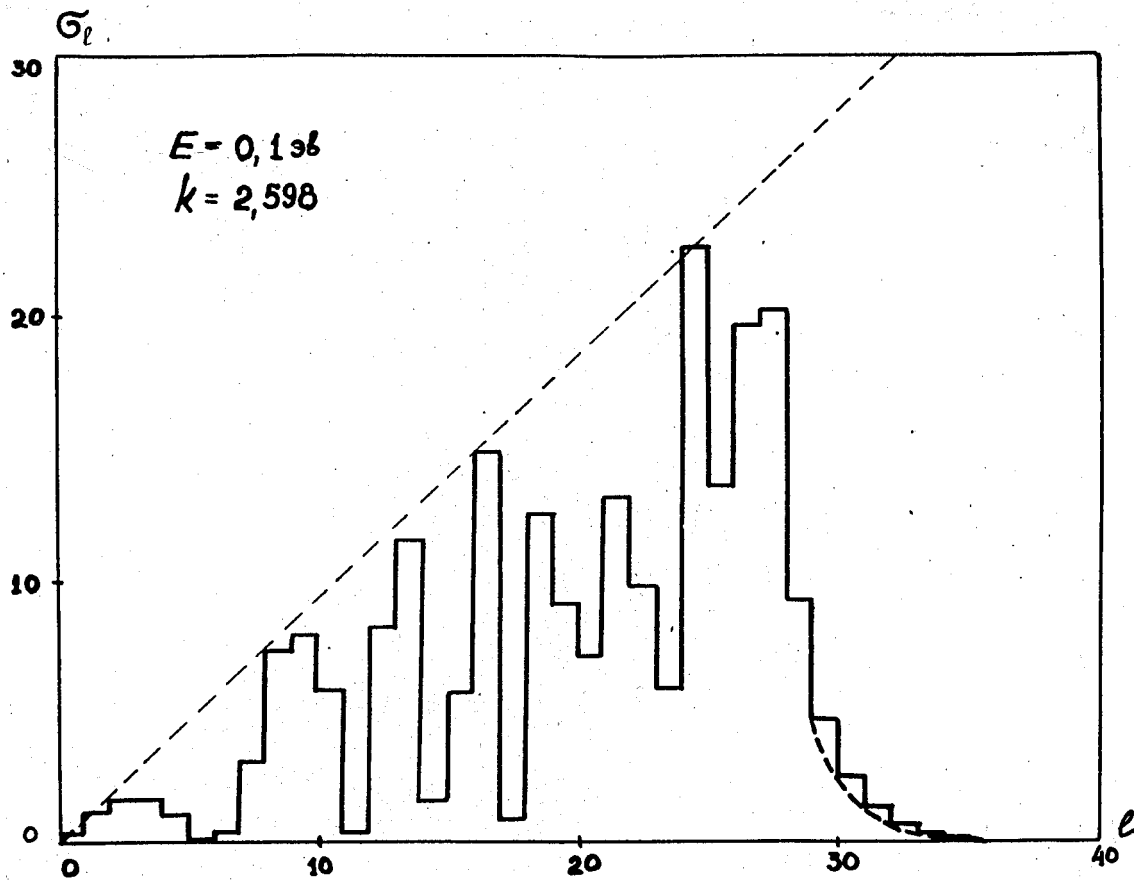


Рис. 6. То же, что и на рис. 4.

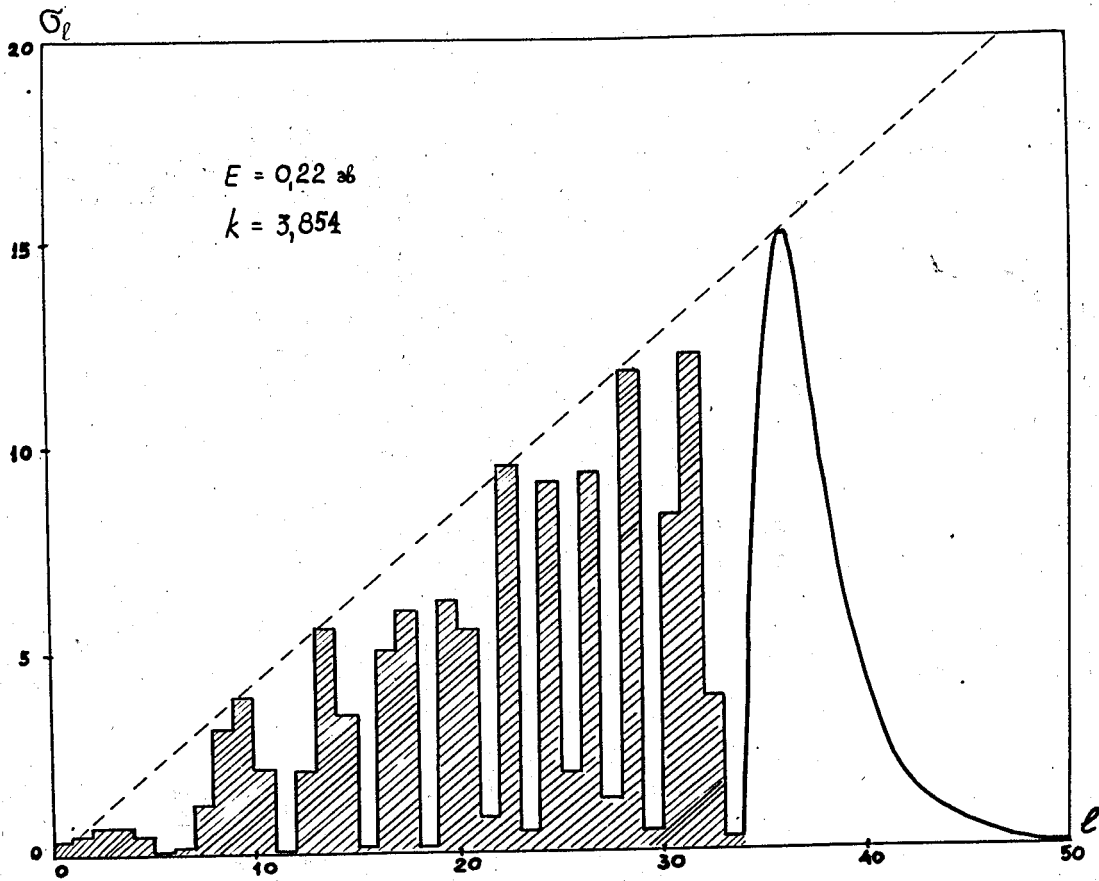


Рис. 7. То же, что и на рис. 4.

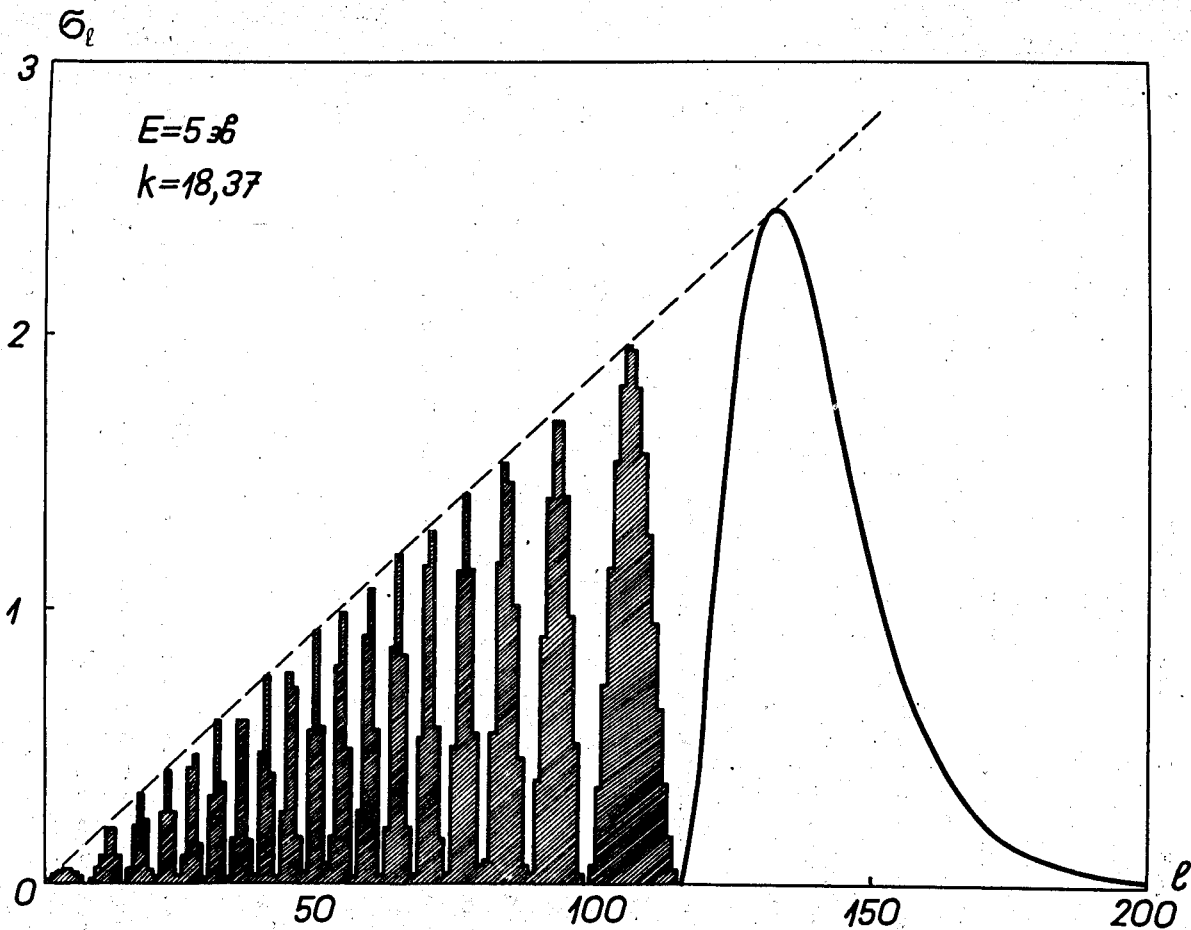


Рис. 8. То же, что и на рис. 4.

При $E = 1$ эв оба слагаемых в формуле (11) дают примерно одинаковый вклад в сечение $\sigma(k)$, однако, при $E > 1$ эв вклад от области $l > l_0$ начинает преобладать.

4. На рис. 9 представлена зависимость полного сечения $\sigma(k)$ от энергии относительного движения E . Расхождение между нашими результатами и типичными значениями Далгарно и Явава^{/6/} разумны, если принять во внимание приближения, принятые в их работе (усреднение при малых l , квазиклассическое вычисление фаз, отбрасывание матричных элементов K_g и K_u).

Причина отличия теоретических расчётов от экспериментальных данных^{/18/} обсуждается в работах^{/5/}.

Обратим внимание, что при энергии $E = 0,1$ эв характер зависимости $\sigma_{ex}(k)$ от энергии столкновения меняется. Этот эффект вызван изменением характера функции Δ_l : при $E < 0,1$ эв она становится ступенчатой и одновременно с этим исчезает вторая область $l > l_0$ в парциальных сечениях $\sigma_l(k)$ (см. рис. 3 и 4-8).

Однако даже при энергии $E = 10^{-5}$ эв ($T \approx 0,1^0$ К) область чистого s -рассеяния еще не достигается, поскольку при этой энергии вклад в сечение дают четыре фазы ($l = 0, 1, 2, 3$). При $E > 0,1$ эв удовлетворительно выполняется формула

$$\sigma_{ex}(k) \approx A + B \lg E, \quad (12)$$

которая уже обсуждалась в литературе^{/8,19/}. Отметим, что при $k \rightarrow 0$ формула (12) несправедлива, поскольку из соотношения (9a) следует, что при этом $\sigma(k) \rightarrow \text{const}$.

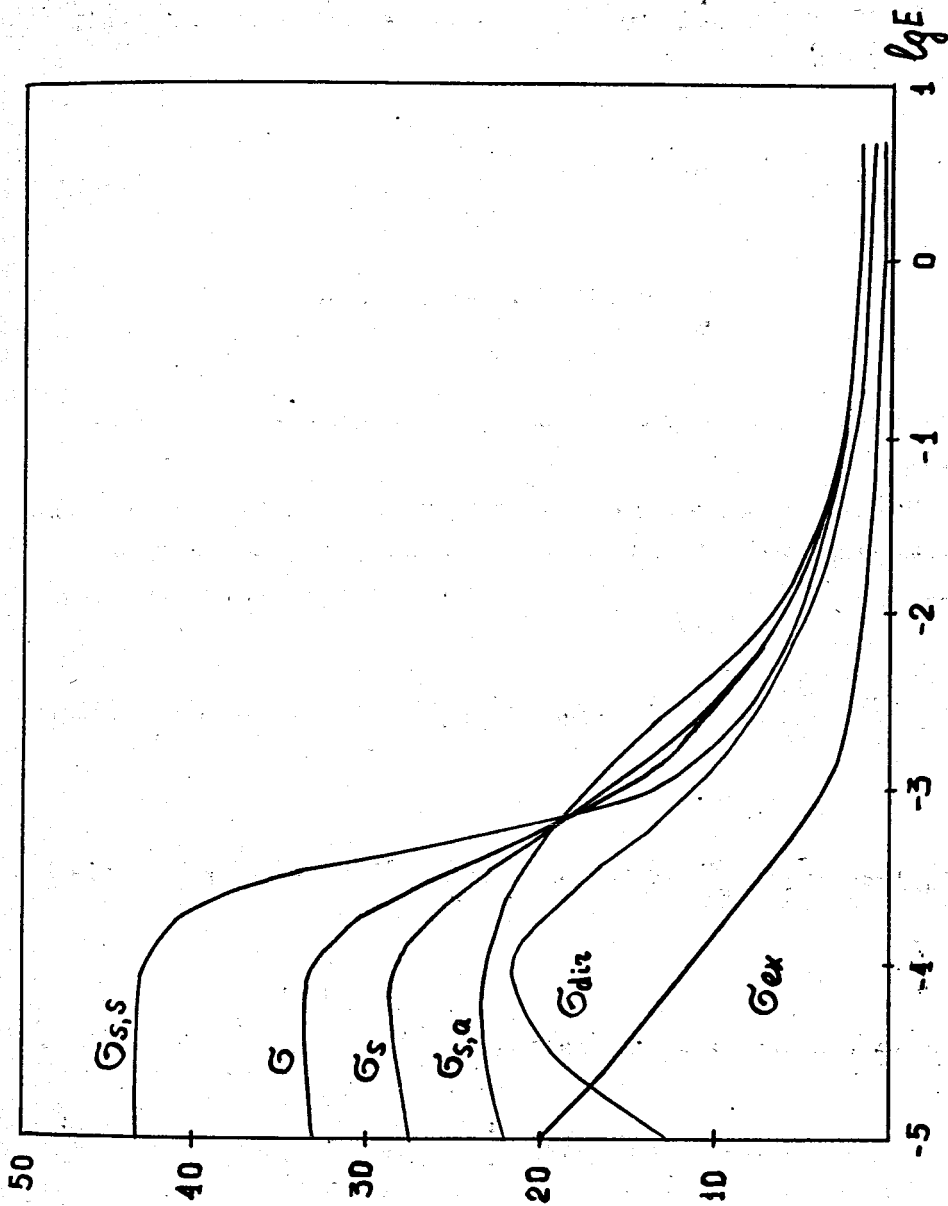


Рис. 8. Различные сечения процесса симметричной перезарядки, определенные в тексте.

5. Сечение перезарядки $\sigma_{ex}(k)$, сечение упругого рассеяния $\sigma_{dir}(k)$ и полное сечение $\sigma(k)$ /4,5/

$$\sigma(k) = \sigma_{ex}(k) + \sigma_{dir}(k) = \quad (13)$$

$$= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (\sin^2 \delta_{\sigma}^{\ell} + \sin^2 \delta_{\alpha}^{\ell})$$

полностью определяют процесс рассеяния (1) без учёта статистики протонов.

При малых энергиях столкновений необходимо учитывать спиновые состояния протонов. В соответствии с этим появляются два полных сечения $\sigma_{s,s}(k)$ и $\sigma_{s,\alpha}(k)$ для синглетного и триплетного состояний двух протонов /3,5/

$$\sigma_{s,s}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \sum_{\text{чет.}} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\sigma}^{\ell} + \sum_{\text{неч.}} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\alpha}^{\ell} \right\} \quad (15a)$$

$$\sigma_{s,\alpha}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \sum_{\text{неч.}} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\sigma}^{\ell} + \sum_{\text{чет.}} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\alpha}^{\ell} \right\}. \quad (15b)$$

В опытах измеряют лишь полное сечение /3,5/

$$\sigma_s(k) = \frac{1}{4} \sigma_{s,s}(k) + \frac{3}{4} \sigma_{s,\alpha}(k), \quad (16)$$

усредненное по начальным и просуммированное по конечным спиновым состояниям обоих протонов. В практических применениях встречается также транспортное сечение^{/3/}

$$\sigma_t = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (17)$$

которое после разложения по парциальным волнам и симметризации принимает вид

$$\sigma_t(k) = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \left(\frac{3}{4} \Sigma_{\text{чет.}} + \frac{1}{4} \Sigma_{\text{неч.}} \right) (\ell+1) \sin^2 \left(\delta_u^\ell - \delta_g^{\ell+1} \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{3}{4} \Sigma_{\text{неч.}} + \frac{1}{4} \Sigma_{\text{чет.}} \right) (\ell+1) \sin^2 \left(\delta_g^\ell - \delta_u^{\ell+1} \right) \right\}. \quad (18)$$

На рис. 9 приведены некоторые из этих сечений как функции энергии столкновения, а в таблице 2 - их численные значения. Из них видно, что при $E \geq 1$ эв учет статистики протонов не изменяет полного сечения.

З а к л ю ч е н и е

В задачах подобного типа существуют два источника погрешностей: при выборе начального приближения и при вычислении сечений в рамках принятого приближения. В данной работе удалось избежать погреш-

Таблица 2.

$E_{\beta\lambda}$	β_{ex}^D	β_{ex}	β_{dir}	β	β_3	$\beta_{5,5}$	$\beta_{5,4}$	$\beta_{5,4}^{dir}$
10^{-5}	-	20,3	II	33	26	42	21	30
10^{-4}	-	II,4	22	34	29	44	24	17
10^{-3}	-	3,27	II	14	16	12	17	6,7
10^{-2}	-	0,933	4,5	5,4	5,7	4,9	5,9	2,0
0,1	0,60	0,622	1,7	2,3	2,2	2,5	2,4	1,2
0,22	-	0,518	1,6	2,1	2,2	1,9	2,3	0,99
I	0,47	0,454	1,2	1,6	1,6	1,6	1,6	0,89
5	-	0,372	0,87	1,2	1,2	1,2	1,2	0,74

Сечения приведены в единицах 10^{-14} см²

β_{ex}^D - значения из работы /6/.

ностей второго типа, поскольку в рамках метода В.С.С. сечения и фазы для процесса (1) вычислены с заданной точностью без каких-либо дополнительных приближений. Поэтому полученные результаты можно использовать для оценки погрешностей других, приближенных методов вычисления фаз и сечений процесса симметричной перезарядки.

Выполненное исследование представляет в основном методический интерес, поскольку при малых энергиях столкновений водород, как правило, находится не в атомарном, а в молекулярном состоянии. Однако эта классическая задача теории рассеяния позволяет почувствовать общие особенности процессов рассеяния в системе трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Особо следует отметить доказательство существования связанного состояния системы H_2^+ при больших межъядерных расстояниях.

Пользуясь случаем, приносим благодарность В.В.Бабикову за многочисленные консультации по методу фазовых функций, С.С.Герштейну за интерес к работе и обсуждения и Т.М. Пику, любезно предоставившему нам таблицы термов.

Приложение I

При практическом вычислении фаз из уравнения (6) возникают специфические трудности, которые здесь необходимо подчеркнуть.

Прежде всего следует отметить, что уравнение для фазовых функций более естественно записать в следующем виде ^{/12,13/}

$$\frac{d}{dR} \eta_{g,u}^{\ell} = -\frac{1}{k} U_{g,u}(R) [j_{\ell}(kR) \cos \eta_{g,u}^{\ell}(R) - n_{\ell}(kR) \sin \eta_{g,u}^{\ell}(R)]^2 \quad (\text{П.1})$$

где

$$U_{g,u}^{\ell}(R) = V_{g,u}^{\ell}(R) - \frac{\ell(\ell+1)}{R^2}, \quad (\text{П.2})$$

$$\delta_{g,u}^{\ell} = \eta_{g,u}^{\ell}(\infty),$$

$j_{\ell}(kR)$ и $n_{\ell}(kR)$ - функции Бесселя, определенные в /12,13/, а фазы $\eta_{g,u}^{\ell}(R)$ при $R \rightarrow 0$ задаются разложениями

$$\eta_{g,u}^{\ell}(R) = - \frac{(kR)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2} \cdot \frac{2M}{(2\ell+2)} \left[1 - \frac{4M}{(2\ell+1)(2\ell+3)} R \right],$$

$$\eta_u^{\ell}(R) = - \frac{(kR)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2} (a + bR), \quad (\text{П.3})$$

$$a = \frac{-\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 16}}{4}, \quad b = - \frac{2M(1+a)^2}{(1+a) + (2\ell+2)(2\ell+1)},$$

$$\gamma = 4 + (2\ell+1)^2.$$

Известно, что фазовые функции $\eta_{g,u}^{\ell}(R)$ при наличии связанных состояний при $k \rightarrow 0$ имеют ступенчатый характер /12,13/. Это соз-

дает значительные трудности при интегрировании уравнений (П.1) и вынуждает вместо них интегрировать уравнения (6). При этом граница интегрирования R_0 существенно отодвигается в область больших R . Окончательно фазы $\delta_{g,u}^{\ell}$ вычислялись по формуле

$$\delta_{g,u}^{\ell} = \delta_{g,u}^{\ell}(R_0) + \frac{\pi \ell}{2} + h^{\ell}(R_0), \quad (\text{П.4})$$

где поправка

$$h^{\ell}(R_0) = -\frac{1}{2k} \int_{R_0}^{\infty} V(R) dR - \frac{1}{(2k)^2} V(R_0) \sin 2(kR_0 + \delta_0) - \\ - \frac{1}{(2k)^3} V'(R_0) \cos 2(kR_0 + \delta_0) \quad (\text{П.5})$$

$$V(R) = -\frac{\ell(\ell+1)}{R^2} - \frac{9M}{2R^4}, \quad \delta_0 = \delta(R_0)$$

учитывает добавку к фазам $\delta_{g,u}^{\ell}$ от области $R_0 \leq R < \infty$, а R_0 определяется из условия сходимости разложения (П.5) ($kR_0 > 1$) при дополнительном условии

$$\delta'(R_0) < 10^{-2}. \quad (\text{П.6})$$

Эти условия обеспечивают заданную точность $\epsilon \leq 10^{-2}$ при вычислении отдельных фаз $\delta_{g,u}^{\ell}$ и точность $\epsilon \leq 10^{-3}$ при вычислении $\Delta \rho$. При интегрировании в области $R \leq 20$ использованы таблицы Пика^{/11/} для термов $W_g(R)$ и $W_u(R)$ и таблицы Хантера и др.^{/16/} для матричных элементов $K_g(R)$ и $K_u(R)$. В области $R > 20$ использована асимптотика термов^{/21/}

$$W_{g,u}(R) = E_0(R) \mp \frac{1}{2} \Delta E(R) \quad (\text{П.7})$$

$$E_0(R) = -\frac{9}{4R^4} - \frac{15}{2R^6} - \frac{213}{4R^7} - \frac{7755}{64R^8} - \frac{1773}{2R^9} - \frac{86049}{16R^{10}} \quad (\text{П.8})$$

$$\Delta E(R) = \frac{4}{e} R e^{-R} \left[1 + \frac{1}{2R} - \frac{25}{8R^2} - \frac{131}{48R^3} - \frac{3923}{384R^4} - \right. \\ \left. - \frac{145399}{3840R^5} - \frac{5219189}{46080R^6} - \frac{509102915}{645120R^7} - \frac{37749539911}{10321920R^8} \right]. \quad (\text{П.9})$$

С ростом энергии столкновений E при вычислении $\sigma(k)$ приходится суммировать большое число парциальных сечений $\sigma_{\ell}(k)$ (см. рис. 4-8). Практически в формуле (3) суммируется лишь конечное число парциальных сечений

$$\sigma(k) = \sum_{\ell=0}^L \sigma_{\ell}(k) + \Delta \sigma(k), \quad (\text{П.10})$$

где L определяется из условия

$$\delta_{\text{г}}^L = \delta_{\text{u}}^L = \delta_{\text{в}}^L, \quad (\text{П.11})$$

а борновская фаза $\delta_{\text{в}}^L$ задается формулой (9б) (см. таблицу 1).

В области $L \leq \ell < \infty$ асимптотическая формула (9б) для фаз рассеяния $\delta_{\text{г,u}}^{\ell}$ уже хорошо выполняется, и вклад $\Delta\sigma(k)$ в полное сечение $\sigma(k)$ можно оценить аналитически

$$\Delta\sigma(k) = \int_L^{\infty} \sigma_{\ell}(k) d\ell \approx \frac{\pi^3 \alpha^2 k^2}{32L^4}, \quad (\text{П.12})$$

$$\alpha = \frac{9M}{2}.$$

Этот вклад пренебрежимо мал ($\approx 10^{-3}$ от полного сечения $\sigma(k)$). При энергиях столкновений $E > 10^{-4}$ эв значение L можно оценить по формулам

$$L \approx 2\ell \approx 30k^{2/3}. \quad (\text{П.13})$$

Приведенные оценки определяют точность полученных результатов в рамках метода В.С.С. в двухуровневом приближении. Это приближение разумно при малых энергиях столкновений, пока расстояния между уровнями системы N_2^+ велики по сравнению с энергией налетающего

протона. Однако точные границы метода пока неясны, хотя некоторые оценки для них имеются^{/6/}.

Приложение II

В некоторых случаях при вычислении фаз δ_ℓ из уравнений (4) области применимости квазиклассического и борновского приближений перекрываются. Это можно показать непосредственно, сравнивая два выражения

$$\delta_{\text{KB}}^\ell = \int_{r_0}^{\infty} \left[k^2 - \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2} - U(r) \right]^{1/2} dr - \int_{r_0}^{\infty} \left[k^2 - \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2} \right]^{1/2} dr \quad (\text{П.14})$$

$$\delta_{\text{B}}^\ell = - \frac{\pi}{2k} \int_0^{\infty} U(r) [j_\ell(kr)]^2 dr \quad (\text{П.15})$$

(здесь $r_0 = (\ell + 1/2)/k$, $j_\ell(kr) = J_{\ell + 1/2}(kr)$ — сферическая функция Бесселя полуцелого порядка). При больших ℓ и малых k точка поворота $r_0 \gg 1$, а в этой области для быстроубывающих потенциалов выполняется условие применимости борновского приближения

$U(r) \ll k^2$. Используя это условие, а также квазиклассическую асимптотику функций $j_\ell(kr)$ при больших ℓ , найденную в работе^{/22/}

$$J_{\ell + 1/2}(kr) = \sqrt{\frac{2k}{\pi r}} \left[k^2 - \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2} \right]^{-1/4} \cos \left(\int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2}} dr - \frac{\pi}{4} \right), \quad (\text{П.16})$$

в обоих случаях приходим к одной и той же формуле

$$\delta_{\ell} \approx \frac{1}{2} \int_{r_0}^{\infty} U(r) \left[k - \frac{(\ell+1/2)^2}{r^2} \right]^{-1/2} dr. \quad (\text{П.17})$$

В нашем конкретном случае $U(r) = -\frac{\alpha}{r^4}$. Вычисляя интеграл, получим соотношение

$$\delta_{\ell} = \frac{\pi \alpha k^2}{8(\ell+1/2)^3}, \quad (\text{П.18})$$

которое практически не отличается от выражения (96).

Л и т е р а т у р а

1. Л.И.Пономарев, ЖЭТФ 52, 1550 (1967). А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев. Препринт ОИЯИ, Дубна, 1969.
2. Атомные и молекулярные процессы. Под ред. Д.Бейтса. 1964 г., изд. "Мир". Б.М.Смирнов. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме", Атомиздат, 1968.
3. N.F.Mott, and H.S.Massey. 1965, The theory of atomic collisions, third edition (Oxford, Clarendon Press).
4. D.R.Bates, H.S.Massey and A.L.Stewart. Proc.Roy.Soc., A, 216, 437 (1953).
5. L.A.Parcell and R.M.May. Proc.Phys.Soc., 91, 54 (1967). F.J.Smith. Proc.Phys.Soc., 92, 866 (1967).
6. A.Dalgarno and H.N.Yadav. Proc.Phys.Soc., A, 66, 173 (1953), A.Dalgarno. Phil.Trans. Roy.Soc., 250, 426 (1958).

7. B.R.Levy and J.B.Keller, J.Math.Phys., 4, 54 (1963).
T.O'Malley, L.Rosenberg and L.Spruch. Phys.Rev., 125,
1300 (1962).
8. О.Б.Фирсов. ЖЭТФ 32, 1964 (1957), 33, 696 (1957), Ю.Н.Демков,
Учёные записки ЛГУ, §146, сер. физ., вып. 6, 74 (1952).
9. D.R.Bates, K.Ledsham, A.L.Stewart. Phyl.Trans.Roy.Soc., A246,
215 (1953); D.R.Bates, T.R.Carson. Proc.Roy.Soc., A234,
207 (1954).
10. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ 52, 1273 (1967), ЖВМ и МФ
8, 1256 (1968). Препринты ОИЯИ Р4-3175, Р4-3405, Дубна, 1967.
- 11.Т.М. Peek, J.Chem.Phys., 43, 3004 (1965).
Sandia Corporation Report No. Sc-RR-65-67, 1965.
12. В.В.Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике, Моск-
ва, 1968, изд. "Наука".
- 13.F.Calogero. Variable Phase Approach to Potential Scattering,
1967, Academic Press, N.Y. and London.
- 14.Cohen S., Judd D.L., Riddel R.J., Phys.Rev., 119, 384 (1960).
- 15.Quantum Theory , Ed. by D.R.Bates, v.1, N.Y.-London Acad.
Press, 1961.
- 16.G.Hunter, B.F.Gray and H.O.Prichard. J.Chem.Phys., 45,
3806 (1966).
- 17.K.W.Ford and J.A.Wheeler. Ann.Phys., N.Y. 7, 259 (1959).
- 18.W.L.Fite, A.C.H.Smith and R.F.Stebbing. Proc. Roy.Soc., A,
268, 527 (1962); W.L.Fite, R.F.Stebbing, D.G.Hummer and
R.T.Brackmann. Phys. Rev., 119, 663 (1960).
- В.А.Беляев, В.Г.Брежнев, Е.М.Ерастов. ЖЭТФ 52, 1171 (1967).
- 18.P. Banks. Planet Space Sci., 14, 1105 (1966).
- 20.F.J.Smith. Molecular Physics, 13, 121 (1967).

21. R.J.Damburg and R.Kh.Prodin. Proc.Phys.Soc.Ser., 2, v.1, 681 (1968); C.A.Coulson. Proc.Roy.Soc.Edin. A, A61, 20 (1941).
22. Л.И.Пономарев. "Лекции по квазиклассике". Препринт ИТФ-67-53, Киев, 1968.

Рукопись поступила в издательский отдел

13 мая 1969 года.