ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 4804

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

И.В. Амирханов, З.К. Смедарчина, Е.Х. Христова

# ОПИСАНИЕ ТРОЙНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ТЕОРИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ КАНАЛОВ

1969

P4 - 4804



И.В. Амирханов, З.К. Смедарчина, Е.Х. Христова

# ОПИСАНИЕ ТРОЙНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ТЕОРИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ КАНАЛОВ

Направлено в "Журнал теоретической и математической физики"

## В в е д е н и е

В данной работе рассматриваются реакции с тремя свободными частицами в начале или в конце процесса

$$
\begin{array}{llr}
A+B+C & \to A+B+C, & \\
 & \to D+E+F, & \mathrm{I} \\
 & \to N+M, & \\
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{llr}
A+B & \to D+E+F, & \\
 & \to A+B, & \mathrm{II} \\
 & \to N+M. & \\
\end{array}
$$

В последнее время сильно возрос интерес к таким реакциям, особенно в связи с изучением физики плазмы /1/, газового разряда /2/ и т.д. Теоретическое исследование неравновесной плазмы, а также интерпретация экспериментальных результатов требуют знания характеристик элементарных процессов, в первую очередь - сечений различных реакций. Из-за сложности эксперимента /3/ эти сечения часто могут быть получены только расчётным путем. Трудности, которые возникают при этом, связаны с необходимостью учёта сложной взаимосвязи различных процессов. Так, столкновение в плазме высокой плотности нельзя считать парным: имеет место одновременное взаимодействие трех (реакции типа I) и более частиц.

Многие прямые реакции, такие как срыв и развал дейтона в ядрах [4], реакции выбивания $(p,2p)$ [5], $(n,2n)$ [6], обмен и ионизация в атомах [7], можно отнести к процессам типа II. Для выяснения механизма прямых реакций большой интерес представляет построение эффективного решения таких процессов.

Главная особенность рассмотрения реакций типа I, II обусловлена тем, что полная энергия системы непрерывным образом распределена по некоторым степеням свободы (подробно-в третьем разделе). Кроме того, возникает ряд проблем [8,9], когда в реакциях участвуют заряженные частицы.

Если мы используем для решения задач типа I, II интегральные уравнения [10], то известно, что ядра этих уравнений обладают рядом особенностей, объясняемых наличием порогов для различных процессов. Наличие сингулярностей в ядрах уравнений сильно усложняет расчёты (требуется большой объем памяти вычислительной машины).

Для численных расчётов на ЭВМ более удобным (экономнее используется оперативная память машины) является рассмотрение задачи на основе многоканального формализма [11]. Однако невозможность описания процессов с перераспределением частиц, трудности удовлетворения граничным условиям в каналах, когда все три частицы свободны, делала многоканальный формализм некорректным математически и очень ограниченным с точки зрения физических приложений.

В работе [12] был предложен метод усеченных асимптотик (МУА), позволяющий обойти трудность описания реакций с перераспределением частиц, который позднее усовершенствован в работах [13]. Основная идея этого метода заключается в том, что из полной функции $\Psi$ вычитается вспомогательная функция $\Phi$, известная с точностью до константы (парциальных амплитуд). Несмотря на то, что МУА в ряде случаев очень удобен при практических расчётах, скорость его сходимости может существенно зависеть от функций $\Phi$

В данной работе мы предлагаем способ решения реакций типа I и II, когда на одинаковых основаниях рассматриваются все возможные разбиения системы на невзаимодействующие подгруппы. В первом разделе приводится модификация метода многоканальной связи, которая устраняет вышеупомянутые трудности. При этом получается система интегро-дифференциальных уравнений, позволяющая описывать всевозможные упругие и неупругие каналы в реакциях I и II. Во втором разделе при использовании результатов работ /14/ предлагается метод решения полученных уравнений. В третьем разделе с помощью полученных уравнений решается модельная задача. Рассеяние заряженных частиц рассматривается в четвертом разделе. В заключение обсуждается вопрос о возможности использования развиваемого формализма для описания квазистационарных состояний.

## 1. Модификация метода многоканальной связи

Поскольку почти все трудности, указанные во введении, встречаются уже в задаче трех тел, то для простоты рассмотрим этот случай. Обобщение для сложных процессов приведено в Приложении I.

Уравнение Шредингера для системы трех частиц, взаимодействующих между собой парным потенциалом, имеет следующий вид:

$$H \Psi = E \Psi , \qquad (1)$$

где

$$H = \sum_{i=1}^{3} T_i + \sum_{i<j} V_{ij} \qquad (2)$$

и $T_i$ – оператор кинетической энергии частицы с номером $i$, $V_{ij}$ задает взаимодействие частиц $i$ и $j$.

Рассмотрим рассеяние, когда открыты следующие каналы:

$$
\begin{array}{llr}
(2+3)+1 \to (2+3)+1\,, & \mathrm{I} & \\
\qquad\quad\;\; \to (1+3)+2\,, & \mathrm{II} & (3)\\
\qquad\quad\;\; \to (1+2)+3\,, & \mathrm{III} & \\
\qquad\quad\;\; \to 1+2+3\,. & \mathrm{IV} &
\end{array}
$$

Здесь скобки объединяют частицы, образующие связанную систему (сложная частица). Заметим, что входным может быть любой из каналов правой части (3) (в зависимости от граничных условий задачи). Кроме того, сложные частицы могут иметь возбужденные состояния, поэтому каждый из каналов I, II, III имеет подканалы неупругого рассеяния.

Нам необходимо решить уравнение (1) с граничными условиями, соответствующими реакции (3).

Для этого перепишем уравнение (1) в координатах Якоби $((R_i, \rho_{jk}),\ i \neq j \neq k = 1,2,3)$. Тогда после исключения движения центра масс оно примет вид

$$[-\frac{\hbar^2}{2M_i}\Delta_{\vec{k}_i} + h_{jk} + \varepsilon_i - E]\Psi = 0, \quad i \neq j \neq k = 1,2,3, \tag{4}$$

где

$$h_{jk} = [-\frac{\hbar^2}{2\mu_{jk}}\Delta_{\vec{\rho}_{jk}} + V_{jk}], \quad j \neq k = 1,2,3 \quad - \tag{5}$$

двухчастичные гамильтонианы и

$$v_i = (V_{ij} + V_{ik}),\ M_i = \frac{(m_j+m_k)\,m_i}{m_j+m_k+m_i},\ \mu_{jk} = \frac{m_j m_k}{m_j+m_k},\quad i \neq j \neq k = 1,2,3 .$$

Решение уравнений для задачи двух тел:

$$h_{jk}\ \phi_{n_i} = \epsilon_{n_i}\ \phi_{n_i}\ ,\quad i \neq j \neq k = 1,2,3, \tag{6}$$

будем считать известным.

Пусть потенциалы $V_{ij}$ таковы, что каждая пара частиц может образовать лишь конечное число связанных состояний $\alpha_k$ с квантовыми числами $n_k$, где $n_k = 1,2,..,\alpha_k$, $i \neq j \neq k = 1,2,3$. (в $n_k$ включены все квантовые числа, характеризующие систему двух тел).

Решение удобно искать в следующем виде:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} \sum_{n_i=1}^{\alpha_i} \chi_{n_i}(\vec{R}_i)\,\phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk}) + X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}),\ (i \neq j \neq k). \tag{7}$$

Отметим, что выражение (7) не является разложением по полным наборам. Такое представление волновой функции позволяет легко удовлетворить граничным условиям задачи. Причем граничные условия в каналах I, II, III будем налагать соответственно на функции $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$ ($(n_i = 1,2,\ldots,\alpha_i)$, $i = 1,2,3$), а граничные условия в канале IV – на функцию $X(\vec{R}_i, \vec{\rho}_{jk})$($i \neq j \neq k = 1,2,3$). В общем случае для канала IV (канал развала) все наборы координат $((R_i, \rho_{jk})$, $i \neq j \neq k = 1,2,3)$ эквивалентны.

Подставляя (7) в (4), умножая слева на функцию $\phi_{n_i}$, интегрируя по соответствующим переменным, получим систему зацепленных интегро-дифференциальных уравнений для неизвестных функций $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$ и $X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12})$ :

$$
\begin{aligned}
& L_{n_i}\chi_{n_i}(\vec{R}_i) = J_{n_i}(\vec{R}_i),\ n_i=1,2,\dots,a_i,\ i=1,2,3, \\
& LX(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}) = J(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}),
\end{aligned} \tag{8}
$$

где

$$
\begin{aligned}
& L_{n_i} = [\Delta_{\vec{R}_i} + k^2_{n_i}],\ k^2_{n_i} = \frac{2M_i}{\hbar^2}(E-\epsilon_{n_i}),\ n_i=1,2,\dots,a_i,\ i=1,2,3, \\
& L = [\frac{\hbar^2}{2M_3}(\Delta_{\vec{R}_3} + k_1^2) + \frac{\hbar^2}{2\mu_{12}}(\Delta_{\vec{\rho}_{12}} + k_2^2)],\ k_1^2 = \frac{2M_3}{\hbar^2}(E-\epsilon),\ k_2^2 = \frac{2\mu_{12}}{\hbar^2}\epsilon,
\end{aligned} \tag{9}
$$

и

$$
\begin{aligned}
J_{n_i}(\vec{R}_i) = & -\int d\vec{\rho}_{jk}\ \phi^*_{n_i}(\vec{\rho}_{jk})\{\frac{M_i}{\hbar^2}\mathcal{V}_i\sum_{n'_i=1}^{a_i}\chi_{n'_i}(\vec{R}_i)\phi_{n'_i}(\vec{\rho}_{jk}) + \\
& +\sum_{n_j=1}^{a_j}\phi_{n_j}(\vec{\rho}_{ij})[\frac{M_i}{M_j}L_{n_j} - \frac{M_i}{\hbar^2}\mathcal{V}_j]\chi_{n_j}(\vec{R}_j) + \\
& +\sum_{n_k=1}^{a_k}\phi_{n_k}(\vec{\rho}_{ij})[\frac{M_i}{M_k}L_{n_k} - \frac{M_i}{\hbar^2}\mathcal{V}_k]\chi_{n_k}(\vec{R}_k) + \\
& +\frac{M_i}{\hbar^2}[L - \mathcal{V}_{123}]X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12})\},\ n_i=1,2,\dots,a_i,\ i=1,2,3.
\end{aligned} \tag{10}
$$

$$
J(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}) = \mathcal{V}_{123}X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{12}) + \sum_{i=1}^{3}\sum_{n_i=1}^{a_i}\phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk})\frac{M_i}{\hbar^2}[L_{n_i} - \mathcal{V}_i]\chi_{n_i}(\vec{R}_i),
$$

$$
\mathcal{V}_{123} = (V_{12} + V_{13} + V_{23}).
$$

Разложим $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$, $J_{n_i}(\vec{R}_i)$, $X(\vec{R}_3,\vec{\rho}_{12})$ и $J(\vec{R}_3,\vec{\rho}_{12})$ по сферическим гармоникам:

$$\chi_{n_i}(\vec{R}_i) = \sum_{L_i M_i} \frac{\chi_{n_i}^{L_i M_i}(R_i)}{R_i} Y_{L_i M_i}, \quad i=1,2,3,$$

$$X(\vec{R}_3,\vec{\rho}_{12}) = \sum_{L_3 M_3 \check{e}_{12} m_{12}} \frac{\psi|_{L_3 M_3 \check{e}_{12} m_{12}}}{R_3 \cdot \rho_{12}} Y_{L_3 M_3}^{*} Y_{\check{e}_{12} m_{12}}, \tag{11}$$

$$J_{n_i}(\vec{R}_i) = \sum_{L_i M_i} \frac{I_{n_i}^{L_i M_i}(R_i)}{R_i} Y_{L_i M_i},$$

$$J(R_3,\rho_{12}) = \sum_{L_3 M_3 \check{e}_{12} m_{12}} \frac{I^{L_3 M_3 \check{e}_{12} m_{12}}}{R_3 \cdot \rho_{12}} Y_{L_3 M_3} Y_{\check{e}_{12} m_{12}}, \tag{12}$$

где

$$I_{n_i}^{L_i M_i}(R_i) = \int d\Omega_{\vec{R}_i} Y^{*}_{L_i M_i} R_i J_{n_i}(\vec{R}_i), \quad i=1,2,3,$$

$$I^{L_3 M_3 e_{12} m_{12}}(R_3,\rho_{12}) = \iint d\Omega_{\vec{R}_3} d\Omega_{\vec{\rho}_{12}} Y^{*}_{L_3 M_3} Y^{*}_{e_{12} m_{12}} R_3 \rho_{12} J(\vec{R}_3,\vec{\rho}_{12}), \tag{13}$$

где $L_i M_i$ – моменты движения $i$-той частицы относительно центра масс у других двух $(jk)$ частиц $(i \neq j \neq k = 1,2,3)$.

Подставляя (11) и (12) в (8), получаем:

$$F_{N_i} \chi_{N_i}(R_i) = I_{N_i}(R_i), \quad i=1,2,3,$$

$$F_{N_4} \psi_{N_4}(R_3,\rho_{12}) = I_{N_4}(R_3,\rho_{12}), \tag{14}$$

$$F_{N_i} = \left[ \frac{d^2}{dR_i^2} + k^2_{n_i} - \frac{L_i(L_i+1)}{R_i^2} \right],$$

$$F_{N_4} = \left[ \frac{\hbar^2}{2M_3}\left(\frac{d^2}{dR_3^2} + k_1^2 - \frac{L_3(L_3+1)}{R_3^2}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu_{12}}\left(\frac{d^2}{d\rho_{12}^2} + k_2^2 - \frac{\check{e}^2_{12}(\check{e}^2_{12}+1)}{\rho_{12}^2}\right)\right] \tag{15}$$

и

$$N_i = (n_i, L_i, M_i), \quad i=1,2,3, \quad N_4 = (L_3, M_3, \check{e}_{12}, m_{12}).$$

Таким образом, мы получили интегро-дифференциальные уравнения (14) для системы трех тел, описывающие рассеяние с учётом всех каналов. Теперь рассмотрим приближенный метод решения таких уравнений.

## 2. Метод решения системы интегро-дифференциальных уравнений

Уравнения (14) представляют собой специальный вид системы 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 $\chi_{n_i}(\vec{R}_i)$ и $X(\vec{R}_3, \vec{\rho}_{23})$ (см. (13), (10)). Поэтому для такой системы необходимо было разработать специальный численный метод решения (известные нам методы представляются непригодными).

Можно воспользоваться тем, что функции $I_{N_i}(R_i)$ и $I_{N_4}(R_3, \rho_{12})$ обладают одним важным свойством, а именно, являются квадратично интегрирующими функциями своих аргументов $R_i$ и $R_3, \rho_{12}$ (см.

приложение II ). Это позволяет перейти от сложной системы (14) к довольно простой системе алгебраических уравнений. Причем для этого достаточно наложить только следующее ограничение на потенциалы:

$$\int_0^\infty \rho_{ij} \, |V_{ij}| \, d\rho_{ij} < \infty \;, \quad i \neq j \neq 1,2,3. \tag{16}$$

Поэтому справедливо разложение $I_{N_i}$ и $I_{N_4}$ в обобщенный ряд Фурье:

$$\begin{aligned} I_{N_i}(R_i) &= \sum_{\beta_i} A^{N_i}_{\beta_i} \Phi_{\beta_i}(R_i), \quad i=1,2,3, \\ I_{N_4}(R_3,\rho_{12}) &= \sum_{\gamma\nu} A^{N_4}_{\gamma\nu} \Phi_\gamma(R_3)\Phi_\nu(\rho_{12}), \end{aligned} \tag{17}$$

где

$$\begin{aligned} A^{N_i}_{\beta_i} &= \int dR_i \, \Phi^*_{\beta_i}(R_i) I_{N_i}(R_i), \quad i=1,2,3, \\ A^{N_4}_{\gamma\nu} &= \iint dR_3 \, d\rho_{12} \, \Phi^*_\gamma(R_3)\Phi^*_\nu(\rho_{12}) I_{N_4}(R_3,\rho_{12}), \end{aligned} \tag{18}$$

а $\Phi_{\beta_i(\gamma,\nu)}$ являются полными наборами известных функций.

Если переписать систему (14) в интегральной форме:

$$\chi_{N_i}(R_i) = C_1^{N_i} f_1^{N_i}(R_i) + C_2^{N_i} f_2^{N_i}(R_i) + \int dR_i' \, G^{(+)}(R_i, R_i') I_{N_i}(R_i'), \tag{19}$$

$$\psi_{N_4}(R_3,\rho_{12}) = \int d\epsilon\, C_1(\epsilon,E) f_1^{N_4}(R_3,k_1) f_1^{N_4}(\rho_{12},k_2) + \int d\epsilon\, C_2(\epsilon,E) f_2^{N_4}(R_3,k_1)\times$$

$$\times f_2^{N_4}(\rho_{12},k_2) + \iint dR_3'\, d\rho_{12}'\, G^{(+)}(R_3,\rho_{12};R_3';\rho_{12}') I_{N_4}(R_3,\rho_{12}), \quad (19)$$

где

$$G^{(+)}(R_i R_i') = \begin{cases} f_1^{N_i}(R_i)\, f_2^{N_i}(R_i') & \text{при} \quad R_i' > R_i, \\ f_2^{N_i}(R_i')\, f_2^{N_i}(R_i) & \text{при} \quad R_i > R_i', \end{cases} \quad (20)$$

$$G^{(+)}(R_3,\rho_{12};R_3',\rho_{12}') = \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, G^{(+)}_{E-\epsilon}(R_3,R_3') G^{(+)}_{\epsilon}(\rho_{12},\rho_{12}') \; -$$

функция Грина[15], то, используя разложения (17), получим решение системы (14) в виде

$$\chi_{N_i}(R_i) = \chi_0^{N_i}(R_i) + \sum_{\beta_i} A_{\beta_i}^{N_i} \tilde{\tilde{\chi}}_{\beta_i}^{N_i}(R_i), \; i=1,2,3, \quad (21)$$

$$\psi_{N_4}(R_3,\rho_{12}) = \psi_0 + \sum_{\gamma\nu} A_{\gamma\nu}^{N_4} \tilde{\tilde{\psi}}_{\gamma\nu}^{N_4}(R_3,\rho_{12}).$$

Здесь

$$\tilde{\tilde{\chi}}_{\beta_1}^{N_1}(R_1) = \int dR_1' \, G^{(+)}(R_1, R_1')\,\Phi_{\beta_1}(R_1'),$$

$$\tilde{\tilde{\psi}}_{\gamma\nu}^{N_4}(R_3, \rho_{12}) = \iint dR_3' d\rho_{12}' G^{(+)}(R_3, \rho_{12}; R_3', \rho_{12}')\Phi_\gamma(R_3')\Phi_\nu(\rho_{12}') - \tag{22}$$

известные функции и

$$\chi_0^{N_1}(R_1) = C_1^{N_1} f_1^{N_1} + C_2^{N_1} f_2^{N_1},$$

$$\Psi_0(R_3, \rho_{12}) = \int d\epsilon C_1^{N_4}(\epsilon, E) f_1^{N_4}(R_3) f_1^{N_4}(\rho_{12}) + \int d\epsilon C_2^{N_4}(\epsilon, E) f_2^{N_4}(R_3) f_2^{N_4}(\rho_{12}). \tag{23}$$

Постоянные $C_{1(2)}^{N_1}$ $(i = 1, 2, 3)$ и функции $C_{1(2)}^{N_4}(\epsilon, E)$ определяются из граничного условия, которому должна удовлетворять волновая функция каждого канала. Так как пока нас не интересуют конкретные граничные условия, то в дальнейшем эти постоянные будем считать известными.

Итак, мы получили решение уравнения (14) в форме (21) через неизвестные коэффициенты $A_{\beta_1}^{N_1}$ и $A_{\gamma\nu}^{N_4}$. Система алгебраических уравнений для этих коэффициентов получается путем подстановки (13), (10), (21) в (18). Полученную бесконечную систему можно решать методом редукции (заменой бесконечной системы конечной). Корректность такой процедуры была рассмотрена в работе [15]. Подставляя найденные коэффициенты $\bar{A}_{\beta_1}$ и $\bar{A}_{\gamma\nu}$ в (21), найдем волновые функции в каждом канале и тем самым решение поставленной задачи рассеяния с учётом всех ( I , II , III , IV ) каналов.

Предлагаемый метод носит общий характер и может быть применен при решении других систем интегро-дифференциальных уравнений или системы интегральных уравнений.

В заключение этого раздела заметим, что описанный подход можно обобщить на случай, когда в рассеянии учитывается больше трех тел (см. приложение I). Кроме того, полученные уравнения (14) и (19) справедливы и для задачи на связанные состояния трех и более тел. Для этого соответствующим образом надо выбрать постоянные $C_1^{N_1}$, $C_2^{N_1}$, что связано с граничными условиями задачи. При этом выведенные уравнения оказываются удобными для описания различных кластерных состояний этих систем.

## 3. Модельная задача

Здесь мы убедимся в эффективности предложенного метода на конкретной задаче расчёта каталитического ускорения реакций слияния частиц. Рассмотрим задачу в координатах Якоби $(R, \rho)$.

Сначала отметим важную отличительную особенность задачи с тремя падающими частицами: имеется энергетическое распределение между степенями $R$ и $\rho$. Если движению по $\rho$ соответствует энергия $\epsilon$, а движению по $R - (E-\epsilon)$, где $E$ – полная энергия системы, то падающая волна имеет следующий вид (см. 23):

$$\Psi_0 = \int d\epsilon \; C_1^{N_4}(\epsilon, E) f_1^{N_4}(R_3, k_1) f_1^{N_4}(\rho_{12} k_2), \tag{24}$$

где $C_1(\epsilon, E)$ характеризует энергетическое распределение в падающей волне.

Естественно, что решение уравнения (14) будет зависеть от вида $C_1(E,\epsilon)$. Однако развитый в предыдущих параграфах формализм позволяет получать решения (14) при произвольных $C_1(E,\epsilon)$, не повторяя сложных расчётов. Дело в том, что матрица системы алгебраических уравнений не зависит от параметров падающей волны и вычисляется при заданных $E$ и $V$ единственным образом. Тогда не составляет большого труда решить задачу при произвольных $C_1(E,\epsilon)$.

Метод примет более универсальную форму, если разложить квадратично интегрируемую функцию $C_1(E,\epsilon)$ в ряд Фурье:

$$C_1(E,\epsilon)=\sum_l d_l\, g_l(\epsilon), \qquad (25)$$

где $g_l(\epsilon)$ – полный набор известных функций. Задавая конкретный вид $C_1(\epsilon,E)$, мы всегда можем найти коэффициенты разложения $d_l$. Тогда решение получается в виде суммы через неизвестные коэффициенты $d_l$ и рассмотрение различных распределений сводится к подстановке в эти решения соответствующих коэффициентов $d_l$.

Рассмотрим молекулы типа $a$ и $b$, которые взаимодействуют между собой с помощью потенциалов $V_{ab}$, $V_{aa}$ и $V_{bb}$. Молекула $b$ играет роль катализатора. Сравним следующие реакции:

без катализатора

$$\begin{aligned} a+a+a &\to a+a+a && \mathrm{I} \\ &\to (a+a)+a && \mathrm{II} \end{aligned},$$

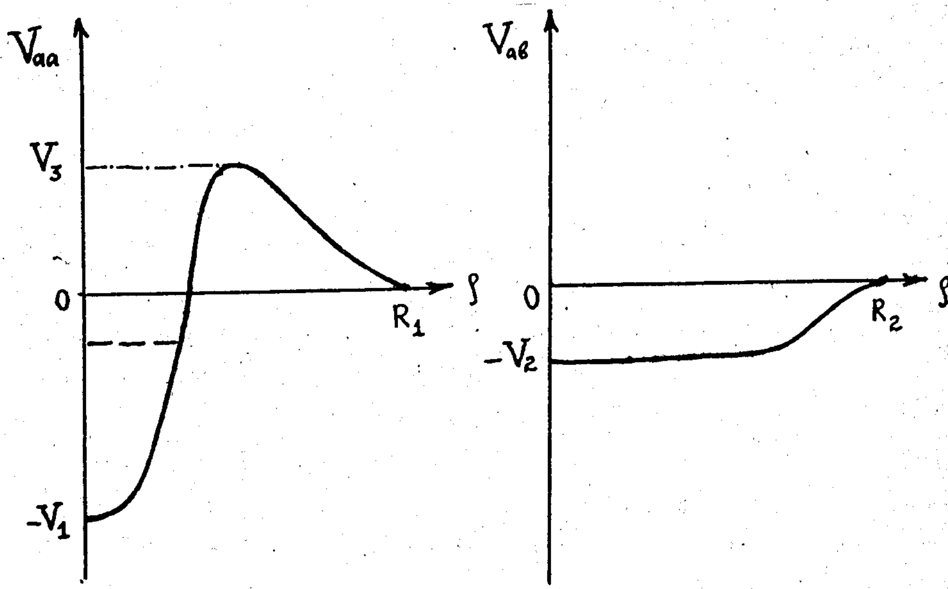
и с катализатором

$$\begin{aligned} a+a+b &\to a+a+b && \mathrm{III} \\ &\to (a+a)+b && \mathrm{IV} \end{aligned},$$

Здесь $(a+a)$ означает сложную молекулу, которая возникает после реакции.

Представляет интерес изучение различных факторов, которые влияют на сечение образования сложной молекулы $(a+a)$ как в присутствии катализатора, так и без него. Поскольку скорость реакций связана с сечением элементарного акта рассеяния /16/, то в дальнейшем мы будем сравнивать сечения процессов ( II и IV ).

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




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

Каталитическое действие частицы $b$ в реакции IV заключается в том, что при столкновении трех частиц (когда все частицы оказываются рядом) притягивающий потенциал $V_{ab}$ эффективно увеличивает относительную энергию столкновения двух частиц $a$. Это должно облегчить преодоление барьера. Чтобы частица $b$ не входила в состав продуктов реакций, в потенциале $V_{ab}$ не должно быть связанных состояний для системы $(a+b)$.

При конкретных расчётах потенциал $V_{aa}$ выбирался так, чтобы имелся лишь один уровень в системе $(a+a)$. Для простоты расчётов мы рассмотрели случай $(L=0,\ e=0)$. Численно проверяли сходимость разложения (17), некоторые результаты приведены в таблице.

Таблица

| N | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|
| $\nabla$ | 39,3 | 6,89 | 7,83 |

Здесь $\nabla = \sigma_{IV}/\sigma_{II}$, где $\sigma_{IV}$ и $\sigma_{II}$ – соответственно сечения спаривания с катализатором и без катализатора, N – число членов в разложении (17), $V_1 = 50$, $V_2 = 9$, $V_3 = 4{,}2$, $E = 1$ эв, $R_1 = R_2 = 3R_0$ и $R_0 = 5.10^9$ см.

Расчёты показывают, что для данной задачи в разложении (17) можно оставить 5-6 членов (с ростом N результат мало меняется).

## 4. Рассеяние заряженных частиц

При описании столкновений заряженных частиц встречаются трудности как в интегральном подходе [8], так и в многоканальном формализме [9]. Рассмотренный в первых двух разделах метод остается справедливым, когда в рассеянии участвует не более двух заряженных частиц, в других случаях не ясно, как удовлетворить граничным условиям на бесконечности (в координатах Якоби), т.е. возникает проблема асимптотического поведения волновой функции. Асимптотическая форма для произвольного количества заряженных частиц была исследована в работе [9].

Уравнение Шредингера для системы $N$ заряженных частиц в системе центра масс можно записать в форме

$$\left[ \frac{1}{\rho^n} \frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho^n \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{\Delta^*}{\rho^2} - \frac{2V(\Omega)}{\rho} + \kappa^2 \right] \Psi(\rho, \Omega) = 0, \qquad (27)$$

где

$$V(\Omega) = \sum_{i>j} \frac{Z_i Z_j}{\varkappa_{ij}(\Omega)},$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{k_1^2}{m_1} + \ldots + \frac{k_n^2}{m_n}}, \qquad \rho = \sqrt{m_1 r_1^2 + \ldots + m_n r_n^2}. \qquad (28)$$

и $\Delta^*$ – угловая часть оператора Лапласа в $3N$ – мерном пространстве, $\Omega$ – совокупность $n = 3N - 4$ переменных (углов), определяющих направления в $3N$-мерном пространстве.

Решение (27) будем искать в следующем виде:

$$\Psi = \int U(k)\, \phi(k, \rho, \Omega)\, dk, \qquad (29)$$

где $\phi$ – является решением уравнения

$$[\frac{1}{\rho^n}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho^n\frac{\partial}{\partial\rho})+\frac{\Delta^*}{\rho^2}-\frac{2Z}{\rho}+k^2]\phi=0. \qquad (30)$$

Как показано в работе /9/, решение (30) можно представить в виде

$$\phi=\sum_e\frac{\chi_e}{\rho^n}u_e(\Omega), \qquad (31)$$

где

$$\chi_e=A_e(2k\rho)^e\exp(-ik\rho)F(e+\frac{N}{2}-i\frac{Z}{k},2(e+\frac{N}{2}),2ik\rho), \qquad (32)$$

$u_e$ – собственная функция оператора $\Delta^*$ и $F$ – вырожденная гипергеометрическая функция.

Подставляя (29) в (27), получаем

$$(k^2-\kappa^2)U(k)=\int(\sum_{ee'}Q_1^{ee'}Q_2^{ee'})U(k')dk', \qquad (33)$$

где

$$Q_1^{ee'}=2\int d\Omega\, u_e^*(\Omega)[V(\Omega)-Z]u_{e'}(\Omega), \qquad (34)$$

$$Q_2^{ee'}=\int\chi_e\frac{1}{\rho}\chi_{e'}d\rho. \qquad (35)$$

Уравнение (33) можно заменить интегральным уравнением

$$U(k)=A\,\delta(k-\kappa)+\frac{\sum\limits_{ee'} Q_1^{ee'}}{k^2-\kappa^2}\int Q_2^{ee'}\,U(k')\,dk', \tag{36}$$

или

$$U(k)=A\,\delta(k-\kappa)+\frac{\sum\limits_{ee'} Q_1^{ee'}\,B^{ee'}(k)}{k^2-\kappa^2}, \tag{37}$$

где

$$B^{ee'}(k)=\int Q_2^{ee'}(k,k')\,U(k')\,dk'. \tag{38}$$

Интегралы типа (38) и (35) исследовались в работе /8/. Особый случай представляет интеграл типа (34). Дело в том, что при некоторых значениях углов функция $V(\Omega)$ имеет особенности (см. приложение III). Поэтому в дальнейшем вместо $V(\Omega)$ будем использовать приближенную функцию

$$\bar V(\Omega)=\sum_{i>j}\frac{Z_i Z_j\,\varrho_{ij}(\Omega)}{\varrho_{ij}^2(\Omega)+\epsilon}, \tag{39}$$

$$\bar V(\Omega)\underset{\epsilon\to 0}{\to} V(\Omega).$$

Эта функция совпадает с $V(\Omega)$ везде, кроме точек, где $V(\Omega)$ имеет особенность, и поэтому интеграл в (34) существует и мы получаем $\bar Q_1^{ee'}$.

Подставляя (37) в (38), получаем

$$B^{ee'}(k)=A\int Q_2^{ee'}(k,k')\,\delta(k'-\kappa)\,dk'+\int Q_2^{ee'}(kk')\frac{\sum\limits_{e''e'''}\bar Q^{e''e'''}}{k^2-\kappa^2}B^{e''e'''}(k). \tag{40}$$

Решая это уравнение (40), мы найдем $B^{ee'}(k)$, тем самым из (37) найдем $U(k)$, а из (29) – $\Psi$, что и требовалось.

На основании вышеизложенного мы можем обобщить формализм, приведенный в первых двух разделах, для рассеяния заряженных частиц, когда открыты все каналы ( I , II , III , IV ). Для этого достаточно вместо (7) искать решение в виде

$$\Psi = \sum_{i=1}^{3} \sum_{n_i=1}^{a_i} \chi_{n_i}(\vec{R}_i)\phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk}) + \int U(k)\phi(k\rho\Omega)dk \tag{41}$$

и повторить выкладки предыдущего и этого раздела.

## 5. Замечание и трехчастичном квазиуровне

Исследование двухпротонного распада – проблема несколько более сложная, чем исследование тривиального однопротонного распада. Дело в том, что двухпротонная радиоактивность является задачей трех тел. Элементарное теоретическое описание двухпротонных распадов было дано в /17/.

Приведенный в первых двух разделах настоящей работы формализм также можно использовать для описания такого сорта распадов.

Пусть сложная частица $(A^*)$ (ядро) распадается по следующим каналам:

$$\begin{aligned}(A^*) &\to F + E\\ &\to B + C + D\\ &\to \text{-- -- ---}\end{aligned}$$

В уравнении (14) полную энергию системы надо сделать комплексным и и задачу решать только с уходящими волнами. При этом все каналы распада будут связаны друг с другом, и у нас есть возможность явно выделить трехчастичный квазиуровень (распад на три частицы одновременно).

В заключение авторы благодарят Б.Н.Захарьева, А.И.Титова, О.Лхагве, Ю.П.Фенина, В.Л.Шмонина за полезные дискуссии, связанные с темой данной работы.

## Приложение I

Здесь мы схематически покажем, как можно формально обобщить результаты первых двух разделов на случай системы из четырех частиц (для бо́льшего числа частиц – аналогично).

При решении задачи трех тел предполагали, что решение задачи двух тел нам известно (хотя бы приближенно), теперь предполагаем, что нам известно решение задачи двух и трех тел, т.е. мы знаем решение следующих уравнений:

$$h_{ij}\,\Phi_{n_{ij}} = \epsilon_{n_{ij}}\,\Phi_{n_{ij}}\,, \quad i \neq j = 1,2,3,4\,,$$
$$H_{ijk}\,\phi_{m_{ijk}} = \epsilon_{m_{ijk}}\,\phi_{m_{ijk}}\,, \quad i \neq j \neq k = 1,2,3,4\,. \tag{I.1}$$

Пусть $h_{ij}$ имеет $\alpha_{ij}$ связанных состояний и $H_{ijk}$ имеет $\beta_{ijk}$ связанных состояний.

Рассмотрим рассеяние, когда открыты следующие каналы.

$$
\begin{array}{lll}
(i+j)+(k+e) & \to (i+j)+(k+e) \quad , & \mathrm{I} \\
 & \to - - - - - - \quad , & \\
 & \to (i+j+k)+e \quad , & \mathrm{II} \\
 & \to - - - - - - \quad , & \\
 & \to (i+j)+k+e \quad , & \mathrm{III} \\
 & \to - - - - - - - - \quad , & \\
 & \to i+j+k+e \quad . & \mathrm{IV}
\end{array}
$$

Здесь скобки объединяют частицы, образующие связанную систему. В общем случае входным каналом может оказаться любой из каналов правой части (что зависит от граничных условий).

Тогда решение уравнения Шредингера удобно искать в виде

$$
\Psi = \sum_{p=1}^{6} \sum_{n_{ij},n_{ke}}^{a_{ij},a_{ke}} \chi^{p}_{n_{ij}\,n_{ke}} \Phi^{p}_{n_{ij}} \Phi^{p}_{n_{ke}} + \sum_{p=1}^{4} \sum_{m_{ijk}=1}^{\beta_{ijk}} \chi^{p}_{m_{ijk}} \phi^{p}_{m_{ijk}} +
$$

$$
+ \sum_{p=1}^{6} \sum_{n_{ij}=1}^{a_{ij}} X^{p}_{n_{ij}} \Phi^{p}_{n_{ij}} + Y \quad . \tag{I .2}
$$

Граничные условия в каналах ( I , II , III , IV ) будем налагать соответственно на функции $\chi^{p}_{n_{ij}\,n_{ke}}$ , $\chi^{p}_{m_{ijk}}$, $X^{p}_{n_{ij}}$ и $Y$.

Повторяя все выкладки, проделанные в первых разделах, можно получить уравнения для этих неизвестных функций и перейти к алгебраическим уравнениям.

Заметим, что с увеличением числа частиц, очень быстро растет число всевозможных разбиений системы на невзаимодействующие подгруппы (на различные кластеры). Но, с другой стороны, не все разбиения и не все каналы дают вклад при рассмотрении конкретных задач рассе–

яния. Поэтому при расчётах с самого начала можно исключить эти разбиения и каналы и получить более простые уравнения.

## Приложение II

Квадратичная интегрируемость функций $I_{n_i}^{L_i M_i}(R_i)$ обеспечивается условием (16) и тем, что $\phi_{n_i}(\vec{\rho}_{jk})$ является функцией связанного состояния. При рассмотрении $I_{N_4}(R_3, \rho_{12})$ последний фактор не имеет места, так как в этом случае и по степеням свободы $R_3$, и по $\rho_{12}$ частицы находятся в непрерывном спектре. Но зато имеется лишнее интегрирование по $\epsilon$, что и обеспечивает квадратичную интегрируемость функции $I_{N_4}(R_3, \rho_{12})$.

## Приложение III

В уравнение (27) кулоновская потенциальная энергия была записана в виде

$$\sum_{i>j} \frac{Z_i Z_j}{|\vec{r}'_i - \vec{r}_j|} = \frac{V(\Omega)}{\rho} = \frac{1}{\rho} \sum_{i>j} \frac{Z_i Z_j}{\alpha_{ij}(\Omega)}. \qquad (III.1)$$

Получив явный вид /18/ (III.1), всегда можно найти направления, вдоль которых $\alpha_{ij}(\Omega) = 0$ или $V(\Omega) = \pm\infty$. Это соответствует /9/ образованию связанных состояний или совместному движению одинаково заряженных частиц. Последнее не имеет практического значения при вычислении потока на бесконечности, так как вероятность рассеяния в окрестности таких направлений очень мала, и поэтому в приближенных расчётах $V(\Omega)$ можно заменить на $\tilde{V}(\Omega)$ (см. 39).

## Литература


1. Низкотемпературная плазма. Труды Международного симпозиума, Москва, июль 1965. Изд. "Мир", М., 1967.
2. С.Браун. Элементарные процессы в плазме газового разряда. Атомиздат, М., 1961.
3. Г.Месси и Е.Бархон. Электронные и ионные столкновения. ИЛ., М., 1958.
4. S.T. Butler, R.G.L. Hewitt, B.R.I. McKellar and R.M. May. Ann. of Phys., 43, 282 (1967).
5. K.L. Lim and I.E. McCarthy. Nucl.Phys., 88, N2, 433 (1966).
6. Г.А.Прокопец, В.И.Стрижак. ЯФ, 10, вып. 4 (1969).
7. Электронно-атомные столкновения. Изд. АН Латв.ССР, Рига, 1965.
8. P.L. Altick. Phys.Rev., 179, N.1, 73 (1969).
9. Р.К.Петеркоп, М.П.Шкеле. АН Латв. ССР, сер.физ. и техн.наук, №2, 7 (1969); Р.К.Петеркоп. Изв. АН Латв.ССР, 8, 79 (1960); Рассеяние электронов на атомах. Изд. АН Латв. ССР, Рига, 1967.
10. Л.Д.Фаддеев. ЖЭТФ, 39, 1459 (1960); Труды математического ин-та имени Стеклова, XXI, 1963; А.Г.Ситенко, В.Ф.Харченко. Препринт ИТФ АН УССР, 68-11, Киев, 1968.
11. H. Feshbach. Ann. of Phys., 5, 357 (1958); 19, 287 (1962); C. Bloch. Лекции XXXVI курса школы Энрико Ферми, Варенна, 1965.
12. И.В.Амирханов, В.П. Жигунов, Б.Н.Захарьев. Препринт ОИЯИ, Р4-2983, Дубна, 1966.
13. Т.Г.Ефименко, В.П.Жигунов, Б.Н.Захарьев. ЯФ, 7 (1968); Ann. of Phys., 47, 275 (1968); Б.Н.Захарьев, В.В.Пустовалов, В.Д.Эфрос. ЯФ, 6, вып. 8 (1968).

14. И.В.Амирханов, В.С.Гурьянов. Препринт ОИЯИ Р4-3741, Дубна, 1968. Phys.Letters, 28A, N.5, 346 (1968);

И.В.Амирханов, М.А.Касымжанов. Препринт ОИЯИ, Р4-4335, Дубна, 1969.

15. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Изд. "Наука", М., 1966.

16. Д.Кларк, М.Макчески. Динамика реального газа, Изд. "Мир", М., 1967.

17. В.Н.Гольданский. УФН, 87, вып. 2 (1965).

18. А.М.Ермолаев. Вестник Ленинградского университета, 1958, №22, 48.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 ноября 1969 года.