

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2310/83

10/5-83

P4-83-89

В.С.Мележик, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман*

ПРОЦЕССЫ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ
В СИСТЕМЕ ТРЕХ ЧАСТИЦ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Направлено в "Журнал экспериментальной
и теоретической физики"

* Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова, Москва.

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

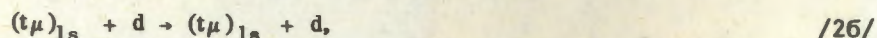
При решении различных задач мезоатомной физики необходимо знать сечения процессов упругого рассеяния в системе трех частиц типа



где a и b - ядра изотопов водорода с массами $M_a \geq M_b$; μ^- - мезон с массой m_μ , n - набор квантовых чисел, характеризующий основное состояние атома $(a\mu)$. Примерами таких реакций могут служить реакции упругого рассеяния мезоатомов дейтерия на протонах



или мезоатомов трития на дейтронах.



рассеяние $p\mu$ и $t\mu$ атомов в синглетном состоянии сверхтонкой структуры на ядрах p и t :



и т.д. /см. обзоры^{/1-3/}.

При малых энергиях столкновения $E \leq 100$ эВ/ наиболее адекватным методом вычисления сечений таких процессов является адиабатическое представление в задаче трех тел /см. обзор^{/4/}. Начиная с работ^{/5,6/}, за четверть века выполнено несколько таких расчетов, и их результаты большей частью согласуются с экспериментом /см. обзоры^{/1-3/}. Однако в некоторых случаях, например, при вычислении сечения реакции /2в/, результаты прежних расчетов^{/5-7/} резко расходятся с данными различных экспериментов^{/8-11/}. Эти расхождения, как будет показано, обусловлены тем, что во всех предыдущих расчетах было использовано приближение двух состояний адиабатического базиса.

В данной работе реализован алгоритм численного решения многоканальной задачи рассеяния, возникающей в адиабатическом представлении задачи трех тел, который позволяет выйти за рамки при-

ближения двух состояний и с необходимой точностью вычислить сечения процессов низкоэнергетического упругого рассеяния в системе трех заряженных частиц.

Суть предлагаемого метода решения многоканальной задачи рассеяния состоит в сведении ее к решению задачи на собственные значения для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих процесс рассеяния в адиабатическом базисе. Развиваемый подход был использован Шором^{/12/} при решении одноканальной задачи рассеяния и близок к подходу работы^{/13/}. Реализация предлагаемого подхода стала возможной после разработки эффективных алгоритмов^{/14/} решения задачи Штурма-Лиувилля для систем дифференциальных уравнений большой размерности, а также вычисления эффективных потенциалов задачи трех тел в адиабатическом представлении^{/15/}.

Развитый в данной работе метод был использован для вычисления сечений упругого рассеяния мезоатомов водорода на ядрах изотопов водорода, знание которых необходимо для описания кинетики процессов мюонного катализа ядерных реакций синтеза^{/16/}.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В адиабатическом представлении волновая функция системы трех частиц с полным моментом J и его проекцией m_J , $\Psi_{m_J}^J(\vec{r}, \vec{R})$, где \vec{r} - координаты μ -мезона, $\vec{R} = \{R, \theta, \Phi\}$ - радиус-вектор, соединяющий ядра a и b , разлагается по полному набору решений $\phi_{jm}(\vec{r}; R)$ и $\phi_{jm}(\vec{r}; k, R)$ дискретного и сплошного спектров задачи двух центров с наборами параболических квантовых чисел $j_m = [n_1 n_2 m p]$ и $[n_2 m p]$ /по классификации разьединенных атомов^{/4,17/}:

$$\Psi_{m_J}^J(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{j_m} \phi_{jm}(\vec{r}; R) R^{-1} \chi_{jm}^J(R) D_{mm_J}^J(\Phi, \theta, 0) + \sum_{j_m} \int_0^\infty dk \phi_{jm}(\vec{r}; k, R) R^{-1} \chi_{jm}^J(k, R) D_{mm_J}^J(\Phi, \theta, 0). \quad /3/$$

Исходное уравнение Шредингера системы трех заряженных частиц

$$(\hat{H} - E) \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = 0 \quad /4/$$

после подстановки в него разложения /3/ и усреднения по координатам \vec{r} , θ и Φ сводится к системе $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $\chi_j(R) \equiv \chi_{jm}^J(R)$, $\chi_j^J(k, R)$

$$\left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1)}{R^2} \right) + \tilde{k}_i^2 - U_{ii}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^N U_{ij}(R) \chi_j(R). \quad /5a/$$

Здесь: $2N$ - число членов в разложении /3/,

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad U_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ia,ia} & U_{ia,jb} \\ U_{ib,ja} & U_{ib,jb} \end{pmatrix}, \quad \chi_j(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ia}(R) \\ \chi_{jb}(R) \end{pmatrix}, \quad /56/$$

$\chi_{ja}(R)$ и $\chi_{jb}(R)$ - радиальные волновые функции относительного движения ядер, соответствующие в асимптотической области $R \rightarrow \infty$ подсистемам $(a\mu) + b$ и $(b\mu) + a$, $U_{ia,ja}(R)$ и т.д. - эффективные потенциалы, построенные в работах /15,18/, асимптотика которых имеет вид /19-21/:

$$U_{ii}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{=} 0,$$

$$U_{ij}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{=} (1 - \delta_{ij}) \left\{ 2q_{ij} \begin{pmatrix} 1+\kappa & 0 \\ 0 & -(1-\kappa) \end{pmatrix} \frac{d}{dR} + h_{ij}^{(*)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4\kappa \end{pmatrix} \right\} \quad /6a/$$

где

$$\kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a), \quad /66/$$

$$q_{ij} = \frac{\vec{R}}{R} \langle \Psi_i | -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}} | \Psi_j \rangle, \quad h_{ij}^{(*)} = \langle \Psi_i | -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} | \Psi_j \rangle,$$

$\Psi_j(\vec{r}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_{im}(\vec{r}; R)$ - волновые функции мезоатома $(a\mu)$ в состоянии j . Величины \tilde{k}_i определены следующим образом:

$$\tilde{k}_i^2 = \begin{pmatrix} \tilde{k}_{ia}^2 & 0 \\ 0 & \tilde{k}_{ib}^2 \end{pmatrix} = 2M \begin{pmatrix} \mathcal{E} + E_{1a} - E_{ia} & 0 \\ 0 & \mathcal{E} + E_{1a} - \tilde{E}_{ib} \end{pmatrix} \quad /7/$$

где E_{ia} - энергия изолированного атома $(a\mu)$ в состоянии i , $\tilde{E}_{ib} = E_{ia} (1 + \frac{\kappa}{M})$ - энергия атома $(b\mu)$ с точностью $-\frac{\kappa^2}{M}$, $\mathcal{E} = E - E_{1a}$ - энергия столкновения, отсчитанная от значения E_{1a} /4,20-22/

$$M = M_0 / m_a, \quad M_0 = M_a + M_b, \quad m_a = m_\mu + M_a^{-1} \quad /8/$$

в дальнейшем используем систему единиц $e = \hbar = m_a = 1$. В случае, когда открыт только один канал реакции ($\tilde{k}_{1a}^2 > 0$, $\tilde{k}_{ia}^2 < 0$, $i \neq 1$, $\tilde{k}_{ib}^2 < 0$), из результатов работ /4,22/ следует, что асимптотика решений $\chi_{ia}(R)$ системы уравнений /5/ размерности $2N$ при $R \rightarrow \infty$ с точностью до членов $\sim R^{-2}$ имеет вид:

$$\chi_{1a}(R) \underset{R \gg 1}{=} \left\{ \sum_j (k_N R) - t_{11}(k_N) n_j(k_N R) \right\} \rightarrow \sin(k_N R - \frac{J\pi}{2} + \delta(k_N)),$$

$$\chi_{ia}(R) = \frac{2(1+\kappa) q_{ia}}{\tilde{k}_{ia}^2 - \tilde{k}_{1a}^2} \frac{d}{dR} \chi_{1a}(R), \quad i \neq 1 \quad /9a/$$

$$k_N^2 = \tilde{k}_{1a}^2 \left\{ 1 - 4(1+\kappa)^2 \sum_{i=2}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{\tilde{k}_{ia}^2 - \tilde{k}_{1a}^2} \right\}^{-1} = 2M_N \mathcal{E}.$$

Главные члены асимптотики решений $\chi_{ib}(R)$ имеют вид:

$$\chi_{1b}(R) = A \cdot \exp\{-\gamma_N R\}$$

$$\chi_{ib}(R) = -\frac{2(1-\kappa) q_{i1}}{\tilde{k}_{ib}^2 - \tilde{k}_{1b}^2} \frac{d}{dR} \chi_{1b}(R) - \frac{4\kappa h_{i1}^{(*)}}{\tilde{k}_{ib}^2 - \tilde{k}_{1b}^2} \chi_{1b}(R), \quad i \neq 1 \quad /96/$$

$$\gamma_N^2 = -2M \left\{ 1 - 4(1-\kappa)^2 \sum_{i=2}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{\tilde{k}_{ib}^2 - \tilde{k}_{1b}^2} \right\}^{-1} (\mathcal{E} + E_{1a} - \tilde{E}_{1b})$$

$$\tilde{E}_{1b} = E_{1a} \left(1 + \frac{\kappa}{M} + \frac{16\kappa^2}{M} \sum_{i=2}^N \frac{h_{1i}^{(*)} h_{i1}^{(*)}}{\tilde{k}_{ib}^2 - \tilde{k}_{1b}^2} \right)$$

в приложении показано, что члены $\sim R^{-1}$ в недиагональных потенциалах $U_{ij}(R)$ не изменяют асимптотики решений /9//.

Асимптотика /9/ решений $\chi_{ia}(R)$ и $\chi_{ib}(R)$ системы уравнений /5/ согласована с граничными условиями задачи рассеяния для процессов /2a/-/2г/ /4,22/:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \Psi_n(\vec{r}_a) \left\{ e^{i\vec{k}_a \vec{R}_a} + \frac{f(\theta)}{R_a} e^{ik_a R_a} \right\}, \quad /10/$$

где $\Psi_n(\vec{r}_a)$ - волновая функция изолированного атома $(a\mu)$ в основном состоянии, \vec{R}_a - вектор, соединяющий ядро b и центр масс атома $(a\mu)$, k_a - импульс их относительного движения

$$k_a^2 = 2M_a \mathcal{E},$$

$$M_a^{-1} = (M_a + m_\mu)^{-1} + M_b^{-1} \quad /11a/$$

Парциальные сечения σ_N^J упругого рассеяния, вычисляемые из системы N пар уравнений /5/ с граничными условиями /9/, равны:

$$\sigma_N^J = \frac{4\pi(2J+1)}{k_N^2} \cdot \frac{t_N^2}{1+t_N^2}, \quad t_N \equiv t_{11}(k_N). \quad /12/$$

В пределе $N \rightarrow \infty$ справедливы соотношения ^{/21,4/}:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} 4 \sum_{i=2}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{E_1 - E_i} = \frac{1}{2}, \quad \lim_{N \rightarrow \infty} 4 \sum_{i=2}^N \frac{h_{1i}^{(*)} h_{i1}^{(*)}}{E_1 - E_i} = E_1,$$

$$M_N \rightarrow M_a = M \left(1 - \frac{(1+\kappa)^2}{4M}\right)^{-1}, \quad /116/$$

$$k_N^2 \rightarrow k_{1a}^2 = 2M_a \epsilon, \quad \gamma_N^2 \rightarrow \gamma_{1b}^2 = -2M_b (\epsilon + E_{1a} - E_{1b}).$$

Сечение упругого рассеяния равно:

$$\sigma^J(\epsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_N^J. \quad /13/$$

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для нахождения параметров Т-матрицы $t_{11}(k_N)$ или соответствующих им фаз $\delta(k_N)$ обычно решают задачу Коши для системы уравнений /5/ размерности $2N$ и затем определяют значения t_{11} , сравнивая асимптотику /9/ с численным решением системы /5/. Однако численное решение задачи Коши при наличии закрытых каналов сопряжено с известными трудностями ^{/23/}, поскольку таким задачам одновременно присущи особенности как задач рассеяния, так и задач на собственные значения, для решения которых обычно используют принципиально различные вычислительные схемы.

В работе ^{/13/} задача рассеяния рассматривалась как задача на собственные значения. При таком подходе энергия столкновения ϵ находится как собственное значение задачи Штурма-Лиувилля при заданном значении t_{11} с граничными условиями /9а/ и /9б/ при $R = R_m \gg 1$ и $\chi_{1a}(0) = 0$.

Используя асимптотику решений /9/ системы уравнений /5/, задачу можно еще более упростить, выбирая граничные условия в некоторой точке $R = R_m$ в виде, не требующем задания t_{11} :

$$\begin{cases} \chi_{1a}(R_m) = 0 \\ \frac{d}{dR} \chi_{ia}(R_m) = 0, \quad i = 2, \dots, N \\ \left[\frac{d}{dR} \chi_{ib}(R) + \gamma_N \chi_{ib}(R) \right]_{R=R_m} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \end{cases} \quad /14/$$

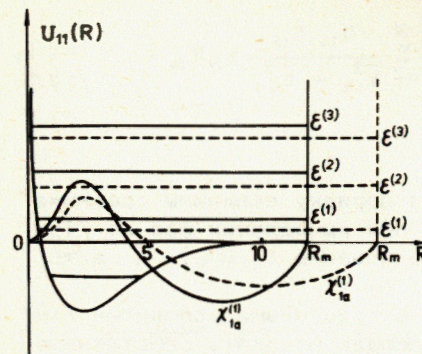


Рис. 1. Схема уровней энергии $\epsilon^{(a)}$ и волновых функций задачи /5/, /14/. Изменение спектра $\epsilon^{(a)}$ достигается перемещением границы интегрирования R_m .

Условие $\chi_{1a}(R_m) = 0$ эквивалентно замене истинного потенциала в первом канале потенциалом с бесконечной стенкой при $R = R_m^*$, которому, как известно, соответствует дискретный спектр собственных значений $\epsilon^{(a)}(R_m)$, $a = 1, 2, \dots$, зависящий от выбора R_m /см. рис.1/. Собственные функции задачи Штурма-Лиувилля /5/, /14/ содержат информацию о фазах рассеяния задачи /5/, /9/ /обычно при малых энергиях столкновения достаточно ограничиться первым собственным значением с $a = 1$ /. Решив задачу /5/, /14/, из соотношения /9а/ определяем значение t_N :

$$t_N = j_J(k_N R_m) / n_J(k_N R_m), \quad /15а/$$

$$\delta_N = \delta(k_N) = \arctg(t_N) \approx \pi(a + J/2) - k_N R_m, \quad /15б/$$

В случае $J = 0$ формулы /15а/ и /15б/ одинаково пригодны для определения фаз δ , причем погрешность вычисления фаз, обусловленная конечным интервалом интегрирования $[0, R_m]$, не превышает величины $\sim (k R_m)^{-1} R_m^{-2} = 1/\pi R_m^2$ ^{/25/}. При $J \neq 0$ погрешность вычисления δ по формуле /15б/ составляет $\sim J(J+1)/(k R_m) \approx J(J+1)/\pi$, поэтому формула /15а/ предпочтительнее, поскольку она точно учитывает фазу действующего центробежного потенциала.

За исключением области резонансных энергий, фазы рассеяния малы ($\delta \ll 1$), поэтому из /15б/ следует полезное соотношение

$$R_m = \pi(a + J/2) / k_N, \quad /16/$$

которое позволяет приблизительно выбрать R_m , соответствующее заданной энергии столкновения ϵ . Из соотношения /15б/ следует также, что для вычисления фаз δ_N с точностью $\sim 10^{-2}$ импульсы k_N необходимо находить с высокой точностью $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$, поскольку они умножаются на большую величину $R_m \geq 100$.

В частности, нельзя пренебрегать различием $\sim (2M)^{-2}$ между \tilde{k}_{1a} и k_N /см. /7/ и /9//, поскольку разность

* Этот прием использовался ранее при решении одноканальной задачи рассеяния /см., например, ^{/12,24/} /.

$$\delta(k_N) - \delta(\tilde{k}_{1a}) = (k_N - \tilde{k}_{1a}) R_m = 2(1 + \kappa) \sum_{i=2}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{k_{1a}^2 - \tilde{k}_{1a}^2} k_N R_m \approx$$

$$\approx \frac{(1 + \kappa)^2}{2M} \pi(a + J/2) \approx 10^{-1} \div 10^{-2} \quad /17/$$

при малых энергиях столкновения \mathcal{E} по порядку величины сравнима с фазой рассеяния $\delta(k_N)$. Кроме того, при вычислении фаз из /15/ при $\mathcal{E} = 0$ выполняется необходимое соотношение $t_{11}(k_N) = 0$, в то время как $t_{11}(k_{1a}) \neq 0$.

Для решения системы уравнений /5/ с граничными условиями /14/ использована программа ВААР^{/14/}, позволяющая находить собственные значения задачи Штурма-Лиувилля для системы ~300 уравнений с абсолютной точностью $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$. Все последующие вычисления выполнены при $N = 1, 3, 6$ и $N = N_B$, т.е. при учете 2, 6 и 10 состояний дискретного спектра адиабатического базиса в разложении /3/ для волновой функции $\Psi_{m_j}^J(\vec{r}, \vec{R})$, а также с учетом сплошного спектра задачи двух центров при $N_B = (6+75)$ и $N_B = (10+119)$ для случаев $J = 0$ и $J = 1$ соответственно.

Эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ системы уравнений /5/ вычислены в работах^{/15/} с абсолютной точностью $10^{-7} - 10^{-5}$.

4. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ МЕЗОАТОМОВ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

Предлагаемый метод решения задачи рассеяния использован для вычисления фаз и сечений упругого рассеяния в реакциях /2/.

На рис.2 представлены результаты вычислений для процесса /2а/, в сечении которого наблюдается эффект Рамзауэра, известный со времени опубликования работ^{/6,7/}. Видно, что учет высших состояний задачи двух центров сдвигает положение минимума в сечении рассеяния /2а/ от энергии столкновения $\mathcal{E}_0 = 0,6$ эВ /при $N = 1$ / до $\mathcal{E}_0 = 1,5$ эВ /при $N = N_B$ / в работах^{/6/} и^{/7/} найдены значения $\mathcal{E}_0 = 0,2$ и $\mathcal{E}_0 = 0,6$ соответственно/. Кроме того, при $\mathcal{E} \rightarrow 0$ сечения, вычисленные при $N = N_B$, превышают сечения, вычисленные при $N = 1$, в три раза.

На рис.3 представлены функции $t_N(k_N)$ для реакции /2а/. Вплоть до энергий $\mathcal{E} \approx 0,2$ эВ зависимости $t_N(k_N)$ с точностью $\sim 10^{-1}$ можно представить разложением

$$(t \approx t_N, k \approx k_N, a \approx a_N, M \approx M_N), \quad /18/$$

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

которое известно из теории одноканального рассеяния^{/26/} на потенциале $U(R)$ с асимптотикой

$$U(R)_{R \rightarrow \infty} = -9M/2R^4. \quad /19/$$

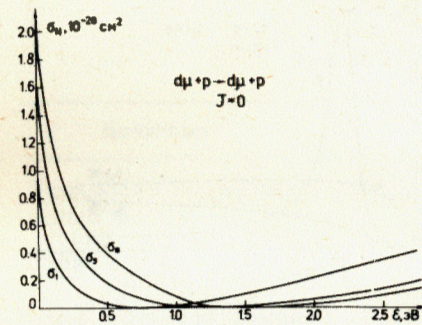


Рис.2. Сечение упругого рассеяния $\sigma_N(\mathcal{E})$ реакции $d\mu + p \rightarrow d\mu + p$ при $J = 0$; N - число пар уравнений в системе /5/. При $\mathcal{E} = 0$ $\sigma_B(0) = 4\pi a^2 = 2,4 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2$.

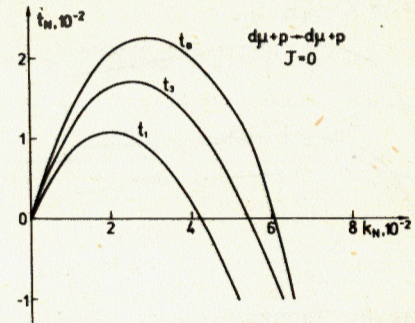


Рис.3. Параметры рассеяния $\delta_N(\mathcal{E})$ реакции $d\mu + p \rightarrow d\mu + p$ при $J = 0$ для $N = 1, 3, N_B = 81$.

Длины рассеяния a_N при различных N соответственно равны: $a_1 = -1,1$, $a_3 = -1,4$, $a_6 = -1,5$, $a_B = -1,6$. Следует, однако заметить, что область применимости понятия длины рассеяния, т.е. область энергий, в которой справедливо соотношение $\sigma_N = 4\pi a_N^2$, очень ограничена / $\mathcal{E} \leq 0,05$ эВ, $k \leq 10^{-2}$ /.

Справедливость разложения /18/ в случае многоканальной задачи /5/, /14/ свидетельствует о том, что, несмотря на присутствие членов $\sim R^{-1}$ в матрице потенциалов

$$U_{ij}(R) = H_{ij}^{(0)} + Q_{ij}^{(0)} \frac{d}{dR} + H_{ij}^{(1)} R^{-1} + 2Q_{ij}^{(1)} R^{-1} \frac{d}{dR} + \dots \quad /20/$$

системы /5/ при $R \rightarrow \infty$, она эквивалентна некоторому эффективному поляризованному потенциалу /19/ в открытом канале /напомним, что первые два члена разложения /20/ обеспечивают правильный импульс k_{1a} при $N \rightarrow \infty$ в /116//.

Для реакции /2б/ эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ отличаются от аналогичных потенциалов для реакции /2а/ лишь очевидными заменами масс частиц. На рис.4 и 5 представлены сечения реакции /2б/ при $J = 0$ и $J = 1$ в зависимости от энергии столкновения \mathcal{E} и размерности N системы уравнений /5/.

Поведение S-волнового сечения определяется в значительной мере уровнем ($J = 0, v = 1$) мезомолекулы dt_μ с относительно малой энергией $\mathcal{E}_{Jv} \approx -35$ эВ. Поскольку при изменении N энергия этого уровня меняется относительно слабо $\mathcal{E}_{Jv}(N = 1) = -32,2$ эВ, $\mathcal{E}_{Jv}(N = N_B) = -34,9$ эВ^{/18/}, то в области энергий столкновения $\mathcal{E} \leq 5$ эВ $\sigma_1 \approx \sigma_B$.

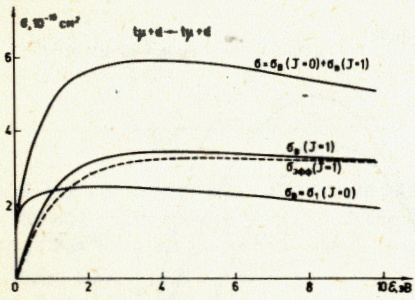


Рис.4. Парциальные σ_B ($J=0$), σ_B ($J=1$) и полное $\sigma_B(J=0) + \sigma_B(J=1)$ сечения рассеяния $\psi + d \rightarrow \psi + d$. Пунктиром изображено P-волновое сечение, вычисленное при $N=4$, $M=11,1$, $\kappa = -0,197$.

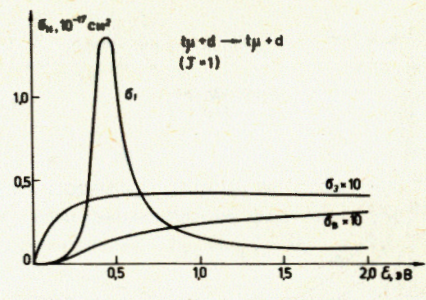


Рис.5. Сечения упругого рассеяния $\psi + d \rightarrow \psi + d$ при $J=1$ в зависимости от числа пар $N=1,3$ и $N_B=129$ решаемых уравнений в системе /5/.

В противоположность этому, сечение в p-волне в зависимости от N качественно меняется /см. рис.5/: при $N=1$ в сечении имеет место резонанс при энергии $\epsilon = 0,46$ эВ, который исчезает при расширении системы /5/ до $N=3$ и при дальнейшем увеличении N сечение изменяется лишь количественно /на фиктивный характер резонанса при $N=1$ указывалось уже в работе /27/ /. При $N \geq 3$ сечение $\sigma_N(J=1)$ определяется энергией ϵ_{Jv} слабосвязанного состояния ($J=v=1$) мезомолекулы $d\psi$, которая для значений $N=3$ и $N=N_B=129$ соответственно равна $\epsilon_{11} = -0,11$ эВ и $\epsilon_{11} = -0,64$ эВ. Полное сечение реакции /26/ $\sigma = \sigma(J=0) + \sigma(J=1)$ при $N=N_B$ представлено на рис.4.

Результаты многолетних экспериментальных и теоретических исследований реакции /2в/ представлены в табл.1. Обращает на себя внимание огромный разброс полученных данных.

Система уравнений для описания этой реакции определена в работах /5/. Для реакции /2в/ эффективные потенциалы $\bar{U}_{ij}(R)$ в системе уравнений /5/ получаются из $U_{ij}(R)$ преобразованием /5,7/

$$\bar{U} = BUB^{-1},$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \delta_{ij}, \quad /21/$$

а значение γ_N^2 в /9/-/11/ определяется формулой $\gamma_N^2 = -2M(\epsilon - \Delta E)$, где $\Delta E = 0,182$ эВ. При построении эффективных потенциалов /21/ для реакции /2в/ из релятивистских поправок к потенциалам ис-

Таблица 1

Сечение упругого рассеяния $\rho\mu(\uparrow\uparrow) + p$

Источник	$\sigma, 10^{-21} \text{ см}^2$
Зельдович и Герштейн /1960/	1,2
Cohen et al. /1960/	8,2
Джелепов и др. /1965/	167+30
Alberigi et al. /1967/	7,6+0,7
Матвеевко и Пономарев /1970/	2,5
Матвеевко и др. /1975/	0,2
Пономарев и др. /1978/	35
Bertin et al. /1978/	14+2
Данная работа*	19

*Результат получен при энергии $\epsilon = 0,04$ эВ и $N=N_B$; при $N=1,3,6$ вычисленные сечения соответственно равны: $\sigma_1 = 0,1$, $\sigma_3 = 8,4$, $\sigma_6 = 12$ /см. рис.6/.

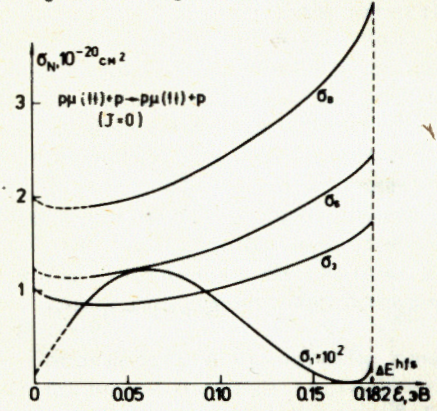


Рис.6. Сечение $\sigma_N(\epsilon)$ реакции $\rho\mu(\uparrow\uparrow) + p \rightarrow \rho\mu(\uparrow\uparrow) + p$ при $N=1,3,6$, $N_B=81$ ($J=0$). Пунктир - экстраполяция $\sigma_N(\epsilon)$ к $\epsilon=0$.

пользован лишь контактный член. Численные проверки показали, что относительный вклад в сечение отброшенных членов, обусловленных взаимодействием спинов мюона и ядер, не превышает величины $\sim 10^{-3}$.

Из рис.6 видно, что при переходе от $N=1$ к $N=3$ вычисленное сечение реакции /2в/ меняется примерно в 100 раз, а при дальнейшем увеличении до $N=N_B$ возрастает еще в 2 раза. Отсюда следует, что двухуровневое приближение, используемое во всех прежних вычислениях, в данном случае совершенно непригодно. Отметим, однако, что сечения, вычисленные в так называемом "простом подходе" /28/, который отличается от обычного двухуровневого приближения лишь заменой $M \rightarrow M_a$, менее, чем в 2 раза отличаются от значений данной работы при $N=N_B$ /см. табл.1, а также рис.5/.

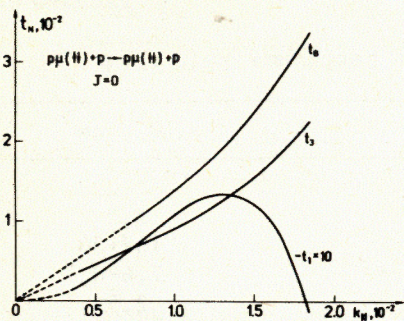


Рис.7. Параметры упругого рассеяния $\delta_N(\xi)$ реакции $\rho\mu(N) + p \rightarrow \rho\mu(N) + p$ при $N = 1, 3$ и $N_B = 81$ ($J = 0$). Пунктир - экстраполяция $\delta_N(\xi)$ к $\xi = 0$.

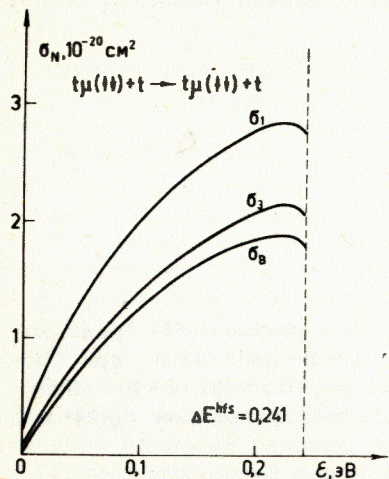


Рис.9. Сечения $\sigma_N(\xi)$ реакции $t\mu(H) + t \rightarrow t\mu(H) + t$ при $N = 1, 3$ и $N_B = 81$ ($J = 0$). Значение $\sigma_B(0) = 2 \cdot 10^{-23}$ см² получено путем экстраполяции к $\xi = 0$.

На рис.7 и 8 представлены величины t_N и $a_N = -t_N/k_N$ для реакции /2в/. Кривые $a_N(k_N)$ обнаруживают характерный максимум, соответствующий точке перегиба функций t_N на рис.7. Из сравнения рис.3 и 7 становится ясной причина резкой зависимости результа-

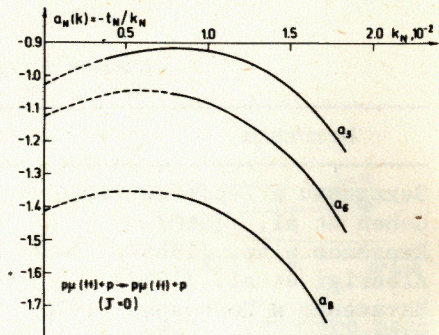


Рис.8. Функции $a_N(k_N) = -t_N(k_N)/k_N$, вычисленные для реакции $\rho\mu(H) + p \rightarrow \rho\mu(H) + p$ при $N = 3, 6$ и $N_B = 81$ ($J = 1$). Длины рассеяния $a_N = \lim_{\xi \rightarrow 0} \delta_N(\xi)$ получены экстраполяцией к $\xi = 0$.

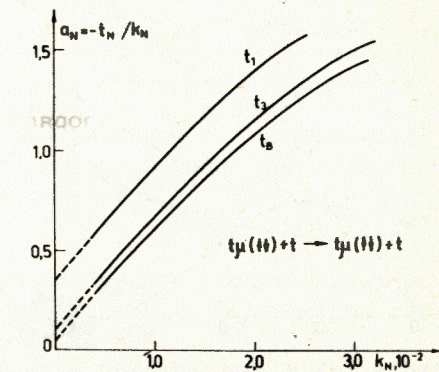


Рис.10. Функции $a_N(k_N) = -t_N(k_N)/k_N$, вычисленные для реакции $t\mu(H) + t \rightarrow t\mu(H) + t$ при $N = 1, 3$ и $N_B = 81$ ($J = 0$). Длины рассеяния $a_N = \lim_{\xi \rightarrow 0} \delta_N(\xi)$ получены экстраполяцией к $\xi = 0$.

тов вычислений от числа уравнений N в случае реакции /2в/. Можно видеть, что в этом случае налицо ситуация, имитирующая при $N = 1$ эффект Рамзауэра, который, однако, столь же фиктивен, как и резонанс в P -волне реакции /2б/ при $N = 1$ и точно так же исчезает при расширении системы уравнений /5/.

На рис.9 представлена зависимость сечения упругого рассеяния /2г/. Обращает на себя внимание резкая зависимость сечения от энергии столкновения, а также аномально малая его величина при $\xi \rightarrow 0$. Из рис.10, где представлены функции $a_N = -t_N/k_N$, видно, что в данном случае область применения понятия длины рассеяния / $\xi \leq 2 \cdot 10^{-4}$ эВ, $k \leq 10^{-3}$ / еще уже, чем в случае реакции /2а-2в/.

Отметим также пороговую особенность /29/ в сечении /2г/, отмеченную в работе /7/. При расширении системы уравнений эта особенность сохраняется.

На рис.2-10 можно проследить зависимость значений σ_N и t_N от числа пар N уравнений /5/, использованных для их вычисления. Легко видеть, что во всех рассмотренных случаях при переходе от двухуровневого приближения ($N = 1$) к многоуровневому ($N = 3, 10, N_B$) поведение сечений как функций энергии столкновения ξ качественно меняется*. Наибольшие качественные изменения наблюдаются при переходе от $N = 1$ к $N = 3$ /или к $N = 4$ при $J = 1$ / , при дальнейшем увеличении N происходят лишь количественные изменения параметров рассеяния. Во всех рассмотренных реакциях вклад состояний непрерывного спектра ($N > 10$) в сечение упругого рассеяния составляет ту же величину /~40%/ от вклада всех состояний $2 \leq N \leq 10$, т.е. того же порядка, что и вклад непрерывного спектра в энергию связи мезомолекул /18/.

В табл.2 представлены сечения и длины рассеяния для процессов /2/, найденные из системы уравнений /5/ при $N = N_B$. Приведенные длины рассеяния использованы для вычисления сечений $\sigma = 4\pi a^2$ при $\xi = 0$.

Погрешность в вычислении сечений упругого рассеяния реакций /2/ по нашим оценкам составляет ~10% и определяется как погрешностью аппроксимации исходной бесконечной системы уравнений конечной системой /5/, так и точностью вычислительной схемы, используемой для нахождения состояний $\xi_N^{(a)}$.

Используемые алгоритмы /14/ позволяют вычислить $\xi_N^{(a)}$ и фазы рассеяния с абсолютной точностью $\sim 10^{-4}$. Алгоритмы более высокого порядка точности описаны в работах /30/. Результаты расчетов, выполненных в данном подходе при $N = 1$, совпадают с аналогичными расчетами, выполненными методом фазовых функций /25/ с относитель-

*Напомним /18,27/, что при вычислении энергии слабосвязанных состояний мезомолекул именно учет членов $\sim (2M)^{-2}$ в потенциалах $U_{ij}(R)$ приводит к появлению нового уровня ($J = v = 1$) в мезомолекуле $d_t\mu$.

Сечения и длины упругого рассеяния мезоатомов*

ϵ (эВ)	Процесс	$\rho_{\mu}(h)+\rho$	$t_{\mu}(v)+t$	$d_{\mu}+\rho$	$t_{\mu+d}$	$t_{\mu+d}$	$t_{\mu+d}$
					($\gamma=0$)	($\gamma=1$)	
0		2,0	0,002	2,4	12	0	12
0,04		1,9	0,62	1,6	16	0	16
0,10		2,4	1,2	1,2	17	2	19
0,15		3,1	1,6	1,0	18	4	22
0,3		-	-	0,65	21	9	30
0,5		-	-	0,38	22	14	36
1		-	-	0,07	24	26	50
3		-	-	0,18	25	34	59
5		-	-	4,00	24	34	58
10		-	-	11,9	19	32	51
Длина рассеяния							
a (м.э.е.)		-1,6	0,05	-1,7	3,8	-	-
m_{μ}/m_e		1,113	1,038	1,056	1,038	-	-

* Сечения приведены в единицах 10^{-20} см², длины рассеяния - в мезоатомных единицах
 $a_{\mu} = \hbar^2/m_{\mu}e^2 = 2,559 \cdot 10^{-11}$ см.

ной точностью $10^{-2} - 10^{-3}$. Для вычисления вклада высших состояний задачи двух центров в сечения рассеяния реакций /2/, можно также использовать предложенный в работе /31/ способ экстраполяции $N \rightarrow \infty$ при вычислении уровней энергии μ -мезомолекул.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развит метод решения многоканальной задачи рассеяния с одним открытым и многими закрытыми каналами. Метод допускает обобщение на случай нескольких открытых каналов, что позволяет вычислять сечения неупругих процессов. Эффективность метода продемонстрирована на примере вычисления сечений упругого рассеяния в системе трех заряженных частиц. Однако сам метод не зависит от специфики адиабатического базиса, использованного для решения исходной задачи рассеяния. Одно из преимуществ развитого метода состоит в том, что он позволяет решать задачу Коши для системы уравнений даже при наличии сильной связи каналов в асимптотической области, что для большинства методов представляет значительные трудности /23,32-34/. Основная идея метода - сведение задачи Коши к задаче Штурма-Лиувилля для системы уравнений большой размерности - реализована нами впервые.

Предлагаемый метод обладает достаточной общностью и может быть использован при решении разнообразных задач атомной и ядерной физики, в теории распространения волн, физике твердого тела и т.д. Естественная область применения метода - рассеяние при малых энергиях, когда в сечения вносят вклад лишь несколько парциальных волн, т.е. как раз та область энергий, где все приближенные методы решения задачи рассеяния оказываются неэффективными.

Рассмотренные нами примеры из области мезоатомной физики демонстрируют достаточное разнообразие возможностей метода: он позволяет единым образом описывать различные физические явления: эффект Рамзауэра, пороговые особенности и резонансы в сечении, а также эффекты, обусловленные влиянием закрытых каналов /типа резонансов Фешбаха /26/ /.

В заключение авторы выражают благодарность С.И.Виницкому, И.В.Пузынину и Л.Н.Сомову за полезные обсуждения на различных этапах работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

При $R \rightarrow \infty$ недиагональные матричные элементы $Q_{ia,jb} = Q_{ib,ja} = H_{ia,jb} = H_{ib,ja} = 0^{/20/}$ и система уравнений /5/ распадается на две подсистемы. Рассмотрим подсистему, которая в асимптотической об-

ласти описывает относительное движение $(a\mu) + b$. Для нее система уравнений /5/ при $J=0$ имеет вид:

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + \tilde{k}^2 - 2Q^{(0)} \frac{d}{dR} - H^{(1)} \cdot \frac{1}{R}\right) \chi = 0, \quad /п.1/$$

где

$$\tilde{k}^2 = \begin{pmatrix} \tilde{k}_1^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \tilde{k}_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{k}_3^2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \tilde{k}_N^2 \end{pmatrix} \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \vdots \\ \chi_N \end{pmatrix}, \quad /п.2/$$

$$Q^{(0)} = (1+\kappa) \begin{pmatrix} 0 & q_{12} & q_{13} & \dots & q_{1N} \\ -q_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -q_{13} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -q_{1N} & 0 & 0 & \dots & q_{NN} \end{pmatrix}, \quad H^{(1)} = 2(1+\kappa) \begin{pmatrix} 0 & q_{12} & q_{13} & \dots & q_{1N} \\ q_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ q_{13} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{1N} & 0 & 0 & \dots & q_{NN} \end{pmatrix}$$

Здесь мы воспользовались свойством $H_{ij}^{(1)} = 2Q_{ij}^{(0)}$, $i < j$. Используя результаты работы /22/, получаем с точностью до членов $\sim (2M)^{-2}$

$$\chi_i = \frac{2(1+\kappa) q_{i1}}{\tilde{k}_1^2 - \tilde{k}_i^2} \left(\frac{d}{dR} - \frac{1}{R}\right) \chi_1. \quad /п.3/$$

Подставляя /п.3/ в первое уравнение системы /п.1/, получим

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \tilde{k}_1^2 - 4(1+\kappa)^2 \sum_{i \neq 1}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{\tilde{k}_1^2 - \tilde{k}_i^2} \left(\frac{d}{dR} + \frac{1}{R}\right) \left(\frac{d}{dR} - \frac{1}{R}\right)\right] \chi_1 = 0. \quad /п.4/$$

Воспользовавшись операторным равенством

$$\left(\frac{d}{dR} + \frac{1}{R}\right) \left(\frac{d}{dR} - \frac{1}{R}\right) = \frac{d^2}{dR^2}, \quad /п.5/$$

приходим к уравнению

$$\left[\left(1 - 4(1+\kappa)^2 \sum_{i \neq 1}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{\tilde{k}_1^2 - \tilde{k}_i^2}\right) \frac{d^2}{dR^2} + \tilde{k}_1^2\right] \chi_1 = 0. \quad /п.6/$$

В пределе $N \rightarrow \infty$, согласно /116/,

$$\left[1 - 4(1+\kappa)^2 \sum_{i \neq 1}^N \frac{q_{1i} q_{i1}}{\tilde{k}_1^2 - \tilde{k}_i^2}\right] \rightarrow \frac{M}{M_a}$$

откуда следует

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + k_{1a}^2\right] \chi_1 = 0,$$

где

$$k_{1a}^2 = \frac{M_a}{M} \tilde{k}_1^2.$$

Этот результат совпадает с выводом работы /21/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б., Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, с.581.
2. Gerstein S.S., Ponomarev L.I. Mesomolecular Processes Induced by μ^- and π^- Mesons. In: Muon Physics (Eds.V.Hughes and C.S. Wu). Academic Press, New York and London, vol.III, 1975.
3. Ponomarev L.I. 6th International Conference on Atomic Physics. Mesic Atomic and Mesic Molecular Processes in the Hydrogen Isotope Mixtures. Zinatne, Riga. Plenum Press, New York and London, 1978.
4. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.6, с.1336.
5. Герштейн С.С. ЖЭТФ, 1958, 34, с.463; 1961, 40, с.698.
6. Cohen S., Judd D.J., Riddel R.J. Phys.Rev., 1960, 119, p.386.
7. Матвеев А.В., Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1975, 68, с.437.
8. Джелепов В.П., Ермолов П.Ф., Фильченков В.В. ЖЭТФ, 1965, 49, с.393.
9. Alberigi A. et al. Nuovo Cimento, 1967, 47B, p.72.
10. Bertin A. et al. Phys.Rev., 1973, 80, p.3774.
11. Bertin A., Massa I., Piccinini M. Phys.Lett., 1978, 78B, p.355.
12. Shore B.W. J.Phys.B, 1974, 7, p.2502.

13. Ponomarev L.I. et al. Ann.Phys., 1978, 110, p.274.
14. Виноцкий С.И. и др. ОИЯИ, P5-12787, Дубна, 1979; Мележик В.С. и др. ОИЯИ, P5-12790, Дубна, 1979.
15. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys.B, 1978, 11, p.3861; Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J.Phys.B, 1977, 10, p.1335.
16. Пономарев Л.И. Доклад на X Европейской конференции по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу. Москва, 14-19 сентября 1981 г. Изд-во ИАЭ, М., 1982, т.2, с.66.
17. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
18. Виноцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698.
19. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys.B, 1976, 13, p.2255.
20. Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys.B, 1979, 12, p.567.
21. Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., Vukaylovic F.R. J.Phys.B, 1980, 14, p.591.
22. Ponomarev L.I., Somov L.N., Vukaylovic F.R. J.Phys.B, 1980, 14, p.591.
23. Бэрк П., Ситон М. В сб.: Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений. "Мир", М., 1974.
24. Нечаев Ю.И., Смирнов Ю.Ф. ЯФ, 1982, т.35, 6, с.1835.
25. Файфман М.П. ЯФ, 1977, 26, с.434.
26. Мотт Н.Ф., Месси Г.Ю. Теория атомных столкновений. "Мир", М., 1969.
27. Виноцкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849.
28. Пономарев Л.И., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ЯФ, 1979, 29, с.133.
29. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. "Наука", М., 1971.
30. Мележик В.С., Сомов Л.Н. ОИЯИ, P11-81-856, Дубна, 1981; Виноцкий С.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. ОИЯИ, P11-82-428, Дубна, 1982.
31. Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1982, 82, с.670.
32. Гайлитис М.К. УФН, 1975, 116, с.665.
33. von Seggern M., Toenies J.P. Zs.Phys., 1969, 218, p.341.
34. Smith E.R., Henry R.J.W. Phys.Rev., 1973, A7, p.1585; Phys.Rev., 1973, A8, p.572.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 февраля 1983 года.

Мележик В.С., Пономарев Л.И., Файфман М.П. P4-83-89
Процессы упругого рассеяния в системе трех частиц
с кулоновским взаимодействием

Развит метод вычисления сечений упругого рассеяния в системе трех частиц при малых энергиях столкновений, состоящий в разложении волновой функции системы по адиабатическому базису и сведении возникающей многоканальной задачи рассеяния с большим числом ~ 300 закрытых каналов к задаче на собственные значения. Возможности метода демонстрируются на примере вычисления сечений упругого рассеяния мезоатомов водорода на ядрах изотопов водорода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Melezhik V.S., Ponomarev L.I., Feifman M.P. P4-83-89
Elastic Scattering Processes in Three-Particle System
with Coulomb Interaction

A method is developed for the calculation of elastic scattering cross sections of a three-body particle system at low collision energies. The method consists in expanding the system wave function over the adiabatic basis and reducing the multi-channel scattering problem with a large number (~ 300) of closed channels to the eigenvalue problem. The method is tested by calculating the cross sections of elastic scattering of hydrogen mesic atoms on nuclei of hydrogen isotopes.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.