91-261

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-91-261

В.Б.Беляев, О.И.Картавцев*, В.И.Кочкин

АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ЯКУБОВСКОГО ДЛЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ ОДНОЙ ЧАСТИЦЫ НА СВЯЗАННОМ КОМПЛЕКСЕ ТРЕХ ЧАСТИЦ

Направлено в труды Тверского университета

*Ташкентский государственный университет

1991

Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. Р4-91-261

Алгоритм численного решения дифференциальных уравнений Якубовского для задачи рассеяния одной частицы на связанном комплексе трех частиц

Данная работа является продолжением численных экспериментов по решению уравнений Якубовского для задачи рассеяния одной частицы на связанном комплексе трех частиц. В отличие от предыдущих работ здесь используется более точная волновая функция для связанного состояния трех частиц, рассчитанная авторами по разработанной ими же программе на языке Фортран. Полученные длины сравниваются с прежними расчетами авторов и имеющимися в литературе данными.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод авторов

Belyaev V.B., Kartavtsev O.I., Kochkin V.I. P4-91-261

The Algorithm of Numerical Calculations of Differential Yakubovsky Equations for the (1+3) Scattering Problem

This work is the continuation of the numerical calculations of the Yakubovsky equations for the scattering problem for four spinless identical particles. More exact wave function for the bound complex of three particles is used here as distinct from the foregoing calculations. This wave function is calculated by means of FORTRAN program, which is made by the authors. The obtained scattering lengths are compared with the former calculations of the authors and with the available data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991

Данная работа является продолжением численных экспериментов[6,7] по решению уравнений Якубовского для задачи рассеяния одной частицы на связанном комплексе трех частиц и основана на использовании более точной волновой функции трех частиц связанного комплекса Φ_3, определяющей граничные условия в дифференциальных уравнениях Якубовского и рассчитанной нами путем решения уравнения Фаддеева для трех частиц по разработанной нами же программе на языке Фортран.

Для случая четырех тождественных бесспиновых частиц, взаимодействующих в S-волне, дифференциальные уравнения Якубовского имеют вид[2]:

$$[\,\Delta + E - V(x)\,(1 + \hat{L})\,]\,|\,\Psi > = 0\,, \tag{1}$$

здесь

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$\Psi(x,y,z)$ — двухкомпонентная функция $\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$,

$$\hat{L} \equiv \begin{pmatrix} \hat{L}^{11} & \hat{L}^{12} \\ \hat{L}^{21} & \hat{L}^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{K}(1+\hat{K}_1) & \hat{K}\hat{K}_2 \\ \hat{K}_2\hat{P}_{12} & \hat{P}_{12} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$\hat{K}\,\Psi(x,y,z) = \int_{-1}^{1} du\, \frac{xy}{x'y'}\,\Psi(x',y',z')\,, \tag{3}$$

$$\hat{K}_{1,2}(x',y',z) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} dv\, \frac{y'z}{y''_{1,2}\,z''_{1,2}}\,\Psi(x',y''_{1,2},z''_{1,2})\,, \tag{4}$$

$$\hat{P}_{12}\,\Psi(x,y,z) = \Psi(y,x,z)\,, \tag{5}$$

$$x'^2 = \frac{1}{4}(x^2 + 3y^2 - 2\sqrt{3}\,uxy) \quad\quad y'^2 = \frac{1}{4}(3x^2 + y^2 + 2\sqrt{3}\,uxy) \qquad (6)$$

$$\left.\begin{aligned} y''^2_{1,2} &= y'^2\cos^2 a_{1,2} + z^2\sin^2 a_{1,2} + vy'z\sin 2a_{1,2} \\ z''^2_{1,2} &= y'^2\sin^2 a_{1,2} + z^2\cos^2 a_{1,2} - vy'z\sin 2a_{1,2} \end{aligned}\right\}, \qquad (7)$$

$a_{1,2}$ определяются из соотношений:

$$\cos a_1 = \frac{1}{3}, \quad \cos a_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \qquad (8)$$

$\Psi(x, y, z)$ в уравнениях (1) удовлетворяет граничным условиям:

$$\Psi(0, y, z) = \Psi(x, 0, z) = \Psi(x, y, 0) = 0. \qquad (9)$$

В уравнениях (1) обозначим

$$E = -\kappa^2, \quad V(x) = -v(x) \qquad (10)$$

(в частности, $v(x) = \gamma e^{-\beta x^2}$ при $\gamma = 1{,}24186$, $\beta = 0{,}3906$), тогда уравнение (1) принимает вид

$$[\,\Delta + v(x)\,(1 + \hat{L}) - \kappa^2]\,|\Psi> = 0\,. \qquad (11)$$

В задаче нахождения длины рассеяния a для процесса $1 + 3 \to 1 + 3$ κ^2 есть энергия связи 3-частичной мишени и считается заданной вместе с функцией 3-частичного связанного состояния $\Phi_3(x, y)$. Граничные условия для уравнения (11) имеют вид (9) и дополняются в задаче рассеяния асимптотическим условием

$$<x, y, z\,|\,\Psi> \underset{\rho\to\infty}{\to} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Phi_3(x, y)\,(z - a), \qquad (12)$$

что соответствует рассеянию при нулевой кинетической энергии налетающей частицы.

Тогда решение уравнения (11) ищем в виде

$$<x, y, z\,|\,\Psi> = <x, y, z\,|\,\Phi> + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Phi_3(x, y)\,[\,z - a(1 - e^{-dz})\,]. \qquad (13)$$

Здесь выбор решения в форме (13) диктуется, с одной стороны, граничными условиями (9), а с другой стороны, асимптотическим условием (12). Множитель $(1 - e^{-dz})$ вводится для сохранения поведения решения на малых расстояниях. В результате для функции $\Phi(x, y, z)$ получаем неоднородное уравнение

$$[\,\Delta + v(x)\,(1 + \hat{L}) - \kappa^2\,]\,|\,\Phi> + f = 0\,. \qquad (14)$$

Из уравнения (14) методом конечномерной аппроксимации находим длину рассеяния a вместе с функцией $\Phi(x, y, z)$. В уравнении (14)

$$f(x, y, z) = f_1(x, y, z) - a f_2(x, y, z), \qquad (15)$$

$$f_1 \equiv \begin{pmatrix} f_1^1 \\ f_1^2 \end{pmatrix} = v(x) \begin{pmatrix} \hat{K} & \hat{K}_1 \\ \hat{K}_2 & \hat{P}_{12} \end{pmatrix} \Phi_3(x, y)\,z, \qquad (16)$$

$$f_2 \equiv \begin{pmatrix} f_2^1 \\ f_2^2 \end{pmatrix} = v(x) \left\{ \begin{bmatrix} -d^2 e^{-dz}\,\Phi_3(x,y) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{K} & \hat{K}_1 \\ \hat{K}_2 & \hat{K}_{12} \end{bmatrix} \Phi_3(x,y)(1 - e^{-dz}) \right\}. \qquad (17)$$

Обозначим

$$W = v(x)\,(1 + \hat{L}) - \kappa^2$$

и будем рассматривать уравнение вида

$$(\Delta + W)\,|\,\Phi> + |f> = 0. \qquad (18)$$

Зададим оператор $\tilde{\Delta}$, не выписывая его явно, соотношением

$$\tilde{\Delta}\,\Delta^{-1}\,|\,\chi_i> = |\,\chi_i>, \quad i = \overline{0, M}. \qquad (19)$$

Ищем решение уравнения (18) в виде

$$|\,\Phi> = W^{-1}[\,\sum_{i=0}^{M} c_i\,|\,\chi_i> + |\,f>]. \qquad (20)$$

Если выбрать

$$c_0\,|\,\chi_0> = -\,|\,f>, \qquad (21)$$

то имеем

$$|\Phi\rangle = W^{-1}\sum_{i=1}^{M} |\chi_i\rangle. \tag{22}$$

Вводя функции $|\phi_i\rangle$:

$$|\chi_i\rangle = W|\phi_i\rangle, \tag{23}$$

получим

$$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{M} c_i|\phi_i\rangle. \tag{24}$$

В уравнении (18) производим замену Δ на $\tilde\Delta$ и проектируем уравнение

$$(\tilde\Delta + W)|\Phi\rangle + f = 0 \tag{25}$$

на $\Delta^{-1}|\chi_\ell\rangle$, $\ell = \overline{0, M}$, получая с помощью (20)

$$\sum_{i=1}^{M} \langle\chi_\ell|\Delta^{-1} + W^{-1}|\chi_i\rangle c_i + \langle\chi_\ell|\Delta^{-1}|f\rangle = 0. \quad \ell = \overline{0, M}$$

Посредством функций $|\phi_i\rangle$ получаем

$$\left.\begin{array}{l} \sum_{i=1}^{M} A_{\ell i} c_i + u_\ell = 0, \quad \ell = \overline{1, M} \\ \sum_{i=1}^{M} (u_i^* + \langle f|\phi_i\rangle) c_i + \langle f|\Delta^{-1}|f\rangle = 0 \end{array}\right\}, \tag{26}$$

где

$$A_{\ell i} = \langle\phi_\ell|W\Delta^{-1}W + W|\phi_i\rangle, \tag{27}$$

$$u_\ell = \langle\phi_\ell|W\Delta^{-1}|f\rangle. \tag{28}$$

В случае

$$|f\rangle = |f_1\rangle - a|f_2\rangle \tag{29}$$

имеем

$$u_\ell = \beta_\ell - a\gamma_\ell,$$

и из (26) выводим уравнение для параметра a. Поскольку (29) есть линейная форма относительно a, а выражения в формуле (26) содержат еще билинейную форму относительно a, то уравнение для определения длины рассеяния a получается квадратным уравнением и имеет вид

$$\begin{aligned} &a^2\Big[\sum_{i=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{M}(\gamma_\ell^* + \langle f_2|\phi_\ell\rangle)(A^{-1})_{\ell i}\gamma_i - \langle f_2|\Delta^{-1}|f_2\rangle\Big] + \\ &+ a\Big\{-\sum_{i=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{M}\big[(\gamma_\ell^* + \langle f_2|\phi_\ell\rangle)(A^{-1})_{\ell i}\beta_i + (\beta_\ell^* + \langle f_1|\phi_\ell\rangle)(A^{-1})_{\ell i}\gamma_i\big] + \\ &+ \langle f_2|\Delta^{-1}|f_1\rangle + \langle f_1|\Delta^{-1}|f_2\rangle\Big\} + \sum_{i=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{M}(\beta_\ell^* + \langle f_1|\phi_\ell\rangle)(A^{-1})_{\ell i}\beta_i - \\ &- \langle f_1|\Delta^{-1}|f_1\rangle = 0. \end{aligned} \tag{30}$$

Пробные функции ϕ_i в разложении (24) для решения Φ уравнения (18) выберем в виде

$$\phi_i(x, y, z) = \Phi_i(\rho)\,\phi_{\ell_i n_i}(x, y, z), \tag{31}$$

$$\Phi_i(\rho) = e^{-a_i\rho}(1 - e^{-a_i\rho})^{2\ell_i + 1}, \tag{32}$$

$$\phi_{\ell n} = 2c_{\ell n} P_{2\ell+1}^{2n}(\cos\beta)\sin 2n\alpha, \tag{33}$$

$$c_{\ell n}^2 = \frac{(4\ell+3)(2\ell-2n+1)!}{\pi(2\ell+2n+1)!}. \tag{34}$$

P_ℓ^m — присоединенные многочлены Лежандра.

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \tag{35}$$

$$\left.\begin{aligned} x &= \rho\cos\beta \\ y &= \rho\sin\beta\cos\alpha \\ z &= \rho\sin\beta\sin\alpha \end{aligned}\right\} . \qquad (36)$$

Для пробных функций ϕ_i в (31) оператор W имеет явное выражение

$$W|\phi_i> = [v(x) - \kappa^2]\phi_i(x,y,z) +$$
$$+ v(x)\Phi_i(\rho)\sum_{n=1}^{\ell_i}\begin{pmatrix} L^{1m_i}_{nn_i}(\ell_i) \\ L^{2m_i}_{nn_i}(\ell_i)\end{pmatrix}\phi_{\ell_i n}(x,y,z). \qquad (37)$$

Матричные элементы оператора $\hat{L}$ в (2) определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} L^{11}_{nn'}(\ell) &= (1+\frac{1}{2}\lambda_{n'}(a_1))\sum_{n''=1}^{\ell} b^{\ell}_{nn''} b^{\ell}_{n'n''}\lambda_{n''}(\frac{\pi}{6}), \\ L^{12}_{nn'}(\ell) &= \frac{1}{2}\lambda_{n'}(a_2)\sum_{n''=1}^{\ell} b^{\ell}_{nn''} b^{\ell}_{n'n''}\lambda_{n''}(\frac{\pi}{6}), \\ L^{21}_{nn'}(\ell) &= \frac{1}{2}(-1)^{n+n'+1} b^{\ell}_{nn'}\lambda_n(a_2), \\ L^{22}_{nn'}(\ell) &= (-1)^{n+n'+1} b^{\ell}_{nn'}. \end{aligned} \qquad (38)$$

Ядро оператора Δ^{-1}, или его функция Грина g, имеет вид

$$g(x,y,z,x',y',z') = -\frac{1}{4\pi}\{[(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2]^{-1/2} -$$
$$-[(x+x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2]^{-1/2} - [(x-x')^2+(y+y')^2+(z-z')^2]^{-1/2} -$$
$$-[(x-x')^2+(y-y')^2+(z+z')^2]^{-1/2} + [(x+x')^2+(y+y')^2+(z-z')^2]^{-1/2} + \qquad (39)$$
$$+[(x+x')^2+(y-y')^2+(z+z')^2]^{-1/2} + [(x-x')^2+(y+y')^2+(z+z')^2]^{-1/2} -$$
$$-[(x+x')^2+(y+y')^2+(z+z')^2]^{-1/2}\}.$$

Обозначим элемент объема $d\Omega = dx\,dy\,dz$. Величины $A_{\ell i}$ в уравнении (27) имеют вид

$$A_{\ell i} = \int d\Omega\, d\Omega_1 g(x,y,z,x_1,y_1,z_1)\sum_{m=1}^{2}[(v(x)-\kappa^2)\phi_i(x,y,z)\delta_{mm_i} +$$
$$+v(x)\Phi_i(\rho)\sum_{n=1}^{\ell_i} L^{mm_1}_{nn_1}(\ell_i)\phi_{\ell_i n}(x,y,z)][(v(x_1)-\kappa^2)\phi_j(x_1,y_1,z_1)\delta_{mm_j} + \qquad (40)$$
$$+v(x_1)\Phi_j(\rho_1)\sum_{n_1=1}^{\ell_j} L^{mm_j}_{n_1 n_j}(\ell_j)\phi_{\ell_j n_1}(x_1,y_1,z_1)] + B_{ij},$$

$$B_{ij} = <\phi_i|W|\phi_j> = \int d\Omega\,\phi_i(x,y,z)[(v(x)-\kappa^2)\phi_j(x,y,z)\delta_{m_i m_j} +$$
$$+\Phi_j(\rho)v(x)\sum_{n=1}^{\ell_j} L^{m_i m_j}_{nn_j}(\ell_j)\phi_{\ell_j n}(x,y,z)]. \qquad (41)$$

В формулах (16), (17) величины f^m_i имеют вид

$$f^1_1(x,y,z) = \frac{1}{2}v(x)\int_{-1}^{1}dv\int_{-1}^{1}du\,\frac{xyz}{x'y''_1 z''_1}\Phi_3(x',y''_1)z''_1, \qquad (42)$$

$$f^2_1(x,y,z) = \frac{1}{2}v(x)\int_{-1}^{1}dv\,\frac{xz}{x'_2 z'_2}\Phi_3(y,x'_2)z'_2, \qquad (43)$$

$$f^1_2(x,y,z) = v(x)[-d^2e^{-dz}\Phi_3(x,y) +$$
$$+\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}dv\int_{-1}^{1}du\,\frac{xyz}{x'y''_1 z''_1}\Phi_3(x',y''_1)(1-e^{-dz''_1})], \qquad (44)$$

$$f^2_2(x,y,z) = \frac{1}{2}v(x)\int_{-1}^{1}dv\,\frac{xz}{x'_2 z'_2}\Phi_3(y,x'_2)(1-e^{-dz'_2}), \qquad (45)$$

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{1}{2}(x^2+3y^2-2\sqrt{3}\,uxy)^{1/2} \\ y' &= \frac{1}{2}(3x^2+y^2+2\sqrt{3}\,uxy)^{1/2} \\ y''_1 &= \frac{1}{3}(y'^2+8z^2+4\sqrt{2}\,vy'z)^{1/2} \\ z''_1 &= \frac{1}{3}(8y'^2+z^2-4\sqrt{2}\,vy'z)^{1/2} \\ x'_2 &= [\frac{1}{3}(x^2+2z^2+2\sqrt{2}\,vxz)]^{1/2} \\ z'_2 &= [\frac{1}{3}(2x^2+z^2-2\sqrt{2}\,vxz)]^{1/2} \end{aligned}\right\}. \qquad (46)$$

Остальные члены, входящие в формулу (30) для вычисления длины рассеяния a, имеют следующие выражения:

$$\langle f_i|\Delta^{-1}|f_j\rangle = \int d\Omega\, d\Omega_1\, g(x,y,z,x_1,y_1,z_1)\sum_{m=1}^{2} f_i(x,y,z)\, f_j^m(x_1,y_1,z_1), \quad i,j=\overline{1,2} \tag{47}$$

$$\beta_i = \langle \phi_i|W\Delta^{-1}|f_1\rangle =$$

$$= \int d\Omega\, d\Omega_1\, g(x,y,z,x_1,y_1,z_1)\sum_{m=1}^{2} f_1^m(x_1,y_1,z_1)\Big[\delta_{mm_i}(v(x) - \kappa^2)\,\phi_i(x,y,z) + v(x)\,\Phi_i(\rho)\sum_{n=1}^{\ell_i} L_{nn_i}^{mm_i}(\ell_i)\,\phi_{\ell_i n}(x,y,z)\Big], \tag{48}$$

$$\gamma_i = \langle \phi_i|W\Delta^{-1}|f_2\rangle =$$

$$= \int d\Omega\, d\Omega_1\, g(x,y,z,x_1,y_1,z_1)\sum_{m=1}^{2} f_2^m(x_1,y_1,z_1)\Big[\delta_{mm_i}(v(x) - \kappa^2)\,\phi_i(x,y,z) + v(x)\,\Phi_i(\rho)\sum_{n=1}^{\ell_i} L_{nn_i}^{mm_i}(\ell_i)\,\phi_{\ell_i n}(x,y,z)\Big], \tag{49}$$

$$\langle f_k|\phi_i\rangle = \int d\Omega\, f_k^{m_i}(x,y,z)\,\Phi_i(\rho)\,\phi_{\ell_i n_i}(x,y,z). \quad k=\overline{1,2};\; i=\overline{1,M} \tag{50}$$

Ошибка аппроксимации вычисляется с помощью функционалов оценки

$$F_1 = \frac{\langle\Phi|\Delta-\tilde{\Delta}|\Phi\rangle^2}{\langle\Phi|\Delta|\Phi\rangle^2}, \tag{51}$$

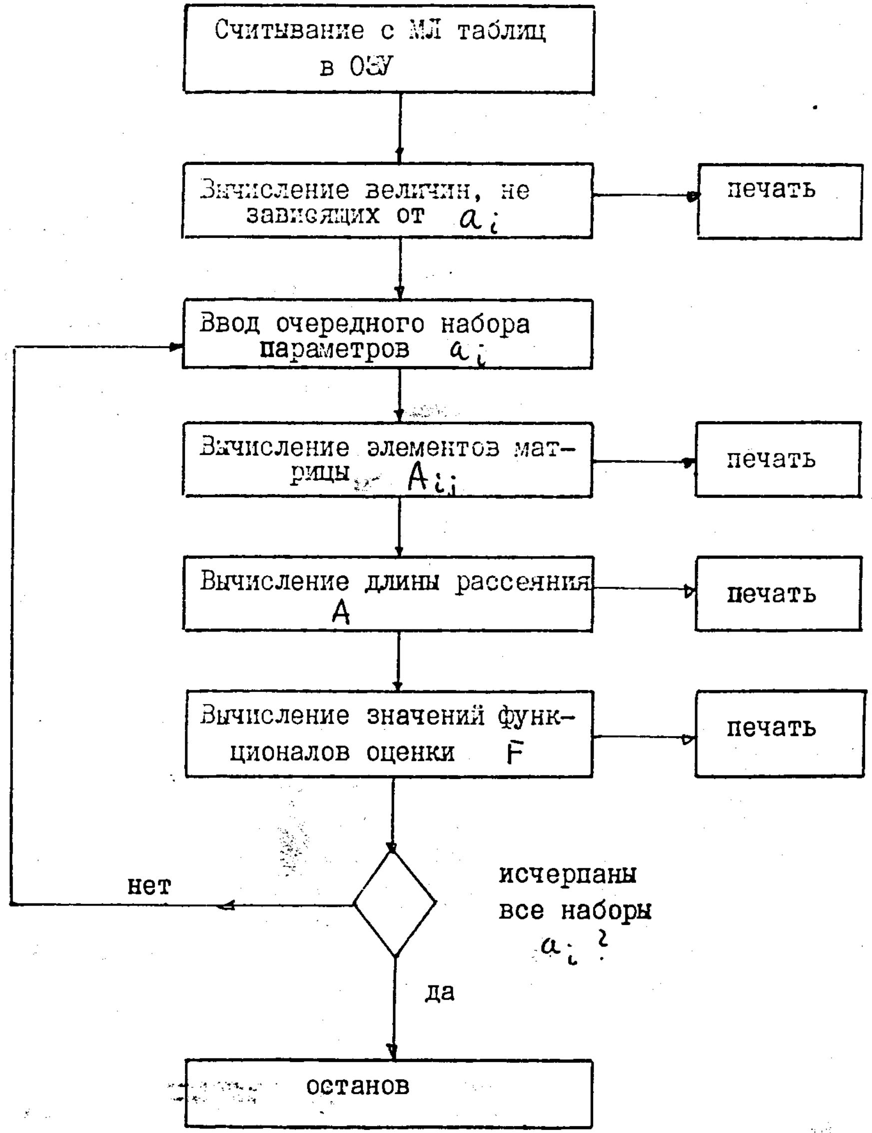
$$F = \frac{\sum_{i=1}^{M}\langle\phi_i|\Delta-\tilde{\Delta}|\Phi\rangle^2}{\sum_{i=1}^{M}\langle\phi_i|\Delta|\Phi\rangle^2}. \tag{52}$$

Необходимые выражения здесь имеют вид:

$$\langle\phi_\ell|\tilde{\Delta}|\Phi\rangle = -\sum_{i=1}^{M}\langle\phi_\ell|W|\phi_i\rangle c_i - \langle\phi_\ell|f\rangle \quad \ell=\overline{1,M}. \tag{53}$$

$$\langle\Phi|\Delta-\tilde{\Delta}|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{M} c_i^* c_\ell\langle\phi_i|\Delta+W|\phi_\ell\rangle + \sum_{i=1}^{M} c_i^*\langle\phi_i|f\rangle. \tag{54}$$

Принципиальная блок-схема программы представлена на рисунке.



Значения $\langle \phi_i | \hat{W} | \phi_j \rangle$ заданы формулой (41), а

$$\langle \phi_i | \Delta | \phi_j \rangle = -\delta_{m_i m_j} \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{n_i n_j} \int_0^\infty d\rho [\rho^2 \frac{\partial \Phi_i}{\partial \rho} \frac{\partial \Phi_j}{\partial \rho} + \tag{55}$$

$$+ 2(\ell_i + 1)(2\ell_i + 1) \Phi_i \Phi_j].$$

Старые результаты [7]:

a_1	a_2	a_3	$A^{(1)}$, фм	F	$A^{(2)}$, фм	F
0,3	0,6	1,2	56,2	0,14	0,51	0,12

Новые результаты:

a_1	a_2	a_3	$A^{(1)}$, фм	F	$A^{(2)}$, фм	F
0,3	0,6	1,2	18,4	0,96	0,71	1,1
0,4	0,6	1,2	15,6	0,95	0,81	0,96
0,5	0,6	1,2	12,9	0,947	0,92	0,95

Имеющиеся данные по $1+3 \to 1+3$ [9] рассеянию (решение уравнений Якубовского другими методами) дают значение $A \sim 9$ фм. Наши уточненные результаты не противоречат, очевидно, имеющимся расчетным данным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Merkuriev S.P., Gignoux G., Laverne A. — Ann. Phys., 1976, 99, p.30.
2. Merkuriev S.P., Yakovlev A.L., Gignoux G. — Nucl.Phys.A, 1984, 431, p.125.
3. Belyaev V.B., Kartavtsev O.I. — Journ.of Comp.Phys., 1985, v.59, p.493; Беляев В.Б., Картавцев О.И. — ОИЯИ, Р4-84-28, Дубна, 1984.
4. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-84-793, Дубна, 1984.
5. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-85-816, Дубна, 1985.
6. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-86-573, Дубна, 1986.
7. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-88-574, Дубна, 1988.
8. Беляев В.Б., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-90-135, Дубна, 1990.
9. Kharchenko V.F., Kuzmichev V.E., Shadchin S.A. — Nucl.Phys., 1974, A226, p.71.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 июня 1991 года.