

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-267

P4-96-267

Ф.М.Пеньков*

ЯДЕРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ
ИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕЗОНАНСОВ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

*E-mail: PENKOV@THSUN1.JINR.DUBNA.SU

1996

1 Введение

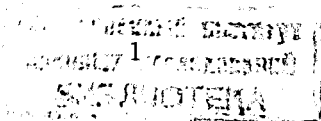
Известная формула Джексона [1] для скоростей ядерных переходов из молекулярных состояний, несмотря на явно двухчастичный вид во входном канале, пользуется до сих пор популярностью и дает разумные оценки для скоростей ядерных переходов из мезомолекул. В настоящее время планируются эксперименты [2] для определения скоростей ядерных переходов из мезомолекулярных резонансов, таких как ${}^3\text{He } \mu d$, ${}^4\text{He } \mu d$. Предварительные теоретические оценки [3, 4, 5] скоростей ядерных переходов из системы ${}^3\text{He } \mu d$ имеют разброс в девять порядков ($10^2 - 10^{11} \text{ c}^{-1}$), что не позволяет их напрямую использовать даже для постановки эксперимента. Такая неопределенность связана с трудностью оценки волновой функции системы на малых (ядерных) расстояниях. Целью настоящей работы являлось использование приближения Джексона [1] в некоторых схемах расчетов резонансных состояний мезомолекул, получение простых квазиклассических выражений для определения скоростей ядерных переходов и их оценка для системы ${}^3\text{He } \mu d$.

Одна из наиболее точных схем расчетов энергии молекулярного резонанса использует метод комплексного вращения [6]. При этих расчетах возникает некоторый объект, который можно назвать волновой функцией резонанса. Разумеется, эта функция не может быть нормирована при действительной энергии. Более того, она даже не ограничена на бесконечности и не сводится к собственной функции молекулярного гамильтониана. Это не позволяет использовать волновую функцию резонанса напрямую для расчетов ядерных реакций. С другой стороны, на конечных расстояниях резонансные функции должны быть чрезвычайно похожи на волновые функции связанных состояний.

Ниже будет показано, что в одинаковых приближениях скорость ядерных переходов из резонансов дается формулой Джексона, в которой $|\Psi(0)|^2$ для молекулы заменена на половину $\text{Re}\Psi(0)^2$ для молекулярного резонанса.

Альтернативой расчетам с использованием волновой функции резонанса является возможность прямого решения задачи рассеяния и определение значения волновой функции в нуле. Например, используя базис задачи двух центров. При этом хорошо разработанная схема разложения [7] сталкивается с численными проблемами определения волновой функции в нуле для системы дифференциальных уравнений с сингулярными в нуле коэффициентами.

В настоящей работе будет показано, что эту схему можно упростить, поскольку для узких резонансов скорости ядерных переходов будут определяться поведением в нуле волновых функций, убывающих на больших расстояниях. При этом формула для скоростей ядерных переходов из непрерывного спектра в точности совпадает с формулой Джексона. Для простых



двухтермовых приближений скорости ядерных реакций определяются поведением в нуле волновой функции закрытого канала, более того, квазиклассичность относительного движения ядер позволяет существенно упростить задачу определения скоростей ядерных переходов из мезомолекулярных резонансов.

2 Скорости реакций из непрерывного спектра

Поскольку резонансные состояния молекул предполагают существование только непрерывного спектра, то для описания их свойств необходимо просто измерять сечения нужных процессов. Например, сечение ядерных переходов при рассеянии дейтронов на мезоатоме гелия. Однако экспериментальная ситуация, как правило, не позволяет точно определить либо ток падающих частиц, либо атомарную плотность мишени. Удобнее определять вероятности ядерных переходов по отношению к молекулярным переходам. При этом удобно ввести параметр λ , характеризующий скорость ядерных переходов в единицу времени, такой же, как и для ядерных переходов из "стационарных молекул". В обоих случаях этот параметр просто равен ширине молекулярного резонанса¹ Γ_n , возникающего из-за наличия ядерных переходов.

В случае резонансных мезомолекул у нас имеется еще две ширины – ширина распадов молекулы по атомным каналам Γ_a и ширина упругого рассеяния Γ_e .

Мы будем рассматривать случай, когда

$$\Gamma_n \ll \Gamma_a. \quad (1)$$

В области резонансных энергий $E_{res} = k_0^2/2m^*$ (m^* – приведенная масса d и системы μ He) можно связать [8] ширины резонансов и сечение переходов σ_n с орбитальным моментом l :

$$\Gamma_n = \frac{1}{2l+1} \frac{k_0^2}{4\pi} \frac{\Gamma^2}{\Gamma_e} \sigma_n, \quad (2)$$

где $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_a + \Gamma_e$ – полная ширина.

С учетом (1)

$$\Gamma \simeq \Gamma_e + \Gamma_a.$$

Здесь возможны две предельные ситуации. В случае полного поглощения вероятность электромагнитных переходов в мезомолекуле велика (~ 1), тогда в пренебрежении фоновым рассеянием в области резонанса сечения упругого и неупругого процессов равны [8] и $\Gamma_a \simeq \Gamma_e \simeq \Gamma/2$. В случае предельно

¹В этой работе постоянная Планка $\hbar = 1$.

малого поглощения вероятность неупругих процессов много меньше вероятности распада резонанса по упругому каналу и $\Gamma_e \simeq \Gamma$.

Мы рассмотрим последний случай, и ниже будем использовать потенциальную модель взаимодействия, в которой резонанс определяется положением полюса на нефизическом листе амплитуды упругого рассеяния (нулями функции Йоста).

В этом случае из (2) получим

$$\lambda = \frac{1}{2l+1} \frac{k_0^2}{4\pi} \Gamma \sigma_n. \quad (3)$$

Рассмотрим приближение Джексона [1]:

$$\sigma_n = A |\Psi(0)|^2,$$

где $|\Psi(0)|^2$ – усредненный по мезонным степеням свободы квадрат модуля волновой функции трехчастичной системы на малых по сравнению с боровским радиусом ядер расстояниях. В нашем случае это будет волновая функция состояния рассеяния, обозначаемая дальше как Ψ_{sc} . Далее, запишем такое же приближение для сечения реакций $\tilde{\sigma}_n$ при рассеянии ядер без μ -мезона $\tilde{\sigma}_n = A |\Psi_{col}(0)|^2$, где $\Psi_{col}(0)$ – значение кулоновской двухчастичной волновой функции в нуле. Фиксируя асимптотику в виде $\sin(k_0 r + \delta)/k_0 r$, получим (см., например, [8]):

$$|\Psi_{col}(0)|^2 = \exp(-2\pi\eta) 2\pi\eta,$$

где $\eta = 1/k_0 a_b$ удобно представить через боровский радиус системы – $a_b^{-1} = m^* Z_1 Z_2$, а Z_1 и Z_2 – заряды первого и второго ядра соответственно. Сравнивая с общепринятым представлением сечения через S -фактор $\tilde{\sigma}_n = S \exp(-2\pi\eta)/E$, находим

$$A = A_r \frac{m^*}{k_0},$$

где специально выделен множитель

$$A_r = S(E_{res})/(\pi m^* Z_1 Z_2),$$

входящий в формулу Джексона.

Подставляя выражение для σ_n в (3), получим аналог формулы Джексона для переходов из непрерывного спектра:

$$\lambda = \frac{A_r}{2l+1} \frac{m^* k_0}{4\pi} \Gamma |\Psi_{sc}(0)|^2. \quad (4)$$

3 Связь резонансной функции с волновой функцией непрерывного спектра

Дальнейшее рассмотрение будет проводиться для S -волнового случая. Пусть $\Psi(r)$ – волновая функция системы двух частиц с относительной энергией $E = k^2/2m^*$. Ниже удобно работать с функцией $\Phi(r) = r\Psi(r)$. Мы собираемся продолжать волновые функции в комплексную по энергии область. Поэтому выберем два линейно независимых решения уравнения Шредингера в форме решений Иоста $f(k, r)$ и $f(-k, r)$ (см., например, [9]) с асимптотикой $f(k, r) \rightarrow \exp(ikr)$. Значения решений Иоста в нуле называются функциями Иоста и имеют ряд замечательных свойств. Нам нужны лишь утверждения, что функция Иоста $u(k) = f(k, 0)$ аналитична в верхней полуплоскости и $u(k) = u(-k)$. Здесь черта сверху будет означать комплексное сопряжение.

Можно построить регулярное в нуле решение уравнения Шредингера в форме

$$\Phi = C(f(k, r)u(-k) - f(-k, r)u(k)). \quad (5)$$

Поведение Φ в нуле определяется вронскианом решений Иоста:

$$\Phi \rightarrow 2ikr C. \quad (6)$$

Тогда для волновой функции состояния рассеяния Φ_{sc} с асимптотикой $\sin(kr + \delta)/k$ получаем

$$C = \frac{1}{|u|} \frac{1}{2ik},$$

$$\Phi_{sc} \rightarrow \frac{r}{|u|}. \quad (7)$$

Рассмотрим теперь резонансные функции. Следуя идее комплексного вращения [6], доопределим регулярные в нуле решения (5) условием конечности интеграла от квадрата функции по лучу s , который начинается от нуля и уходит под некоторым углом θ к действительной оси в бесконечность. Здесь мы выберем условие

$$4\pi \int_s \Phi_{res}(r)^2 dr = 1.$$

Это условие определяет величину C . Для этого продифференцируем уравнение Шредингера по импульсу и умножим на Φ_{res} , а уравнение Шредингера умножим на $\partial\Phi_{res}/\partial k$, вычтем одно из другого и проинтегрируем до конечного радиуса (по лучу s) R . Полученное выражение

$$\int_0^R \Phi_{res}^2 dr = \frac{1}{2k} (\Phi_{res}' \Phi_{res} - \Phi_{res} \Phi_{res}')_{r=R}, \quad (8)$$

где точка сверху означает производную по импульсам, а штрих – по координатам, можно проанализировать, подставляя выражение (5). Опуская громоздкую подстановку, укажем условие существования интеграла по лучу s . Для этого необходимо, чтобы при энергии $Z = E_{res} - i\Gamma/2$, ($k_{res} = k_0 - ik_1$) функция Иоста обращалась в нуль, то есть существовал резонанс. При этом для луча s должно выполняться условие $\tan(\theta) > k_1/k_0$. Устремляя R к бесконечности по лучу s , получим выражение для C :

$$C^2 = -\frac{1}{4\pi i} \frac{1}{\overset{\circ}{u}(k_{res})u(-k_{res})}.$$

Поведение резонансной функции вблизи нуля (6)

$$\Phi_{res}^2 \rightarrow -\frac{i}{4\pi} \frac{4k_{res}^2 r^2}{\overset{\circ}{u}(k_{res})u(-k_{res})} \quad (9)$$

позволяет выразить ее через $|\Phi_{sc}|^2$. Для этого заметим, что при малых широтах ($k_1/k_0 \ll 1$) функцию Иоста $u(k_0)$ можно разложить вблизи k_{res} :

$$u(k_0) \simeq ik_1 \overset{\circ}{u}(k_{res}).$$

Учитывая (7), (9) и последнее соотношение, получаем связь между резонансной функцией и волновой функцией непрерывного спектра:

$$|\Phi_{sc}|^2 \simeq \frac{2\pi}{\Gamma k_0 m^*} \text{Re } \Phi_{res}^2. \quad (10)$$

Последнее соотношение вместе с выражением (4) и замечанием в начале раздела о связи функций Φ и Ψ дает окончательное выражение для скоростей ядерных переходов для узких резонансов:

$$\lambda = A_r \frac{1}{2} \text{Re } \Psi_{res}(0)^2, \quad (11)$$

которое отличается от формулы Джексона [1] заменой квадрата модуля волновой функции связанного состояния молекулы на половину реальной части квадрата резонансной функции.

4 Скорости реакций для двухканальной модели молекулярных резонансов

Рассмотрим двухканальную модель резонансного рассеяния. При этом один канал отвечает асимптотическим состояниям рассеяния и называется открытым, а второй – отвечает за ближайшие возбужденные состояния подсистем

и будет называться закрытым. Такой подход удобен для описания близких к порогу возбуждения резонансов [10, 11]. В рамках этой схемы введем проекторы открытого $|\nu_1\rangle$ и закрытого $|\nu_2\rangle$ каналов соответственно. При этом $\langle \nu_i | \nu_j \rangle = \delta_{ij}$ и $|\nu_1\rangle + |\nu_2\rangle = I$. Волновая функция состояния рассеяния представляется в форме двух слагаемых:

$$\Psi_{sc} = |\nu_1\rangle f_1 + |\nu_2\rangle f_2,$$

которые отвечают волновым функциям открытого (f_1) и закрытого (f_2) каналов. После проектирования уравнения Шредингера на эти каналы получаем систему уравнений для этих функций:

$$(H_{ij} - Z\delta_{ij})f_j = 0, \quad i, j = 1, 2, \quad (12)$$

где $H_{ij} = \langle \nu_i | H | \nu_j \rangle$, а $Z = E + i0$ – полная энергия системы.

Для исследования решений вблизи резонанса удобно выразить

$$f_2 = g_{22}(Z)H_{21}f_1 \quad (13)$$

из второго уравнения и, подставив в первое, получить замкнутое уравнение

$$(H_{11} + H_{12}g_{22}(Z)H_{21} - Z)f_1 = 0. \quad (14)$$

для f_1 . При этом $g_{22}(Z) = (Z - H_{22})^{-1}$ – функция Грина закрытого канала. Резонансы возникают в случае совпадения энергии системы E с собственной энергией ϵ гамильтониана закрытого канала:

$$(H_{22} - \epsilon)\Psi_c = 0,$$

где Ψ_c – волновая функция изолированного канала 2. В этом случае функцию Грина закрытого канала можно представить полюсным слагаемым

$$g_{22}(Z) \simeq \frac{|\Psi_c\rangle\langle\Psi_c|}{Z - \epsilon}$$

и, вводя обозначение

$$|b\rangle = H_{12}|\Psi_c\rangle,$$

написать уравнение Липпмана-Швингера для первого канала:

$$f_1 = f_1^0 + \frac{g_{11}(Z)|b\rangle\langle b|f_1}{Z - \epsilon}. \quad (15)$$

Здесь введены функция Грина открытого канала $g_{11}(Z)$ и собственные функции состояния рассеяния с расходящейся волной для этого канала f_1^0 :

$$(H_{11} - E)f_1^0 = 0.$$

Явный сепарабельный вид уравнения (15) позволяет выразить функции f_1 и f_2 через волновые функции изолированных каналов:

$$f_1 = f_1^0 + \frac{g_{11}|b\rangle\langle b|f_1^0}{Z - \epsilon - \langle b|g_{11}|b\rangle}; \quad (16)$$

$$f_2 = \Psi_c \frac{\langle b|f_1^0}{Z - \epsilon - \langle b|g_{11}|b\rangle}.$$

Выражения (16), с одной стороны, дают унитарную S -матрицу рассеяния в брейт-вигнеровской форме, что позволяет выразить не определенные в общем виде матричные элементы от функции Грина через ширину резонанса и его сдвиг от энергии ϵ , а с другой стороны, позволяют определить поведение функций f_1 и f_2 вблизи нуля, которое нам необходимо для нахождения $|\Psi_{sc}(0)|^2$, так как

$$|\Psi_{sc}(0)|^2 = |f_1(0)|^2 + |f_2(0)|^2.$$

Поскольку нас интересуют S -волновые ядерные переходы, все рассмотрение ниже будет проводиться только в этой парциальной гармонике. Удобно ввести регулярное (F) и нерегулярное (G) решения для гамильтониана H_{11} , имеющие асимптотики $\sin(kr + \delta_1)$ и $\cos(kr + \delta_1)$ соответственно, а также функцию $\chi = G + iF$, через которые можно выразить волновую функцию и функцию Грина первого канала:

$$f_1^0 = \frac{F(r)}{kr} \exp(i\delta_1);$$

$$g_{11}(r, r'; Z) = -\frac{2m^*}{k} \frac{\chi(r_>)F(r_<)}{rr'}. \quad (17)$$

Здесь используются стандартные обозначения для фазы рассеяния в первом канале δ_1 , а также $r_>$ и $r_<$, которые определяют большее или меньшее значения переменных r и r' .

Используя эти определения, нетрудно получить мнимую часть матричного элемента от функции Грина:

$$\text{Im} \langle b|g_{11}|b\rangle = -\frac{2m^*}{k} \left| \langle b|\frac{F}{r}\rangle \right|^2,$$

которая входит в S -матрицу, легко получаемую из (16):

$$S = \frac{Z - E_r - i\frac{2m^*}{k} |\langle b|\frac{F}{r}\rangle|^2}{Z - E_r + i\frac{2m^*}{k} |\langle b|\frac{F}{r}\rangle|^2} \exp(2\delta_1),$$

где определена резонансная энергия $E_r = \epsilon + Re \langle b | g_{11} | b \rangle$. Выражение для S -матрицы унитарно, а мнимая часть функции Грина дает полуширину резонанса:

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{2m^*}{k} \left| \langle b | \frac{F}{r} \rangle \right|^2.$$

Определив ширину резонанса и используя представление (17) для функции Грина, можно записать выражение для Ψ_{sc} вблизи нулевых значений координаты относительного движения:

$$|\Psi_{sc}(0)|^2 = \left(\frac{F'(0)}{k} \right)^2 \left| \frac{\langle b | \frac{G}{r} \rangle}{\langle b | \frac{F}{r} \rangle} \right|^2 + \frac{1}{km^*\Gamma} |\Psi_c(0)|^2. \quad (18)$$

Последнее выражение вместе с (4) определяет скорости ядерных переходов из непрерывного спектра. При этом первое слагаемое в (18) порождается открытым каналом и отвечает за реакцию "с ходу", тогда как второе возникает из-за закрытого канала и определяет вклад в скорости ядерных переходов из резонанса. Именно это слагаемое доминирует при $\Gamma \rightarrow 0$, то есть, когда время жизни резонанса неограниченно возрастает. Технически такая ситуация возникает при слабой связи между каналами, определяемой нормой вектора b . При этом первое слагаемое содержит отношение проекций b на нерегулярное и регулярное решение для гамильтониана H_{11} и не зависит от силы связи между каналами. Более того, в случае асимптотически далекой для H_{11} области формирования резонанса, это отношение определяется косинус- и синус-преобразованиями Фурье, то есть является величиной ~ 1 . Поэтому первое слагаемое могло бы дать существенный вклад только для таких резонансов, область формирования которых была внутри кулоновского барьера (точки поворота). Однако расчеты энергий связи мезомолекулярного резонанса [12, 13] показывают, что, во-первых, для этих расчетов связью между каналами можно пренебречь, во-вторых, область локализации собственной функции такого связанного состояния находится на расстояниях, больших мюонной единицы, тогда как точка поворота для энергий объединенного атома $\simeq 0.5$.

Исходя из этих аргументов скорость ядерных переходов для мезомолекулярных резонансов будет определяться только вторым слагаемым в (18). Подставляя это значение в (4) и определив нормировку по полному объему, получаем окончательное выражение для скоростей ядерных переходов из мезомолекулярных состояний в рамках двухканального формализма:

$$\lambda = A_r |\Psi_c(0)|^2. \quad (19)$$

Это выражение совпадает с формулой Джексона [1], но вместо молекулярной волновой функции в него входит волновая функция закрытого канала.

Ниже при оценке скоростей ядерных переходов мы построим гамильтониан H_{22} , который представляет собой сумму свободного гамильтониана двух ядер и эффективной потенциальной энергии $U(r)$ – терма. При этом движение тяжелых ядер существенно квазиклассично за исключением малых расстояний, где действует кулоновское отталкивание и известно аналитическое выражение для терма. Поэтому существует возможность упростить выражение (19), используя квазиклассическое приближение для Ψ_c . Для этого нужно воспользоваться стандартными выражениями для квазиклассической волновой функции (см., например, [8]). Так, в области классически доступного движения волновая функция представима в виде

$$r\Psi(r)_c = \frac{B}{\sqrt{P}} \cos\left(\int_{R_{min}}^r P(x)dx - \frac{\pi}{4}\right),$$

где $P(r) = \sqrt{2m^*(E-U)}$, R_{min} – левая точка поворота, а константа B определяется нормировкой волновой функции по всему пространству. Слева (ближе к нулю) от R_{min} , в классически недоступной области, эта функция заменяется на

$$r\Psi(r)_c = \frac{B}{2\sqrt{|P|}} \exp\left(-\int_r^{R_{min}} |P(x)|dx\right).$$

Последнее выражение справедливо до расстояний, больших боровского радиуса ядерной подсистемы $a_b = 1/Z_1 Z_2 m^*$, которые, в свою очередь, много меньше точки поворота в системе объединенного атома. Поэтому существует область, где справедливо квазиклассическое приближение, с одной стороны, и чисто кулоновское – с другой. Выбирая точку шивки в этой области для кулоновских функций слева и линейной комбинации возрастающей и убывающей экспонент квазиклассического решения справа, можно получить выражение, не зависящее ни от точки шивки, ни от кинетической энергии в этой точке. Здесь мы сразу запишем регулярное в нуле выражение

$$|\Psi(0)_c|^2 = \frac{2\pi B^2}{a_b} \exp(-2 \int_0^{R_{min}} |P(x)|dx). \quad (20)$$

Подставляя это выражение в (19), с учетом определения величины A_r получим выражение для скоростей ядерных переходов в квазиклассическом случае

$$\lambda = 2S(0)B^2 \exp(-2 \int_0^{R_{min}} |P(x)|dx). \quad (21)$$

Величина B^2 определяется нормировкой по всему пространству, имеет размерность квадрата импульса и приобретает ясный физический смысл при осцилляторном представлении терма. В этом случае она пропорциональна частоте осциллятора, что вместе с "барьерной экспонентой" имеет смысл вероятности проникновения через барьер в единицу времени. Здесь мы приведем выражение для B^2 , рассчитанное для осцилляторного представления терма возле минимума U_{min} :

$$B^2 = 0.459 \frac{2m^*(\epsilon - U_{min})}{4\pi}, \quad (22)$$

в котором специально выделен фактор 0.459, возникающий при численном интегрировании $|\Psi(r)_c|^2$ по всему пространству.

5 Оценка скоростей ядерных переходов в мезомолекулярном резонансе ${}^3\text{He } \mu d$

Приведенные выше обобщения формулы Джексона (11), (19) для скоростей ядерных реакций из мезомолекулярных резонансов требуют знания волновой функции при малых значениях координат относительного движения ядер: $r \ll a_b$. Для системы ${}^3\text{He } \mu d$ борковский радиус кулоновского взаимодействия ядер составляет лишь 0.05 атомной мюонной единицы. К сожалению, несмотря на ряд работ, хорошо описывающих поведение мезомолекулярных резонансов на расстояниях ~ 1 , значения волновых функций на малых расстояниях неизвестны. Поэтому в этом разделе будет приведена оценка ядерных переходов для мезомолекулярного резонанса ${}^3\text{He } \mu d$ в простой двухканальной модели.

Как мы убедились выше, нам нужен только гамильтониан закрытого канала. Этот гамильтониан должен отвечать относительному движению ядер, что практически делает невозможным использование расчетных моделей в рамках гиперсферических координат. С другой стороны, наиболее подходящая для наших целей схема разложения по двухцентровому базису требует учета неопределенно большого количества термов из-за вопросов сходимости разложения на малых расстояниях. При этом основной терм закрытого канала в этом разложении ($2pr$) на малых расстояниях отвечает P -волновому движению мезона в объединенном атоме [14] и, соответственно, ядер и не может быть использован даже в качестве оценочного приближения.

Ниже мы построим простую схему описания резонанса в мезомолекулярной системе исходя из предположения, что основной вклад в потенциал взаимодействия (терм) в закрытом канале дает поляризуемость мезодейтона ядром гелия. В этом случае мы можем искать терм закрытого канала разложением только по водородоподобным функциям мезодейтона. Разумеется,

такое разложение может быть как и при описании эффекта Штарка, только асимптотическим, и имеет смысл при ограниченном базисе. Как будет показано, сходимость значений резонансной энергии и $|\Psi(0)|^2$ обеспечивается набором водородоподобных функций с главным квантовым числом ≤ 8 .

Поскольку схема разложения уравнения Шредингера по таким функциям совпадает со схемой разложения по функциям двухцентрового базиса, мы приведем лишь основные этапы этой схемы. Пронумеруем частицы: 1 – ядро ${}^3\text{He}$ с зарядом Z_1 , 2 – ядро d с зарядом Z_2 и 3 – μ -мезон, и введем координаты Якоби:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}, \quad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}^{(3)} - \frac{\mathbf{r}^{(1)}m_1 + \mathbf{r}^{(2)}m_2}{m_1 + m_2}.$$

Величины с индексом относятся к соответствующим частицам, при этом нижний индекс для координат \mathbf{r}_i зарезервирован для обозначения вектора между парой частиц, отличных от i .

Введем базисный ортонормированный набор функций $K_m(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$, по которому разложим волновую функцию состояния рассеяния:

$$\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \sum_m K_m(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) f_m(\mathbf{r}).$$

Тогда гамильтониан отдельно взятого канала не содержит первых производных функций f_i . Для построения терма закрытого канала представим K_2 в форме разложения по собственным функциям мезодейтона $\phi_i(\mathbf{r}_1)$, отвечающим собственным значениям E_i :

$$K_2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}_1) y_i(\mathbf{r}),$$

где индекс i включает все квантовые числа водородоподобных функций. Тогда функции y_i должны быть компонентами собственного вектора матрицы:

$$E_i \delta_{ij} - \langle \phi_i | \frac{Z_1 e}{r_2} \phi_j \rangle,$$

где угловые скобки означают интегрирование по всему пространству координаты $\boldsymbol{\rho}$, а терм закрытого канала $U(r)$ – минимальным собственным значением этой матрицы.

Из-за зависимости функций y_i от \mathbf{r} окончательное уравнение для волновой функции закрытого канала

$$\left(-\frac{1}{2m_{12}}\Delta + \frac{Z_1 Z_2}{r} + U(r) + Q(r)\right) \Psi_c(\mathbf{r}) = \epsilon \Psi_c(\mathbf{r}) \quad (23)$$

содержит поправку к терму

$$Q = -\frac{1}{2m_{12}} \left(2 \sum_{ij} y_i \left\langle \phi_i \frac{\partial}{\partial r} \phi_j \right\rangle \frac{\partial y_j}{\partial r} - \sum_i \left(\frac{\partial y_i}{\partial r} \right)^2 \right).$$

Здесь m_{12} – приведенная масса ядер гелия и дейтона.

Как говорилось выше, мы рассматриваем случай только S -волнового движения ядер. Поэтому функции y_i зависят только от r , а угловые функции водородоподобного базиса можно выбрать в форме полиномов Лежандра, аргументом которых будет косинус угла между \mathbf{r} и \mathbf{r}_1 .

Задача на собственное значение U и вектор y решалась численно. На рисунке 1 приведен фрагмент терма в зависимости от расстояния между ядрами. Терм дан в единицах энергии мезодейтона $m_{23}e^4/2$, а расстояния – в боровских радиусах $a_0 = 1/m_{23}e^2$.

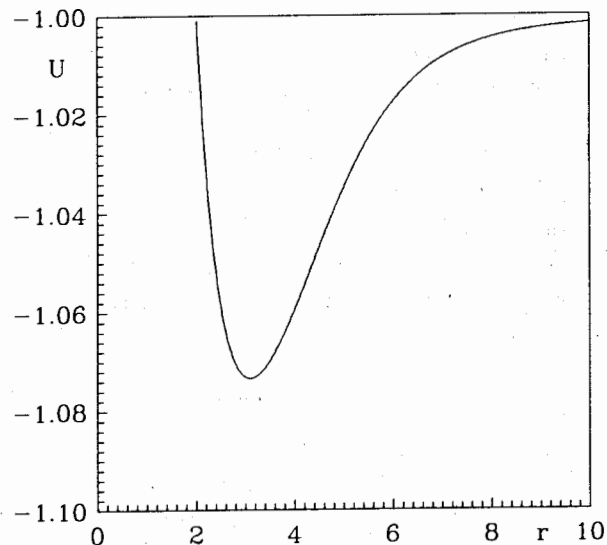


Рис. 1. Поведение терма закрытого канала. Пояснения в тексте

После нахождения терма и поправки Q энергия связи ϵ определялась по формуле Бора-Зоммерфельда, а значения $|\Psi_c(0)|^2$ – по квазиклассической формуле (20). Ниже мы приводим таблицу значений энергий связи и $|\Psi_c(0)|^2$ в зависимости от главного квантового числа n , которое определяет количество базисных функций $n(n+1)/2$. При этом энергия связи дается в эВ, а волновые функции даны в единицах a_0 .

Как видно из этой таблицы, значения и энергии связи ϵ , и величины $|\Psi_c(0)|^2$ быстро сходятся. При этом величина $|\Psi_c(0)|^2$ сходится быстрее и

Таблица 1. Сходимость ϵ и $|\Psi_c(0)|^2$ в зависимости от размера базиса. Пояснения в тексте

n	ϵ	$ \Psi_c(0) ^2$
4	-60.0	$1.75 \cdot 10^{-11}$
5	-67.4	$1.89 \cdot 10^{-11}$
6	-71.8	$1.96 \cdot 10^{-11}$
7	-74.7	$2.01 \cdot 10^{-11}$
8	-76.6	$2.02 \cdot 10^{-11}$

отличие ее значений для базиса из 10 ($n=4$) и из 36 ($n=8$) функций составляет $\sim 13\%$ и является малым в рамках приближения Джексона для скоростей ядерных реакций.

Необходимо отметить, что значение энергии связи ϵ сходится к меньшему числу, чем получено при точных схемах нахождения энергии резонанса $\simeq -71.0$ эВ [12, 13, 15]. Численно можно проверить, что отличие квазиклассических значений энергии от точных (метод Нумерова) не превышают -1 эВ и величина невязки составляет $\simeq -5$ эВ (0.2% в единицах энергии мезодейтона). Учитывая простоту модели построения терма закрытого канала, такое отличие от точных расчетов можно считать удовлетворительным.

Расчитанные значения величины $|\Psi_c(0)|^2$ позволяют оценить скорости ядерных реакций в мезомолекулярном резонансе ${}^3\text{He} \mu d$. С учетом экспериментального значения астрофизического фактора $S(0) \simeq 6.32$ МэВ · барн [16] выражение (19) приводит к величине

$$\lambda \simeq 3.8 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}. \quad (24)$$

Сравним это значение с оценкой скорости ядерной реакции λ_i , определяемой первым слагаемым в (18), то есть с реакцией "с ходу". Для этого положим

$$|\Psi_{sc}(0)|^2 \simeq \left(\frac{\dot{F}(0)}{k} \right)^2,$$

считая фактор (см. раздел 4) $|\langle b | \frac{\partial}{\partial r} \rangle| / |\langle b | \frac{F}{r} \rangle|^2$ равным 1. А величину $F(0)$ для открытого канала оценим в модели объединенного атома как значение в нуле регулярного решения уравнения Шредингера с энергией в 8 мезодейтонных единиц для кулоновского отталкивающего потенциала с зарядом $2e^2$. Используя численное значение величины $\Gamma \simeq 3.5 \cdot 10^{-4}$ эВ [13], получим

$$\lambda_i \sim 5.3 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}.$$

Сравнивая эту оценку с (24), можно заключить, что расчет скорости ядерных реакций в системе ${}^3\text{He } \mu d$ по закрытому каналу может быть только оценочным. Поскольку же вопрос сходимости волновой функции на малых расстояниях в существующих схемах решения кулоновской задачи трех тел остается открытым, можно рассматривать будущие экспериментальные значения для скорости ядерной реакции как тест: в случае $\lambda \sim n \cdot 10^5$ реакция определяется нерезонансными механизмами и сечения ядерных реакций будут гладкой функцией энергии столкновения, а в случае $\lambda \sim n \cdot 10^6$ – ядерные переходы определяются молекулярными резонансами.

6 Заключение

Рассмотренные здесь схемы расчета скоростей ядерных реакций из мезомолекулярных резонансов предполагают независимость ядерных и молекулярных движений (приближение Джексона). Более того, использование $|\Psi(0)|^2$ имеет смысл только при условии, что ядерный боровский радиус больше характерного размера области ядерных реакций. В случае рассеяния дейтона на ядрах это условие нарушается уже при $Z > 3$. Поэтому приведенные в настоящей работе цифры являются только оценочными в рамках указанных выше приближений и могут служить лишь для постановки экспериментальных методик. Так как точные многотельные расчеты в настоящее время выполнить невозможно, то именно опытные результаты позволят выбрать адекватную модель учета молекулярных степеней свободы для ядерных реакций.

Автор выражает свою признательность В.Б. Беляеву, С.И. Виницкому и А.К. Мотовилову за неоднократные предварительные обсуждения результатов настоящего сообщения, а В.И. Коробову – за предоставление еще не опубликованных расчетных значений по ${}^3\text{He } \mu d$ -резонансу.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 95-02-05689).

Литература

- [1] *Jackson J.D.* // Phys.Rev. 1957, V. 106. P. 330.
- [2] PSI proposal R-96-01
- [3] *Kino Y., Kamimura M.* // Hyperfine Int. 1993, V. 82. P. 195;
- [4] *Кравцов А.В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 1984, Т. 40. С. 124.
- [5] *Harley D. et al* // Preprint AZPH-TH/88, Arizona, 1988; AIP Conf. Proc. 1989. V. 181. P. 239.
- [6] *Reinhardt W.P.* // Ann. Rev. Phys. Chem. 1982, V. 33. P. 223.
- [7] *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
- [8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика, М.: Наука, 1974.
- [9] *Гольбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. М.: Мир, 1967.
- [10] *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М.: Наука, 1971.
- [11] *Feshbach H.* // Ann. Phys. 1958, P. 357.
- [12] *Belyaev V.B., Kartavtsev O.I., Kochkin V.I., Kolganova E.A.* // Preprint JINR E4-94-414.
- [13] *Коробов В.И.* // Не опубликовано
- [14] *Герштейн С.С., Кривченко В.Д.* // ЖЭТФ. 1961, Т. 40. С. 1491.
- [15] *Hara S., Ishihara T.* // Phys. Rev.A. 1989, V. 39. P. 5633;
Gershtein S.S., Gusev V.V. // Hyperfine Int. 1993, V. 82. P. 185;
Kravtsov A.K., Mikhailov A.I., Savichev V.I. // Hyperfine Int. 1993, V. 82. P. 203.
- [16] *Ajzenberg-Selove G.* // Nucl. Phys.A. 1988, V. 490. N 1.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 июля 1996 года.

Пеньков Ф.М.

P4-96-267

Ядерные переходы из молекулярных резонансов

Рассмотрена связь между резонансными функциями для узких резонансов и волновыми функциями состояния рассеяния. Определены скорости ядерных переходов и обобщена формула Джексона для молекулярных резонансов. Сделаны оценки для скорости ядерных реакций из мезомолекулярного резонанса ${}^3\text{He}\mu d$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1996

Перевод автора

Pen'kov F.M.

P4-96-267

Nuclear Transitions from Molecular Resonances

The relation between narrow resonance functions and scattering wave one has been considered. The nuclear transition rate has been defined and Jackson formula has been generalized for molecular resonances. The nuclear transition rate from muonic molecular resonance ${}^3\text{He}\mu d$ has been estimated.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1996