



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

M-47

На правах рукописи

4-91-518

**МЕЛЕЖИК**

**Владимир Степанович**

УДК 530.145,539.18,539.19

**МНОГОМЕРНЫЕ И МНОГОКАНАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ  
РАССЕЯНИЯ В МЕЗОАТОМНОЙ ФИЗИКЕ**

**Специальность: 01.04.02 - теоретическая физика**

**Автореферат диссертации на соискание ученой  
степени доктора физико-математических наук**

Дубна 1991

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
профессор

Балашов В.В.

доктор физико-математических наук,  
профессор

Жидков Е.П.

доктор физико-математических наук,  
профессор

Пресняков Л.П.

Ведущая организация:

Санкт-Петербургский университет, г. Санкт-Петербург

Автореферат разослан " " \_\_\_\_\_ 1991 г.

Защита диссертации состоится " " \_\_\_\_\_ 199 г.  
на заседании Специализированного совета Д047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований г.Дубна, Московская область.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Ученый секретарь Совета,  
кандидат физико-математических наук

  
В.И. Журавлев

## I. Общая характеристика работы

### Актуальность проблемы

В последние годы мезоатомные и мезомолекулярные процессы стали предметом планомерных исследований. Интерес к этой области был стимулирован работами группы теоретиков ОИЯИ, которые предсказали высокую эффективность процесса мюонного катализа в смеси дейтерия и трития. Это предсказание было впервые подтверждено экспериментально в Дубне, а затем и на зарубежных мезонных фабриках. В настоящее время работы в этом направлении ведутся примерно в 50 лабораториях в СССР и за рубежом, начал издаваться специальный журнал "Muon Catalyzed Fusion", целиком посвященный экспериментальным и теоретическим проблемам мюонной физики.

Эта новая область, возникшая на стыке атомной, ядерной и молекулярной физики, поставила ряд оригинальных задач и потребовала разработки теоретических и экспериментальных методов для описания нового класса физических явлений.

В частности, для описания всей совокупности процессов, происходящих на стадии замедления мезоатомов от нескольких десятков эВ до тепловых энергий ( $\sim 10^{-2}$  эВ), необходимо решить задачу о медленных столкновениях с перераспределением в системе трех кулоновских частиц со сравнимыми массами: два ядра и мюон. Ее решения используются для расчета таких мезоатомных процессов как реакции изотопного обмена и переворота спина мезоатома, упругое рассеяние мезоатомов на ядрах, а также учета влияния электронного экранирования и молекулярной структуры на скорости мезоатомных процессов.

С другой стороны задача о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц со сравнимыми массами (в мезоатомной физике параметр неадиабатичности, отношение массы мюона  $m$  к массе ядер  $M$ , равен  $1/M = m/M \sim 0.1 - 0.2$ ) представляет также самостоятельный интерес, как удобный и достаточно сложный объект для отработки методов решения многомерных и многоканальных задач рассеяния.

Причем, если к настоящему времени задача о связанных состояниях системы трех тел в мезоатомной физике исследована достаточно хорошо (вычислены с рекордной точностью в адиабатическом и вариационном подходах уровни энергии и волновые функции мезомолекул, которые использовались для расчета скоростей резонансного образо-

вания и девозбуждения мезомолекул, скоростей ядерных реакций в них и коэффициентов прилипания мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа), то задача о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц до настоящей работы исследовалась лишь эпизодически.

#### Основная цель работы

Целью работы было решение многомерных и многоканальных задач рассеяния, возникающих в физике мезоатомов, и приложение развитых методов для расчета сечений и скоростей различных мезоатомных процессов, необходимых для интерпретации и планирования экспериментов, и в смежных областях квантовой физики.

#### Научная новизна

В диссертации получен ряд новых результатов применительно к классической задаче квантовой механики — задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. Так, впервые сформулированы граничные условия для многоканальной задачи рассеяния, возникающей в адиабатическом представлении при описании медленных столкновений в системе трех кулоновских частиц, в пределе малых ( $R \rightarrow 0$ ) и больших межъядерных расстояний ( $R \rightarrow \infty$ ). На основе непрерывного аналога метода Ньютона разработан новый метод решения этой задачи, с его помощью впервые выполнены многоуровневые адиабатические расчеты процессов столкновения с перераспределением в системе трех кулоновских частиц. Впервые исследована сходимость адиабатического разложения применительно к задаче о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц со сравнимыми массами. Сходимость продемонстрирована на примере ряда мезоатомных систем и в задаче о рассеянии электронов на позитронии, где параметр неадиабатичности равен  $1/M \sim 1$ .

С помощью развитой вычислительной схемы впервые рассчитан ряд мезоатомных процессов и эффектов в физике мезоатомов и в некоторых смежных областях квантовой физики. Выполнены расчеты и издан атлас сечений мезоатомных процессов в однородных смесях изотопов водорода в области энергий столкновения 0 – 100 эВ мезоатомов с ядрами, атомами и молекулами смеси. До настоящей работы эти процессы исследовались лишь эпизодически. Предложен метод расчета скоростей ядерных реакций в мезомолекулах, с помощью которого впервые вычислены скорости ядерных реакций из возбужденных состояний ме-

зомолекул, а также учтены эффекты влияния сильного взаимодействия и неадиабатичности движения ядер в этих состояниях на коэффициент прилипания мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа. Впервые вычислены сдвиги уровней энергии мезомолекул за счет поляризации электрон-позитронного вакуума и указано на возможность их экспериментального измерения.

Разработан метод расчета ядерных реакций "на лету" в мезоатомной и атомной физике типа  $t\mu + d \rightarrow He^4 + n + \mu$  и  $d + D \rightarrow t + d + e$  в области энергий столкновения от 0 до нескольких кэВ, с помощью которого впервые выполнены квантовомеханические расчеты этих реакций и обнаружено резонансное усиление реакции  $t\mu + d \rightarrow He^4 + n + \mu$  при энергии  $\approx 70$  эВ. Исследована природа этого эффекта и возможности его проявления в других квантовых системах.

На основе этих разработок предложен новый метод решения многомерного уравнения Шредингера без разделения переменных и дана его реализация для двухмерного и трехмерного случаев.

#### Практическая ценность

Развитая в диссертации вычислительная схема для многоуровневых адиабатических расчетов применительно к задаче о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц успешно использовалась для описания различных мезоатомных процессов: упругое рассеяние мезоатомов на ядрах, реакции изотопного обмена и переворота спина мезоатома в таких столкновениях. Данный подход позволил также учесть влияние электронного экранирования и молекулярной структуры на эти процессы. Полученные результаты являются в настоящее время наиболее точными и полными по объему. Рассчитанные сечения и скорости мезоатомных процессов необходимы, и частично уже использовались, для интерпретации и планирования экспериментов в мезоатомной и мезомолекулярной физике. Некоторые из полученных результатов уже подтверждены экспериментально и другими независимыми расчетами.

Предложенная вычислительная схема использовалась также в некоторых смежных областях квантовой физики, что характеризует ее достаточную универсальность. Продemonстрирована сходимость метода в задаче о рассеянии электронов на позитронии, где параметр неадиабатичности равен  $1/M \sim 1$ , и его применимость в задаче об элек-



тронном экранировании ядерных реакций синтеза типа  $d + D$  в области больших энергий столкновения 5 – 10 кэВ, где движение ядер уже трудно согласовать с гипотезой адиабатичности. В рамках этой вычислительной схемы выполнены расчеты скоростей ядерных реакций "на лету" в мезоатомной и атомной физике типа  $t\mu + d \rightarrow He^4 + n + \mu$  и  $d + D \rightarrow t + d + e$ . Результаты расчета последней реакции находятся в хорошем согласии с расчетом по методу классических траекторий.

Отметим также применимость подхода и в области дискретного спектра системы трех кулоновских частиц. В данном подходе рассчитаны скорости ядерных реакций в мезомолекулах, как из основных, так и из возбужденных состояний, и эффекты влияния сильного взаимодействия и неадиабатичности движения ядер в этих состояниях мезомолекул на коэффициент прилипания мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа. Все перечисленные результаты в пределах заданной точности согласуются с более поздними вариационными расчетами.

На основе вычислительной схемы, разработанной нами для решения многоканальных задач, возникающих в мезоатомной физике, предложен и реализован для двумерного и трехмерного случаев новый метод решения многомерного уравнения Шредингера, не допускающего разделения переменных. По простоте реализации он близок к "прямым" методам конечных элементов и конечных разностей, но превосходит их по скорости сходимости. Эти два обстоятельства, а также то, что здесь, как и в "прямых" методах, допускается априорная оценка его точности, делают метод привлекательным, как для решения задач, рассмотренных в данной диссертации в адиабатическом подходе, так и других задач квантовой физики.

Практическая значимость результатов диссертации подтверждается их успешным использованием в различных лабораториях как в СССР, так и за рубежом: ОИЯИ, ИАЭ им.И.В.Курчатова, ЛИЯФ, ИТЭФ, ЛГУ, Национальный институт ядерной физики Италии, Институт им.П.Шеррера (Швейцария), Институт физики средних энергий Австрийской академии наук, Институт ядерной физики и техники (Польша).

#### Апробация работы

Результаты, вошедшие в диссертацию, докладывались на Международных конференциях по атомной физике (Рига 1978, Токио 1986),

Международных конференциях по малоуклонным системам (Тбилиси 1985, Сендай, Япония 1986, Ванкувер, Канада 1989, Эльба, Италия 1991), Международных симпозиумах по мюонному катализу (Токио 1986, Гатчина 1987, Флорида 1988, Вена 1990), Международном симпозиуме "Взаимодействие мюонов и пионов с веществом" (Дубна 1987), Международной школе по экзотическим атомам (Эриче, Италия 1989), Всесоюзных конференциях по малонуклонным системам (Ленинград 1983, Киев 1985), III Всесоюзной школе по малочастичным и кварк-адронным системам (Паланга 1986), сессиях Отделения ядерной физики АН СССР, сессиях секции Ученого совета ОИЯИ по теоретической физике, на научных семинарах ОИЯИ, ИАЭ им.И.В.Курчатова, ЛИЯФ, ИТЭФ, в некоторых зарубежных лабораториях.

#### Публикации

Основное содержание диссертации отражено в 30 публикациях, которые приведены в списке литературы.

#### Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Она содержит 145 страниц, в том числе 21 рисунок на 19 страницах, 12 таблиц и библиографический список из 149 наименований.

#### Автор защищает:

1. Постановку граничных условий для многоканальной задачи рассеяния, возникающей в адиабатическом представлении при описании медленных столкновений в системе трех кулоновских частиц в пределе малых ( $R \rightarrow 0$ ) и больших межъядерных расстояний ( $R \rightarrow \infty$ ).
2. Разработку метода решения многоканальной задачи рассеяния, возникающей при описании в адиабатическом представлении медленных столкновений в системе трех кулоновских частиц.
3. Численное исследование сходимости адиабатического разложения в задаче о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц со сравнимыми массами.
4. Результаты расчетов сечений мезоатомных процессов в однородных смесях изотопов водорода, которые изданы в виде атласа мезоатомных сечений для области энергий столкновения 0-100 эВ мезоатомов с ядрами, атомами и молекулами смесей  $H_2$ ,  $D_2$  и  $T_2$ .

5. Результаты расчетов в многоуровневом приближении адиабатического подхода сечений упругого рассеяния мезоатомов и скорости изотопного обмена в смеси дейтерия и трития.
6. Метод и результаты расчета скоростей ядерных реакций "на лету" в мезоатомной и атомной физике типа  $t\mu + d \rightarrow He^4 + n + \mu$  и  $d + D \rightarrow t + d + e$  в области энергий столкновения от 0 до нескольких кэВ.
7. Метод и результаты расчета скоростей ядерных реакций в мезомолекулах, а также эффектов влияния сильного взаимодействия и неадиабатичности движения ядер на коэффициент прилипания мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа.
8. Новый метод решения многомерного уравнения Шредингера без разделения переменных и его реализации для двухмерного и трехмерного случаев.

## II. Содержание диссертации

Во Введении к диссертации дан краткий обзор многомерных и многоканальных задач рассеяния, возникающих в мезоатомной физике. Отмечается, что центральное место здесь занимает задача о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц – "мезоатом + ядро", решения которой необходимо знать для теоретического описания процессов рассеяния мезоатомов на ядрах, атомах и молекулах водородосодержащих смесей. Отмечается, что до настоящей работы эти задачи исследовались лишь эпизодически. Дается краткий обзор имеющихся результатов. Все они получены в одноуровневом и двухуровневом приближениях адиабатического подхода.

Дано описание структуры диссертации и краткое описание по главам.

В Главе 1 "Адиабатическое представление для описания медленных столкновений в системе трех кулоновских частиц" исходная задача в шестимерном пространстве  $(\vec{r}, \vec{R})$  о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц ( $\vec{r}$  - координаты мюона, а  $\vec{R}$  - радиус-вектор соединяющий ядра) формулируется в адиабатическом представле-

нии как многоканальная задача рассеяния

$$\left\{ \left( \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \right) \delta_{ij} + \bar{k}_i^2 - U_{ij}(R) \right\} y_i(R) = \sum_{j \neq i}^N U_{ij}(R) y_j(R) \quad (1)$$

с большим числом закрытых каналов и сильной ( нестандартной ) связью в асимптотической области: при больших межъядерных расстояниях  $R \rightarrow \infty$  эффективные потенциалы  $U_{ij}(R)$  имеют вид

$$U_{ij}(R) = A_{ij} + B_{ij} \frac{1}{R} + C_{ij} \frac{1}{R^2} \quad (2)$$

В §1.1 описывается процедура перехода от многомерного уравнения Шредингера для искомой волновой функции системы "мезоатом + ядро"  $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$  к многоканальной задаче рассеяния (1) с граничными условиями при  $R = R_m \rightarrow \infty$

$$y_i^{(\nu)}(R) = \begin{cases} j_J(k_i^{(N)} R) \delta_{i\nu} + n_J(k_i^{(N)} R) t_{i\nu}, & i \leq s, \\ \exp(-|k_i^{(N)}| R), & i > s, \end{cases} \quad (3)$$

где  $s$  - число открытых каналов,  $\nu = 1, 2, \dots, s$ .

Следуя работам <sup>1</sup>, показывается, что в пределе  $N \rightarrow \infty$  асимптотика (3) системы уравнений согласована с физическими граничными условиями задачи рассеяния "мезоатом + ядро", то есть устраняется недостаток одноуровневых и двухуровневых приближений адиабатического подхода: неправильный импульс  $\bar{k}_i$  и неправильное начало отсчета энергии в канале. Обе эти трудности устраняются при корректном учете связи каналов (2) в асимптотической области. Так при  $N \rightarrow \infty$  выполняется соотношение:

$$\bar{k} \rightarrow k_{(N)} \rightarrow k, \text{ где } \bar{k}^2 = 2M\epsilon, \quad k_{(N)}^2 = 2M_N\epsilon, \quad k^2 = 2M\epsilon,$$

$$M = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b}, \quad M_N = \frac{M}{1 - \alpha_N}, \quad \mathcal{M} = \frac{(m_\mu + M_a) M_b}{(m_\mu + M_a + M_b)},$$

что позволяет корректно ставить граничные условия задачи рассеяния (1). В §1.2 найдена асимптотика волновой функции задачи трех тел

<sup>1</sup>Ponomarev L.I. and Vinitzky S.I., J.Phys.B12(1979)567; Ponomarev L.I., Somov L.N. and Vukajlović F., J.Phys.B14(1980)591.

$\Psi(\vec{r}, \vec{R})$  в пределе малых межъядерных расстояний  $R \rightarrow 0$  и формулируются граничные условия задачи рассеяния (1) в этом пределе для ограниченного адиабатического базиса. В §1.3 сформулированы граничные условия многоканальной задачи рассеяния (1) для ограниченного адиабатического базиса в пределе  $R \rightarrow \infty$ .

В Главе 2 "Непрерывный аналог метода Ньютона в многоканальной задаче рассеяния" предлагается метод решения многоканальной задачи рассеяния (1), учитывающий особенности (2). В §2.1, следуя идеям работ <sup>2</sup>, задача рассеяния (1), (3) формулируется в виде системы нелинейных функциональных уравнений

$$\varphi_{(m)}^{(\nu)}(z) = 0 \quad (4)$$

$$\nu = 1, \dots, s; \quad m = 1, \dots, 5$$

относительно искомым волновой функции  $y_i^{(\nu)}(R)$  и элементов матрицы реакции  $t_{\nu\nu} : z = \{y^{(\nu)}, t_{\nu\nu}, \epsilon\}$ . Здесь  $\varphi_2 = 0$  и  $\varphi_3 = 0$  — граничные условия, учитывающие асимптотику системы (1) (см. §§1.2-1.3),  $\varphi_4 = 0$  — условие нормировки. Условие  $\varphi_5 = 0$  фиксирует  $\epsilon = \epsilon^*$  таким образом, что решение уравнения (4)  $z^*$  совпадает с решением задачи рассеяния (1), (3) при  $\epsilon = \epsilon^*$ . В §2.2 описана итерационная схема решения уравнений (4) с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. Условие  $\varphi_5 = 0$  фиксирует заданную энергию  $\epsilon = \epsilon^*$  в конце итерационного процесса. Отметим, что убрав это условие из системы (4) и заменив соответствующим образом граничное условие  $\varphi_3 = 0$ , получим задачу на собственные значения для системы уравнений (1). Исследование сходимости и эффективность данного подхода демонстрируются в §2.3 на примере одноканальной задачи, имеющей аналитическое решение: рассеяние на потенциале Морзе. В §2.4 предложенный подход применяется для решения многоканальной задачи рассеяния с двумя открытыми и большим числом закрытых каналов ( $\approx 500$ ), возникающей при описании в адиабатическом представлении упругого рассеяния и реакции переворота спина  $p\mu$ -атома при столкновении с протонами. Численно демонстрируется сходимость адиабатического разложения для максимального в физике мезоатомов параметра неадиабатичности  $1/M = 0.2$ .

<sup>2</sup>Ролотаев Л.И., Пузынин И.В. and Пузынина Т.Р. J.Comp.Phys.13 (1973)1; Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В., ЭЧАЯ,4 (1973)127.

В Главе 3 "Применение метода для расчета сечений и скоростей мезоатомных процессов в смеси изотопов водорода" рассмотрено применение развитой в главах 1 и 2 вычислительной схемы для расчета характеристик процессов, происходящих при замедлении мезоатомов в водородосодержащих смесях от нескольких десятков эВ до тепловых энергий ( $\approx 10^{-2}$  эВ). Сюда относятся :

а) упругое рассеяние мезоатомов в основных состояниях

$$(a\mu) + (a, b) \rightarrow (a\mu) + (a, b) \quad (5.a)$$

б) реакции изотопного обмена

$$(b\mu) + a \rightarrow (a\mu) + b \quad (5.b)$$

в) реакции переворота спина мезоатома

$$a(\uparrow\uparrow) + a \rightarrow a(\uparrow\downarrow) + a \quad (5.c)$$

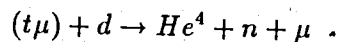
Для расчета сечений этих процессов требуется решить задачу о медленных столкновениях ( энергия столкновения не превышает порога второго возбужденного состояния мезоатома ) с перераспределением в системе трех кулоновских частиц. Предложенная в предыдущих главах схема позволяет также учитывать влияние электронного экранирования и молекулярной структуры в более сложных мезоатомных процессах типа

$$(a\mu)_F + \{(D_2)_i^I, (DT)_i^I\} \rightarrow (a\mu)_{F'} + \{(D_2)_i^I, (DT)_i^I\}, \quad (6)$$

где  $i = k, \nu$ ,  $k$  и  $\nu$  вращательное и колебательное квантовые числа молекул  $T_2$  и  $DT$ ,  $I$  - спин молекулы,  $F$  - спин мезоатома. В §3.1 дается краткий обзор результатов, полученных в этой области к моменту выполнения данной работы. В §3.2 представлены результаты наших многоуровневых адиабатических расчетов сечений процессов (5.a), (5.b) и демонстрируется сходимость метода. Проведено сравнение с результатами других авторов, предпринимавших попытки учета неадиабатичности движения ядер в этих процессах в рамках двухуровневых приближений. Расчитанная в многоуровневом адиабатическом подходе скорость изотопного обмена

$$(d\mu) + t \rightarrow (t\mu) + d$$

прекрасно согласуется с экспериментальными данными и результатами лучших вариационных расчетов, в то время, как результаты двухуровневых аппроксимаций существенно от них отличаются. В §3.3 описана структура рассчитанного нами атласа сечений мезоатомных процессов (5.a), (5.c) в однородных смесях изотопов водорода  $H_2$ ,  $D_2$  и  $T_2$ . Проведено сравнение с имеющимися двухуровневыми аппроксимациями. Расчитанные  $t$ -матрицы процессов (5.a), (5.b), (5.c) использовались нами в качестве входной информации при учете эффектов электронного экранирования и молекулярной структуры в более сложных реакциях (6). Схема этих расчетов изложена в §§3.4 и 3.5. Результаты расчета реакций (6) в однородных смесях  $H_2$ ,  $D_2$  и  $T_2$  также изданы в виде атласа мезоатомных сечений. Отметим, что до настоящего времени эти расчеты молекулярных эффектов являются единственными, исключая оценки эффекта, выполненные в рамках модели Ферми. Полученные результаты частично уже использовались для экспериментальных данных. В §3.6 рассмотрено применение предложенной в главах 1 и 2 вычислительной схемы для расчета волновых функций трехтелных систем  $(a\mu) + b$ , которые используются для описания ядерных реакций "на лету"



Обнаружено резонансное усиление скорости этой реакции при энергии  $\approx 70$  эВ. Получены простые формулы, описывающие подобные эффекты в сечениях ядерных реакций  $X(a, b)Y$  за счет добавочного к кулоновскому взаимодействию во входном канале.

Предложенная вычислительная схема применима не только в области положительных энергий столкновения, но также и в области отрицательных энергий, для нахождения связанных состояний в системе трех кулоновских частиц.

В Главе 4 "Приложение метода в смежных областях мезоатомной, атомной и ядерной физики" демонстрируются возможности метода для решения разнообразных задач такого типа, возникающих в физике мюонов, а также его применимость в смежных областях атомной и ядерной физики: в области более высоких энергий и при отсутствии параметра малости в задаче. В §4.1 представлены результаты расчета в адиабатическом подходе скоростей ядерных реакций синтеза в мезомолекулах тяжелых изотопов водорода и проводится сравнение с

более поздними вариационными расчетами. Интерес к проблеме мюонного катализа поставил задачу об определении величины "коэффициента прилипания" мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа в смеси дейтерия и трития. В рамках предложенного в работе <sup>3</sup> подхода с помощью вычислительной схемы, изложенной в главах 1 и 2, впервые рассчитаны эффекты влияния сильного взаимодействия и неадиабатичности движения ядер в возбужденных состояниях мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$  на коэффициент прилипания. Здесь представлены также результаты первых адиабатических расчетов эффектов поляризации вакуума в мезомолекулах, которые продемонстрировали возможность экспериментального измерения этой величины в слабосвязанных состояниях  $dd\mu$  и  $dt\mu$ . Изложенная в главах 1 и 2 вычислительная схема применима для описания медленных столкновений и связанных состояний в системе трех частиц, хотя она формально не содержит ограничений на границу исследуемой области энергий. В §4.2 этот подход успешно использовался для расчета эффектов электронного экранирования в реакции  $d - D$  синтеза. Здесь мы продвинулись в область больших энергий столкновений 5-10 кэВ, где движение ядер уже трудно согласовать с гипотезой адиабатичности. Представленные результаты согласуются с данными, полученными по методу классических траекторий. В §4.3 на примере расчета сечений рассеяния электронов на позитронии демонстрируется сходимость адиабатического представления в случае большого параметра неадиабатичности в задаче. Сходимость в этом случае обусловлена, по-видимому, малостью недиагональных матричных элементов в системе уравнений (1).

В Главе 5 "Новый метод решения многомерной задачи рассеяния в квантовой физике" излагается новый метод решения многомерного уравнения Шредингера, не допускающего разделения переменных. Предлагается такое обобщение рассмотренной в главах 1 и 2 вычислительной схемы, в котором устранена наиболее трудоемкая часть адиабатического и вариационного подходов: вычисление матричных элементов гамильтониана в заданном представлении. Идея подхода излагается в §5.1. Для части переменных  $\Omega$  из пространства независимых переменных  $X = \{R, \Omega\}$  искомой волновой функции  $\Psi(X)$  вводится разностная

<sup>3</sup>Bogdanova L.N., Bracci L., Fiorentini G., Gerstein S.S., Markushin V.E., Melezhhik V.S., Menshikov L.I. and Ponomarev L.I. Nucl.Phys. A454(1986)653.

сетка  $\Omega_i (i = 0, 1, \dots, N)$ ; расстояние между узлами сетки характеризуется шагом сетки  $h$ ), значения  $\Omega_i$  рассматриваются как дискретные переменные, а переменная  $R$  остается непрерывной. Исходное многомерное уравнение Шредингера аппроксимируется при этом системой дифференциально - разностных уравнений для вектора  $\{\Psi_i(R)\}_1^N = \Psi(R, \Omega_i)$ . Разностную сетку  $\Omega_i$  для "внутренних" переменных  $\Omega$  можно ввести различными способами. Предлагаемый здесь подход близок к "discrete variable representation" <sup>4</sup>. В §5.3 показано, как в предлагаемом подходе перейти к представлению "discrete variable representation" для двумерной задачи. В §5.2 задача рассеяния для полученной системы дифференциально - разностных уравнений формулируется аналогично подходу §2.2 как система функциональных уравнений

$$\varphi_{(m)}(z) = 0; \quad m = 1, \dots, 5$$

относительно вектора  $z = \{\Psi_i(R), \varepsilon, t_{\nu\nu}^h\}$ .

В таком подходе вопрос о точности решения многомерной задачи рассеяния сводится к вопросу, достаточно разработанному в вычислительной математике, о сходимости полученного в пространстве  $X_h = \{R, \Omega_i\}$  решения  $\{\Psi_i(R), t_{\nu\nu}^h\}$  к решению исходной задачи  $\{\Psi(R, \Omega), t_{\nu\nu}\}$  в  $X = \{R, \Omega\}$ . Это особенно привлекательно, если учесть то обстоятельство, что исследовать сходимость методов, использующих разложение искомой волновой функции по тому или иному адиабатическому (или вариационному) базису, можно лишь численно.

В §5.3 метод применяется для решения ряда двумерных задач: рассеяние на несферической потенциальной яме, "дипольное" рассеяние, атом водорода в однородном магнитном поле. Во всех этих примерах метод сходится быстрее, чем  $1/N!$ . В §5.4 рассмотрено решение трехмерного уравнения Шредингера без разделения переменных на примере расчета энергии связи атома гелия. В предлагаемом подходе получена двухсторонняя сходимость к решению, что демонстрирует эффективность метода по сравнению с "прямыми" методами конечных элементов и конечных разностей.

Подчеркнем два обстоятельства, которые делают метод привлекательным применительно к решению различных задач квантовой физики: по простоте генерации матрицы коэффициентов системы диффе-

ренциально - разностных уравнений метод близок к "прямым" методам, однако существенно превосходит их по скорости сходимости.

В Заключении сформулированы основные результаты полученные в диссертации.

### III. Основные результаты и выводы.

1. В диссертации впервые сформулированы граничные условия для многоканальной задачи рассеяния, возникающей в адиабатическом представлении при описании медленных столкновений в системе трех кулоновских частиц в пределе малых ( $R \rightarrow 0$ ) и больших межъядерных расстояний ( $R \rightarrow \infty$ ).
2. Разработан новый метод решения многоканальной задачи рассеяния, с помощью которого впервые выполнены многоуровневые адиабатические расчеты процессов столкновения с перераспределением в системе трех кулоновских частиц.
3. Впервые исследована сходимость адиабатического разложения в задаче о медленных столкновениях в системе трех кулоновских частиц со сравнимыми массами.
4. Выполнены расчеты и издан атлас сечений мезоатомных процессов в однородных смесях изотопов водорода в области энергий столкновения 0 - 100 эВ мезоатомов с ядрами, атомами и молекулами смесей  $H_2$ ,  $D_2$  и  $T_2$ .
5. Впервые вычислены в многоуровневом приближении адиабатического подхода сечения упругого рассеяния мезоатомов и скорость изотопного обмена в смеси дейтерия и трития.
6. Разработан метод расчета скоростей ядерных реакций "на лету" в мезоатомной и атомной физике типа  $t\mu + d \rightarrow He^4 + n + \mu$  и  $d + D \rightarrow t + d + e$  в области энергий столкновения от 0 до нескольких кэВ. Впервые выполнен квантово-механический расчет этих реакций и обнаружено резонансное усиление реакции  $t\mu + d$  при энергии  $\approx 70$  эВ. Исследована природа этого эффекта и возможности его проявления в других квантовых системах.

<sup>4</sup>Lill J.V., Parker G.A., and Light J.C. Chem.Phys.Lett.82 (1982) 483.



7. В адиабатическом представлении вычислены волновые функции мезомолекул, что дало возможность впервые рассчитать скорости ядерных реакций в мезомолекулах, а также учесть эффекты влияния сильного взаимодействия и неадиабатичности движения ядер на коэффициент прилипания мюонов к гелию в реакциях мюонного катализа.
8. Впервые рассчитаны сечения рассеяния электронов на позитронии в адиабатическом представлении. Продемонстрирована сходимость последнего в случае большого параметра неадиабатичности в задаче.
9. Предложен новый метод решения многомерного уравнения Шредингера без разделения переменных, и дана его реализация для двухмерного и трехмерного случаев. По простоте реализации предложенный подход близок к "прямым" методам конечных элементов и конечных разностей, но превосходит их по скорости сходимости. Эти два обстоятельства делают метод привлекательным, как для решения задач, рассмотренных в диссертации в адиабатическом представлении, так и в других задачах квантовой физики.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. V.S.Melezhik and L.I.Ponomarev. "Vacuum - polarization in  $\mu$  - mesic molecules of hydrogen isotopes", Phys. Lett. B77 (1978) 217-220.
2. Л.Н.Богданова, В.Е.Маркушин, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев. "Ядерная реакция синтеза в мезомолекуле  $dt\mu$ ", ЯФ, 34 (1981) 1191-1206.
3. В.С.Мележик. "Эффекты поляризации вакуума в мезомолекулах  $dd\mu$  и  $dt\mu$ ", Письма в ЖЭТФ, 36 (1982) 101-103.
4. С.И.Виницкий, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев. "Волновые функции мезомолекул при малых межъядерных расстояниях", ЯФ, 36 (1982) 465-473.
5. В.С.Мележик, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов. "Решение системы интегродифференциальных уравнений возникающей при вычислении уровней энергии мезомолекул в адиабатическом представлении задачи трех тел", Сообщение ОИЯИ, P11-82-842, Дубна, 1982.
6. В.С.Мележик, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман. "Процессы упругого рассеяния в системе трех частиц с кулоновским взаимодействием",

ЖЭТФ, 85 (1983) 434-446.

7. V.S.Melezhik, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina, L.N.Somov. "Numerical solution of a system of integrodifferential equations arising from the quantum mechanical three-body problem with Coulomb interaction", J. Comp. Phys. 54 (1984) 221-236.
8. V.S.Melezhik. "Continuous analog of Newton method in the multichannel scattering problem", J. Comp. Phys. 65 (1986) 1-17.
9. V.S.Melezhik and J.Wozniak. "Cross sections for scattering of deuterium mesic atom on deuterium nuclei", Phys. Lett. A116 (1986) 370-374.
10. A.Adamczak, V.S.Melezhik and L.I.Menshikov. "Electron screening in low energy scattering of muonic hydrogen on hydrogen atoms", Z. fur Phys. D4 (1986) 153-160.
11. A.Adamczak and V.S.Melezhik. "Low energy scattering of muonic hydrogen on hydrogen molecules", Phys. Lett. A118 (1986) 181-184.
12. V.S.Melezhik and F.Vucajlović. "Low energy scattering of electrons on positronium atoms", Phys. Rev. Lett. 59 (1987) 641-644.
13. V.S.Melezhik. "Recent progress in the theoretical description of the mesic molecular processes in  $\mu CF$ ", Muon Catalyzed Fusion, 1 (1987) 205-218.
14. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini and J.Wozniak. "Collisions between hydrogen isotopes and their muonic counterparts", II Int.Symp."Muons in matter" Proceedings, Dubna, 1987, 295-301.
15. V.S.Melezhik and F.Vukajlović. "Low energy scattering of electrons by positronium", Phys. Rev. A38 (1988) 6426-6428.
16. V.S.Melezhik. "Cross sections of mesic atomic processes in hydrogen isotope mixture", Muon Catalyzed Fusion 2 (1988) 117-130.
17. A.Adamczak and V.S.Melezhik. "Influence of electron screening and molecular binding on cross sections for scattering of muonic hydrogen", Muon Catalyzed Fusion 2 (1988) 131-136.
18. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini and J.Wozniak. "Collision-induced spin-flip in isotopes of muonic hydrogen", Phys. Lett. A134 (1989) 435-439.
19. Л.Н.Богданова, В.Е.Маркушин, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев, "  $\mu He$  - прилипание как функция ядерного  $dt$ -взаимодействия в мезомолекуле  $dt\mu$ ", ЯФ, 50 (1989) 1365-1373.
20. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini and J.Woz-

- niak. "About the boundary conditions for the three-body problem in the adiabatic representation", Nuovo Cimento, B105 (1990) 459-468.
21. L.Bracci, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, G.Mezzorani and P.Quarati. "Atomic effects in the determination of nuclear cross sections of astrophysical interest", Nucl. Phys. A513 (1990) 316-343.
22. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini and J. Wozniak. "The calculation of the elastic scattering cross sections for the  $p\mu + p$  and  $t\mu + t$  collisions in adiabatic representation", Phys. Lett. A149 (1990) 463-468.
23. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini, L.I.Ponomarev and J.Wozniak. "The Atlas of the cross sections of mesic atomic processes. I.The processes  $p\mu + p$ ,  $d\mu + d$  and  $t\mu + t$ ", Muon Catalyzed Fusion 4 (1989) 247-302.
24. A.Adamczak and V.S.Melezhik. "Atlas of cross sections for scattering. II.  $p\mu + H_2$ ,  $d\mu + D_2$  and  $t\mu + T_2$ ", Muon Catalyzed Fusion 4 (1989) 303-340.
25. L.Bracci, C.Chiccoli, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, P.Pasini, L.I.Ponomarev and J.Wozniak. "Recent progress in the theoretical description of the mesic atomic collision processes  $p\mu + p$ ,  $d\mu + d$  and  $t\mu + t$ ", Muon Catalyzed Fusion 5 (1991) 21-32.
26. A.Adamczak and V.S.Melezhik. "Cross sections of processes  $p\mu + H_2$ ,  $d\mu + D_2$  and  $t\mu + T_2$ ", Muon Catalyzed Fusion 5 (1991) 65-72.
27. V.S.Melezhik. "New method for solving three-dimensional Schroedinger equation". Nuovo Cimento, B106 (1991) 537-544.
28. L.Bracci, G.Fiorentini, V.S.Melezhik, G.Mezzorani and P.Pasini. "Quantum mechanical calculation of the electron screening in  $d - D$  fusion", Phys. Lett. A153 (1991) 456-460.
29. V.S.Melezhik. "Resonance amplification of the nuclear reaction  $X(a, b)Y$  near the  $a + X$  channel threshold", JINR Communications, E4-91-132, Dubna, 1991.
30. V.S.Melezhik. "New method for solving multidimensional scattering problem", J. Comp. Phys. 92 (1991) 67-81.

Рукопись поступила в издательский отдел

25 ноября 1991 года.