



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.4>

УДК 533.95:539.17
ББК 22.193

Дата поступления статьи: 29.11.2021
Дата принятия статьи: 22.05.2022



МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ СИСТЕМЫ НЕСКОЛЬКИХ ЧАСТИЦ¹

Сергей Алексеевич Позднеев

Доктор технических наук, профессор отделения квантовой радиофизики,
физический институт им. П.Н. Лебедева, Российская академия наук
pozdnееv@sci.lebedev.ru
просп. Ленинский, 53, 107924 г. Москва, Российская Федерация

Аннотация. Представлены методы численного решения квантовой проблемы нескольких частиц, основанные на уравнениях Фаддеева. Данные методы применены для расчетов необычных связанных состояний и состояний рассеяния.

Ключевые слова: математическое моделирование, квантовая теория рассеяния, уравнения Фаддеева, состояния Ефимова.

Введение

Потребности практики, связанные с разработкой новых химических лазеров на электронных переходах атомов и молекул, экспериментами по лазерному термоядерному синтезу, астрофизическими исследованиями, развитием новых нано-технологий, созданием новых химических соединений с заранее заданными свойствами и целенаправленным поиском оптимальных путей их синтеза, с разработкой ЭВМ новых поколений, в частности оптических и нейро-ЭВМ, с исследованием Бозе-конденсации, а также необычных свойств многочастичных систем (эффект Ефимова [7; 16]) и т. д. требуют новых методов и основанных на них средств для расчетов основных характеристик различных элементарных процессов, таких как взаимодействия излучения с веществом,

столкновения электронов и атомов с атомами и молекулами, молекул и нуклонов между собой и т. п.

Наиболее последовательным и математически корректным методом моделирования элементарных процессов в области низких и средних энергий является метод, основанный на интегральных и дифференциальных уравнениях, сформулированных Л.Д. Фаддеевым, О.А. Якубовским и С.П. Меркурьевым [7], которые описывают движение нескольких квантовых частиц, взаимодействующих при помощи парных потенциалов. Корректная формулировка задачи рассеяния для системы нескольких частиц, разработанная в этих работах, позволила реализовать новые численные методы для моделирования различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, математически строго обосновать различные приближенные методы решения многочастичных задач и корректно определить границы применимости этих приближений, а также взаимосвязь между ними [7; 15–17].

Можно так же применять для этих целей уравнения Шредингера, однако при исследовании состояний рассеяния возникают существенные трудности, преодолеть которые и позволяют уравнения Фаддеева.

Кроме того, только благодаря этим уравнениям было открыто одно из уникальных явлений квантовой физики — эффект Ефимова [2; 21], состоящий в том, что в системе же трех частиц, даже с гладкими финитными парными потенциалами, при определенных условиях реализуется ситуация, когда число трехчастичных связанных состояний может оказаться бесконечным. Это происходит в случае, когда ни одна из парных подсистем не имеет связанных состояний, но хотя бы две из них обладают бесконечными длинами рассеяния.

Этот эффект в общем случае зависит от квантовых чисел трехчастичного состояния, момента, четности, симметрии относительно перестановок частиц, оценка для которых представлена в [2; 3; 20; 21]. Наибольшее притяжение должно быть при орбитальном моменте трех частиц $L = 0$, так как там нет центробежных сил, симметрия этого состояния должна быть максимальной, в противном случае волновая функция будет иметь узлы и связь уменьшится. Таким образом, количество резонансных состояний в трехчастичной системе определяется только специфическими свойствами парных подсистем. В связи с простотой данной модели представляется интересным исследование влияния различных факторов на эти необычные состояния трехчастичной системы, в результате было показано, что [2; 3; 20; 21]:

- центробежные силы разрушают эффект;
- данные состояния обладают максимальной симметрией;
- тройные силы не влияют на эффект;
- добавление частицы к трехчастичной системы разрушает эффект;
- заряд частиц влияет на эффект и в этом случае эффект выражен менее ярко;
- для спиновых частиц эффект выражен менее ярко.

Наиболее существенно влияют на эффект массы частиц. Имеется три характерных режима: режим одинаковых частиц, режим тяжелого центра и молекулярный режим [2; 3; 7; 16; 20; 21].

Режим тяжелого центра имеет место, когда две частицы имеют массы одного порядка m_l , а третья m_h намного тяжелее, причем у пары легких частиц нет связанного состояния или они не взаимодействуют между собой, а взаимодействуют только с тяже-

лой частицей при помощи притягивающего потенциала. В этом случае при бесконечно тяжелой третьей частице имеем случай пары частиц в силовом центре, и естественно в такой системе трехчастичные уровни не возникают. В случае конечной массы тяжелого m_h центра число уровней пропорционально: $N \sim \frac{m_l}{m_h} \ln \frac{1}{e_0 m_l r_0^2}$. Особенность этого режима состоит в том, что для существования трехчастичных уровней необходимы чрезвычайно мелкие уровни в парных подсистемах, в отличие от молекулярного режима, где требования на парные уровни значительно проще. В этом случае $m_h \rightarrow \infty$ (бесконечно тяжела) тяжелая частица не реагирует на движение невзаимодействующих частиц, которые движутся независимо друг от друга в поле неподвижной тяжелой частицы. Поэтому в этом пределе энергия связи трех частиц аддитивно складывается из энергий связи двухчастичных систем. Однако при конечной величине массы тяжелой частицы все три частицы движутся согласованно, оставляя неподвижным центр масс системы. При этом тяжелая частица реагирует на изменение положений двух других частиц, в движении которых возникает корреляция, несмотря на отсутствие прямого взаимодействия между ними. Таким образом, динамическая корреляция в движении связываемых частиц может трактоваться как специфическое притяжение. Необходимо отметить, что подобное динамическое притяжение возникает и в том случае, когда между связываемыми частицами действуют силы отталкивания. В этом случае динамическое притяжение компенсирует взаимное отталкивание и приводит к стабилизации системы [19; 20; 23].

В общем случае уравнения Фаддеева являются многомерными и найти аналитическое решение можно только в некоторых предельных случаях [7; 16]. Поэтому значительный как теоретический, так и практический интерес представляют собой различные методы численного решения этих уравнений. Таким образом, основная цель работы состоит в предложении одного из методов численного решения уравнений квантовой задачи нескольких тел. В результате представлен универсальный и эффективный метод численного решения этих уравнений, который позволяет рассчитывать как связанные состояния, так и состояния рассеяния в системах нескольких частиц.

1. Уравнения квантовой теории рассеяния в системе нескольких тел

Впервые полученные уравнения квантовой теории рассеяния в системе нескольких тел имеют вид интегральных уравнений [7] в импульсном пространстве. Однако в практических расчетах более удобной оказалась дифференциальная формулировка этих уравнений для трех частей, на которые разбивается полная волновая функция системы трех тел

$$\Psi = \sum_{i=1}^3 F_i,$$

каждая из которых соответствует всевозможным разбиениям системы трех частиц на не взаимодействующие подгруппы. Эти уравнения в координатном пространстве в случае рассеяния частицы с импульсом \vec{p}_j на связанной паре j в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_B(\vec{x}_j)$ с энергией, ϵ_B , ($B = (ij)$), где i — номер связанного состояния пары j , имеют следующий вид [7]:

$$(-\Delta_{x_i} - \Delta_{y_i} + V_i(x_i) - E)F_i = -V_i \sum_{j \neq i} F_j, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{x}_i &= \sqrt{\frac{2m_j m_k}{m_j + m_k}} (\vec{r}_j - \vec{r}_k), \quad \vec{y}_i = \sqrt{\frac{2m_i(m_j + m_k)}{m_i + m_j + m_k}} \left(\vec{r}_i - \frac{m_j \vec{r}_j + m_k \vec{r}_k}{m_j + m_k} \right), \\ \vec{x}_i &= c_{ij} \vec{x}_j + s_{ij} \vec{y}_j, \quad \vec{y}_i = -s_{ij} \vec{x}_j + c_{ij} \vec{y}_j, \\ s_{ij}^2 &= \frac{m_k \sum_k m_k}{(m_i + m_j)(m_j + m_k)}, \quad s_{ij}^2 + c_{ij}^2 = 1, \end{aligned}$$

$V_i(x_i)$ — парные короткодействующие потенциалы взаимодействия.

Для однозначного решения этих уравнений необходимо добавить граничные условия, которые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} F_i(\vec{x}_i, \vec{y}_i)|_{x_i, y_i \rightarrow 0} &\rightarrow 0, \\ F_i(\vec{x}_i, \vec{y}_i, \vec{p}_j)_{\rho = \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \rightarrow \infty} &\rightarrow \delta_{ij} \Psi_B(x_j) \exp(i\vec{p}_j \vec{y}_j) + \\ &+ \sum_A A_{AB}(\hat{y}_j, \vec{p}_j) \Psi_A(x_i) \frac{\exp(i\sqrt{E - \epsilon_A} |\vec{y}_i|)}{|\vec{y}_i|} + \\ &+ A_{iA}(\hat{X}, \vec{p}_j) \frac{\exp(i\sqrt{E} |X|)}{|X|^{5/2}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Уравнения Фаддеева (1)–(3) являются математически корректными уравнениями для описания динамики трех попарно взаимодействующих бесструктурных квантовых частиц, причем предположение о парном взаимодействии между частицами трехчастичной системы является естественным, так как все характеристики процессов в такой системе в первую очередь будут определяться парным взаимодействием. Это полностью подтверждается экспериментальными результатами в прямых реакциях ядерной, атомной физики и молекулярной физики, где столкновения близких и парных потенциалов определяют всю динамику реакции [7–12; 15–17; 19; 22].

Уравнения Фаддеева (1)–(3) являются шестимерными, и найти аналитическое решение можно только в некоторых случаях [7; 16]. Поэтому значительный как теоретический, так и практический интерес представляют собой различные методы численного решения этих уравнений. Для понижения размерности исходных уравнений необходимо провести парциальный анализ при помощи разложения компонент Фаддеева по некоторому базису [7; 16; 19; 22]. В случае разложения по бисферическим гармоникам имеем следующую систему интегро-дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{l(l+1)}{x_i^2} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{y_i^2} + V_i(x_i) - E \right) F_{i;l\lambda}^L(x_i, y_i) = \\ = -V_i(x_i, y_i) \sum_{i \neq j} \sum_{l'\lambda'} \int_{-1}^1 h_{(i;l)(j;l'\lambda')}^L(\eta) F_{j;l\lambda}^L(x_i, y_i) d\eta, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\eta = (\widehat{\vec{x}_i \vec{y}_i})$, $h_{(i;l)(j;l'\lambda')}^L$ представлены в [4; 7; 16] и зависят только от угла $\theta = \arctan(y/x)$ и не зависят от гиперрадиуса $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, и поэтому для численного решения полярные координаты ρ и θ наиболее удобны. Граничные условия для состояний рассеяния имеют следующий вид

$$F_{i;l\lambda}^L(x_i, y_i)|_{x_i=0, y_i=0} = 0, \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
 F_{a';a,v}^L(x, y, p) &= \delta_{aa'} \Psi_{lv}(x) J_\lambda(y, p) + \\
 &+ \sum_{v'} \Psi_{v'v'}(x) H_{v'}(\sqrt{E - \epsilon_{v'v'}}, y) [a_{a'Lv'}^{av}(p) + o(y^{-1/2})] + \\
 &+ (\exp(i\sqrt{E}\rho + i\pi L/2)) / (\sqrt{\rho}) [A_{a'L}^{av}(p, \theta) + o(\rho^{-1/2})], \tag{6}
 \end{aligned}$$

где $E = \epsilon_{lv} + p^2$, $a = (l, \lambda)$, J_λ — сферическая функция Бесселя, $a(p)$, $A(p, \theta)$ — амплитуды упругого рассеяния (при $E > 0$ и $a' = a, v' = v$), перестройки ($E > 0, a' \neq a, v' \neq v$) и развала соответственно. В случае связанных состояний

$$\begin{aligned}
 F_{l\lambda}^L(x, y,) &= \\
 &= \sum_v \Psi_{lv}(x) H_\lambda(\sqrt{E - \epsilon_{lv}} y) [a_{l\lambda Lv} + o(y^{-1/2})] + \\
 &+ \exp(i\sqrt{E}\rho + i\pi L/2) [A_{l\lambda L}(\theta) + o(\rho^{-1/2})] / (\sqrt{\rho}), \tag{6}
 \end{aligned}$$

В случае модели твердого кора [7; 9; 15; 19] каждая парциальная компонента при $x_i > c_i > 0$ удовлетворяет уравнению (4), а при $x_i \leq c_i$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{l(l+1)}{x_i^2} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{y_i^2} - E \right) F_{i;l\lambda}^L(x_i, y_i) = 0 \tag{7}$$

и требованию равенства нулю полной волновой функции в области $x_i \leq c_i$. Иногда ограничиваются условием — равенством нулю волновой функции при $x_i = c_i$.

Попытки учесть внутреннюю структуру частиц предпринимались в ряде работ [5; 6; 8], однако расчетов реальных систем на их основе практически не известно.

2. Методы численного решения

Описание конечно-разностного алгоритма решения дифференциальных уравнений Фаддеева впервые представлено в [4; 7; 15; 16; 22], а его обобщение на случай модели твердого кора — в [7–10; 16]. Для простоты изложения ограничимся случаем $(L, l, \lambda = 0)$ и рассмотрим следующие процессы в трехчастичной системе

$$1 + (2, 3) \rightarrow \begin{cases} 1 + (2, 3) & \text{процессы упругого рассеяния} \\ 1 + (2, 3)^* & \text{процессы возбуждения} \\ 3 + (1, 2)^* & \text{процессы перестройки} \\ 2 + (1, 3)^* & \text{с возбуждением} \\ 1 + 2 + 3 & \text{процессы ионизации.} \end{cases}$$

Преобразовав уравнения таким образом [16; 22], чтобы для $F' = F - \chi$, получим уравнение, которое отличается от исходного (4) только наличием неоднородного члена

$$F'(x, y, p) = -V(x) \int_{-1}^{+1} d\eta h_{0000}^0(x, y, \eta) \chi(x', y', p). \tag{8}$$

Для решения уравнений (4)–(8) используем конечно-разностную аппроксимацию в полярных координатах ρ и θ . В качестве узлов сетки выбираем точки пересечения дуг

$\rho = \rho_i, i = 1, 2, \dots, N_\rho$ и лучей $\theta = \theta_j, j = 1, 2, \dots, N_\theta$. На фиксированной дуге $\rho = \rho_i$ рассматриваемой сетки значения функции F' образуют вектора $\chi_j^{(i)}, F_j^{(i)}$. В этом представлении уравнения (4) становятся матричными уравнениями

$$\begin{cases} \chi^{(0)} & = 0, \\ L_i \chi^{(i-1)} + (M_i - E\Gamma_i) \chi^{(i)} + R_i \chi^{(i+1)} & = F^{(i)}, \\ i = 1, 2, \dots, N_\rho, \end{cases} \quad (9)$$

где L_i, M_i, Γ_i и R_i — матрицы ранга N_θ . Матрицы L_i и R_i являются диагональными, матрица M_i соответствует вкладам угловой части оператора Лапласа и интегральному оператору на дуге $\rho = \rho_i$. Система уравнений (9) состоит из N_ρ уравнений с $N_\theta + N_\theta$ неизвестными. Необходимое соотношение, которое позволяет выбрать единственное решение системы (9), следует из условий (5)–(6) для (4):

$$\chi^{(N_\rho+1)} = B_{N_\rho} \Gamma_{N_\rho} \chi^{(N_\rho)} + a_0(p) \Gamma_{N_\rho} D^{(N_\rho)}, \quad (10)$$

где B_{N_ρ} — диагональная матрица с элементами

$$b_j = C_{N_\rho}^+ [1 + o(\rho_{N_\rho}^{-1/2})],$$

$$C_{N_\rho}^+ = \sqrt{(\rho_{N_\rho} / \rho_{N_\rho+1})} \exp[i\sqrt{E}(\rho_{N_\rho+1} - \rho_{N_\rho})]$$

и вектор $D^{(N_\rho)}$ с компонентами

$$D_j^{(N_\rho)} = \chi_1(\rho_{N_\rho+1}, \theta_j) - b_j \chi_1(\rho_{N_\rho}, \theta_j),$$

$$\chi_1(\rho, \theta) = \Psi(\rho \cos \theta) \exp(ip\rho \sin \theta),$$

причем (10) позволяет преобразовать последнее уравнение системы (9) к следующему виду

$$L_{N_\rho} \chi^{(N_\rho-1)} + (M_{N_\rho} - E\Gamma_{N_\rho}) \chi^{(N_\rho)} = F^{(N_\rho)} + a_0(p) F'^{(N_\rho)}, \quad (11)$$

где M_{N_ρ} и $F'^{(N_\rho)}$ определяются следующим образом:

$$M_{N_\rho} = M_{N_\rho} + R_{N_\rho} B_{N_\rho} \Gamma_{N_\rho}, \quad F'^{(N_\rho)} = R_{N_\rho} \Gamma_{N_\rho} D^{(N_\rho)}.$$

Система (9) после замены последнего уравнения на (11) становится матричной системой

$$(K - E\Gamma) \chi = F + a_0(p) F'. \quad (12)$$

Матрицы K и Γ имеют ранг N_θ . Из (9) следует, что K имеет ленточную структуру с шириной ленты $2N_\theta + 2$.

Решение системы (12) можно представить в виде

$$\chi = \chi_0 + a_0(p) \chi_1, \quad (13)$$

где χ_0 и χ_1 определяются из уравнений

$$\begin{cases} (K - E\Gamma) \chi_0 & = F, \\ (K - E\Gamma) \chi_1 & = F'. \end{cases} \quad (14)$$

Определив χ_0 и χ_1 и учитывая асимптотику (5), (6), можно найти амплитуду упругого рассеяния $a_0(p)$, причем для этих целей существует несколько методов. В одном сравниваются представления (4) и (13) на дуге $\rho = \rho_{N_\rho}$ в тех узлах сетки ρ_{N_ρ}, θ_j , для которых значения $\rho_{N_\rho} \cos \theta_j$ принадлежат окрестности x_0 , где двухчастичная функция $\psi(x)$ имеет максимум: $\psi(x_0) = \max \psi(x)$. В этой окрестности второе слагаемое, содержащее сферическую волну $\exp(i\sqrt{E}\rho)/\sqrt{\rho}$, намного меньше, чем слагаемое $\psi(x) \exp(ipr)$ при $\rho_{N_\rho} \rightarrow \infty$, следовательно, имеем

$$a_0(p) = [\chi_0^{(N_\rho)}]_j / (\chi_1(N_\rho, \theta_j) - [\chi_1^{(N_\rho)}]_j), \quad (15)$$

причем j соответствует углу θ_j , для которого $\rho_{N_\rho} \cos \theta_j \approx x_0$.

В другом методе сравниваются компоненты (13) с асимптотическим представлением (6) на двух последовательных дугах $\rho_{N_\rho-1}$ и ρ_{N_ρ} .

$$\begin{cases} [\chi_0^{(N_\rho-1)}]_j + a_0(p)[\chi_1^{(N_\rho-1)}]_j = a_0(p)\chi_1(\rho_{N_\rho-1}, \theta_j) + A(\theta_j) \exp(i\sqrt{E}\rho_{N_\rho-1}/\sqrt{\rho_{N_\rho-1}}), \\ [\chi_0^{(N_\rho)}]_j + a_0(p)[\chi_1^{(N_\rho)}]_j = a_0(p)\chi_1(\rho_{N_\rho}, \theta_j) + A(\theta_j) \exp(i\sqrt{E}\rho_{N_\rho}/\sqrt{\rho_{N_\rho}}), \end{cases} \quad (16)$$

где A — амплитуда развала системы на свободно движущиеся частицы. Из (16) следует, что

$$a_0(p) = -([\chi_0^{(N_\rho)}]_j - C^- N_\rho [\chi_0^{(N_\rho-1)}]_j) / ([\chi_1^{(N_\rho)}]_j - \chi_1(\rho_{N_\rho}, \theta_j) - C_{N_\rho}^- [\chi_1^{(N_\rho-1)}]_j - \chi_1(\rho_{N_\rho}, \theta_j)), \quad (17)$$

$$C_{N_\rho}^- = \sqrt{\frac{\rho_{N_\rho-1}}{\rho_{N_\rho}}} \exp [i\sqrt{E}(\rho_{N_\rho} - \rho_{N_\rho-1})],$$

а j определяется номером узлов сетки ρ_{N_ρ}, θ_j , для которых значения $\rho_{N_\rho} \cos \theta_j$ находятся в окрестности x_0 максимума функции $\psi(x_0)$.

Определив $a_0(p)$ при помощи (16) или (17), можно найти $\chi^{(N_\rho)}$, соответствующий значениям искомой функции F' на последней дуге $\rho = \rho_{N_\rho}$, $F'(\rho_{N_\rho} \cos \theta_j, \rho_{N_\rho} \sin \theta_j) = \chi_j^{(N_\rho)}$, и определить амплитуду развала

$$A(\theta_j) = [\chi_j^{(N_\rho)} - a_0(p)\chi_1(\rho_{N_\rho}, \theta_j)] \sqrt{\rho_{N_\rho} \exp(-i\sqrt{E}\rho_{N_\rho})}.$$

В случае связанных состояний решается система уравнений (9) для $\chi_j^{(i)} = F(\rho_i \cos j, \rho_i \sin j)$, где $F(x, y)$ — волновая функция связанного состояния, удовлетворяющая асимптотическим условиям (6), причем в этом случае неоднородный член $F^i = 0$.

Чтобы исключить $\chi^{N_\rho+1}$ из последнего ($i = N_\rho$) уравнения системы (9), можно использовать асимптотическое представление (6). Для углов, отвечающих узлам на дуге сетки $\rho = \rho_{N_\rho}$, можно записать выражение (6) для компонент $\chi_j^{(i)}$ на трех последовательных дугах $\rho = \rho_i$, $i = N_\rho - 1, N_\rho, N_\rho + 1$, пренебрегая членом $\exp(i\sqrt{E})o(\rho^{-1})$. В результате имеем

$$\chi_j^{(i)} = a_0(p)\chi_1(\rho_i, \theta_j) + A(\theta_j) \exp(i\sqrt{E}\rho_i)/\sqrt{\rho_i}, \quad (18)$$

$$\chi_1(\rho, \theta) = \psi(\rho \cos \theta) \exp(i\sqrt{E - e_d}\rho \sin \theta).$$

Используя эти соотношения для $i = N_{\rho-1}$ и $i = N_{\rho}$, можно выразить a_0 и $A(\theta_j)$ в терминах $\chi_j^{(N_{\rho-1})}$ и $\chi_j^{(N_{\rho})}$. Затем можно выразить $\chi_j^{(N_{\rho+1})}$ через $\chi_j^{(N_{\rho-1})}$ и $\chi_j^{(N_{\rho})}$, используя (16) для $i = N_{\rho} + 1$.

В результате имеем

$$\tilde{L}_{N_{\rho}} \chi^{(N_{\rho-1})} + (\tilde{M}_{N_{\rho}} - E \tilde{\Gamma}_{N_{\rho}}) \chi^{(N_{\rho})} = 0,$$

где

$$\tilde{M}_{N_{\rho}} = M_{N_{\rho}} + R_{N_{\rho}} \tilde{\Gamma}_{N_{\rho}} W_{N_{\rho}}, \quad \tilde{L}_{N_{\rho}} = L_{N_{\rho}} + R_{N_{\rho}} \tilde{\Gamma}_{N_{\rho}} W_{N_{\rho}}, \quad (19)$$

и $W_j^{N_{\rho}}$, $\tilde{W}_j^{N_{\rho}}$ — матрицы с элементами

$$w_j^{N_{\rho}} = \frac{\chi_1(\rho_{N_{\rho}}, \theta_j) - C_{N_{\rho}}^+ \chi_1(\rho_{N_{\rho}}, \theta_j)}{\chi_1(\rho_{N_{\rho}-1}, \theta_j) - C_{N_{\rho}}^- \chi_1(\rho_{N_{\rho}}, \theta_j)}, \quad (20)$$

$$\tilde{w}_j^{N_{\rho}} = \frac{\chi_1(\rho_{N_{\rho}-1}, \theta_j) - C_{N_{\rho}}^- \chi_1(\rho_{N_{\rho}}, \theta_j)}{\chi_1(\rho_{N_{\rho}-1}, \theta_j) - C_{N_{\rho}}^- \chi_1(\rho_{N_{\rho}}, \theta_j)}. \quad (21)$$

Матрицы $\tilde{L}_{N_{\rho}}$ и $\tilde{M}_{N_{\rho}}$ зависят от энергии, так как функция χ_1 и коэффициенты $C_{N_{\rho}}^+$ и $C_{N_{\rho}}^-$ также являются функциями энергии. Следовательно, матрица K тоже является функцией энергии. Поэтому энергию связи трехчастичной системы можно определить как положительные корни детерминанта матрицы $K(E) - E\Gamma$.

В случае модели твердого кора в правой части уравнения (4) имеем

$$F(y) = \int_{-1}^{+1} d\eta h_{0,00,0}^0(c, y, \eta) \chi(x', y', p)$$

на фиксированной дуге $\rho = \rho_i$ сетки $F_j^{(i)} = F(\rho_i \sin \theta_j)$ при значениях $\rho_i \cos \theta_j$, равных радиусу кора c . Элементы матриц L_i , M_i , I_i и R_i , входящих в (9) при i, j таких, что $\rho_i \cos \theta_j = c$, вычисляются из условия (7), (8). Для углов, соответствующих узлам на дугах $\rho = \rho_{N_{\rho}}$, лежащих в области $\rho_{N_{\rho}} \cos \theta_j < c$, можно использовать компоненты $\chi_j^{(N_{\rho})}$ и $\chi_j^{(N_{\rho+1})}$ на двух последовательных дугах $\rho = \rho_{N_{\rho}}$ и $\rho = \rho_{N_{\rho+1}}$. Затем, учитывая условие $\psi(x) = 0$ при $x \leq c$ и пренебрегая $\exp(i\sqrt{E}\rho) o(\rho^{-1})$, имеем

$$\chi_j^{(N_{\rho+1})} = C_{N_{\rho}}^+ \chi_j^{(N_{\rho})}.$$

Элементы матриц (20) и (21) при $\rho_{N_{\rho}} \cos \theta_j \leq c$ определяются равенствами $w_j^{(N_{\rho})} = 0$ и $\tilde{w}_j^{(N_{\rho})} = C_{N_{\rho}}^+$.

Уравнения (1) с асимптотическими граничными условиями (2), (3) применяются при расчетах связанных состояний, состояний рассеяния и слабосвязанных состояний Ефимова [7; 16; 19].

Точность расчетов, проводимых в соответствии с описанным выше численным методом, определяется плотностью узлов сетки и величиной радиуса обрезания $\rho_{N_{\rho}}$, причем ошибка за счет фиксирования асимптотического поведения функций при $\rho > \rho_{N_{\rho}}$ имеет порядок $O(\rho_{N_{\rho}}^{-3/2})$. Поэтому для увеличения точности расчетов узлы сетки должны располагаться неравномерно. Сетка должна быть плотной в областях, примыкающих к оси $x = 0$, а при $\rightarrow \infty$ более редкой. Такое расположение узлов сетки необходимо для того,

чтобы достаточно точно воспроизвести поведение волновой функции в области $x \ll y$. В области $x \rightarrow \infty$ волновая функция принимает асимптотический вид (2), (3), (5), (6), гладко зависит от угловой переменной, и поэтому в этой области сетка должна быть более редкой. Анализ ошибок, возникающих за счет дискретизации, достаточно сложен и требует специального исследования. Однако следует отметить, что при вычислениях на неоднородной сетке важно соблюдать условие самосогласованности, которое состоит в том, что ошибка за счет введения радиуса обрезания должна быть много меньше ошибки дискретизации в окрестности границы ρ_{N_p} , а именно — $|\Delta h|^2 \ll \rho_{N_p}^{-3/2}$, h — минимальный шаг в окрестности границы.

На основе предлагаемого численного метода был разработан комплекс программ [14; 16], удовлетворяющих определенным условиям — таким как мобильность, надежность, производительность и удобство работы, который и был применен для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики.

Заключение

В заключение в качестве универсальности и эффективности предлагаемого метода численного решения уравнений (1)–(6) представлены результаты расчетов процессов атомной, молекулярной и ядерной физики [7–12; 15–17; 19; 22].

В случае атомной физики проведены расчеты столкновений электронов с двухатомными молекулами

$$e + AB(v_1, J_1) \rightarrow \begin{cases} e + AB(v_1, J_1) & \text{— процессы упругого рассеяния,} \\ e + AB(v_2, J_2) & \text{— колебательно-вращательное возбуждение,} \\ A^-(eA) + B & \text{— диссоциативное прилипание (ДП),} \\ A + B^-(eB) & \text{— электрона к молекуле,} \\ e + A + B & \text{— диссоциация молекулы,} \end{cases}$$

находящимися как в основных, так и возбужденных колебательно-вращательных состояниях, а на рисунке 1 представлены расчеты сечений реакции ДП электрона к молекуле водорода, которые демонстрируют необычные состояния в системах трех частиц, описанных во введении вместе с экспериментальными данными и расчетами других авторов [1; 12; 25].

В качестве конкретных двухатомных молекул были рассмотрены молекулы H_2 , HD , D_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , HF , DF , HCl , DCl , HBr , DBr , HI , DI , $RbCl$, $RbBr$, $CsCl$, $CsBr$, KI , Li_2 [14–17; 19; 23; 24]. В этих расчетах основное приближение состоит в том, что взаимодействие налетающего электрона с электронами и ядрами молекулы-мишени заменяется взаимодействием налетающего электрона с каждым из атомов в целом, считая атом силовым центром. Таким образом, сложная многочастичная задача по расчетам сечений рассеяния электрона двухатомными молекулами сводится к задаче столкновения в системе трех тел, для решения которой и применяется метод квантовой задачи рассеяния в системе несколько тел.

Данное приближение представляется разумным при энергиях налетающего электрона меньших, чем энергия электронного возбуждения молекулы.

В качестве исходных данных в подобной постановке задачи используются простейшие парные потенциалы взаимодействия (потенциалы Юкавы — между налетаю-

щим электроном и атомом молекулы и потенциал Морзе — между атомами молекулы [15; 16]), массы и энергии сталкивающихся частиц. В этом же приближении проявляется и изотопический эффект, впервые предсказанный Ю.Н. Демковым [1], что и представлено на рисунке 1.

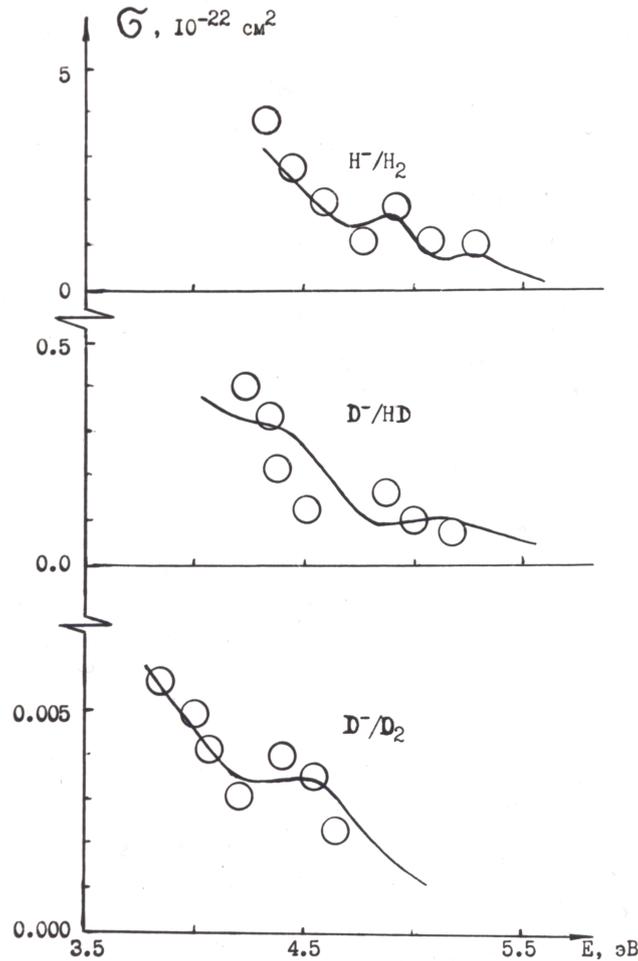


Рис. 1. Зависимость сечения реакции диссоциативного прилипания электронов к молекулам водорода и их изотопозамещенным аналогам от энергии.

ooo — экспериментальные данные [25], — — результаты расчетов настоящей работы

Представлены результаты расчетов процессов как из области молекулярной (рис. 2) $H + H + H \rightarrow H_2(v = n) + H$, так и ядерной физики (рис. 3, 4) — расчеты сечений упругого рассеяния $p + d \rightarrow p + d$ и развала (рис. 3) $p + d \rightarrow p + p + n$.

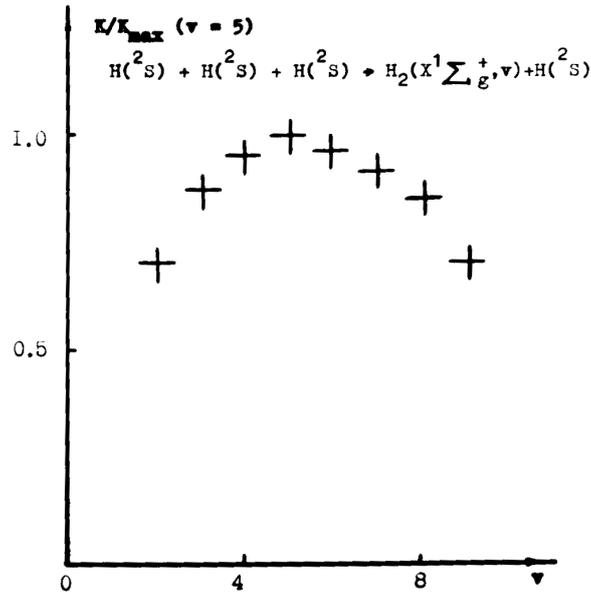


Рис. 2. $H + H + H \rightarrow H_2(v = n) + H$ от колебательного квантового числа v ,
 +++++ — результаты расчетов настоящей работы

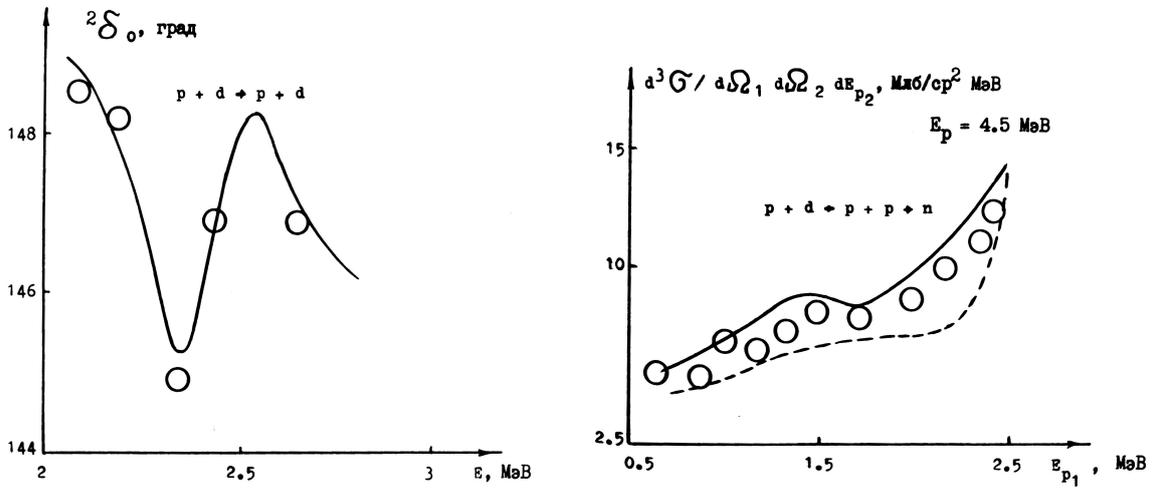


Рис. 3. Зависимость фазы от энергии для процесса упругого рассеяния $p + d \rightarrow p + d$ (рисунок слева),
 o o o — экспериментальные данные [6; 7; 16; 22],
 — — результаты расчетов настоящей работы.
 Зависимость сечения от энергии для реакции $p + d \rightarrow p + p + n$ (рисунок справа),
 o o o — экспериментальные данные [6; 7; 16; 22],
 — — результаты расчетов настоящей работы

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Работа выполнена при поддержке: РФФИ, проекты 98-002-17266 и 01-02-16075, Академии Наук Тайваня, проект NCS-85-2112-M-007-009, Академии Наук Китая, проект NSF 19734030.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Демков, Ю. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике / Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. — Л. : Изд-во ЛГУ, 1975. — 240 с.
2. Ефимов, В. Н. Низоэнергетические свойства трех резонансно взаимодействующих частиц / В. Н. Ефимов // Препринты ЛИЯФ. — 1978. — Article ID: 436.
3. Ефимов, В. Н. Слабосвязанные состояния трех резонансно взаимодействующих частиц / В. Н. Ефимов // ЯФ. — 1970. — Т. 12. — С. 1080–1090.
4. Колганова, Е. А. Трехатомные системы при ультранизких энергиях в Фаддеевском подходе: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Колганова Елена Александровна. — Дубна, 2021. — 153 с.
5. Куперин, Ю. А. Квантовая задача нескольких частиц с внутренней структурой / Ю. А. Куперин, К. А. Макаров, С. П. Меркурьев // ТМФ. — 1988. — Т. 2, № 2. — С. 242–260.
6. Куперин, Ю. А. Модель резонансного рассеяния составных частиц / Ю. А. Куперин, К. А. Макаров, Б. С. Павлов // ТМФ. — 1985. — Т. 63, № 1. — С. 78–87.
7. Меркурьев, С. П. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц / С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев. — М. : Наука, 1985. — 398 с.
8. Меркурьев, С. П. Применение модели граничных условий для расчетов связанных состояний и состояний рассеяния в системе нейтрон — дейтрон / С. П. Меркурьев, С. А. Позднеев // Вестник ЛГУ. — 1978. — Т. 16. — С. 136–138.
9. Меркурьев, С. П. Расчеты связанных состояний и состояний рассеяния в системе трех частиц в модели граничных условий / С. П. Меркурьев, С. А. Позднеев // ЯФ. — 1979. — Т. 29. — С. 620–624.
10. Мотовилов, А. К. Квантовая задача трех тел в модели граничных условий : дис. ... канд. физ.-мат. наук / Мотовилов Александр Константинович. — Л., 1984. — 100 с.
11. Мотовилов, А. К. Теория резонансов в многоканальных системах : дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Мотовилов Александр Константинович. — Дубна, 2006. — 253 с.
12. Никитин, Е. Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах / Е. Е. Никитин. — М. : Химия, 1970. — 559 с.
13. Позднеев, С. А. Моделирование процессов атомной и молекулярной физики на основе квантовой теории рассеяния / С. А. Позднеев // Математическое моделирование и численные методы. — 2017. — № 1. — С. 3–21.
14. Позднеев, С. А. Пакет прикладных программ для решения систем интегральных и интегро-дифференциальных уравнений квантовой задачи трех тел / С. А. Позднеев // Пакеты прикладных программ: Функциональное наполнение. — М. : Наука, 1986. — С. 48–62.
15. Позднеев, С. А. Применение квантовой теории рассеяния для расчетов простейших химических реакций — диссоциативного прилипания, диссоциации и рекомбинации / С. А. Позднеев // ЖТФ. — 2019. — Т. 89. — С. 803–811.
16. Позднеев, С. А. Применение квантовой теории рассеяния для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики / С. А. Позднеев. — М. : Янус-К, 2001. — 412 с.
17. Позднеев, С. А. Резонансы в рассеянии электронов молекулами / С. А. Позднеев // ЖЭТФ. — 2004. — Т. 126, № 5. — С. 1051–1072.

18. Позднеев, С. А. Столкновения электронов с молекулами, находящимися в возбужденных колебательно-вращательных состояниях / С. А. Позднеев // ЖЭТФ. — 2000. — Т. 117, № 1. — С. 35–50.
19. Позднеев, С. А. Эффект Ефимова в рассеянии нейтрона на дейтоне / С. А. Позднеев // ЯФ. — 1982. — Т. 35, вып. 2. — С. 511–512.
20. Efimov, V. Energy levels of three resonantly interacting particles / V. Efimov // Nucl. Phys. A. — 1973. — Vol. 210. — P. 157–188.
21. Efimov, V. Energy levels arising from resonant two-body forces in a threebody system / V. Efimov // Phys. Lett. B. — 1970. — Vol. 33. — P. 563–564.
22. Merkuriev, S. P. Three-body scattering in configuration space / S. P. Merkuriev, C. Gignoux, A. Laverne // Ann. Phys. — 1976. — Vol. 99. — P. 30–71.
23. Pozdneeve, S. The Efimov effect in neutron deuteron scattering near deuteron breakup threshold / S. Pozdneeve // Phys. Lett. — 1983. — Vol. B125, № 7. — P. 355–358.
24. Pozdneeve, S. Application of quantum-theoretical three-body scattering to the calculation of proton-deuteron collisions / S. Pozdneeve // J. Phys. G : Nucl. Phys. — 1982. — Vol. 2. — P. 1509–1516.
25. Schultz, G. J. Resonances in electron impact on diatomic molecules / G. J. Schultz // Rev. Mod. Phys. — 1973. — Vol. 45, № 3. — P. 423–486.

REFERENCES

1. Demkov Yu.N., Ostrovskiy V.N. *Metod potentsialov nulevogo radiusa v atomnoy fizike* [Zero-Range Potentials and Their Application in Atomic Physics]. Leningrad, Izd-vo LGU, 1975. 240 p.
2. Efimov V.N. Nizoenergeticheskie svoystva trekh rezonansno vzaimodeystvuyushchikh chastits [Low-Energy Properties of Three Resonantly Interacting Particles]. *Preprinty LIYaF*, 1978, article ID: 436.
3. Efimov V.N. Slabosvyazannyye sostoyaniya trekh rezonansno vzaimodeystvuyushchikh chastits [Weakly Connected States of Three Resonantly Interacting Particles]. *YaF*, 1970, vol. 12, pp. 1080-1090.
4. Kolganova E.A. *Trekhatomnye sistemy pri ultranizkikh energiakh v Faddeevskom podkhode: dis. ... d-ra fiz.-mat. nauk* [Triatomic Systems at Ultra-Low Energies in the Faddeev Approach. Doc. phys. and math. sci. diss.]. Dubna, 2021. 153 p.
5. Kuperin Yu.A., Makarov K.A., Merkur'yev S.P. Kvantovaya zadacha neskol'kikh chastits s vnutrenney strukturoy [The Quantum Problem of Several Particles with an Internal Structure]. *TMF*, 1988, vol. 2, no. 2, pp. 242-260.
6. Kuperin Yu.A., Makarov K.A., Pavlov B.S. Model rezonansnogo rasseyaniya sostavnykh chastits [Model of Resonant Scattering of Composite Particles]. *TMF*, 1985, vol. 63, no. 1, pp. 78-87.
7. Merkur'yev S.P., Faddeev L.D. *Kvantovaya teoriya rasseyaniya dlya sistem neskol'kikh chastits* [Quantum Scattering Theory for Several Particles Systems]. Moscow, Nauka Publ., 1985. 398 p.
8. Merkur'yev S.P., Pozdneeve S.A. Primenenie modeli granichnykh usloviy dlya raschetov svyazannykh sostoyaniy i sostoyaniy rasseyaniya v sisteme neytron — deyton [Application of the Boundary Condition Model for Calculations of Bound States and Scattering States in the Neutron — Deutron System]. *Vestnik LGU*, 1978, vol. 16, pp. 136-138.
9. Merkur'yev S.P., Pozdneeve S.A. Raschety svyazannykh sostoyaniy i sostoyaniy rasseyaniya v sisteme trekh chastits v modeli granichnykh usloviy [Calculations of Bound States and Scattering States in a System of Three Particles in a Model of Boundary Conditions]. *YaF*, 1979, vol. 29, pp. 620-624.
10. Motovilov A.K. *Kvantovaya zadacha trekh tel v modeli granichnykh usloviy: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* [The Quantum Problem of Three Bodies in the Model of Boundary Conditions. Cand. phys. and math. sci. diss.]. Leningrad, 1984. 100 p.

11. Motovilov A.K. *Teoriya rezonansov v mnogokanalnykh sistemakh: dis. ... d-ra fiz.-mat. nauk* [Theory of Resonances in Multichannel Systems. Doc. phys. and math. sci. diss.]. Dubna, 2006. 253 p.
12. Nikitin E.E. *Teoriya elementarnykh atomno-molekulyarnykh protsessov v gazakh* [Theory of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gases]. Moscow, Khimiya Publ., 1970. 559 p.
13. Pozdnev S.A. Modelirovanie protsessov atomnoy i molekulyarnoy fiziki na osnove kvantovoy teorii rasseyaniya [Modeling of Atomic and Molecular Physics Processes Based on Quantum Scattering Theory]. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody*, 2017, no. 1, pp. 3-21.
14. Pozdnev S.A. Paket prikladnykh programm dlya resheniya sistem integralnykh i integro-differentsialnykh uravneniy kvantovoy zadachi trekh tel [A Package of Application Programs for Solving Systems of Integral and Integro-Differential Equations of the Quantum Three-Body Problem]. *Pakety prikladnykh program: Funktsionalnoe napolnenie*. Moscow, Nauka Publ., 1986, pp. 48-62.
15. Pozdnev S.A. Primenenie kvantovoy teorii rasseyaniya dlya raschetov prosteyshikh khimicheskikh reaktsiy — dissotsiativnogo prilipaniya, dissotsiatsii i rekombinatsii [Application of Quantum Theory of Scattering for Calculating Simple Chemical Reactions — Dissociative Attachment, Dissociation and Recombination]. *ZhTF*, 2019, vol. 89, pp. 803-811.
16. Pozdnev S.A. *Primenenie kvantovoy teorii rasseyaniya dlya raschetov razlichnykh protsessov yadernoy, atomnoy i molekulyarnoy fiziki* [Application of Quantum Theory of Scattering for Calculating Various Processes in Nuclear, Atomic and Molecular Physics]. Moscow, Yanus-K Publ., 2001. 412 p.
17. Pozdnev S.A. Rezonansy v rasseyanii elektronov molekulami [Resonances in Electron Scattering by Molecular]. *ZhETF*, 2004, vol. 126, no. 5, pp. 1051-1072.
18. Pozdnev S.A. Stolknoveniya elektronov s molekulami, nakhodyashchimisya v vzbuzhdennykh kolebatelno-vrashchatelnykh sostoyaniyakh [Electron Scattering with State Selected Rovibrational Excited Diatomic Molecules]. *ZhETF*, 2000, vol. 117, no. 1, pp. 35-50.
19. Pozdnev S.A. Effekt Efimova v rasseyanii neytrona na deytone [The Efimov Effect in Neutron Deuteron Scattering]. *YaF*, 1982, vol. 35, iss. 2, pp. 511-512.
20. Efimov V. Energy Levels of Three Resonantly Interacting Particles. *Nucl. Phys. A.*, 1973, vol. 210, pp. 157-188.
21. Efimov V. Energy Levels Arising From Resonant Two-Body Forces in a Threebody System. *Phys. Lett. B*, 1970, vol. 33, pp. 563-564.
22. Merkuriev S.P., Gignoux C., Laverne A. Three-Body Scattering in Configuration Space. *Ann. Phys.*, 1976, vol. 99, pp. 30-71.
23. Pozdnev S. The Efimov Effect in Neutron Deuteron Scattering Near Deuteron Breackup Treshhold. *Phys. Lett.*, 1983, vol. B125, no. 7, pp. 355-358.
24. Pozdnev S. Application of Quantum-Theoretical Three-Body Scattering to the Calculation of Proton-Deuteron Collisions. *J. Phys. G : Nucl. Phys.*, 1982, vol. 2, pp. 1509-1516.
25. Schultz G.J. Resonances in Electron Impact on Diatomic Molecules. *Rev. Mod. Phys.*, 1973, vol. 45, no. 3, pp. 423-486.

**METHOD OF NUMERICAL SOLUTION
QUANTUM FEW-BODY SCATTERING PROBLEM**

Sergey A. Pozdnev

Doctor of Technical Sciences, Professor, Department of Quantum Radiophysics,
P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academia of Sciences
pozdnev@sci.lebedev.ru
Prosp. Leninsky, 53, 107924 Moscow, Russian Federation

Abstract. A methods of numerical solution of the Faddeev equations for the bound and scattering state problems are presented. To solve the Faddeev's equations with corresponding boundary conditions the method is used which is a generalization of the colon scheme of solution of Schrodinger equations. In this method a finite-difference approximation of equations in polar coordinates is used. By means of the net with knots on the arc and knots on the beam the finite-difference approximation of Faddeev's equations is performed. The increase the calculation accuracy and to provide an effective operation of the corresponding software support the net knots must be located nonuniformly are discussed. The net must be denser in the regions adjacent to an axis $x = 0$, while at $\rightarrow \infty$ becomes less dense. Such an arrangement of the net knots is necessary for sufficiently accurate description of the complex behaviour of wave function in the region, where $x \ll y$. In the region $\rightarrow \infty$ the wave function takes asymptotical depends smoothly on angular variable, hence in this region the net must be chosen to be less dense. At calculations on the inhomogeneous net, it is very important to comply with the condition of self-consistency, which implies that the error due to introducing the cut off radius must be far less than the quantizing error in the vicinity of boundary. The stability and self-consistency of the calculations may be checked by various methods determinations of the net, the cut off radius and the scattering amplitude. This approach to the numerical solution of the Faddeev's equations combines the advantages of integral equations (the solution exists and uniqueness) with the computational scheme simplicity. Also it has the advantage that unknown two-particle quantities are specified not T-matrices but potentials and eigenfunctions corresponding to the bound states. The simplicity of the computational algorithm allows to consider few-body problems in real systems. The results of calculations binding energies and scattering state of are presented.

Key words: mathematical simulation, quantum theory of scattering, Faddeev equation, Efimov effect.