

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**  
**Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флерова**

**ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ**  
**В БАЗЕ ЗНАНИЙ**  
**NUCLEAR REACTION VIDEO (NRV)**

**Методические указания к практическим и лабораторным занятиям**

**Дубна 2024**

## Оглавление

<b>I. ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ АТОМНЫМИ ЯДРАМИ ЯДЕР И НУКЛОНОВ.....</b>	<b>3</b>
1. Экспериментальные данные по упругому рассеянию .....	3
2. Каналы ядерной реакции .....	7
3. Квантовое описание выхода из упругого канала в оптической модели.....	8
4. Численное решение радиального уравнения Шредингера .....	13
5. Расчеты сечений упругого рассеяния .....	14
6. Пример $s$ -рассеяния (для $L = 0$ ) в короткодействующем поле.....	24
<b>ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>29</b>
Основная .....	29
Дополнительная .....	29

**Составители:**

**А. С. Деникин © 2024**

**М. А. Науменко © 2024**

**В. В. Самарин © 2024**

.....

# I. ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ АТОМНЫМИ ЯДРАМИ ЯДЕР И НУКЛОНОВ

## 1. Экспериментальные данные по упругому рассеянию

Типичная схема проведения экспериментов по рассеянию протонов, нейтронов и легких ядер (например, альфа-частиц) показана на рис. 1.1 Узкий пучок ускоренных частиц с энергией  $E_0$  (в лабораторной системе) попадает на тонкую пластинку (или тонкий слой жидкости, например, сжиженного газа) мишени. Число частиц пучка, проходящих через единицу площади каждую секунду, называется плотностью потока  $j_0$ .

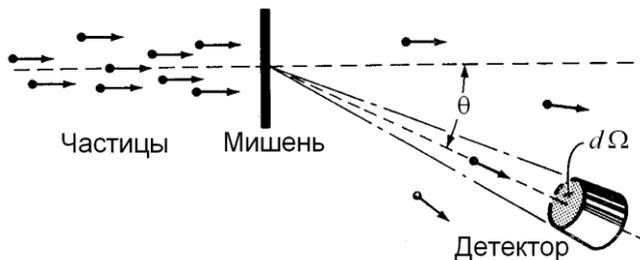


Рис. 1.1. Схематичное изображение рассеяния частиц [1].

Частица, столкнувшаяся с одним из атомных ядер мишени, отклоняется на угол  $\theta$  и регистрируется детектором, находящимся на расстоянии  $L$  от мишени и имеющим площадь детектирующей поверхности  $\Delta S$  (телесный угол  $\Delta\Omega = \Delta S/L^2$ ). Используемый детектор позволяет идентифицировать зарегистрированную частицу и измерить ее энергию. Так можно выделить среди зарегистрированных продуктов ядерных реакций только упруго рассеянные частицы. Если каждую секунду детектор, установленный под углом  $\theta$ , регистрирует  $\Delta N$  упруго рассеянных частиц, то отношение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{\Delta N}{j_0 \Delta\Omega} \quad (1.1)$$

называется *дифференциальным сечением упругого рассеяния* (пример на рис. 1.2) и выражается в единицах бн/ср, 1 барн равен:  $1 \text{ бн} = 10^{-24} \text{ см}^2$ . Для заряженных частиц часто вычисляют отношение сечения упругого рассеяния к Резерфордскому сечению рассеяния в кулоновском поле (без учета ядерных сил)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) / \frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}(\theta) = \frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{Ruth}}}(\theta). \quad (1.2)$$

Формула Резерфорда для сечения упругого рассеяния частиц с зарядами  $Z_1 e$  и  $Z_2 e$  (взаимодействующих только кулоновскими силами) в системе центра масс получена в рамках классической механики, но остается справедливой и в квантовой механике

$$\frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}(\theta_{\text{c.m.}}) = \left( \kappa \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{\text{c.m.}}} \right)^2 \sin^{-4} \theta_{\text{c.m.}} / 2. \quad (1.3)$$

Здесь  $E_{\text{c.m.}}$  – энергия в системе центра масс частиц

$$E_{\text{c.m.}} = E_{\text{lab}} (1 + m_1/m_2), \quad (1.4)$$

$E_{\text{lab}}$  – кинетическая энергия частицы массы  $m_1$ , налетающей на неподвижную частицу массы  $m_2$ . Значение постоянной  $\kappa$  зависит от выбора системы единиц:  $\kappa=1$  в системе СГС и  $\kappa=1/4\pi\epsilon_0$  в системе СИ, а значение безразмерной величины одинаково в любой системе

$$\kappa \frac{e^2}{x_0 E_0} \approx 1.44, \quad (1.5)$$

где  $E_0=1$  МэВ,  $x_0=1$  фм =  $10^{-13}$  см. При расчетах Резерфордского сечения в единицах [мбн/ср], для энергии, выраженной в единицах [МэВ]  $\tilde{E}_{\text{c.m.}} = E_{\text{c.m.}}/E_0$  удобно использовать выражения

$$\left( \kappa \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{\text{c.m.}}} \right)^2 = x_0^2 \left( \kappa \frac{e^2}{x_0 E_0} \frac{Z_1 Z_2}{4\tilde{E}_{\text{c.m.}}} \right)^2 = 10S_0 \left( 1.44 \frac{Z_1 Z_2}{4\tilde{E}_{\text{c.m.}}} \right)^2 \quad (1.6)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}(\theta_{\text{c.m.}}) = 10S_0 \left( 1.44 \frac{Z_1 Z_2}{4\tilde{E}_{\text{c.m.}}} \right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta_{\text{c.m.}}}{2} \quad [\text{мбн/ср}]. \quad (1.7)$$

где  $S_0=1$  мбн =  $10^{-27}$  см<sup>2</sup>. Пример сравнения экспериментального дифференциального сечения с Резерфордским показан на рис. 1.2.

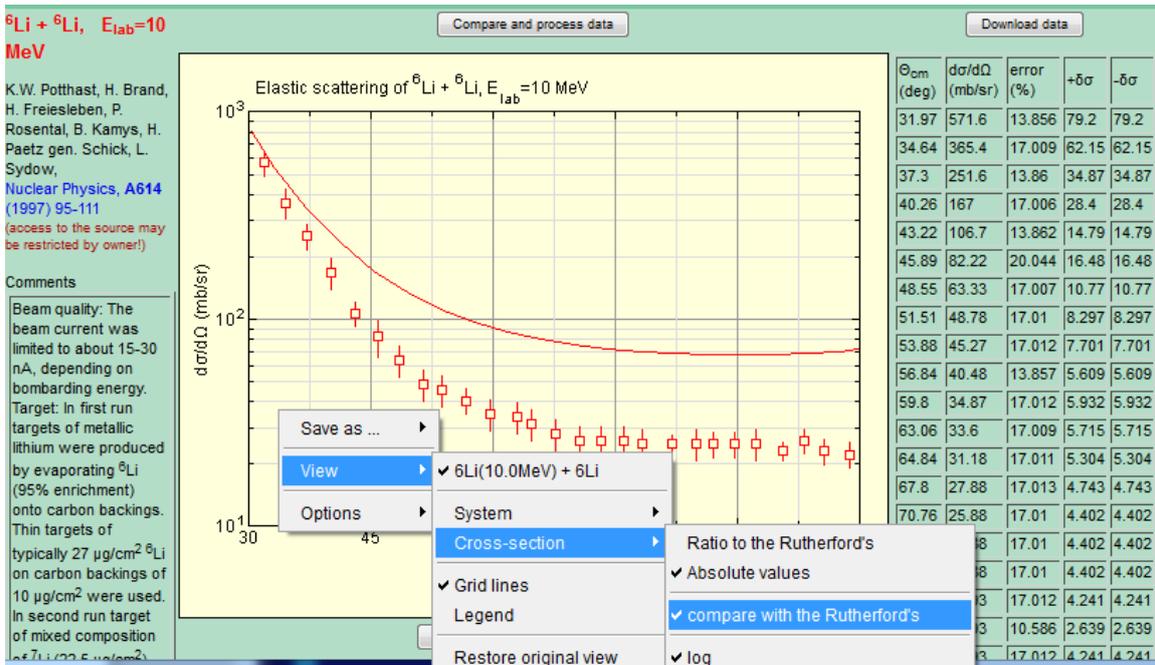


Рис. 1.2. Сравнение в базе знаний NRV дифференциального сечения упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с Резерфордским сечением (1.7), (1.8) в кулоновском поле для энергии в лабораторной системе  $E_{\text{lab}} = 10$  МэВ.

При столкновении одинаковых частиц под углом  $\theta$  может быть зарегистрирована либо частица-снаряд, либо частица-мишень, при этом их траектории расходятся под прямыми углами. В классической механике [2]

$$\frac{d\sigma_{\text{Ruth}}^{(2)}}{d\Omega}(\theta) = \frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}(\theta) + \frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}(\pi - \theta) = \left( \delta_* \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{\text{c.m.}}} \right)^2 \left( \sin^{-4} \theta/2 + \cos^{-4} \theta/2 \right). \quad (1.8)$$

При квантовом описании одинаковые частицы считаются неразличимыми (тождественными), после столкновения невозможно ответить на вопрос, какая из зарегистрированных частиц была падающей, и какая неподвижной до столкновения, поэтому выражение для сечения отличается от классического выражения (1.8). Точное выражение для дифференциального сечения упругого рассеяния тождественных частиц (1.38) приведено ниже.

При больших прицельных параметрах столкновения и, как следствие, малых углах рассеяния минимальное расстояние между частицей-снарядом и поверхностью ядра мишени превышает радиус действия ядерных сил, и рассеяние, в основном, определяется кулоновским отталкиванием (рис. 1.2). Поэтому при малых углах рассеяния отношение (1.2) близко к единице (рис. 1.3а). Для больших углов действие ядерных сил приводит к отличию отношения (1.2) от единицы и появлению в угловых распределениях максимумов и минимумов (рис. 1.3б). Максимумы в угловых распределениях подобны дифракционным максимумам при огибании светом препятствий (например, диска). Они явным образом подтверждают волновой характер движения нуклонов и легких ядер вблизи атомного ядра-мишени.

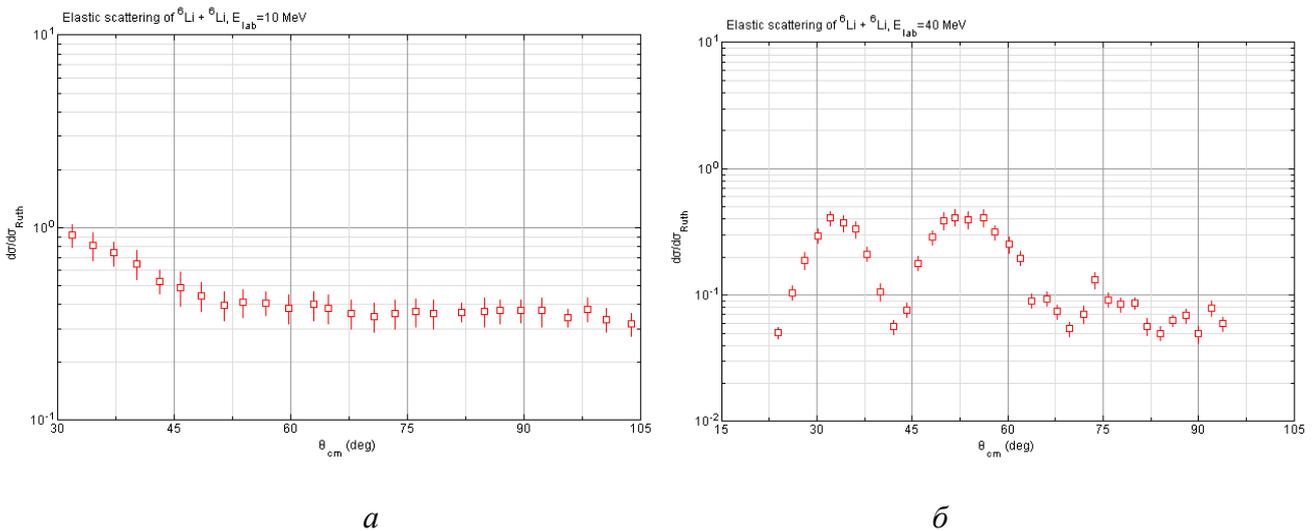


Рис. 1.3. Отношение сечения упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  к резерфордовскому сечению для энергий в лабораторной системе  $E_{\text{lab}} = 10 \text{ МэВ}$  (а) и  $40 \text{ МэВ}$  (б). Углы в системе центра масс (см).

База знаний NRV содержит большой объем непрерывно обновляемых и дополняемых экспериментальных данных по угловым распределениям (1.1) и (1.2) упруго рассеянных протонов, альфа-частиц и легких ядер. Некоторые примеры приведены на рис. 1.2, 1.3.

**Задание 1.** Ознакомьтесь и поработайте с экспериментальными данными по упругому рассеянию в следующем порядке.

1.1. Для доступа к экспериментальным данным по упругому рассеянию в подразделе “Experimental Data  $d\sigma/d\Omega$ ” раздела “Nuclear Reactions / Elastic scattering” (рис. 1.4) можно щелкнуть по кнопке  (реализация с помощью Java-апплетов) или по кнопке  (реализация с помощью JavaScript). Далее будет рассмотрена работа в разделе, реализованном с помощью Java-апплетов. Работа в разделе, реализованном с помощью JavaScript и отличающимся, в основном, стилем оформления, выполняется аналогично.

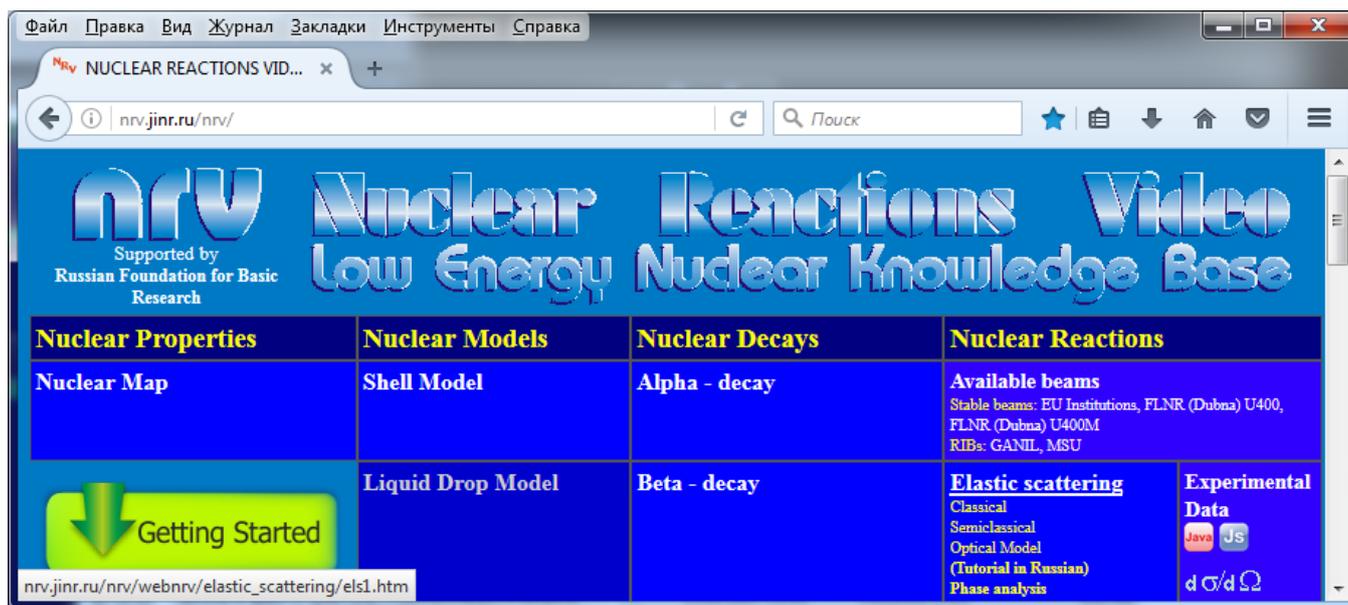


Рис. 1.4. Переход к подразделу “Experimental Data” раздела “Nuclear Reactions / Elastic scattering” на стартовой странице базы знаний NRV в окне браузера.

Щелкните по кнопке . В открывшемся списке реакций выберите реакцию между ядрами, угловые распределения для которой были измерены для нескольких энергий (желательно, в несколькими авторами или в нескольких работах). Возможными вариантами являются данные по рассеянию ядра  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  (рис. 1.5) и более тяжелых ядрах  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{16}\text{O}$ ,  ${}^{24}\text{Mg}$ ,  ${}^{28}\text{Si}$ ,  ${}^{40}\text{Ca}$ ,  ${}^{58}\text{Ni}$ ,  ${}^{90}\text{Zr}$ ,  ${}^{144}\text{Sm}$ ,  ${}^{208}\text{Pb}$ ,  ${}^{209}\text{Bi}$ .

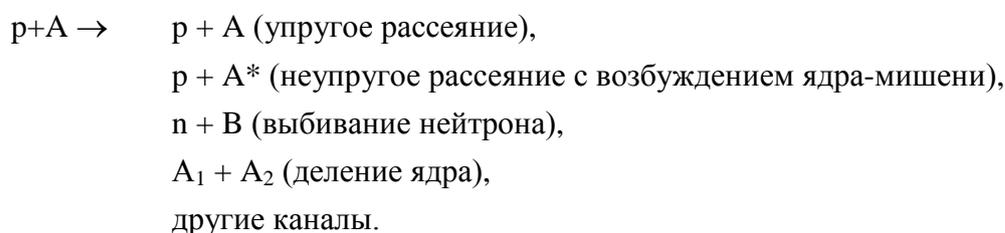
${}^6\text{Li} + {}^6\text{Li}$	$E_{\text{cm}} = 4, 5, 6, 7.25 \text{ MeV}$	G. Gruber, I.C. Dornhehl, K. Meier-Ewert, K. Bethge	Zeitschrift für Physik, A265 (1973) 411-420
${}^6\text{Li} + {}^6\text{Li}$	$E_{\text{cm}} = 5, 8, 10, 14, 15, 20, 25, 30, 35, 40 \text{ MeV}$	K.W. Potthast, H. Brand, H. Freiesleben, P. Rosental, B. Kamys, H. Pae	Nuclear Physics, A614 (1997) 95-111
${}^6\text{Li} + {}^7\text{Li}$	$E_{\text{cm}} = 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40 \text{ MeV}$	K.W. Potthast, H. Freiesleben, P. Rosental, B. Kamys, Z. Rudy, H. Paet	Nuclear Physics, A629 (1998) 656-676
${}^6\text{Li} + {}^9\text{Be}$	$E_{\text{cm}} = 32 \text{ MeV}$	J. Cook, K.W. Kemper	Physical Review, C31 (1985) 1747
${}^6\text{Li} + {}^9\text{Be}$	$E_{\text{cm}} = 7, 10, 12 \text{ MeV}$	E. Muskat, J. Carter, R.W. Fearick, V. Hnzido	Nuclear Physics, A581 (1995) 42-60
${}^6\text{Li} + {}^9\text{Be}$	$E_{\text{cm}} = 50 \text{ MeV}$	D.E. Trcka, A.D.Frawley, K.W.Kemper, D.Robson, J.D.Fox, and E.G.Myers	Physical Review, C41 (1990) 2134

Рис. 1.4. Фрагмент списка реакций, для которых в базе знаний NRV имеются данные по угловым распределениям упругого рассеяния при различных энергиях, полученные в нескольких работах различных авторов.

1.2. Выведите на экран графики экспериментальных и Резерфордовских дифференциальных сечений по образцу рис. 1.2 и их отношений (как на рис. 1.3). Щелкните по рисунку правой кнопкой мыши и, используя пункт контекстного меню “Save as...” сохраните экспериментальные данные в виде графического файла в формате PNG и текстового файла (в кодировке ASCII). Используя одну из программ научной графики, постройте на основе сохраненных файлов данных на одном графике экспериментальные точки, полученные разными авторами при одной энергии (если такие есть) и график Резерфордовского сечения (1.7) (или (1.8)). Сравните результат самостоятельной работы с изображением, построенным с помощью базы знаний NRV. Внесите результаты в файл отчета.

## 2. Каналы ядерной реакции

Различные состояния, образующиеся после столкновения частиц, называют каналами *реакции*. При столкновении протона с ядром  $A$  возможны следующие каналы реакции:



При энергиях, превышающих порог неупругих процессов, частица-снаряд может выйти из упругого канала. При этом число упруго рассеянных частиц всегда меньше, чем число частиц налетающих на ядро-мишень. При сравнении теоретического дифференциального сечения упругого рассеяния с экспериментальным это уменьшение учитывают введением понятия *длины свободного пробега* частицы в ядре

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma_{NN}}, \quad (1.9)$$

где  $n$  – концентрация нуклонов,  $\sigma_{NN}$  – сечение нуклон-нуклонного взаимодействия. При прохождении налетающим нуклоном пути  $s$  он с вероятностью

$$P_{\text{abs}}(s) = 1 - \exp(-s/\lambda), \quad (1.10)$$

вызовет какую-либо ядерную реакцию, т.е. выйдет из упругого канала. Это можно интерпретировать как “поглощение” (absorption) частицы. Вероятность “выживания” (survival)

частицы на траектории и ее вклада в упругое рассеяние равна

$$P_{\text{surv}}(s) = 1 - P_{\text{abs}}(s) = \exp(-s/\lambda), \quad (1.11)$$

В классической механике значение  $s$  зависит от траектории, по которой движется нуклон. Для больших прицельных параметров столкновения траектории налетающих частиц лежат вне ядра, значение  $s$  мало (или равно нулю). В этом случае частицы (нуклоны,  $\alpha$ -частицы, легкие ядра) с вероятностью, близкой к единице остаются в упругом канале. Для малых прицельных параметров  $s \approx 2R$ ,  $R$  – радиус ядра. Частицы, движущиеся по таким траекториям, с большой вероятностью вызывают какую-либо ядерную реакцию и выбывают из упругого канала. Сравнение с экспериментом показывает, что длина свободного пробега нуклона в ядре зависит от энергии нуклона и соизмерима с размерами ядра.

### 3. Квантовое описание выхода из упругого канала в оптической модели

В нерелятивистской квантовой механике уменьшение потока частиц может быть смоделировано добавлением отрицательной мнимой части  $iW(\mathbf{r})$ ,  $W(\mathbf{r}) < 0$ , к потенциалу взаимодействия ядер  $V(\mathbf{r})$ .

Зависимость от времени волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  (в системе центра масс) определяется *нестационарным уравнением Шредингера*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.12)$$

и комплексно сопряженным уравнением для  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}) - iW(\mathbf{r}) \right] \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (1.13)$$

Здесь  $\mu$  – приведенная масса сталкивающихся частиц с массами  $m_1, m_2$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.14)$$

$\mathbf{r}$  – вектор их относительного расстояния. Умножим обе части уравнения (1.12) на комплексно сопряженную функцию  $\Psi^*$ , а обе части уравнения (1.13) на  $\Psi$  и вычтем второе уравнение из первого. В результате получим уравнение непрерывности, описывающее поглощение частиц

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = \frac{2}{\hbar} W(\mathbf{r})\rho < 0, \quad (1.15)$$

где  $\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^* \Psi$  – плотность вероятности,  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  – вектор плотности потока вероятности

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi). \quad (1.16)$$

Относительная скорость поглощения частиц равна

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = \frac{2}{\hbar} W(\mathbf{r}) < 0. \quad (1.17)$$

Относительное уменьшение числа частиц со скоростью  $v$  на единице длины траектории  $s$

$$\frac{dP}{ds} = -\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{v\rho} \frac{d\rho}{dt} = \frac{2}{v\hbar} W(\mathbf{r}) < 0. \quad (1.18)$$

Таким образом, мнимая часть потенциала взаимодействия ядер связана с длиной свободного пробега соотношением

$$\lambda(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar v}{2W(\mathbf{r})} > 0. \quad (1.19)$$

Для зависящей от  $r$  длины свободного пробега вероятность “выживания” (survival) частицы на траектории с длиной пути  $s$  будет определяться выражением

$$P_{\text{surv}}(s) = \exp\left(-\int \frac{ds}{\lambda(\mathbf{r})}\right). \quad (1.20)$$

Модель, в которой взаимодействие частицы с ядром аппроксимируется эффективным “преломляющим” потенциалом  $V(\mathbf{r})$  и “поглощающим” потенциалом  $W(\mathbf{r})$  (уменьшающим поток упруго рассеянных частиц за счет их выхода в другие каналы реакции) называется *оптической моделью ядерных реакций* [3, 4]. Она была предложена в 1954 г. Фешбахом, Портером и Вайскопфом. В этой модели ядро можно представить как “преломляющую полупрозрачную сферическую линзу” с комплексным показателем преломления

$$n = \sqrt{1 - \frac{V + iW}{E}} = \text{Re } n + i \text{Im } n. \quad (1.21)$$

При рассмотрении задачи рассеяния в стационарной постановке волновая функция относительного движения рассеиваемых частиц с асимптотическим импульсом  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , ( $\mathbf{k}$  – волновой вектор) и энергией в лабораторной системе  $E_{\text{lab}} = p^2/2m_1$  (в системе центра масс энергия равна  $E_{\text{c.m.}} = E_{\text{lab}}/(1+m_1/m_2)$ ) удовлетворяет уравнению Шредингера с *оптическим потенциалом*  $U(r) = V(r) + iW(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi_{\mathbf{k}} + [V(r) + iW(r) - E] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.22)$$

Строгое обоснование введения оптического потенциала дается в многоканальной квантовой теории рассеяния [5].

Потенциал взаимодействия нуклонов и сферических легких ядер-снарядов со сферическими ядрами-мишенями является центральным  $V(r) = V_C(r) + V_N(r)$  и включает кулоновскую  $V_C$  и ядерную  $V_N$  части [2 – 4, 6, 7]. Поглощение обычно предполагается либо объемным в форме потенциала Вудса-Саксона

$$W(r) = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}, \quad (1.23)$$

либо поверхностным потенциалом Вудса-Саксона

$$W(r) = -4a_W W_0 \frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}. \quad (1.24)$$

Значения параметров  $W_0 < 0$ ,  $R_W = r_{0W} (A_1^{1/3} + A_2^{1/3})$ ,  $a_W$ , а также подобных параметров  $V_0 < 0$ ,  $R_V = r_{0V} (A_1^{1/3} + A_2^{1/3})$ ,  $a_V$  для  $V_N(r)$  определяют путем подбора для обеспечения наилучшего согласия теоретического дифференциального сечения упругого рассеяния с экспериментальными данными для данной пары ядер снаряд-мишень [2 – 7]. Было установлено, что  $R_W \approx R_V$ ,  $a_W \approx a_V$ ,  $|W_0| \ll |V_0|$ , и значения  $|W_0|$  увеличиваются с ростом энергии (приблизительно от 3 до 20 МэВ), [2, 8, 16].

В центральном поле используется разложение волновой функции  $\psi_k(\mathbf{r})$  по парциальным волнам с орбитальными моментами  $l = 0, 1, \dots$  [2, 6]

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) A_L \psi_{k,L}(r) P_L(\cos \theta) \quad (1.25)$$

где  $P_L$  – полиномы Лежандра [7], а ось  $Oz$  выбрана в направлении волнового вектора  $\mathbf{k}$ . Асимптотика полной волновой функции при  $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \psi_k(r, \theta) = \exp[ikr \cos \theta + i\eta \ln(kr - kr \cos \theta)] + \\ + \frac{f_C(\theta) + f_N(\theta)}{r} \exp[i(kr - \eta \ln 2kr)] \end{aligned} \quad (1.26)$$

представляет собой суперпозицию падающей волны, искаженной дальнедействующим кулоновским потенциалом (первое слагаемое), и рассеянной расходящейся сферической волны [2 – 5]. Здесь  $\eta = \frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{k \hbar^2}$  – кулоновский параметр (параметр Зоммерфельда),  $f_C(\theta)$  и  $f_N(\theta)$  –

кулоновская и ядерная амплитуда рассеяния соответственно,  $Z_1 e$ ,  $Z_2 e$  – заряды частицы и ядра-мишени, энергия в системе центра масс  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ . Кулоновская амплитуда рассеяния известна в явном виде,

$$f_C(\theta) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \frac{1}{\sin^2 \theta/2} \exp\{-i\eta \ln(\sin^2 \theta/2) + i\pi + 2i\sigma_0\}, \quad (1.27)$$

$$\sigma_0 = \arg \Gamma(1 + i\eta), \quad (1.28)$$

Соответствующее сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = |f_C(\theta)|^2 = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \sin^{-4} \theta/2, \quad (1.29)$$

в точности совпадает с классической формулой сечения рассеяния кулоновским полем (резерфордским сечением). Ядерная амплитуда рассеяния  $f_N(\theta)$  равна

$$f_N(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \exp(2i\sigma_L) [\exp(2i\delta_L) - 1] P_L(\cos \theta), \quad (1.30)$$

где величины

$$\sigma_L = \arg \Gamma(L+1+i\eta), \quad (1.31)$$

называются *кулоновскими фазами*, а величины  $\delta_l$  называются *парциальными фазами рассеяния* (сдвигами фазы).

Смысл фаз рассеяния  $\delta_l$  можно продемонстрировать на примере короткодействующего потенциала. Без кулоновского отталкивания (с учетом  $\eta=0, \sigma_L=0, f_C(\theta)\equiv 0$ ) асимптотика полной волновой функции при  $r \rightarrow \infty$  представляет собой суперпозицию падающей плоской волны  $\exp(ikr \cos \theta)$  и рассеянной расходящейся сферической волны

$$\psi_k(r, \theta) = \exp(ikr \cos \theta) + \frac{f_N(\theta)}{r} \exp(ikr), \quad r \rightarrow \infty \quad (1.32)$$

Падающая плоская волна может быть разложена по парциальным волнам

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{L=0}^{\infty} i^L (2L+1) j_L(kr) P_L(\cos \theta), \quad (1.33)$$

где  $j_L(kr)$  – сферические функции Бесселя. Графические представления трех парциальных волн  $j_L(kr)P_L(\cos \theta)$  с  $L=0,1,2$  приведены на рис. 1.5.

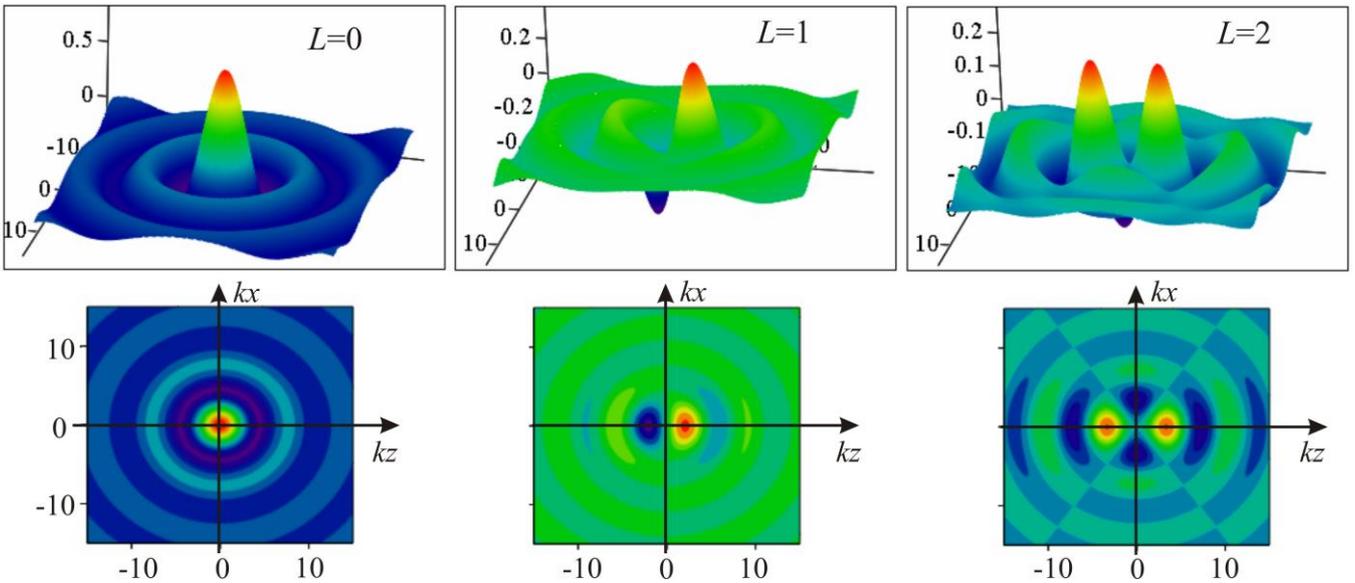


Рис. 1.5. Графические представления трех парциальных волн  $j_L(kr)P_L(\cos \theta)$  с  $L=0,1,2$ .

При больших значениях  $r$  радиальная зависимость парциальных волн для свободного движения определяется синусоидами  $\sin(kr - \frac{\pi L}{2})$  (см. рис. 1.6 для  $L=0$ )

$$\exp(ikr \cos \theta) \approx \frac{1}{kr} \sum_{L=0}^{\infty} i^L (2L+1) \sin(kr - \frac{\pi L}{2}) P_L(\cos \theta), \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.34)$$

Вдали от рассеивающего центра радиальная зависимость парциальных волн определяется синусоидами  $\sin(kr - \frac{\pi L}{2} + \delta_L)$ , сдвинутыми по фазе на величины  $\delta_L$  относительно синусоид для свободного движения.

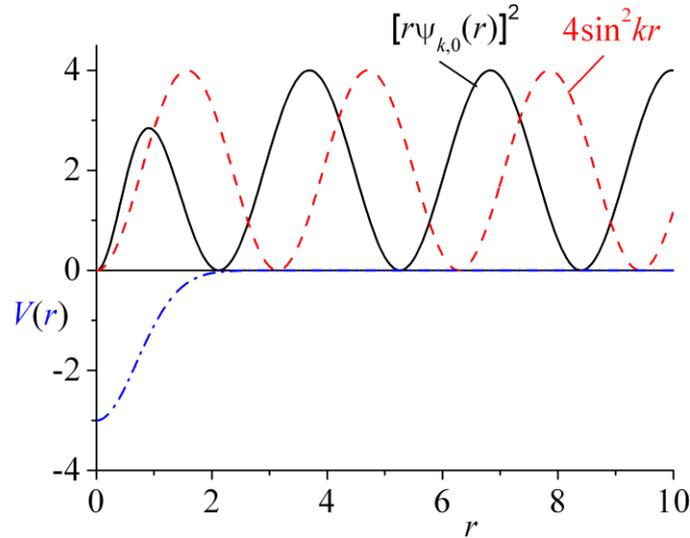


Рис. 1.6. Пример сдвига фазы  $\delta_0$  (для так называемого  $s$ -рассеяния [2]) в вещественном короткодействующем потенциале (штрих-пунктирная линия), графики зависимостей  $|r\psi_{k,0}(r)|^2$  для рассеяния (сплошная кривая) и свободного движения (штриховая кривая),  $|r\psi_{k,0}(r)|^2 \rightarrow 4\sin^2(kr + \delta_0)$  при  $r \rightarrow \infty$ . Решение модельной задачи в системе единиц, где  $\hbar = 1$ ,  $\mu = 0.5$  для потенциала  $V(r) = -3\exp(-r^2)$  и  $k = 1$ .

При наличии мнимой части потенциала сдвиг фазы является комплексным числом  $\delta_L = \xi_L + i\gamma_L$ . Вычисление фаз  $\delta_l$  производится путем численного решения радиальных уравнений Шредингера для парциальных волн с коэффициентами  $A_L = i^L \exp(i\sigma_L)$  в формуле (1.25). Если ядерная часть потенциала включает спин-орбитальное взаимодействие [6,8]

$$V_N(r) = -V_c f(r) - iW_c g(r) + \left(\frac{\hbar}{\mu c}\right)^2 (V_{so} + iW_{so}) \left(\frac{1}{r} \frac{df}{dr}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}), \quad (1.35)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – матрицы Паули,  $\mathbf{L}$  – оператор орбитального момента, то состояния с квантовыми числами полного момента  $j = L \pm 1/2$  имеют различные сдвиги фаз, которые усложняют выражение ядерной амплитуды рассеяния.

Амплитуда рассеяния и дифференциальное сечение рассеяния равны [2-5]

$$f(\theta) = f_C(\theta) + f_N(\theta), \quad (1.36)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2. \quad (1.37)$$

Для столкновения тождественных ядер (например,  ${}^6\text{Li} + {}^6\text{Li}$ ) дифференциальное сечение упругого рассеяния, при котором одно из ядер отклоняется в пределах телесного угла  $d\Omega$  равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2. \quad (1.38)$$

#### 4. Численное решение радиального уравнения Шредингера

Дифференциальное сечение упругого рассеяния в рамках оптической модели вычисляется по следующей схеме [2 – 6]. Парциальные волновые функции являются решениями радиального уравнения Шредингера с оптическим потенциалом  $U(r)$

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) \right] \psi_{k,L}(r) = 0, \quad (1.39)$$

энергия в системе центра масс  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ . Радиальные части парциальных волновых функций представляют в виде

$$\psi_{k,L}(r) = y_{k,L}(r)/r, \quad (1.40)$$

где функции  $y_{k,L}(r)$  удовлетворяют радиальному уравнению, совпадающему по форме с одномерным уравнением Шредингера

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U_{\text{eff}}(r) \right] y_{k,L}(r) = 0 \quad (1.41)$$

для эффективного потенциала, включающего центробежную добавку

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mr^2}. \quad (1.42)$$

Граничное условие для функции  $y_{k,L}(r) = r\psi_{k,L}(r)$  при  $r = 0$  имеет вид

$$y_{k,L}(0) = 0. \quad (1.43)$$

Решая численно (например, методом Рунге-Кутты [9, 10]) задачу Коши для уравнения (1.41) с начальными условиями при  $r = 0$

$$y_{k,L}(0) = 0, \quad y'_{k,L}(0) = C, \quad (1.44)$$

можно найти одно из его решений (отличающихся постоянным множителем  $C$ ). На больших расстояниях (там, где ядерные силы отсутствуют) волновые функции  $y_{k,L}(r)$  имеют асимптотику

$$y_{k,L}(r \geq R_M) = \frac{i}{2} \exp(i\sigma_L) \left[ H_L^{(-)}(\eta, kr) - S_L H_L^{(+)}(\eta, kr) \right], \quad (1.45)$$

где  $R_M \approx \max(R_V, R_W) + 15 \max(a_V, a_W)$  некоторое расстояние, на котором уже можно пренебречь ядерными силами;  $H_L^{(\pm)}$  – волновые функции Кулона (“кулоновские” функции Ханкеля), выражающиеся через регулярную волновую функцию Кулона  $F_L(\eta, \rho)$  и нерегулярную волновую функцию Кулона  $G_L(\eta, \rho)$  [7]

$$H_L^{(\pm)}(\eta, \rho) = G_L(\eta, \rho) \pm iF_L(\eta, \rho). \quad (1.46)$$

Волновые функции Кулона вычисляют, применяя различные алгоритмы в различных областях переменных  $\rho, \eta$ , см. например [7, 11 – 13]. Возможно также применение универсального регуляризованного квазиклассического приближения [14].

Величина

$$S_L = \exp(2i\delta_L) \quad (1.47)$$

называется *диагональным матричным элементом матрицы рассеяния (S-матрицы)*, соответствующим орбитальному моменту  $L$ . Полное сечение реакции (сумма сечений всех неупругих каналов) дается выражением

$$\sigma_R = \frac{\pi}{k^2} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) (1 - |S_L|^2). \quad (1.48)$$

Вычислительный код базы знаний NRV выполняет расчеты полного сечения реакции  $\sigma_R$  и полного сечения рассеяния  $\sigma_{\text{tot}}$ , равного сумме  $\sigma_R$  и полного сечения упругого рассеяния  $\sigma_{\text{elast}}$

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_R + \sigma_{\text{elast}}. \quad (1.49)$$

Условие непрерывности волновой функции и ее производной в точке  $r = R_M$  дает алгебраическое уравнение для нахождения  $S_L$  и  $\delta_L$

$$\left. \frac{y'_{k,L}}{y_{k,L}} \right|_{R_M} = \frac{H_L^{(-)}(R_M) - S_L H_L'^{(+)}(R_M)}{H_L^{(-)}(R_M) - S_L H_L^{(+)}(R_M)}. \quad (1.50)$$

Расчетный код, основанный на решении задачи Коши, размещен в базе знаний NRV, доступ к нему осуществляется через форму в Web-браузере, ряд алгоритмов приведены в статьях [16 – 21].

Следует заметить, что при использовании условно устойчивого метода Рунге-Кутты [9, 10] возможно накопление погрешностей, образующихся на каждом шаге вычислений. Безусловно устойчивым является метод прогонки [10]. Его применяют (см. [15] и задание 3) к решению краевой задачи для уравнения (1.41) с граничным условием первого рода в нуле  $y_{k,L}(0) = 0$  и условием третьего рода в точке  $r = R_M$

$$y'_L(r) - y_L(r) \frac{1}{H_L^{(+)}(r)} \left( \frac{d}{dr} H_L^{(+)}(r) \right) = - \frac{2ik}{H_L^{(+)}(r)}. \quad (1.51)$$

## 5. Расчеты сечений упругого рассеяния и реакции

**Задание 2.** Для реакции, экспериментальные данные которой были изучены в задании 1, выполните расчеты в следующем порядке

**2.1.** Откройте экспериментальные данные для максимальной энергии (пример на рис. 1.7) и щелкните по кнопке “Theoretical analysis of the data”.

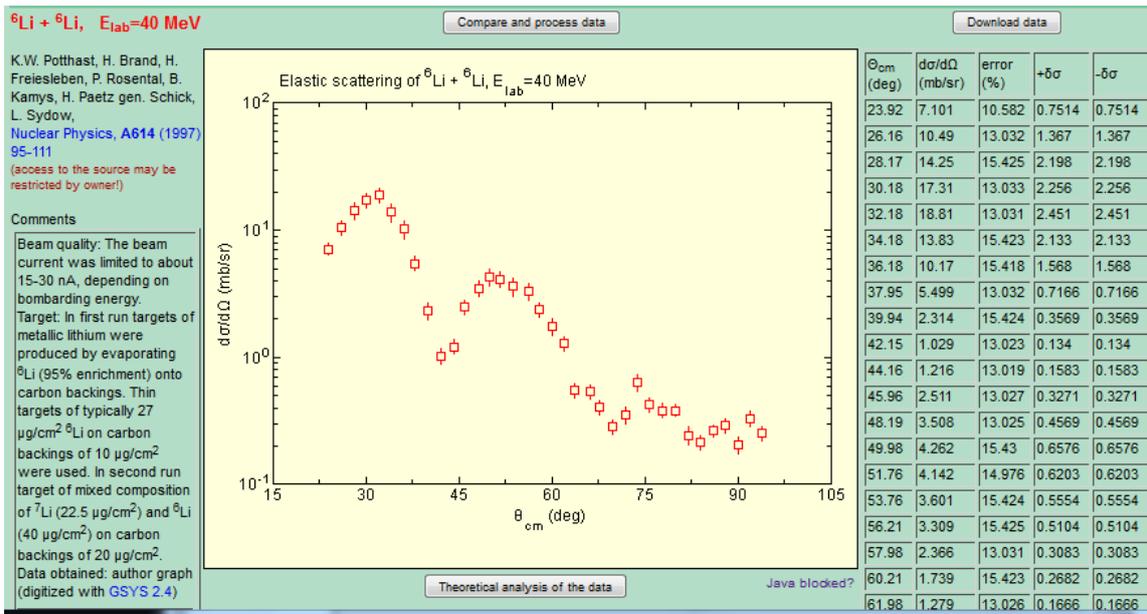


Рис. 1.7. Экспериментальные данные для упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40 \text{ МэВ}$

В открывшемся окне формы (рис. 1.8) имеются поля для ввода интервала углов, выбора параметров оптического потенциала и расчетной схемы. Интервал углов в полях “Initial angle” (Начальный угол), “Maximal angle” (Максимальный угол) нужно задать несколько шире интервала экспериментальных данных.

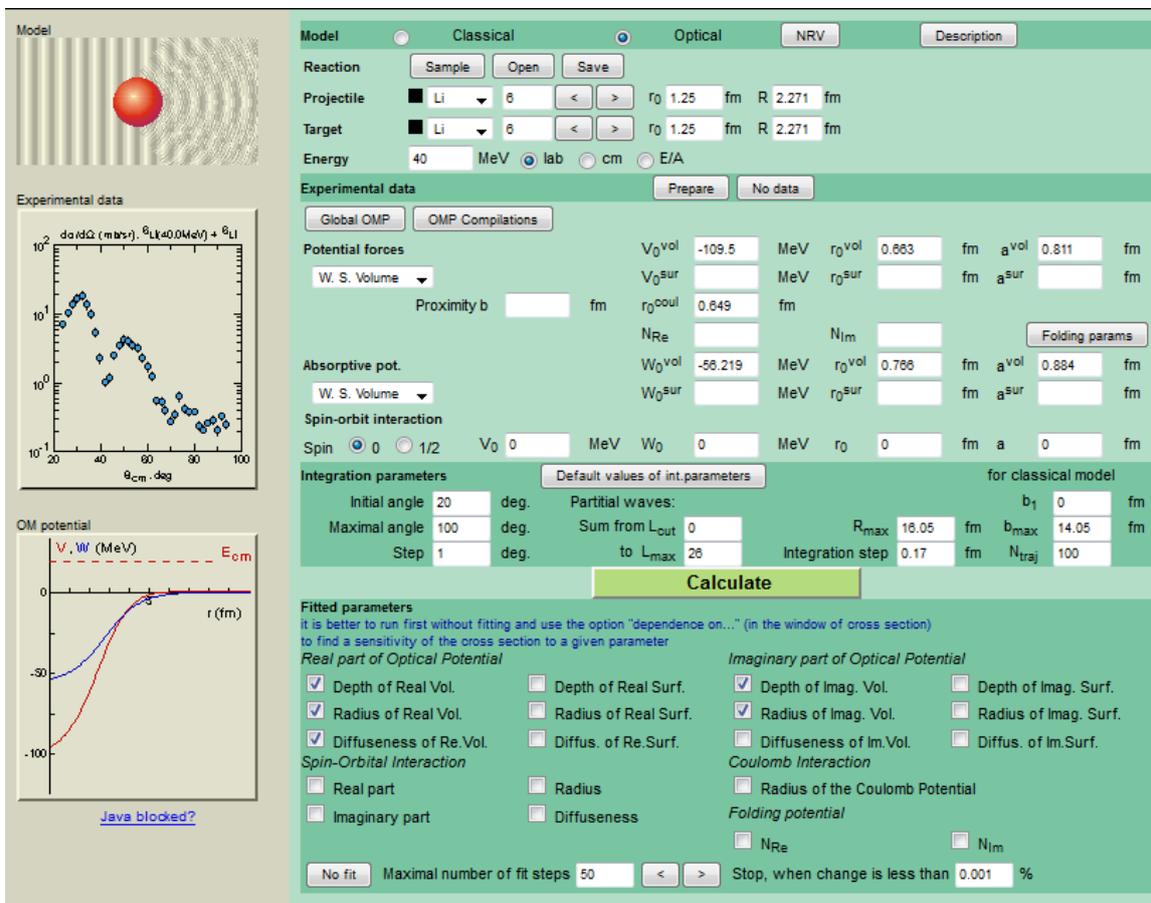


Рис. 1.8. Форма для ввода данных для расчетов упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$ .

Начальные значения параметров оптического потенциала можно задать с помощью соответствующих полей ввода, или (после щелчка по кнопке “Global OMP”) воспользовавшись одной из систематик потенциала оптической модели (OMP, Optical Model Potential). Примеры выбора систематик даны на рис. 1.9. Расчеты сечений для рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  следует выполнить с тремя формами оптического потенциала, предложенных авторами:

- 1) J. Cook (для ядер  ${}^6\text{Li}$ ),
- 2) R. Kalpakchieva et al. (для ядер  ${}^6\text{Li}$ ),
- 3) R.O. Akyuz and A. Winther (для тяжелых ядер, (Heavy Ions)).

Затем нужно будет выбрать потенциал, обеспечивающий лучшее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными.

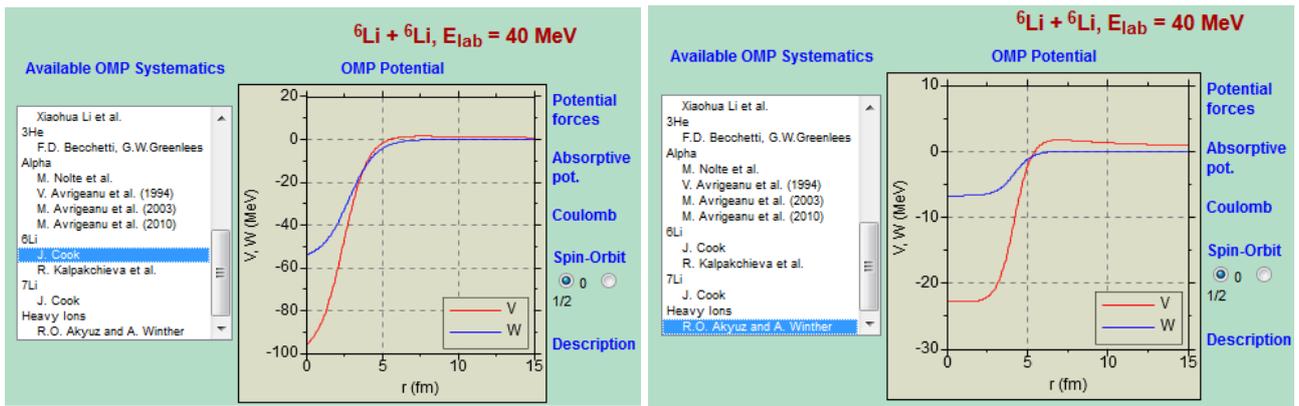


Рис. 1.9. Примеры выбора систематик для параметров потенциала оптической модели

Для загрузки параметров потенциала щелкните по кнопке Submit. Графики реальной и мнимой частей оптического потенциала представлены на обеих формах. Для численного решения радиального уравнения Шредингера для парциальных волн можно задать следующие параметры: максимальное значение орбитального момента  $L_{\max}$ , шаг интегрирования (integration step) по  $R$  и максимальный радиус  $R_{\max}$  так, чтобы на расстоянии  $R_{\max}$  взаимодействие ядер было чисто кулоновским, а мнимая часть потенциала была исчезающе малой. Для проверки точности вычисления нужно проделать с максимальным числом шагов 50 и 100 и с двумя значениями максимального радиуса сетки  $R_{\max}$ . Небольшие различия в значениях сечений реакции  $\sigma_R$ , и полного сечения рассеяния  $\sigma_{\text{tot}}$  будут означать наличие сходимости к точному решению задачи. Укажите параметры для поиска и построения сглаживающей кривой методом наименьших квадратов. Допустимо выбрать не более пяти параметров из списка (поставить не более пяти флажков). Рекомендуется выбрать все глубины и радиусы вещественной и мнимой части оптического потенциала. Они будут изменяться для поиска минимума суммы квадратов относительных отклонений теоретической кривой от экспериментальных данных [20, 21]

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{\left[ \frac{d\sigma^{\text{theor}}}{d\Omega}(\theta_i) - \frac{d\sigma^{\text{exp}}}{d\Omega}(\theta_i) \right]^2}{[\delta\sigma_i]^2}, \quad (1.52)$$

где  $\delta\sigma_i$  – ошибки измерения дифференциального сечения (см. пример на рис. 1.7). Значение максимального числа шагов поиска минимума по умолчанию равно 50, но процедура может закончиться и раньше, при условии малого относительного изменения величины  $\chi^2$

$$\frac{\Delta\chi^2}{\chi^2} < \varepsilon, \quad (1.53)$$

где по умолчанию  $\varepsilon = 0.001$ .

Для выполнения расчета щелкните по кнопке “Calculate”. Пример результатов показан на рис. 1.10.

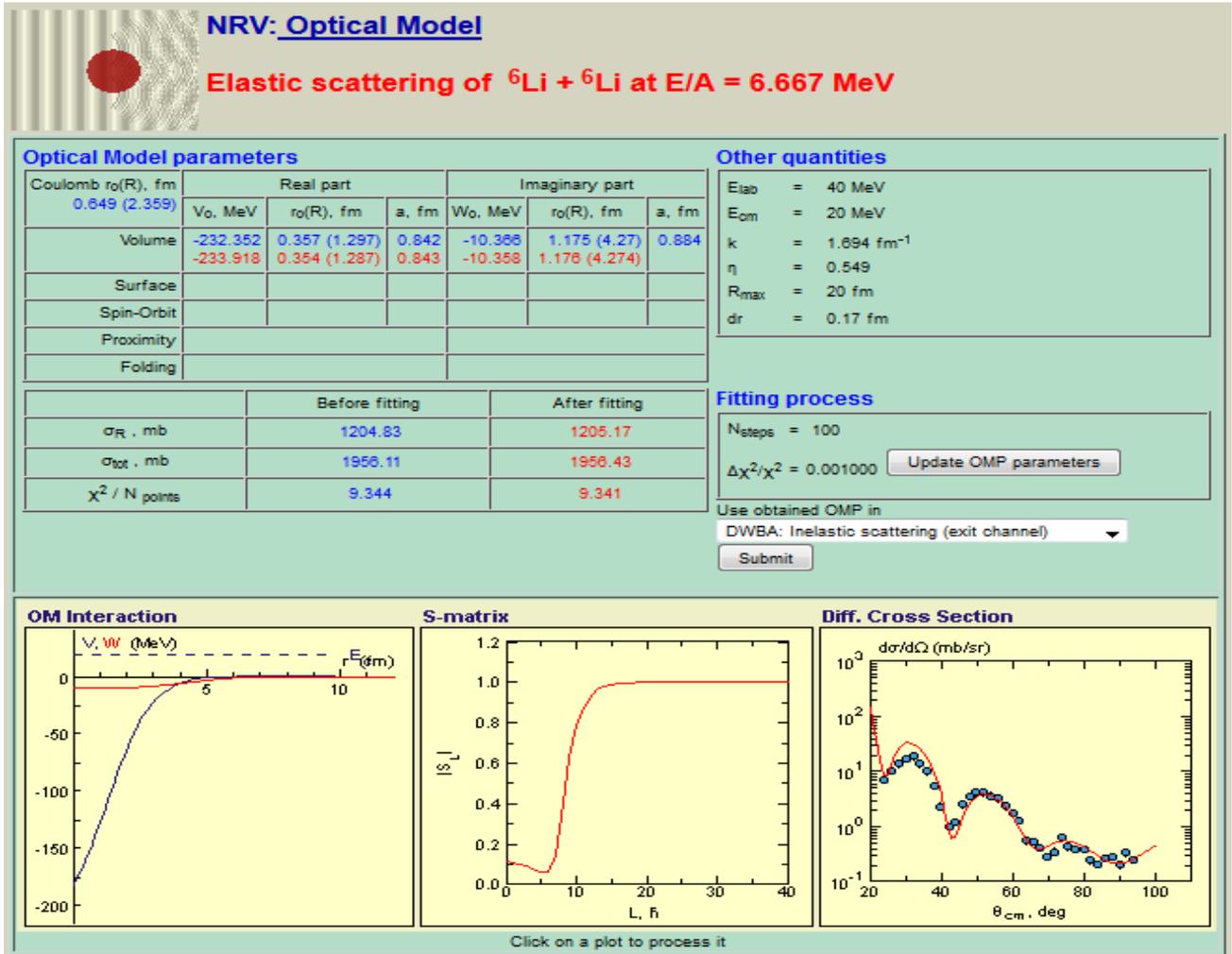


Рис. 1.10. Пример результатов расчета для начальных данных на рис. 1.8.

В появившемся окне с результатами расчета щелкните по кнопке “Update OMP parameters” и повторите расчет с другой систематикой, в том числе с универсальной систематикой для тяжелых ионов. Выберите вариант с наименьшим значением  $\chi^2/N_{points}$  среднего квадрата отклонения теоретической кривой от экспериментальных данных с числом точек  $N_{points}$ . Для этого варианта нужно будет проделать подробный анализ полученных результатов.

**2.2.** Для более детального анализа результатов щелкните поочередно по всем трем графикам и сохраните их в виде графического файла в формате PNG и текстового файла (в кодировке

ASCII). График углового распределения представьте и сохраните в форме отношения экспериментального и Резерфордовского дифференциальных сечений (рис. 1.11).

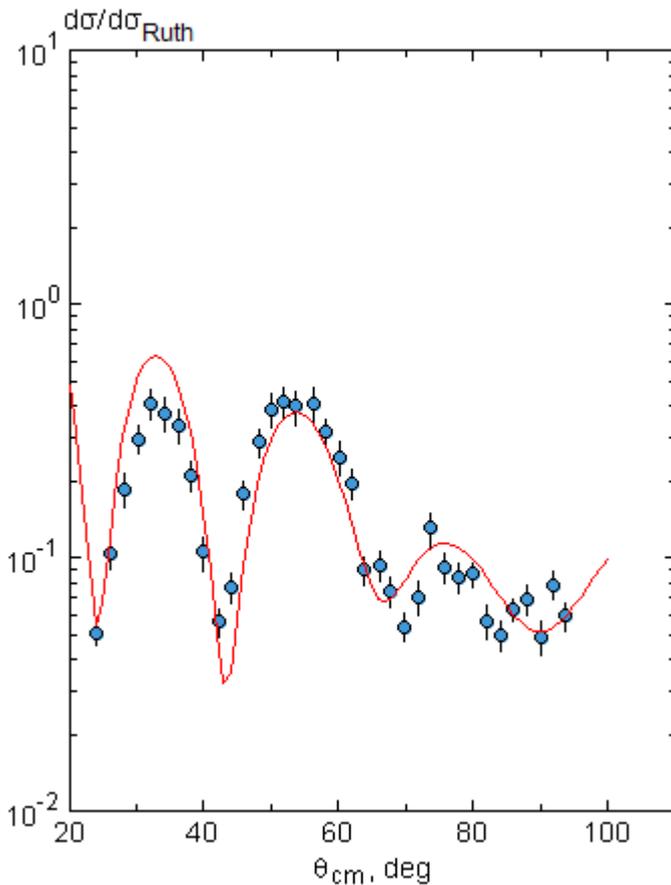


Рис. 1.11. Отношение дифференциального сечения упругого рассеяния к Резерфордовскому сечению ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  при энергии 40 МэВ. Кривая соответствует расчету в рамках оптической модели, точки – экспериментальные данные (см. рис. 1.7).

Скопируйте (выбрав пункт меню в дополнительном окне апплета Save as: ASCII) числовые данные в файл отчета о работе и внесите данные в таблицы, содержащие полученные для различных энергий значения параметров оптического потенциала, а также значения сечения реакции (сечение поглощения)  $\sigma_R$  и полного сечения  $\sigma_{\text{tot}}$  всех процессов, возможных при столкновении.

**2.3.** Проанализируйте зависимость диагонального элемента парциальной  $S$ -матрицы от орбитального момента (график  $S$ -matrix на рис. 1.10). Выведите график  $S$ -матрицы в отдельное окно щелчком правой кнопки мыши (рис. 1.12), затем сохраните как текст (Save as... ASCII). В одной из программ компьютерной графики постройте в логарифмическом масштабе график зависимости величины  $1-|S_L|^2$  от  $L$  (пример на рис. 1.13). С учетом выражения (1.48) для полного сечения реакции величину  $1-|S_L|^2$  можно считать характеристикой непрозрачности (поглощения) для частиц с орбитальным моментом  $\hbar[L(L+1)]^{1/2}$  (парциальных волн с орбитальным квантовым числом  $L$ ). К центру ядра с небольшим поглощением проникают парциальные волны с  $L < 10$ . При больших значениях орбитального квантового числа центробежный потенциал препятствует этому. При  $L > 15$  парциальные волны не попадают в область действия ядерных сил. Значение максимального орбитального момента  $L_{\text{max}}$  должно обеспечивать выполнение условия  $1-|S_{L_{\text{max}}}|^2 \ll 1$ .

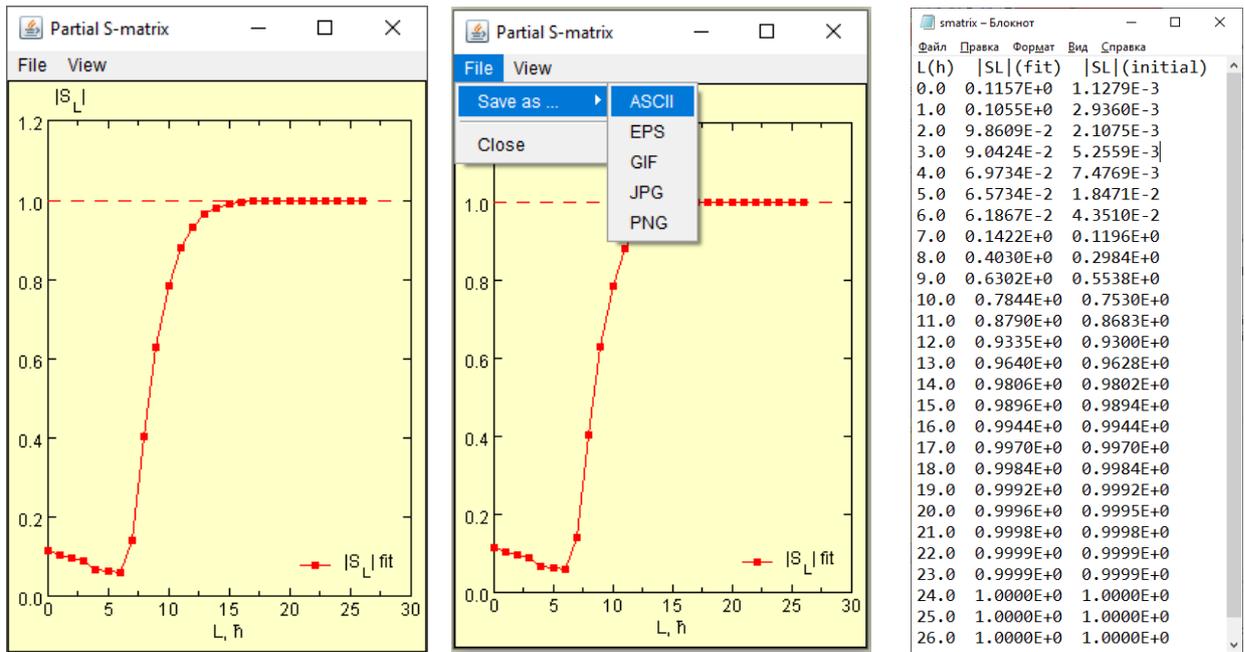


Рис. 1.12. Зависимость модуля  $|S_L|$  частичной  $S$ -матрицы от  $L$  для упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40$  МэВ.

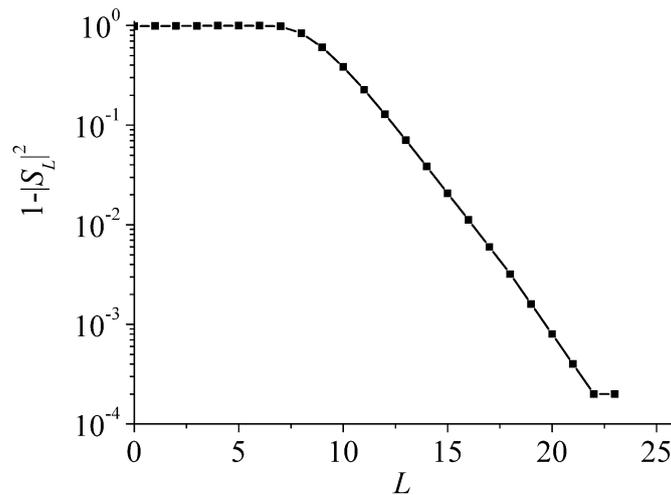


Рис. 1.13. Зависимость величины  $1 - |S_L|^2$  от  $L$  для упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40$  МэВ.

Проанализируйте поведение частичных волн с различными значениями орбитального момента (рис. 1.14).

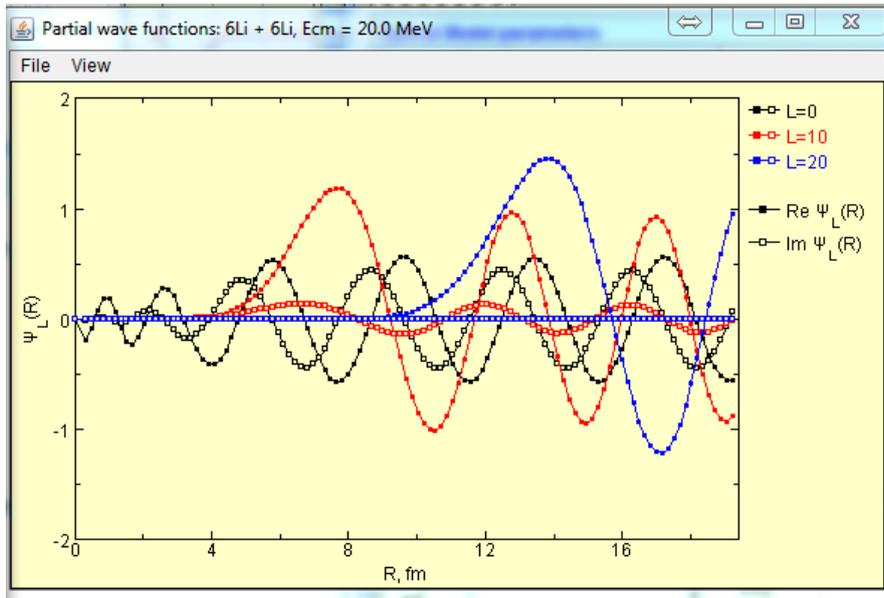


Рис. 1.14. Парциальные волны с орбитальными квантовыми числами  $L = 0, 10, 20$  для упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40$  МэВ.

Для парциальных волн с большими моментами центробежный член в уравнении Шредингера “экранирует” область малых значений  $r$ . Частицы с большими прицельными параметрами столкновения не попадают в область действия ядерных сил, поэтому

$$\delta_{L \rightarrow \infty} \rightarrow 0, S_{L \rightarrow \infty} \rightarrow 1 \quad (1.54)$$

Таким образом, суммирование в ядерной амплитуде рассеяния фактически можно проводить лишь до некоторого  $L_{\text{max}} < kR_M$  [8]. Для рассеяния нуклонов с низкими энергиями это всего лишь несколько слагаемых, в то время как для рассеяния тяжелых ионов число парциальных волн, вносящих заметный вклад в сечение, может достигать нескольких сотен. Используемый в NRV алгоритм расчета предусматривает суммирование в формуле (1.30) до некоторого максимального значения орбитального момента  $L_{\text{max}}$

**2.4.** Получите картину распределения плотности вероятности  $|\psi_k(\mathbf{r})|^2$  (рис. 1.15)

**2.5.** Используя найденные значения параметров потенциала, получите результаты описания упругого рассеяния в рамках классической механики (рис. 1.16). Щелчком по рисунку траекторий откройте его в отдельном окне и сохраните как графический файл. Сравните картины классических траекторий и распределения плотности вероятности (рис. 1.17) при рассеянии частиц на ядрах. Обратите внимание на образование тени за рассеивающим центром. С помощью функции отклонения – зависимости угла отклонения  $\theta$  от прицельного параметра столкновения  $b$  найдите области радужного рассеяния. Сравните вероятность выживания частицы на траектории (Survival Probability) с парциальной  $S$ -матрицей (рис. 1.12).

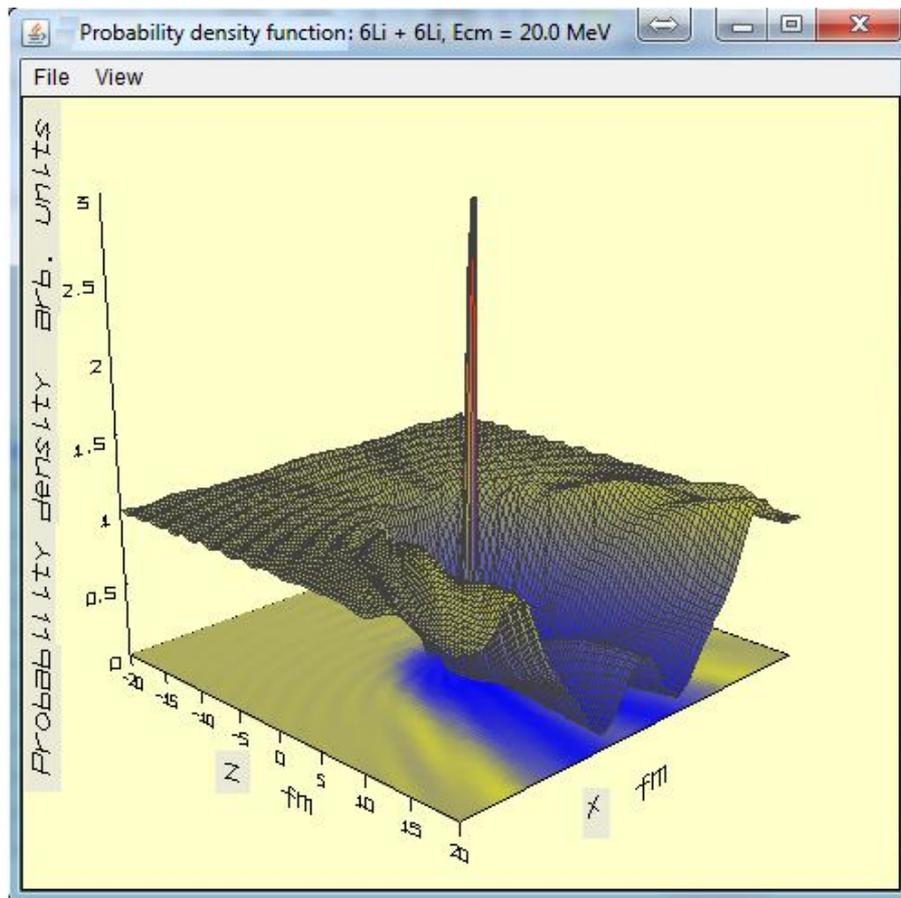


Рис. 1.15. Плотность вероятности  $|\psi_k(\mathbf{r})|^2$  для упругого рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40$  МэВ, ось  $Oz$  совпадает с направлением начальной скорости частицы-снаряда.

NRV: Classical Model

Elastic scattering of  ${}^6\text{Li} + {}^6\text{Li}$  at  $E/A = 6.667$  MeV

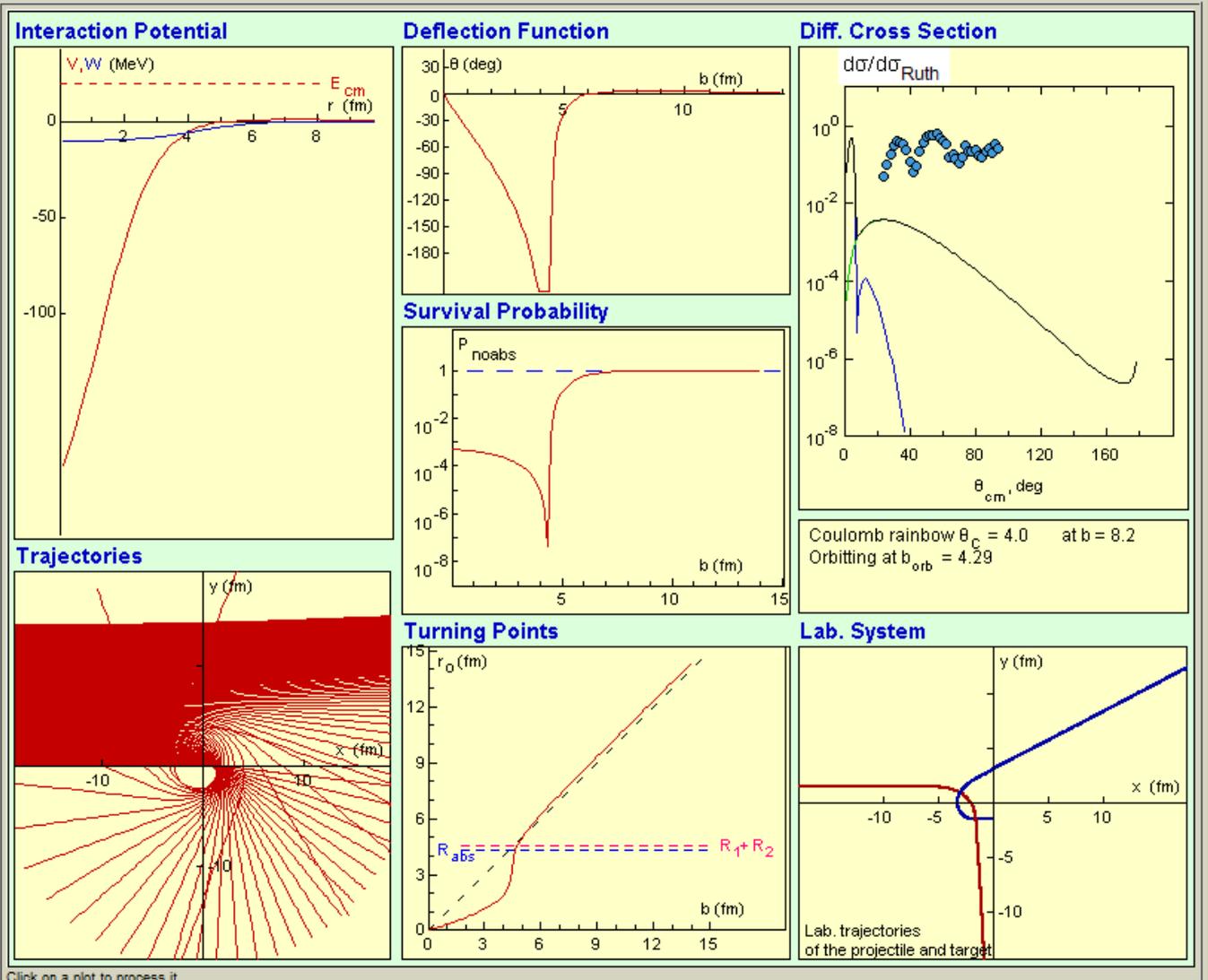


Рис. 1.16. Картина рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{lab} = 40$  МэВ в рамках классической механики

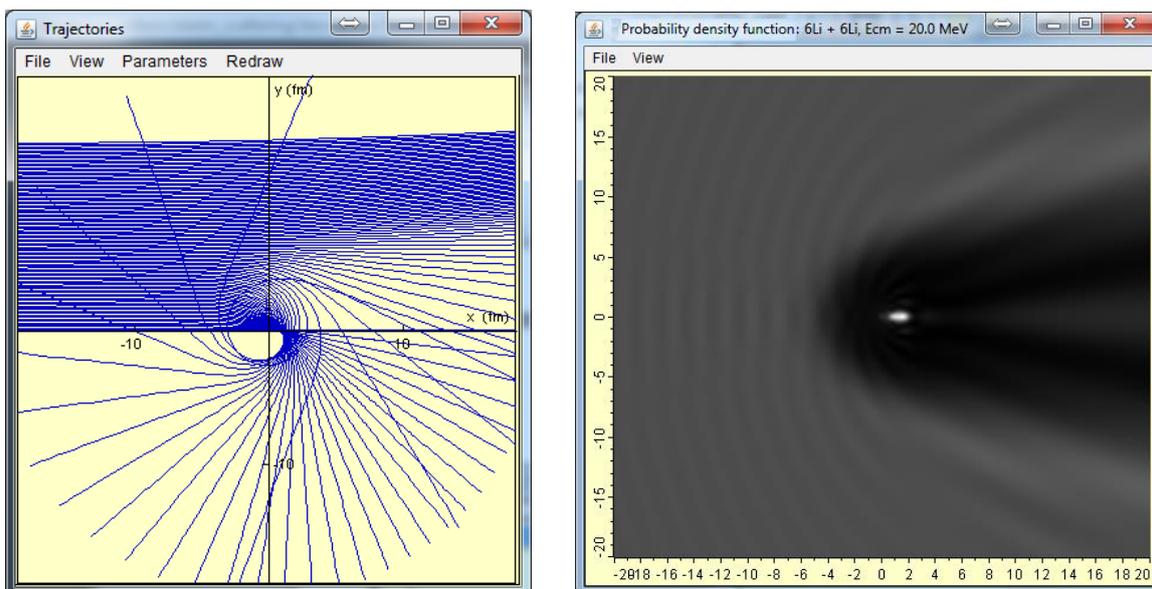


Рис. 1.17. Картина классических траекторий (слева) и квантовой плотности вероятности (справа) для рассеяния ядер  ${}^6\text{Li}$  на ядрах  ${}^6\text{Li}$  с энергией  $E_{\text{lab}} = 40$  МэВ

**2.6.** Сравните классические и квантовые дифференциальные сечения. Дайте интерпретацию как возможному их сильному различию (рис. 1.16), так и возможному сходству (рис. 1.18).

**2.7.** Повторите расчеты для всех энергий, для которых имеются экспериментальные данные по рассматриваемой реакции, переходя от больших энергий к меньшим. Внесите данные в таблицы, содержащие полученные для различных энергий значения параметров оптического потенциала, а также значения сечения реакции (сечение поглощения)  $\sigma_R$  и полного сечения всех процессов, возможных при столкновении  $\sigma_{\text{tot}}$ . Постройте графики зависимости сечения реакции (сечение поглощения)  $\sigma_R$  и полного сечения всех процессов, возможных при столкновении  $\sigma_{\text{tot}}$  от энергии.

**2.8.** Для всех рассмотренных энергий постройте графики реальной и мнимой частей оптического потенциала. Определите высоты и положения вершины кулоновского барьера у реальной части потенциала. Постройте графики их зависимости от энергии.

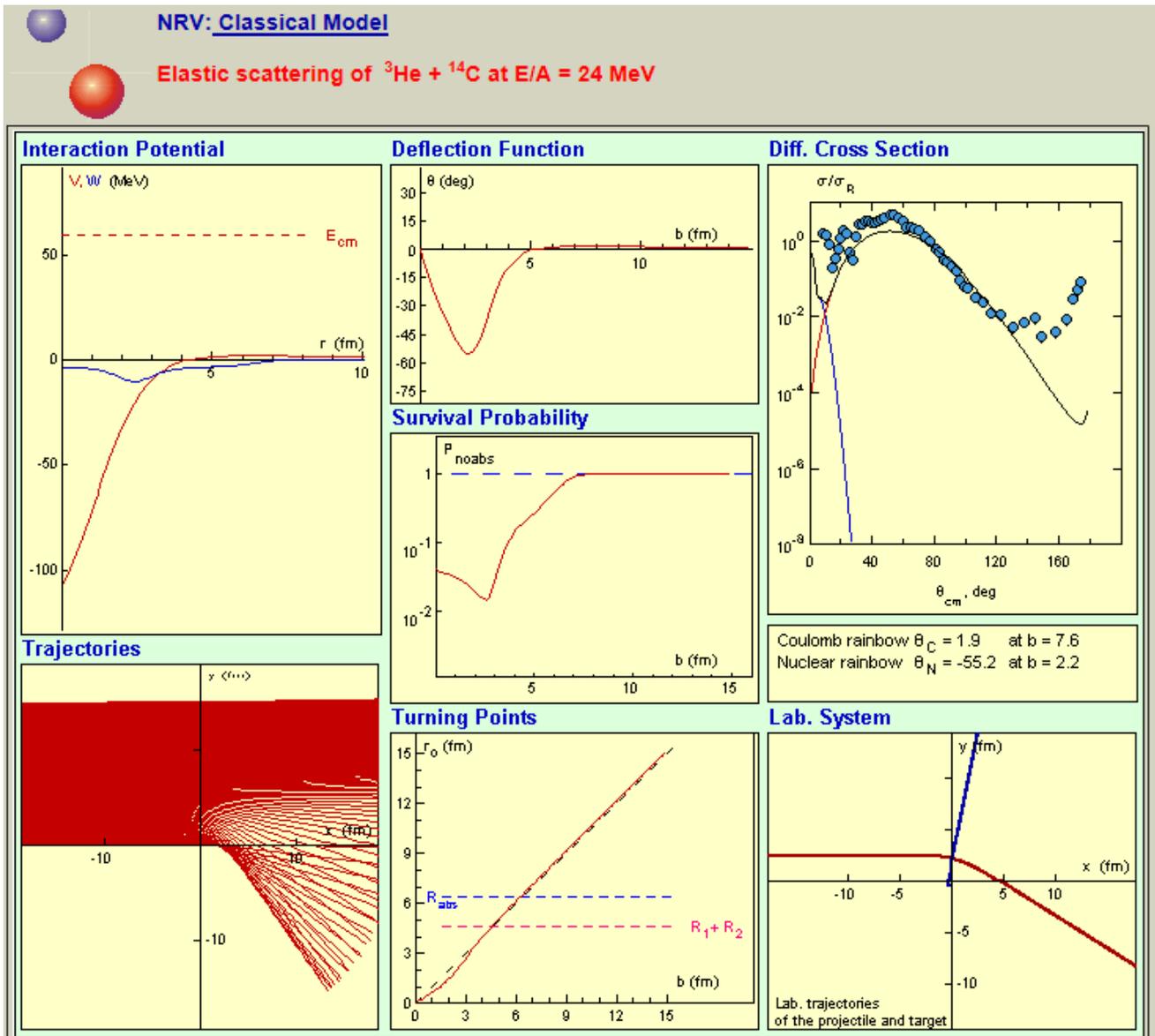


Рис. 1.18. Картина рассеяния ядер  ${}^3\text{He}$  на ядрах  ${}^{14}\text{C}$  с энергией  $E_{lab} = 72$  МэВ в рамках классической механики.

### 6. Пример $s$ -рассеяния (для $L = 0$ ) в короткодействующем поле

Принципы работы сложного вычислительного кода оптической модели можно изучить на простом примере  $s$ -рассеяния (для  $L = 0$ ) в короткодействующем поле. Для медленных частиц при  $L > 0$  фазы малы  $|\delta_L| \ll 1$  и ими можно пренебречь. Упругое рассеяние будет определяться только нулевой фазой  $\delta_0$ . Далее радиальную волновую функцию  $y_{k,0}(r) = r\psi_{k,0}(r)$  будем обозначать просто  $y(r)$ . Для радиального уравнения Шредингера в безразмерном виде

$$y''(r) + (k^2 - u(r))y(r) = 0, \quad u(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \quad (1.55)$$

граничное условие в нуле является однородным первого рода

$$y(0) = 0. \quad (1.56)$$

Рассмотрим постановку граничного условия при больших значениях  $r$ , когда потенциал  $u(r) \rightarrow 0$ . Из формул (1.30) – (1.34) следует асимптотика радиальной части в разложении волновой функции по полиномам Лежандра [2 – 5]

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2kr} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) [(-1)^L \exp(-ikr) - \exp(2i\delta_L + ikr)] P_L(\cos \theta), \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.57)$$

Фаза рассеяния  $\delta_0$  определяет асимптотику при  $r \rightarrow \infty$  функций

$$\psi_{k,0} = C \frac{1}{2kr} [\exp(-ikr) - \exp(2i\delta_0 + ikr)], \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.58)$$

$$y = C [\exp(-ikr) - \exp(2i\delta_0 + ikr)], \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.59)$$

Для нахождения фазы рассеяния  $\delta_0$  выберем  $C = 1$  тогда граничное условие

$$y(r) = \exp(-ikr) - \exp(2i\delta_0 + ikr) = \exp(-ikr) - S_0 \exp(ikr), \quad r \rightarrow \infty, \quad (1.60)$$

содержит диагональный матричный элемент матрицы рассеяния (S-матрицы), являющийся неизвестной постоянной

$$S_0 = \exp(2i\delta_0), \quad (1.61)$$

Исключение постоянной  $S_0$  дает граничное условие третьего рода:

$$\begin{aligned} (y'(r) + ik \exp(-ikr)) &= -ik S_0 \exp(ikr) = ik(y(r) - \exp(-ikr)), \quad r \rightarrow \infty, \\ y'(r) -iky(r) &= -2ik \exp(-ikr). \end{aligned} \quad (1.62)$$

Таким образом, для уравнения Шредингера (1.52) поставлена смешанная краевая задача с граничными условиями (1.56), (1.62). Численное решение задачи  $y_j = y(r_j)$  находится в узлах сетки

$$r_j = r_{\max} - (j-1)h, \quad j = 1, \dots, n; \quad r_1 = r_{\max}, \quad r_n = 0, \quad h = r_{\max}/(n-1). \quad (1.63)$$

Разностные аппроксимации уравнения (1.52) по трехточечной схеме

$$y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1} + h^2 (k^2 - u(r_j)) y_j = 0, \quad (1.64)$$

или по более точному методу Нумерова

$$\begin{aligned} y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1} + \\ + h^2 \frac{1}{12} [(k^2 - u(r_{j-1})) y_{j-1} + 10(k^2 - u(r_j)) y_j + (k^2 - u(r_{j+1})) y_{j+1}] = 0, \end{aligned} \quad (1.65)$$

и граничных условий (1.56), (1.62)

$$y_n = 0 \quad (1.66)$$

$$\frac{y_1 - y_2}{h} - ik \frac{y_1 + y_2}{2} = -2ikh \exp(-ikr_{1+1/2}) \quad (1.67)$$

$$y_1 - y_2 - \frac{ikh}{2} (y_2 + y_1) = -2ikh \exp(-ikr_{3/2}) \quad (1.68)$$

$$y_1 - y_2 \frac{2 + ikh}{2 - ikh} = -\frac{4ikh}{2 - ikh} \exp(-ikr_{3/2}) \quad (1.69)$$

приводят к системе линейных уравнений для неизвестных  $y_j$  с трехдиагональной симметричной матрицей

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 y_1 + c_1 y_2 = d_1 \\ a_2 y_1 + b_2 y_2 + c_2 y_3 = d_2 \\ a_j y_{j-1} + b_j y_j + c_j y_{j+1} = d_j \\ a_{n-1} y_{n-2} + b_{n-1} y_{n-1} + c_{n-1} y_n = d_{n-1} \\ a_n y_{n-1} + b_n y_n = d_n \end{array} \right. \quad (1.70)$$

с элементами

$$a_j = 1, j = 2, \dots, n-1, a_n = 0 \quad (1.71)$$

$$a_j = 1 + h^2 \frac{1}{12} (k^2 - u(r_{j-1})), j = 2, \dots, n-1, a_n = 0, \text{ (для метода Нумерова)} \quad (1.72)$$

$$b_1 = 1, b_j = -2 + h^2 (k^2 - u(r_j)), j = 2, \dots, n-1, \quad (1.73)$$

$$b_1 = 1, b_j = -2 + h^2 \frac{10}{12} (k^2 - u(r_j)), j = 2, \dots, n-1, \text{ (для метода Нумерова)} \quad (1.74)$$

$$c_1 = -\frac{2 + ikh}{2 - ikh}, c_j = 1, j = 2, \dots, n-1. \quad (1.75)$$

$$c_1 = -\frac{2 + ikh}{2 - ikh}, c_j = 1 + h^2 \frac{1}{12} (k^2 - u(r_{j+1})), j = 2, \dots, n-1, \text{ (для метода Нумерова)} \quad (1.76)$$

$$d_1 = -\frac{4ikh}{2 - ikh} \exp(-ikr_{3/2}), d_j = 0, j = 2, \dots, n. \quad (1.77)$$

Матрица системы оказывается трехдиагональной и ее решение легко находится стандартным методом прогонки [9]

$$A_1 = -\frac{c_1}{b_1}, B_1 = \frac{d_1}{b_1}, \quad (1.78)$$

$$A_j = -\frac{c_j}{a_j A_{j-1} + b_j}, B_j = \frac{d_j - a_j B_{j-1}}{a_j A_{j-1} + b_j}, j = 2, \dots, n-1, \quad (1.79)$$

$$y_n = 0, y_j = A_j y_{j+1} + B_j, j = n-1, \dots, 1. \quad (1.80)$$

Постоянная  $S_0$  находится по формулам

$$S_0 \exp(ikr_1) = \exp(-ikr_1) - y(r_1), S_0 = [\exp(-ikr_1) - y(r_1)] \exp(-ikr_1), \quad (1.81)$$

а фаза рассеяния  $\delta_0$  – из уравнения (1.61). Поскольку полином Лежандра нулевого порядка тождественно равен единице  $P_L(\cos \theta) \equiv 1$ , упругое рассеяние является изотропным, а полное сечение равно

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (1.82)$$

Для медленных частиц [2]

$$\delta_0 = a'k. \quad (1.83)$$

где величина  $a'$  называется *длиной рассеяния*. Полное сечение рассеяния в этом случае равно

$$\sigma \approx 4\pi a'^2. \quad (1.84)$$

Таким образом можно рассчитывать сечение упругого рассеяния медленных (в том числе тепловых) нейтронов на атомных ядрах.

Заметим, что формула (1.62) следует из формулы (1.51) в отсутствие кулоновского взаимодействия для  $L=0$ , когда волновые функции Кулона заменяются на экспоненты:  $H_0^{(+)}(x) \rightarrow \exp(ix)$ . Граничное условие (1.51) получается аналогично формуле (1.62) при исключении неизвестной величины  $S_L$

$$\begin{aligned} y_l(r) &= H_l^{(-)} - S_l H_l^{(+)}, S_l H_l^{(+)} = H_l^{(-)} - y_l(r), S_l = \frac{1}{H_l^{(+)}} [H_l^{(-)} - y_l(r)], \\ y_l'(r) &= \left( \frac{d}{dr} H_l^{(-)} \right) - S_l \left( \frac{d}{dr} H_l^{(+)} \right), \\ y_l'(r) - y_l(r) \frac{1}{H_l^{(+)}} \left( \frac{d}{dr} H_l^{(+)} \right) &= \frac{1}{H_l^{(+)}} \left\{ H_l^{(+)} \left( \frac{d}{dr} H_l^{(-)}(kr) \right) - H_l^{(-)} \left( \frac{d}{dr} H_l^{(+)}(kr) \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.85)$$

с учетом значения вронскиана

$$W(G, F) = GF' - FG' = 1, W(H_l^{(+)}, H_l^{(-)}) = (G - iF)'(G + iF) - (G - iF)(G + iF)' = -2i. \quad (1.86)$$

Разностная аппроксимация граничного условия (1.48) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{y_l(r_n) - y_l(r_{n-1})}{h} - \frac{y_l(r_n) + y_l(r_{n-1})}{2} \frac{H_l^{(+)}(kr_n) - H_l^{(+)}(kr_{n-1})}{hH_l^{(+)}(kr_{n-1/2})} &= -\frac{2ik}{H_l^{(+)}(kr_{n-1/2})}, \\ y_l(r_n) \left[ 1 - \frac{H_l^{(+)}(kr_n) - H_l^{(+)}(kr_{n-1})}{2H_l^{(+)}(kr_{n-1/2})} \right] &= y_l(r_{n-1}) \left[ 1 + \frac{H_l^{(+)}(kr_n) - H_l^{(+)}(kr_{n-1})}{2H_l^{(+)}(kr_{n-1/2})} \right] - \frac{2ikh}{H_l^{(+)}(kr_{n-1/2})}. \end{aligned} \quad (1.87)$$

**Задание 3.** Составьте программу на языке C++ для расчета радиальной волновой функции  $y(r)$ , фазы  $\delta_0$  и сечения  $\sigma_0$  упругого рассеяния на ядрах медленных нейтронов с использованием метода прогонки. Для работы с комплексными данными в среде Microsoft Visual Studio (см., например, [22]) и в среде Dev-C++ необходима директива препроцессора `#include <complex>` как в примере на рис. 1.19. Для проверки правильности работы программы воспроизведите графики на рис. 1.6.

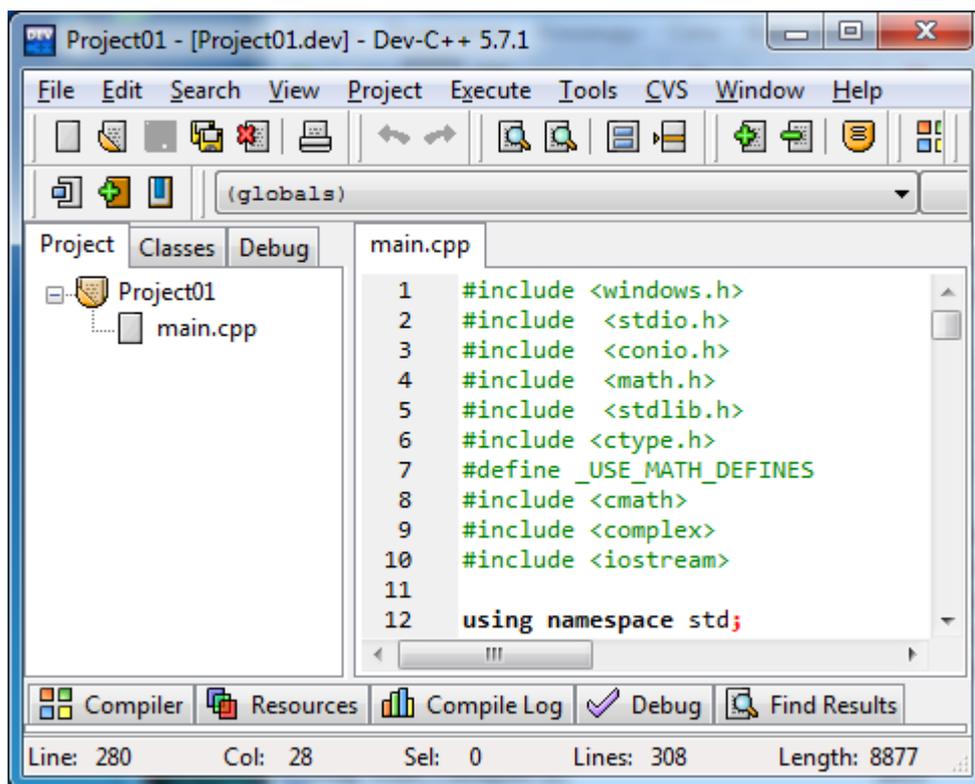
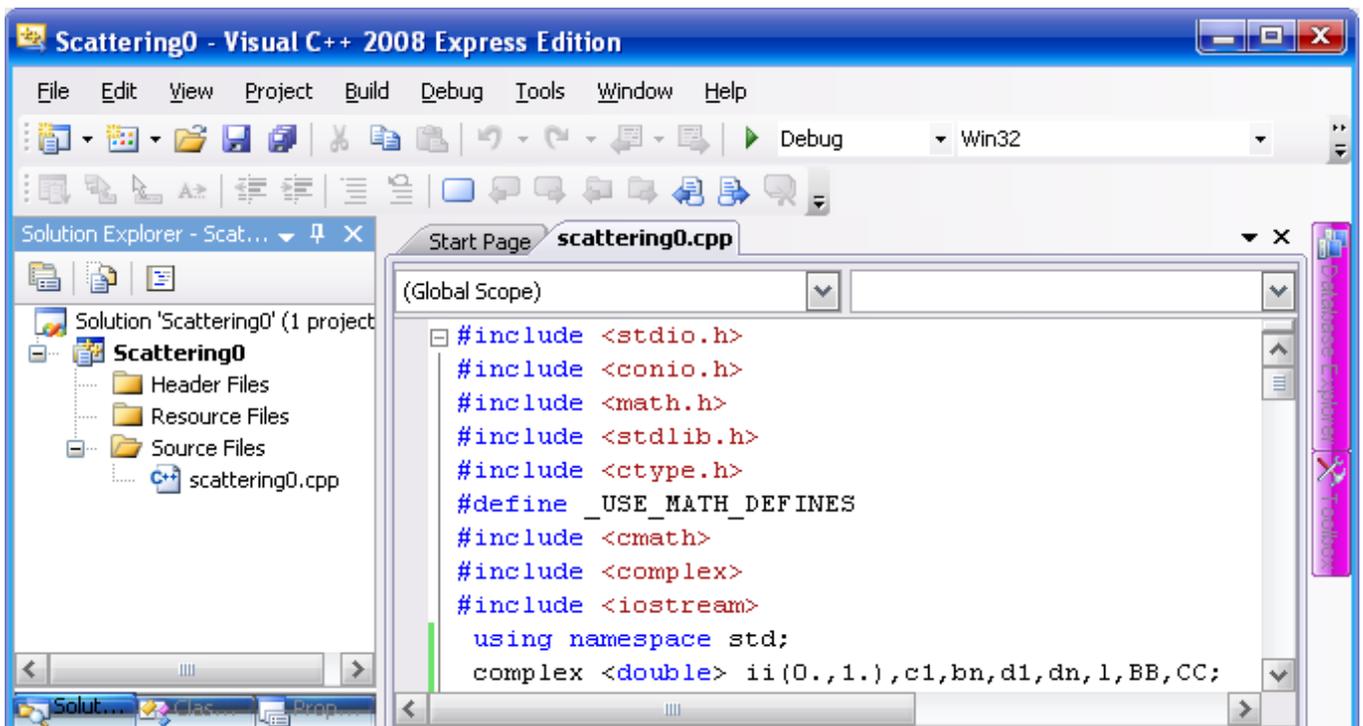


Рис. 1.19. Примеры подключения библиотек работы с комплексными данными в среде Microsoft Visual Studio и Dev-C++

## ЛИТЕРАТУРА

### Основная

1. Фрауэнфельдер, Г. Субатомная физика. /Г. Фрауэнфельдер, Э. Хэнли. М.:Мир. 1979. 736 с.
2. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969, 756 с.
3. Престон М. Физика ядра. М. Мир, 1964, 574 с.
4. Загребаев В. И. Ядерные реакции с тяжелыми ионами. Дубна. УНЦ ОИЯИ. 2016. 184 с.
5. Тэйлор Дж. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М. Мир 1975. 565 с.

### Дополнительная

6. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973. 703 с.
7. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами /Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 830 с
8. Широков Ю.М., Юдин Н.П. Ядерная физика. М.: Наука, 1972.
9. Турчак Л.И., Плотников П.В. Основы численных методов.- М.: Физматлит. 2003.- 300 с.
10. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975, 392 с.
11. С. Bardin, Y. Dandeu, L. Gauthier, J. Guillermin, T. Lena and J.-M. Pernet, H.H. Wolter and T. Tamura. Coulomb Functions in Entire  $(\eta, \rho)$  – plane. Comp. Phys. Comm. 3 (1972) 73 – 87.
12. K. S. Kolbig. Remarks on the Compilation of Coulomb Wave Functions. Comp. Phys. Comm. 4(1972) 214 – 220.
13. A.R. Barnett, D.H. Feng, J.W. Steed and L.J.B. Goldfarb. Coulomb Wave Functions for all real  $\eta$  and  $\rho$ . Comp. Phys. Comm... 8 (1974) 377 – 395.
14. Самарин В.В., Самарина С.М. Применение регуляризованного квазиклассического приближения для волновых функций Кулона при описании ядерных реакций с тяжелыми ионами. Изв. РАН, сер. физ., 2010, т.74, №6, с. 822.
15. Александров В. А., Загребаев В. И., Самарин В. В., Филиппов Г. М. Ядерная физика. Лабораторный практикум. Чебоксары. Изд-во Чуваш. ун-та 1999. 192 с.
16. Методы измерения основных величин ядерной физики. Под ред. Люк К. Л. Юан и Ву Цзянь-Сюн. М. (Мир, Москва, 1964); Fundamental Principles and Methods of Particle Detection. Eds. By Luke C. L. Yuan and Chien-Shiung. Academic Press, New York – London. 1961.
17. Smith W. R. Nuclear Penetrability and Phase Shift Subroutine. Comp. Phys. Comm. 1 (1969) 106 – 112.
18. Smith W. R. Nuclear Elastic Scattering Program with Parameter Search Comp. Phys. Comm. 1 (1969) 198 – 206.
19. Allison A. C. The Calculation of Absorption and Elastic Cross Sections the Optical Potential. Comp. Phys. Comm. 3 (1972) 173 – 179.
20. Eastgate R. J., Thompson W. J. A Nuclear Optical Model Code for Small Computers. Comp. Phys. Comm.. 5 (1973) 69 – 79.
21. Auerbach E. H. A-THREE: A General Optical Model Code Especially Suited to Heavy-Ion Calculations Comp. Phys. Comm. 15 (1978) 165 – 192.
22. Пахомов Б. С/С++ и MS Visual C++ 2008 для начинающих. С-Пб, “БХВ-Петербург”, 2009.