

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ МЕЗОМОЛЕКУЛ *dtμ* и *ddμ*

Л. И. Меньшиков

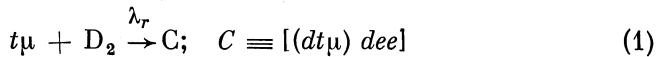
Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова, Москва

Рассмотрены механизмы образования мезомолекул *dtμ* и *ddμ* в смеси $D_2 + T_2$ высокой плотности и найдены скорости этих процессов. Известные к настоящему времени нелинейные по плотности газа зависимости скоростей образования следуют из формул данной работы в качестве их предельных случаев.

Mechanisms of *dtμ*- and *ddμ*-mesic molecules formation in mixture $D_2 + T_2$ of high density are considered, and rates of these processes are calculated. Known at present nonlinear dependencies of formation rates in high density gas follows from formulas of this paper as limiting cases.

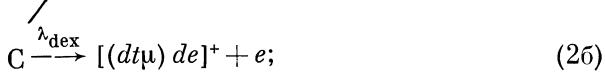
1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И СТРУКТУРА РАБОТЫ

При низких плотностях дейтерий-тритиевой смеси мезомолекулы *dtμ* и *ddμ* образуются в процессах [1] (для определенности далее рассматриваем образование *dtμ* с участием молекул D_2)



по резонансному механизму Весмана [2] со скоростью λ_r , пропорциональной плотности φ дейтерий-тритиевой смеси ($\varphi = N_n/N_0$, N_n — число ядер в 1 см³ смеси, $N_0 = 4,25 \cdot 10^{22}$ см⁻³).

Комплекс С нестабилен:

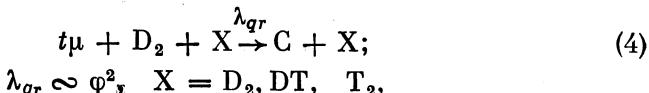


т.е. происходит или его распад по упругому каналу (2a) со скоростью Γ_e [3, 4], или девозбуждение мезомолекулы (2b) [5] со скоростью λ_{dex} , или ядерная реакция (2c) [6] со скоростью λ_f . Суммарное сечение процессов (1), (2), которое далее будем называть сечением образования мезомолекул, определяется формулой Брейта — Вигнера с полной шириной резонанса Γ (далее $\hbar = 1$):

$$\sigma(\epsilon_p) = \frac{\pi}{p^2} \frac{\Gamma_e \Gamma}{\Delta_p^2 + \Gamma^2/4}, \quad (3)$$

где $\Delta_p = \varepsilon_p - \varepsilon_r$; $\Gamma = \Gamma_V$; $\Gamma_V = \Gamma_e + \Gamma_r$ — ширина резонанса в вакууме; $\Gamma_r = \lambda_{dex} + \lambda_f$ — неупругая ширина реакции; p и ε_p — импульс и кинетическая энергия относительного движения $t\mu$ и D_2 ; ε_r — положение резонанса («резонансная энергия»).

При увеличении плотности смеси ($\varphi \geq 0,1$) становятся существенными квазирезонансный механизм [7]



а также дополнительное уширение резонансов, обусловленное столкновениями D_2 и C с молекулами X , поэтому при $\varphi \geq 0,1$ ширина резонанса равна [8]:

$$\Gamma = \Gamma_V + \Gamma_\varphi, \quad (5)$$

где Γ_φ — столкновительная ширина.

К настоящему времени имеются обширные экспериментальные данные для наблюдаемой скорости образования мезомолекул [9—12], т.е. для суммарной скорости процессов (1), (2б) и (2в) [подчеркнем разницу между скоростью образования мезомолекул, т.е. суммарной скоростью процессов (1), (2), и наблюдаемой скоростью образования мезомолекул], для объяснения которых необходимо разработать детальную теорию механизмов образования мезомолекул в газах большой плотности и жидкости, в чем и заключается цель данной работы.

Отправным пунктом для этого исследования является аналогия между интересующей нас реакцией



и процессами резонансной флуоресценции



Эта аналогия позволяет применить к нашему случаю хорошо разработанные методы из теории ударного уширения спектральных линий (ТУУ), которая изложена, например, в [13]. Наше рассмотрение справедливо в «газовом» пределе

$$\tau_c v_c \ll 1, \quad (8)$$

где τ_c — длительность столкновения, т.е. время, в течение которого потенциальная энергия взаимодействия молекул порядка их кинетической энергии ($\sim T$, где T — температура смеси); v_c — частота столкновений, т.е. средний интервал между столкновениями. Смысл ограничения (8) уточняется в разд. 7.

Вращательные степени свободы D_2 и C , а также каналы (2б) и (2в) пока мы не принимаем во внимание; они учитываются в разд. 4 и далее. В разд. 2 в применении к нашему случаю рассмотрена простейшая из моделей ТУУ, в которой молекула D_2 и комплекс C рассмат-

риваются как неподвижные и бесструктурные частицы. Показано, что трехчастичная реакция (2) и ударное уширение резонансов, рассмотренное Ю. В. Петровым, являются двумя различными предельными случаями одного и того же явления — резонансной реакции (1), (2), происходящей в газе высокой плотности.

Модель из разд. 2 наиболее информативна. Тем не менее из-за принятых ограничений ей присущи определенные недостатки. В разд. 3 снимается предположение о неподвижности D_2 и С и обсуждаются принципиальные различия между реакциями (6) и (7). В частности, оказывается существенной отдача комплекса, возникающая при «захвате» мезоатома молекулой (эффект передачи импульса), вследствие чего ударная ширина Γ_φ определяется только столкновениями $C + X$ и не зависит от характера движения D_2 . Этот вывод основан на допущении, справедливость которого доказывается в приложении 1 на основе простой точно решаемой модели.

В разд. 4 учтены врачательные степени свободы комплекса и молекулы. В разд. 5 результаты разд. 2, полученные в приближении $\Gamma_V \rightarrow 0$, обобщаются на случай комплекса с конечным временем жизни ($\Gamma_V \neq 0$). В разд. 6 получено строгое выражение для формы резонансов, которую нужно учитывать при низкой температуре смеси. В разд. 7 проведено обсуждение основных результатов.

2. ОБРАЗОВАНИЕ МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСА ИЗ ТЯЖЕЛОЙ БЕССТРУКТУРНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Рассмотрим предельный случай $m_d \gg m_X$, $m_d \gg m_t$, ($d \equiv D_2$, $t \equiv t\mu$; здесь и далее иногда вместо D_2 и $t\mu$ будут использоваться краткие обозначения d и t), когда D_2 и С можно считать неподвижными. Предположим также, что

$$\Gamma_V \ll T; \quad \Gamma_V \ll \Gamma_\varphi, \quad (9)$$

что позволяет переписать формулу (3) в виде

$$\sigma(\varepsilon_p) = \frac{2\pi^2}{p^2} \Gamma_e \delta(\Delta_p). \quad (10)$$

Согласно [15] скорость Γ_e определяется выражением, формально совпадающим с «золотым правилом» Ферми:

$$\Gamma_e \equiv \Gamma_e(p) = \frac{\mu p}{\pi} V_p^2, \quad (11)$$

где μ — приведенная масса $t\mu$ и D_2 (при $m_d \rightarrow \infty \mu \rightarrow m_t$); V_p — матричный элемент перехода $C \rightarrow t\mu + D_2$ мезоатома из связанного состояния в комплексе с волновой функцией (далее ВФ) $\Phi_c(r)$ в свободное состояние $\Phi_p(r) = \Omega^{-1/2} \exp(ipr)$; Ω — нормировочный объем; r — координаты $t\mu$ -атома, отсчитанные от ц.м. молекулы D_2 , помещенного в начало координат. ВФ Φ_c , Φ_p и оператор перехода $V(r)$ обсуждаются в [15]. В данной работе их точный вид несуществен.

По определению, принятому в данной работе, матричный элемент V_p описывает реакцию на молекуле. Поэтому, в частности, для реакции $t\mu + D_2$ имеется соотношение $V_p^2 = 2\tilde{V}_p^2$, где \tilde{V}_p — матричный элемент перехода, в котором учтено взаимодействие $t\mu$ -атома только с одним из дейtronов молекулы D_2 . Указанное соотношение справедливо при любом импульсе p , поскольку из-за малости размера мезомолекул когерентные эффекты в процессах образования их несущественны.

Скорость образования мезомолекул в реакциях (1) определяется выражением

$$\lambda = \int_0^\infty d\epsilon_p f(\epsilon_p) \lambda(\epsilon_p), \quad (12)$$

где $f(\epsilon_p)$ — функция распределения мезоатомов по энергиям ϵ_p ;
 $\lambda(\epsilon_p) = 2\pi N V_p^2 I(\epsilon_p)$ (13)

— скорость образования мезомолекул из $t\mu$ -атомов с энергией ϵ_p ;
 $N = N_0 \varphi C_{D_2}/2$ — число D_2 -молекул в 1 см³ смеси; C_{D_2} — их доля;
 $I(\epsilon_p)$ — форма резонанса.

Из (10), (11) и (13) получаем хорошо известное выражение Весмана [1, 2]:

$$I(\epsilon_p) = \delta(\Delta_p); \quad \lambda(\epsilon_p) = N 2\pi \delta(\Delta_p) V_p^2. \quad (14)$$

Таким образом, в предельном случае (9) комплекс, возникающий в реакции (6), можно считать бесконечно долго живущим, т.е. вместо

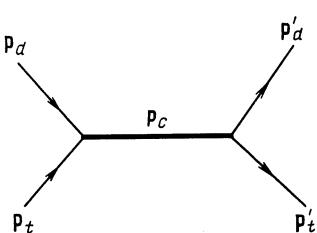


Рис. 1. Амплитуда реакции резонансного рассеяния $t\mu + D_2 \rightarrow C \rightarrow t\mu + D_2$ с образованием промежуточного комплекса C с конечным временем жизни:

p_C — импульс комплекса; p_t , p_d и p'_t , p'_d — импульсы $t\mu$ и D_2 до и после рассеяния

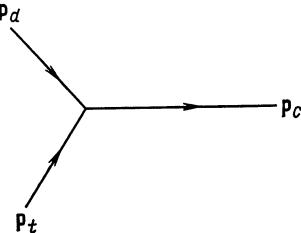


Рис. 2. Амплитуда реакции образования бесконечно долго живущего комплекса $t\mu + D_2 \rightarrow C$:
 p_t , p_d , p_C — импульсы $t\mu$, D_2 и комплекса C соответственно

процесса (6) (рис. 1) следует рассматривать более простой процесс образования комплекса (рис. 2).

Чтобы учесть различие приведенных масс систем $D_2 + X$ и $C + X$, полагаем, что $U_i(\mathbf{R}_j) \neq U_f(\mathbf{R}_j)$, где U_i и U_f — потенциаль-

ные энергии взаимодействия j -й молекулы газа соответственно с D_2 и С. Функция распределения молекул X по импульсам \mathbf{q} является максвелловской:

$$f_X(\mathbf{q}) = f(m_X, \mathbf{q}) \equiv (2\pi m_X T)^{-3/2} \exp(-\epsilon_q/T), \quad \epsilon_q = q^2/(2m_X).$$

Тем самым неявно учитывается взаимодействие между молекулами X; явным же образом их взаимодействие учитывать не будем. Введем также обозначение $w_{\mathbf{q}}$ для вероятностей заполнения квантовых состояний с импульсом \mathbf{q} , нормированных условием

$$\sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} = \int f(m_X, \mathbf{q}) d^3q = 1,$$

откуда, учитывая правило перехода от суммирования к интегрированию

$$\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int \frac{\Omega d^3q}{(2\pi)^3}, \quad (15)$$

получаем $w_{\mathbf{q}} = (2\pi)^3 \Omega^{-1} f(m_X, \mathbf{q})$.

Начальному ($t\mu + D_2 + n_X$ молекул X) и конечному ($C + n_X$ молекул X) состояниям соответствуют ВФ

$$\Psi_i = \varphi_p(\mathbf{r}) \prod_{j=1}^{n_X} \psi_{\mathbf{q}_j}^{(i)}(\mathbf{R}_j); \quad \Psi_f = \varphi_C(\mathbf{r}) \prod_{j=1}^{n_X} \psi_{\mathbf{q}_j}^{(f)}(\mathbf{R}_j).$$

Поэтому вместо (14) для скорости образования мезомолекул в присутствии молекул X получаем выражение

$$\begin{aligned} \lambda(\epsilon_p) &= NV_p^2 \sum_{\mathbf{q}_j \mathbf{q}'_j} 2\pi\delta \left[\Delta_p + \sum_{j=1}^{n_X} (\epsilon_{q_j} - \epsilon_{q'_j}) \right] \prod_{j=1}^{n_X} (w_{\mathbf{q}_j} |S_{\mathbf{q}'_j \mathbf{q}_j}|^2) = \\ &= NV_p^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\Delta_p t) \Phi(t), \end{aligned} \quad (16)$$

$$S_{\mathbf{q}'_j \mathbf{q}_j} = \int d^3 R_j [\psi_{\mathbf{q}'_j}^{(f)}(\mathbf{R}_j)]^* \psi_{\mathbf{q}_j}^{(i)}(\mathbf{R}_j), \quad \Phi(t) = [\varphi(t)]^{n_X}; \quad (17)$$

$$\varphi(t) = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} \exp[i(-\epsilon_{q''} + \epsilon_q) t] + S_{\mathbf{q}'' \mathbf{q}}|^2, \quad (18)$$

при выводе которого использована формула $2\pi\delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t)$.

Как видно из (17), $\Phi(t)$ разбивается на множители, соответствующие отдельным молекулам X, что является следствием независимости столкновений с различными молекулами X в случае (8).

Из (18) и свойства полноты $\sum_{\mathbf{q}'} |\mathbf{q}'\rangle \langle \mathbf{q}'| = \hat{\mathbf{1}}$ заключаем, что $\varphi(t=0) = 1$, что позволяет преобразовать $\varphi(t)$ и $\Phi(t)$:

$$\varphi(t) = 1 + \beta(t)/\Omega; \quad (19)$$

$$\beta(t) = \Omega \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} [e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} - 1] |S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2; \quad (20)$$

$$\Phi(t) = \exp(N_X \beta(t)), \quad N_X = n_X/\Omega. \quad (21)$$

Из (13) и (16) для формы резонанса с учетом столкновений получаем выражение

$$\begin{aligned} I(\varepsilon_p) &= (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i\Delta_p t + N_X \beta(t)] = \\ &= \pi^{-1} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} dt \exp[i\Delta_p t + N_X \beta(t)] \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Отметим, что при $N_X \rightarrow 0$ выражение (22) сводится к (14).

Для нахождения $\beta(t)$ представим $|\mathbf{q}\rangle$ и $|\mathbf{q}'\rangle$ в виде

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}) = \Omega^{-1/2} [\exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}) + \chi_{\mathbf{q}}(\mathbf{R})]. \quad (23)$$

В импульсном представлении (см. [16], § 130)

$$\chi_{\mathbf{q}}^{(i,f)}(\mathbf{p}) = 4\pi F_{i,f}(\mathbf{q}, \mathbf{p})/(p^2 - q^2 - i0); \quad (24)$$

$$F_{i,f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = -\frac{m_X}{2\pi} \int d^3 R e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}} U_{i,f}(\mathbf{R}) \sqrt{\Omega} \psi_{\mathbf{q}}^{(i,f)}(\mathbf{R}). \quad (25)$$

В частности, при $p = q$

$$F_{i,f}(q\hat{\mathbf{q}}, q\hat{\mathbf{p}}) = f_{i,f}(q, \hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}), \quad (26)$$

где f — амплитуда упругого рассеяния в направлении $\hat{\mathbf{p}}$; $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/p$; $\mathbf{q} = \mathbf{q}/q$.

После несложных преобразований из (23) — (26) получаем

$$S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} = \delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} + Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}/\Omega; \quad (27)$$

$$\left. \begin{aligned} Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} &= -(\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}/(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'} + i0); \\ \Delta U &= U_f - U_i, \quad (\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} = \Omega \langle \mathbf{q}' | \Delta U | \mathbf{q} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Как видно из (27) и (28), при вычислении $|S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2$ появляется неопределенность из-за обращения в нуль знаменателя в (28).

Раскрыть эту неопределенность помогает следующий прием. Из (20) следует

$$\dot{\beta}(t) \equiv \frac{d\beta(t)}{dt} = i\Omega \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} (\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2,$$

откуда, используя свойство полноты функций $|\mathbf{q}'\rangle$ и соотношение (27), получаем

$$\begin{aligned}\dot{\beta}(0) &= i\Omega \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_q (\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2 = \\ &= -i \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^* (\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} = -i \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} (\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{(i)},\end{aligned}$$

где

$$(\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{(i)} = \int d^3 R \psi_{\mathbf{q}}^{(i)*}(\mathbf{R}) \Delta U(\mathbf{R}) \psi_{\mathbf{q}}^{(i)}(\mathbf{R}).$$

Далее,

$$\begin{aligned}\dot{\beta}(t) &= \dot{\beta}(0) + \dot{\beta}(0) = \\ &= -i \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} (\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{(i)} + i\Omega \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} [e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} - 1] (\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |S_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2.\end{aligned}$$

Последнее выражение уже не содержит указанных неопределенностей. Учитывая (27), находим

$$\dot{\beta}(t) = -i \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} (\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{(i)} + \frac{i}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} \frac{e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} - 1}{\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}} |(\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2.$$

Интегрируя это выражение по dt и учитывая, что $\beta(t=0)=0$, получаем

$$\begin{aligned}\beta(t) &= -it \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} (\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{(i)} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} |(\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2 (\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})^{-2} \times \\ &\quad \times [e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} - 1 - i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t].\end{aligned}$$

Применяя еще раз (27) и свойство полноты функций $|\mathbf{q}'\rangle$, получаем окончательно

$$\begin{aligned}\beta(t) &= -it \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} \operatorname{Re}[(\Delta U)_{\mathbf{q}\mathbf{q}}] + \\ &+ \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} w_{\mathbf{q}} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}'}} \right) \frac{e^{i(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t} - 1}{\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}} |(\Delta U)_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}|^2.\end{aligned}\quad (29)$$

При $|t| \rightarrow \infty$ справедливо соотношение

$$\omega^{-2} [1 - \cos(\omega t)] \approx \pi |t| \delta(\omega),$$

поэтому, выделив возрастающие линейно по t при $|t| \rightarrow \infty$ члены, представим $N_x \beta(t)$ в виде

$$N_x \beta(t) = -iv''t - v' |t| + G(t); \quad (30)$$

$$\begin{aligned}v' &= N_x \langle v\sigma' \rangle = N_x \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} v\sigma'(q) = \\ &= N_x \int d^3 q f(m_x, \mathbf{q}) \sigma'(q) q/m_x;\end{aligned}\quad (31)$$

$$v'' = N_x \langle v\sigma'' \rangle = N_x \int d^3 q f(m_x, \mathbf{q}) \sigma''(q) q/m_x;$$

$$\begin{aligned}\sigma'(q) &= \frac{\pi}{q^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \cos 2(\delta_l^i - \delta_l^f)]; \\ \sigma''(q) &= \frac{\pi}{q^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin 2(\delta_l^i - \delta_l^f),\end{aligned}\quad (32)$$

где $\delta_l^{i,f}$ — парциальные фазы рассеяния молекул X на D₂ и C. Следуя ТУУ, величины v'' и v' будем называть соответственно частотами сдвига и уширения резонанса. Выражение для функции $G(t)$, не содержащей линейных по t членов, следует из сравнения (30) и (29) и для дальнейшего несущественно.

Анализ выражения (29), основанный на ВКБ-приближении для ВФ $\psi_q^{(i,f)}$, показывает, что линейный по t режим в (30) устанавливается при $|t| \gg \tau_c$:

$$N_x \beta(t) \approx -iv''t - v' |t|, \quad |t| \gg \tau_c. \quad (33)$$

Отсюда из соотношения $\beta(0) = 0$ следует, в частности, оценка, спра-ведливая для любого t :

$$N_x |\beta(t)| \sim v' |t|. \quad (34)$$

Для дальнейших приложений отметим, что частоту уширения v' нетрудно вычислить непосредственно из выражения (20). Действи-тельно, комбинация

$$[1 - \cos(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t] |S_{q'q}|^2 = \frac{1 - \cos(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})t}{\Omega^2 (\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})^2} |(\Delta U)_{q'q}|^2$$

не содержит указанных выше неопределенностей. При $|t| \rightarrow \infty$ она стремится к выражению

$$\frac{\pi |t|}{\Omega^2} \delta(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |(\Delta U)_{q'q}|^2,$$

откуда и из (20), (33) следует формула

$$v' = \frac{\pi N_x}{\Omega} \sum_{qq'} w_q \delta(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |(\Delta U)_{q'q}|^2,$$

которая приводится к (31), (32). Таким образом, частота уширения v' определяется выражением

$$\left. \begin{aligned} v' &= \frac{\pi N_x}{\Omega} \sum_{qq'} w_q \delta(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}) |L|^2; \\ L &= \lim_{\Delta\varepsilon \rightarrow 0} (\Delta\varepsilon S_{q'q}), \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon_q - \varepsilon_{q'}$.

Обсудим следствия из формулы (22). Основной вклад в $I(\varepsilon_p)$ дает характерное время осцилляции множителя $\exp(i\Delta_p t)$

$$t \sim t_0 = |\Delta_p|^{-1}. \quad (36)$$

Из (8), (36) и оценки $v' \sim v_c$ следует, что в области

$$|\Delta_p| \sim v', \quad (37)$$

которую далее будем называть резонансной, справедлива оценка

$$t_0 \sim (v')^{-1} \gg \tau_c, \quad (38)$$

поэтому применимо асимптотическое выражение (33), из которого и из (22) следует

$$I(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_\varphi}{\Delta_p^2 + \Gamma_\varphi^2/4}, \quad \Gamma_\varphi = 2v', \quad (39)$$

т. е. выражение, использованное Ю. В. Петровым [8].

Эта формула легко может быть получена, если для функций χ с самого начала использовать их асимптотические выражения при $R \rightarrow \infty$, т. е. при большом расстоянии между X и D_2 :

$$\chi_q^{(i,f)}(R) \rightarrow R^{-1} f_{i,f}(\hat{R}) \exp(iqR).$$

Другими словами, в резонансной области (37) образование мезомолекул происходит в парных столкновениях, когда характерное расстояние между $t\mu$ и D_2 мало по сравнению с расстоянием между D_2 и X , т. е. в момент образования $dt\mu$ взаимодействием между D_2 и X можно пренебречь.

Аналогичный вывод следует из (38).

В области

$$|\Delta_p| \gg v', \quad (40)$$

которую, следуя работе [7], будем называть квазирезонансной, согласно (35) имеем

$$t_0 v' \sim v'/|\Delta_p| \ll 1,$$

поэтому из (34) заключаем:

$$N_X |\beta(t)| \ll 1,$$

что позволяет произвести в (22) разложение по степеням $N_X \beta$. Учитывая определение (20), получаем выражение для $\lambda(\varepsilon_p)$ в квазирезонансной области (40):

$$\begin{aligned} \lambda(\varepsilon_p) &= N N_X V_p^2 \times \\ &\times \sum_{q'q} w_q 2\pi \delta(-\Delta_p + \varepsilon_{q'} - \varepsilon_q) |S_{q'q}|^2, \end{aligned} \quad (41)$$

т.е. в этой области мезомолекулы образуются в результате трехчастичных реакций (4) по квазирезонансному механизму [7], при этом в момент образования комплекса взаимодействие между D_2 и X значительно.

В разд. 5 показано, что условно можно выделить еще третью область — вакуумную, которая соответствует дальним крыльям резонанса.

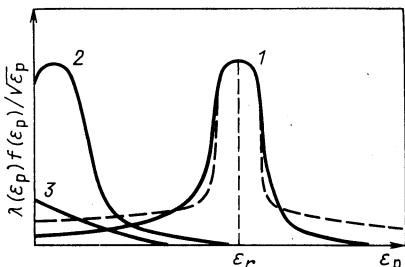


Рис. 3. Качественная зависимость подынтегрального выражения в формуле (12) от энергии столкновения ε_p при различных значениях резонансной энергии ε_r :
пунктирная линия — феноменологическая теория Ю. В. Петрова [8].

Обращаясь к формуле (12) для скорости образования мезомолекул, видим, что в зависимости от величины ε_r возможны три случая (рис. 3):

$$1) \quad \varepsilon_r \geq \Gamma/2; \quad 2) \quad |\varepsilon_r| \leq \Gamma/2; \quad 3) \quad \varepsilon_r \leq -\Gamma/2$$

(при учете конечности Γ_V появляются еще два случая — см. разд. 5).
В первом случае имеем

$$\begin{aligned} \lambda^{(1)} &= \lambda_r + \lambda_{qr}; \\ \lambda_{qr} &= \int_{|\Delta p| \geq \Gamma/2} f(\varepsilon_p) \lambda(\varepsilon_p) d\varepsilon_p; \\ \lambda_r &= \lambda_r(\varepsilon_r) = \int_{|\Delta p| \leq \Gamma/2} f(\varepsilon_p) \lambda(\varepsilon_p) d\varepsilon_p \approx \\ &\approx 2\pi N V_{p_r}^2 f(\varepsilon_r) = \lambda_{\text{Весм}} \propto \exp(-\varepsilon_r/T), \end{aligned} \quad (42)$$

где $\lambda_{\text{Весм}}$ — скорость образования мезомолекул в приближении Весмана [2]. Из (41) нетрудно установить характер температурной зависимости $\lambda_{qr}(T)$:

$$\begin{aligned} \lambda_{qr}(T) &\propto \int d\varepsilon_q d\varepsilon_{q'} d\varepsilon_p \exp[-(\varepsilon_p + \varepsilon_q)/T] \delta(\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_r - \varepsilon_{q'}) \times \\ &\times |S_{q'q}|^2 = \exp(-\varepsilon_r/T) \int d\varepsilon_q d\varepsilon_{q'} d\varepsilon_p \exp(-\varepsilon_{q'}/T) \delta(\varepsilon_p + \varepsilon_q - \varepsilon_r - \varepsilon_{q'}) |S_{q'q}|^2, \end{aligned} \quad (43)$$

т. е. вклад λ_{qr} в наблюдаемую скорость образования мезомолекул λ , происходящий от «крыльев» резонанса, содержит аррениусовский множитель $\exp(-\varepsilon_r/T)$. Оценим отношение λ_{qr}/λ_r . Согласно [7] [ср. с формулой (41)]

$$\lambda_{qr} \approx N_X \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} d\varepsilon_{q'} f(m_X, q) |S_{q'q}|^2 \lambda_r(\varepsilon_p + \varepsilon_{q'} - \varepsilon_q),$$

откуда получаем оценку, справедливую при любой температуре смеси:

$$\lambda_{qr}/\lambda_r \sim N_X q^3 |S_{q'q}|^2 \sim \frac{N_X R_0^2}{\eta} \sim \frac{\Phi}{\pi R_0} \sim 0,2\varphi \ll 1, \quad (44)$$

где параметры η и R_0 определяются формулой (79). Использована оценка для интеграла перекрытия [7]

$$|S_{q'q}|^2 \sim R_0^2/(\eta q^3).$$

Окончательно получаем

$$\lambda^{(1)} \approx \lambda_r \approx \lambda_{\text{Весм}}. \quad (45)$$

В работе [8] утверждается, что λ_{qr} не содержит аррениусовского множителя, и поэтому при низких температурах $\lambda_{qr}/\lambda_r \gg 1$. Это утверждение, однако, основано на предположении о лоренцевой форме резонанса (39) при любых ε_p , что, как мы видели, неправильно при $\Gamma_\varphi \geq \Gamma_v$ ($\varphi \geq 0,1$). Аналогичное явление хорошо известно в оптике, когда при ударном механизме уширения спектральные линии имеют сложную форму.

Аналогично, пренебрегая вкладом от крыльев резонанса, получаем выражение для скоростей λ во втором и третьем случаях, т. е. при $|\varepsilon_r| \leq \Gamma/2$ и $\varepsilon_r \leq -\Gamma/2$:

$$\lambda^{(2)} = \int_0^\infty d\varepsilon_p f(\varepsilon_p) \frac{N \Gamma V_p^2}{\Delta_p^2 + \Gamma^2/4}; \quad \lambda^{(3)} = \lambda_{qr}. \quad (46)$$

В третьем случае ($\varepsilon_r \leq -\Gamma/2$) образование комплексов по механизму Весмана [2] невозможно ($\lambda_r = 0$).

3. БЕССТРУКТУРНАЯ МОЛЕКУЛА С КОНЕЧНОЙ МАССОЙ. ЭФФЕКТ ПЕРЕДАЧИ ИМПУЛЬСА

В этом разделе учитывается движение D_2 и C . Участвующие в реакции частицы ($t\mu$, D_2 , C и X) по-прежнему считаем бесструктурными.

Ключевым моментом расчета является утверждение о том, что в газовом пределе (8) столкновения происходят случайным образом, поэтому формулы вида (16) и (21), являющиеся следствием факторизуемости функции $\Phi(t)$ [см. формулу (17)], справедливы не только для рассмотренной в разд. 2 модели с неподвижными D_2 и C , но и в общем случае для движущихся D_2 и C . Это утверждение доказывается в приложении 1 для модели с неподвижными молекулами X и движущимися D_2 и C , т.е. для предельного случая, противоположного рассмотренному в разд. 2.

Факторизуемость $\Phi(t)$ позволяет найти функцию $\beta(t)$ из рассмотрения более простого случая $n_X = 1$ одной молекулы X в объеме Ω (аналогичный метод использован в [18]). При $n_X = 1$ из (21) полу-

чаем

$$\Phi(t) = \exp(\beta/\Omega) \approx 1 + \beta/\Omega. \quad (47)$$

Сначала рассмотрим случай $n_{D_2} = 1$.

ВФ начального ($t\mu + D_2 + X$) и конечного ($C + X$) состояний имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \psi_i &= \Omega^{-1} \exp[i p_t r_t + i(p_d + p_X) R_{Xd}] \psi_q(R_i); \\ \psi_f &= \Omega^{-1/2} \exp[i(p_C + p_X) R_{XC}] \psi_{q'}(R_f) \varphi_C(r_{td}), \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

где p_a и r_a ($a = t, d, C, X; t \equiv t\mu; d \equiv D_2$) — импульсы частиц в лабораторной системе и их координаты; координаты Якоби системы

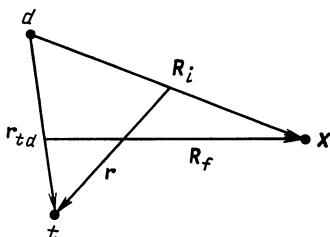


Рис. 4. Координаты Якоби реакции $t\mu + D_2 + X \rightarrow C + X$ в модели с бесструктурными $t\mu$ и D_2 (обозначены через t и d соответственно)

(R_i , R_f и др.) изображены на рис. 4; q и q' — импульсы относительного движения системы $D_2 + X$ и $C + X$ соответственно; $R_{Xd} = (m_d r_d + m_X r_X)/(m_d + m_X)$;

$$R_{XC} = (m_t r_t + m_d r_d + m_X r_X)/(m_d + m_t + m_X);$$

$$q = (m_d p_X - m_X p_d)/(m_X + m_d);$$

$$q' = (m_C p'_X - m_X p_C)/(m_X + m_C).$$

Из рис. 2 заключаем

$$R_i = R_f + \frac{m_t}{m_C} r_{td}; \quad r = r_{td} - \gamma R; \quad \gamma = m_X/(m_d + m_X). \quad (49)$$

Скорость образования мезомолекул из мезоатомов, движущихся с импульсом p_t (в л.с.) в газе, равна:

$$\lambda(p_t) = \sum_{p_d p_X p_C p'_X} w_d w_X \cdot 2\pi \delta(\varepsilon_t + \varepsilon_d + \varepsilon_X - \varepsilon_r - \varepsilon_C - \varepsilon_{X'}) |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2; \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V} | i \rangle &= \int d^3 r_t d^3 r_d d^3 r_X V(r_{td}) \times \\ &\times \psi_i(r_t, r_d, r_X) \varphi_C(r_{td}) \psi_f^*(R_{XC}, R_f), \end{aligned} \quad (51)$$

где $\varepsilon_a = p_a^2/(2m_a)$ и проведено суммирование по молекулам D_2 , давшее множитель N .

Для модели бесструктурного комплекса $r_{td} \sim \kappa^{-1} \sim 0,1$ а.е. [15], где κ^{-1} — характерный размер мезомолекулы, с большим запа-

сом выполняется соотношение

$$p_t r_{td} \ll 1, \quad (52)$$

поэтому формулы (49) — (51) упрощаются:

$$\mathbf{R}_i \approx \mathbf{R}_f \equiv \mathbf{R}; \quad \mathbf{r} \approx -\gamma \mathbf{R}; \quad \mathbf{r}_d \approx \mathbf{r}_t \equiv \mathbf{p}; \quad (53)$$

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle \approx \frac{V_p}{\sqrt{\Omega}} \int d^3 p d^3 r_X \varphi_i(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \exp(i \mathbf{p}_t \mathbf{p}) \varphi_f^*(\mathbf{p}, \mathbf{R}); \quad (54)$$

$$V_p = \int d^3 r_{td} V_{td}(\mathbf{r}_{td}) \varphi_C(\mathbf{r}_{td});$$

$$\mathbf{p} = (m_d \mathbf{p}_t - m_t \mathbf{p}_d)/m_C;$$

$$\varphi_i(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Omega^{-1/2} \exp[i(\mathbf{p}_X + \mathbf{p}_d) \mathbf{R}_{Xd}] \psi_q(\mathbf{R}) \equiv |\mathbf{p}_X, \mathbf{p}_d\rangle; \quad (55)$$

$$\varphi_f(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \Omega^{-1/2} \exp[i(\mathbf{p}_C + \mathbf{p}'_X) \mathbf{R}_{XC}] \psi_{q'}(\mathbf{R}) \equiv |\mathbf{p}'_X, \mathbf{p}_C\rangle;$$

$$\mathbf{R}_{Xd} = (m_d \mathbf{p} + m_X \mathbf{r}_X)/(m_d + m_X);$$

$$\mathbf{R}_{XC} = (m_C \mathbf{p} + m_X \mathbf{r}_X)/(m_C + m_X); \quad \mathbf{R} = \mathbf{r}_X - \mathbf{p}.$$

Из (57) и (58) получаем

$$|\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 = \Omega^{-1} V_p^2 |\langle \mathbf{p}'_X \mathbf{p}_C | \exp(i \mathbf{p}_t \mathbf{p}) | \mathbf{p}_X \mathbf{p}_d \rangle|^2; \quad (56)$$

$$\langle \mathbf{p}'_X \mathbf{p}_C | \exp(i \mathbf{p}_t \mathbf{p}) | \mathbf{p}_X \mathbf{p}_d \rangle = \delta_{\mathbf{p}_t + \mathbf{p}_d + \mathbf{p}_X, \mathbf{p}_C + \mathbf{p}'_X} [\exp(-i \gamma S \mathbf{R})]_{q'q}; \quad (57)$$

$$(e^{-i \gamma S \mathbf{R}})_{q'q} = \int d^3 R \psi_{q'}^*(\mathbf{R}) \exp(-i \gamma S \mathbf{R}) \psi_q(\mathbf{R}); \quad (58)$$

$$S = [(m_d + m_X) \mathbf{p}_t - m_t (\mathbf{p}_d + \mathbf{p}_X)]/(m_C + m_X) \quad (59)$$

импульс $t\mu$ -атома относительно ц.м. системы $D_2 + X$.

Если между D_2 и X , C и X нет взаимодействия ($U_i = U_f = 0$), то, очевидно, импульсы сохраняются:

$$\mathbf{p}_X = \mathbf{p}'_X; \quad \mathbf{p}_C = \mathbf{Q}, \quad (60)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_d + \mathbf{p}_t$.

Этот предельный случай соответствует $\beta(t) = 0$, $\Phi(t) = 1$, т.е. отсутствию столкновений. Учитывая это обстоятельство, для нахождения $\beta(t)$ переписываем $\lambda(\mathbf{p}_t)$ в виде

$$\lambda(\mathbf{p}_t) = \Omega^{-1} N \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{\mathbf{p}_d} w_d V_p^2 \exp[i t (-\varepsilon_r + \varepsilon_t + \varepsilon_d - \varepsilon_{\mathbf{p}_t + \mathbf{p}_d}^C)] \Phi(t); \quad (61)$$

$$\Phi(t) = \sum_{\mathbf{p}_X \mathbf{p}'_X \mathbf{p}_C} w_X \exp(i t \Delta \varepsilon) |\langle \mathbf{p}'_X \mathbf{p}_C | \exp(i \mathbf{p}_t \mathbf{p}) | \mathbf{p}_X \mathbf{p}_d \rangle|^2; \quad (62)$$

$$\Delta \varepsilon = -\varepsilon_X + \varepsilon_X + \varepsilon_{\mathbf{p}_d + \mathbf{p}_t}^C + \varepsilon_{\mathbf{p}_t}^C = [-\mathbf{q}'^2 + (\mathbf{q} - \gamma S)^2]/(2 \mu_{XC}); \quad (63)$$

$\mu_{XC}^{-1} = m_C^{-1} + m_X^{-1}$. При преобразовании (63) использовано сохранение полного импульса $\mathbf{p}_d + \mathbf{p}_t + \mathbf{p}_X = \mathbf{p}_C + \mathbf{p}'_X$.

Множитель $\Phi(t)$ однозначным образом определяется из (61). Действительно, при выполнении условий (60) справедливо соотно-

шение

$$\mathbf{q}' = \mathbf{q} - \gamma \mathbf{S}, \quad (64)$$

поэтому $\Phi(t) = 1$, что соответствует отсутствию столкновений.

Из полноты системы функций $|p_X p_C\rangle$ и выражения (62) следует, что $\Phi(t=0) = 1$, поэтому, как и в разд. 2, представим $\Phi(t)$ в виде (47), откуда и из (57) получаем

$$\beta(t) = \Omega \sum_{\mathbf{p}_X \mathbf{q}'} w_X (e^{it\Delta\varepsilon} - 1) |(e^{-i\gamma S_R})_{\mathbf{q}' \mathbf{q}}|^2. \quad (65)$$

Из (23) и (24) следует

$$(e^{-i\gamma S_R})_{\mathbf{q}' \mathbf{q}} = \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q} - \gamma \mathbf{S}} + Q_{\mathbf{q}' \mathbf{q}} / \Omega; \quad (66)$$

$$Q_{\mathbf{q}' \mathbf{q}} = \frac{4\pi F_i(\mathbf{q}, \mathbf{q}' + \gamma \mathbf{S})}{q^2 - (\mathbf{q}' + \gamma \mathbf{S})^2 + i0} + \frac{4\pi F_f^*(\mathbf{q}', \mathbf{q} - \gamma \mathbf{S})}{q'^2 - (\mathbf{q} - \gamma \mathbf{S})^2 + i0} + \tilde{Q}_{\mathbf{q}' \mathbf{q}}, \quad (67)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\mathbf{q}' \mathbf{q}} &= 2\pi^{-1} \int d^3 q_1 D^{-1} F_f^*(\mathbf{q}', \mathbf{q}_1) F_i(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1 + \gamma \mathbf{S}) \times \\ &\times [1/(q'^2 - q_1^2 - i0) - 1/(q^2 - (q_1 + \gamma \mathbf{S})^2 + i0)]; \\ D &= q^2 - q'^2 + q_1^2 - (q_1 + \gamma \mathbf{S})^2 + i0. \end{aligned}$$

Отметим разницу между выражениями (20) и (65), которая возникает из-за эффекта передачи импульса $t\mu$ -атома образующемуся комплексу.

Как и в разд. 2, при возведении $S_{\mathbf{q}' \mathbf{q}}$ в квадрат возникают неопределенности, которые в данном случае нам раскрыть не удалось.

В данном разделе ограничимся анализом реакций в резонансной (см. разд. 6) области (квазирезонансные реакции рассмотрены в [7]), которые описываются асимптотическим выражением (33). Из-за быстрых осцилляций синуса в выражении (32) сдвиг резонансов оказывается малым, и поэтому далее им пренебрегаем:

$$|v''| \sim v'/l_0 \sim 10^{-4} \varphi,$$

где v'' — в электрон-вольтах; $l_0 \sim \sqrt{3\mu_{XC}T} R_0 \gg 10$ — характерный орбитальный момент относительного движения С и Х; размер R_0 определен ниже. Аналогично формуле (35), выделяя линейно растущие при $|t| \rightarrow \infty$ члены (которые не содержат неопределенностей), получаем

$$\begin{aligned} v' \equiv v'(Q) &= \Omega N_X \sum_{\mathbf{p}_X \mathbf{q}'} w_X \pi \delta(\Delta\varepsilon) |L|^2 = \\ &= \frac{1}{2} N_X \sum_{\mathbf{p}_X} w_X \frac{q_{XC}}{\mu_{XC}} \sigma_C(q_{XC}) = \frac{1}{2} N_X \int d^3 p_X f(m_X, \mathbf{p}_X) \frac{q_{XC}}{\mu_{XC}} \sigma_C(q_{XC}), \end{aligned} \quad (68)$$

где

$$L = \lim_{\Delta\varepsilon \rightarrow \infty} [\Delta\varepsilon (e^{-i\gamma S_R})_{\mathbf{q}' \mathbf{q}}] = -\frac{2\pi}{\mu_{XC}} F_f^{**}(q_{XC} \hat{\mathbf{q}'}, \mathbf{q}_{XC}); \quad (69)$$

$$\mathbf{q}_{XC} = \mathbf{q} - \gamma \mathbf{S} = (m_C \mathbf{p}_X - m_X \mathbf{Q}) / (m_C + m_X)$$

— импульс относительного движения $X + C$ (при импульсе комплекса, равном Q); $\sigma_C(q_{XC})$ — полное сечение рассеяния $X + C$. При выводе формулы (68) учтено соотношение

$$\int d\Omega_{\hat{q}} |F_f(q_{XC}\hat{\mathbf{q}}, \mathbf{q}_{XC})|^2 = \sigma_C(q_{XC}) = \\ = \frac{4\pi}{q_{XC}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l^f(q_{XC}).$$

Таким образом, столкновительная ширина резонанса $\Gamma_\phi = 2v'$ определяется только столкновениями $C + X$ и не зависит от фаз δ_l^i , т.е. от характера движения молекулы D_2 , что объясняется эффектом передачи импульса мезоатома образующемуся комплексу. Это становится ясным из следующих качественных соображений. При $S = 0$ из выражения (67), как и в разд. 2, получаем формулы (31), (32) для частоты уширения v' . Таким образом, необходимо выяснить, при каких условиях в выражении (67) можно пренебречь импульсом S . Очевидно, основной вклад в интеграл по d^3q_1 в (67) дают $q_1 \sim q \sim \sim q' \sim q_T \equiv \sqrt{2\mu_{XC}T}$. Для учета конечности времени жизни комплекса во всех выражениях следует произвести замену $\epsilon_q^C \rightarrow \epsilon_q^C - i\Gamma_V/2$, т.е. в формуле (67) $i0 \rightarrow i\mu_{XC}\Gamma_V$.

Такая замена объясняется тем, что реально необходимо рассматривать процесс, изображенный на рис. 1. При

$$\left. \begin{array}{l} S \ll \mu_{XC}\Gamma_V/(qv) \sim \mu_{XC}\Gamma_V/(q_T v) \\ D \approx q^2 - q'^2 + i\mu_{XC}\Gamma_V, \end{array} \right\} \quad (70)$$

поэтому множитель D^{-1} выносится из-под знака интеграла в (67), и получаем выражения (31), (32). Из (70) и оценки $S \sim q_T$ заключаем, что выражение (68) справедливо при условии

$$T \geq \gamma\Gamma_V, \quad (71)$$

определяющем температурную область, в которой существует эффект передачи импульса [погрешность формулы (68), таким образом, порядка $\sim \gamma\Gamma_V/T$; для $dt\mu \Gamma_V \approx 9$ К, для $dd\mu \Gamma_V \approx 0,01$ К].

Другими словами, при $S \geq \mu_{XC}\Gamma_V/(\gamma q_T)$ отдача, испытываемая молекулой при «захвате» мезоатома, столь значительна, что происходит своеобразное «забывание» начального состояния, если реакция происходит в резонансной области. В оптике этот эффект несуществен из-за малости импульса фотона в реакции (7).

Оценим частоту уширения v' . Потенциальная энергия взаимодействия между молекулами изотопов водорода равна [17]:

$$U(R) \approx U_0 \exp(-2\eta R), \quad U_0 = 250 \text{ эВ}, \quad \eta = 0,85 \text{ а.е.}, \quad (72)$$

откуда с логарифмической точностью получаем

$$\sigma_C \approx 2\pi R_0^2; \quad U(R_0) = T; \quad R_0 = \Lambda_T/(2n); \quad (73)$$

$$\Lambda_T = \ln(U_0/T);$$

$$v' \approx N_X \sqrt{\frac{3T}{\mu_{XC}}} \pi R_0^2 \approx 3 \cdot 10^{-4} \Phi \sqrt{T} \Lambda_T^2, \quad (74)$$

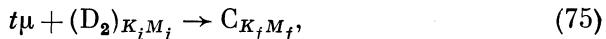
где v' и T — эВ.

Отметим, что мы не учитывали в $U(R)$ ван-дер-ваальсово взаимодействие, которое существенно изменяет сечение (73) лишь при $T \ll 5$ К.

В заключение данного раздела отметим, что вывод о независимости v' от столкновений $X + D_2$ был получен нами также из рассмотрения точно решаемой модели, в которой молекулы считались неподвижными, а комплекс С не взаимодействует с ними. Как и везде в данной работе, в указанной модели столкновения $D_2 + X$ рассматриваются в газовом приближении (8). Из-за недостатка места мы не приводили здесь громоздкий расчет для этой модели.

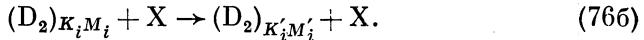
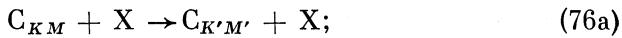
4. УЧЕТ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛЫ И КОМПЛЕКСА

В реальном случае следует учитывать вращательную структуру уровней молекулы и комплекса:



поэтому имеется целый набор резонансов (K_i, K_f) с резонансными энергиями ϵ_r (K_i, K_f) (в дальнейшем для краткости будем писать K, M вместо K_f, M_f).

В столкновениях с молекулами X происходят переходы



Согласно результатам предыдущего раздела ширина резонансов определяется только столкновениями комплекса (76a), поэтому естественно рассмотреть модель со следующими свойствами:

- 1) комплекс С имеет вращательную структуру;
- 2) молекула D_2 бесструктурная;
- 3) D_2 и С неподвижны ($m_d = \infty$);
- 4) молекулы X взаимодействуют только с комплексом С;
- 5) молекулы X движутся по классическим траекториям.

Приближения 2—4 оправданы эффектом передачи импульса, а приближение 5 справедливо для процессов в резонансной области $|\epsilon_p - \epsilon_r| \sim \Gamma_\phi \ll \epsilon_p$, рассмотрением которых ограничимся в данном разделе.

Рассмотрим реакцию (1), (2a), (2b) на основе модели Фано [14] [канал (2б) пока не учитываем].

Вращательным состояниям ($K, M \equiv a$) комплекса соответствует набор ВФ φ_a . Имеются также два континуума: $\varphi_p(r)$ [реакция (2а)] и $\varphi_q(R)$ [реакция (2в)], где p, r и q, R — импульсы и координаты соответственно $t\mu$ -атома и α -частицы (относительно нейтрона).

ВФ системы $t\mu + D_2$ согласно модели Фано может быть символически представлена в виде

$$\Psi_p = \int a_{p'} \varphi_{p'} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} + \int C_q \varphi_q \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} + \sum_a b_a \varphi_a. \quad (77)$$

Амплитуды вероятности $a_{p'}(t)$, $C_q(t)$ и $b_a(t)$ удовлетворяют уравнениям [14]

$$i\dot{a}_{p'}(t) = \varepsilon_{p'} a_{p'} + \sum_a V_{ap'} b_a; \quad (78a)$$

$$i\dot{C}_q(t) = E_q C_q + \sum_a V_{aq} b_a; \quad (78b)$$

$$i\dot{b}_a(t) = \varepsilon_a b_a + \sum_{a'} \kappa_{aa'}(t) b_{a'} + J_a^{(a)}(t) + J_a^{(c)}(t); \quad (78c)$$

$$J_a^{(a)}(t) = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} V_{ap'}^* a_{p'}; \quad J_a^{(c)} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V_{aq}^* C_q,$$

где $V_{ap'}$ и V_{aq} — матричные элементы, связывающие состояния комплекса φ_a с континуумами $\varphi_{p'}$ и φ_q ; $E_q = q^2/(2M)$; M — приведенная масса α -частицы и нейтрона. Коэффициенты $\kappa_{aa'}(t)$ аналогично ТУУ [13] описывают взаимодействие комплекса с молекулами X в процессах (76а). В газовом приближении (8) в резонансной области можно положить (см. по этому поводу следующий раздел)

$$\kappa_{aa'}(t) \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\eta_n)_{aa'} \delta(t - t_n), \quad (79)$$

где t_n — моменты столкновений; $(\eta_n)_{aa'}$ — матрицы, описывающие вращательные переходы (76а) (конкретный вид этих матриц нам не понадобится).

Начальное условие к уравнениям (78а) — (78в) выбираем в виде

$$a_{p'}(0) = (2\pi)^3 \delta(p' - p); \quad C_q(0) = b_a(0) = 0,$$

тогда при $t \rightarrow +\infty$ устанавливается стационарное решение, соответствующее правильному граничному условию

$$\Psi_p \rightarrow \exp(ipr), \quad r \rightarrow \infty.$$

Требуется вычислить амплитуды при $t > 0$, поэтому можно положить при $t < 0$ $a_{p'} = C_q = b_a = 0$. Применяя к (78а) фурье-пре-

образование, получаем

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}'}(\omega) &= \left[i(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) + \sum_a V_{a\mathbf{p}'} b_a(\omega) \right] / (\omega + i0 - \varepsilon_{\mathbf{p}'}) ; \\ J_a^{(e)}(t) &= e^{-i\varepsilon_{\mathbf{p}} t} V_{a\mathbf{p}}^* + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \sum_{a'} \Delta_{aa'}(\omega) b_{a'}(\omega) \approx \\ &\approx \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{p}} t) V_{a\mathbf{p}}^* + \Delta_{aa}^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) b_a(t); \end{aligned} \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{aa}^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) &= \Delta\varepsilon_K^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) - i\Gamma_K^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}})/2; \\ \Delta\varepsilon_K^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) &= \mathcal{P} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} V_{Kp'}^2 / (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'}) ; \end{aligned}$$

$$\Gamma_K^{(e)}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} 2\pi \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'}) V_{Kp'}^2 = \mu p V_{Kp}^2 / \pi, \quad (81)$$

где

$$V_{Kp}^2 = (2K+1)^{-1} \sum_M |V_{a\mathbf{p}}|^2; \quad (82)$$

μ — приведенная масса $t\mu + D_2$ ($\mu \rightarrow m_t$ при $m_d \rightarrow \infty$). При выводе соотношения (80) учтено, что собственно энергетическая часть

$$\Delta_{aa'}^{(e)}(\omega) = \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{V_{a\mathbf{p}}^* V_{a'\mathbf{p}'}^*}{\omega + i0 - \varepsilon_{\mathbf{p}'}} ,$$

соответствующая упругому распаду комплекса (2а), при изменении ω изменяется медленно по сравнению с функциями $b_a(\omega)$, представляющими собой резкий резонанс с шириной $\sim \Gamma$ (см. ниже). Учтено также, что упругий распад не приводит к перекрытию соседних резонансов

$$\Gamma_e \sim 1K \ll |\varepsilon_K - \varepsilon_{K'}| \geq 40K. \quad (83)$$

Этот вывод остается справедливым и при учете реакций (2б) и (2в), так как для $dt\mu$ - и $dd\mu$ -молекул ширины Γ_v малы.

Аналогичным образом преобразуется выражение для $J_a^{(e)}(t)$.

Уравнение (78в) принимает вид

$$i\dot{b}_a(t) = \tilde{\varepsilon}_K b_a + \sum_{a'} \kappa_{aa'} b_{a'} + e^{-i\varepsilon_{\mathbf{p}} t} V_{a\mathbf{p}}^*, \quad (84)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_K &= \bar{\varepsilon}_K - i\Gamma_K^{(V)}/2; \quad \Gamma_K^{(V)} = \Gamma_K^{(e)} + \lambda_{ef}; \\ \bar{\varepsilon}_K &= \varepsilon_K + \Delta\varepsilon_K^{(e)} + \Delta\varepsilon_K^{(f)} + \Delta\varepsilon_K^{(d)}; \\ \Delta\varepsilon_K^{(f)} &= \mathcal{P} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} V_q^2 (E_f - E_q); \quad \lambda_{ef} = \lambda_{dex} + \lambda_f; \\ V_q^2 &= (2K+1)^{-1} \sum_M |V_{a\mathbf{q}}|^2; \\ \lambda_f &= \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} 2\pi \delta(E_q - E_f) V_q^2 = Mq V_q^2 / \pi \end{aligned} \quad (85)$$

— скорость ядерной реакции (2в); E_f — ее энергетический выход.

Введением в уравнение (84) скорости девозбуждения λ_{dex} и поправки $\Delta e_K^{(d)}$, обусловленной конечным размером мезомолекулы, очевидным образом учтен канал девозбуждения (26).

Из (786) получаем

$$C_q(\omega) = \sum_a V_{aq} b_a(\omega) / (\omega + i0 - E_q),$$

откуда и из (77) следует, что при $R \rightarrow \infty$

$$\psi_p \rightarrow \sum_a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) b_a(\omega) J(R);$$

$$J(R) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{V_{aq} \exp(iqR)}{\omega + i0 - E_q} \rightarrow -V_{aq} M \exp(iq_\omega R) \theta(\omega) / (2\pi R),$$

где здесь и далее $q = q_\omega \hat{R}$; $\hat{R} = R/R$; $q_\omega = \sqrt{2M\omega}$. Следовательно,

$$\psi_p(R, t) \rightarrow -\frac{M}{4\pi^2 R} \int_0^\infty d\omega \exp(-i\omega t + iq_\omega R) \sum_a V_{aq} b_a(\omega). \quad (86)$$

Плотность тока α -частиц равна:

$$\mathbf{j}(R, t) = \frac{i}{2M} [(\nabla_{R'} - \nabla_R) \rho(R, R', t)]_{R'=R},$$

где

$$\rho(R, R', t) = \langle \psi_p(R, t) \psi_p^*(R', t) \rangle \quad (87)$$

— матрица плотности α -частиц.

Угловыми скобками в (87) обозначено усреднение по столкновениям, т.е. по прицельному параметру и скорости столкновения (более подробно эта операция поясняется ниже).

Из (86) и (87) получаем

$$\begin{aligned} \rho(R, R', t) &= \left(\frac{M}{4\pi^2} \right)^2 \frac{1}{RR'} \int_0^\infty \int d\omega d\omega' e^{i(\omega' - \omega)t} \times \\ &\times \exp(iq_\omega R - iq_{\omega'} R') \sum_{aa'} V_{aq} V_{a'q'}^* \langle b_a(\omega) b_{a'}^*(\omega') \rangle. \end{aligned} \quad (88)$$

Корреляционная функция

$$\langle b_a(t) b_{a'}^*(t') \rangle \equiv B_{aa'}(t - t') \quad (89)$$

зависит только от разности $t - t'$, поэтому

$$\langle b_a(\omega) b_{a'}^*(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega - \omega') B_{aa'}(\omega),$$

что упрощает выражение (88):

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = M^2 (8\pi^3 R R')^{-1} \int_0^\infty d\omega \exp[iq_\omega(R - R')] \times \\ \times \sum_{a'a} V_{a\mathbf{q}} V_{a'\mathbf{q}}^* B_{aa'}(\omega). \quad (90)$$

Из вида матрицы плотности (90) заключаем, что $\omega = E_q$, $q_\omega = q$ (энергия и импульс относительного движения $\alpha + n$).

Вычисляя полный ток α -частиц и деля его на плотность потока p/μ падающих мезоатомов, получаем следующее выражение для дифференциального сечения ядерной реакции:

$$\frac{d\sigma_f}{dE_q} = \frac{\mu M q}{2\pi^2 p} \sum_{aa'} \langle V_{a\mathbf{q}} V_{a'\mathbf{q}}^* \rangle_{\hat{\mathbf{q}}} B_{aa'}(E_q), \quad (91)$$

где проведено усреднение по направлениям $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$. Такое усреднение эквивалентно усреднению по направлению оси квантования момента вращения комплекса:

$$\langle V_{KM\mathbf{q}} V_{K'M'\mathbf{q}}^* \rangle_{\hat{\mathbf{q}}} = \int \frac{d\Omega}{8\pi^2} V_{KM\mathbf{q}}(\Omega) V_{K'M'\mathbf{q}}^*(\Omega) = \delta_{KK'} \delta_{MM'} V_q^2, \quad (92)$$

где $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ — углы Эйлера, определяющие ориентацию системы координат, в которой заданы угловые функции комплекса; $d\Omega = \sin \beta d\beta d\alpha d\gamma$; матричный элемент V_q^2 определен формулой (85). При вычислениях в (92) использованы формула

$$V_{KM\mathbf{q}}(\Omega) = \sum_{M'} D_{M'M}^{(K)}(\Omega) V_{K'M'\mathbf{q}}(0),$$

где $V_{KM\mathbf{q}}(0)$ — матричные элементы в некоторой фиксированной системе координат, и условие ортогональности матриц Вигнера

$$\int \frac{d\Omega}{8\pi^2} D_{M_1 M_2}^{(K)*}(\Omega) D_{M'_1 M'_2}^{(K')}(\Omega) = (2K+1)^{-1} \delta_{KK'} \delta_{M_1 M'_1} \delta_{M_2 M'_2}.$$

Из (91), (92) и (85) получаем

$$\frac{d\sigma_f}{dE_q} = \frac{m \lambda_f}{2\pi p} \sum_K (2K+1) B_K(E_q); \quad (93)$$

$$B_K(E_q) = (2K+1)^{-1} \sum_M B_{KM, KM}(E_q), \quad (94)$$

а также выражение для полного сечения ядерной реакции

$$\sigma_f(\varepsilon_p) = \int_0^\infty dE_q \frac{d\sigma_f}{dF_q} = \frac{\mu \lambda_f}{2\pi p} \sum_K (2K+1) B_K(\tau=0), \quad (95)$$

где $\tau = 0$ означает, что корреляционная функция вычисляется при $t = t'$, $\varepsilon_p = p^2/(2\mu)$.

При $t \gg \Gamma_V^{-1}$ решение уравнения (84) определяется его неоднородным членом и имеет вид

$$\beta_a(t) = -ie^{-i\epsilon_p t} \int_0^\infty d\tau e^{i\epsilon_p \tau} \sum_{a'} S_{aa'}(t, t-\tau) V_{a'p}^*, \quad (96)$$

где матрица $S_{aa'}(t, t')$ удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial S_{aa'}(t, t')}{\partial t} = \tilde{\epsilon}_K S_{aa'} + \sum_{a''} \kappa_{aa''}(t) S_{a''a'}(t, t') \quad (97)$$

и начальному условию

$$S_{aa'}(t', t') = \delta_{aa'}, \quad (98)$$

т.е. является S -матрицей, описывающей эволюцию комплекса в газе.

Из определения (89) и (96) получаем

$$B_K(t-t') = \exp[-i\epsilon_p(t-t')] \sum_{K'} V_{K'p}^2 \int_0^\infty d\tau_1 d\tau_2 \times \\ \times \exp[i\epsilon_p(\tau_1-\tau_2)] F_{KK'}(t, t-\tau_1, t', t'-\tau_2); \quad (99)$$

$$F_{KK'}(t_1, t_2, t_3, t_4) = \sum_{MM'} \langle S_{KM, K'M'}(t_1, t_2) S_{KM, K'M'}^*(t_3, t_4) \rangle, \quad (100)$$

где использовано свойство ортогональности (92).

Для вычисления $B_K(\tau=0)$ положим $t'=t=0$, тогда из (99) следует, что возможны два случая:

- 1) $t_1 > t_3 > t_2 > t_4$;
- 2) $t_1 > t_3 > t_4 > t_2$.

В первом случае, воспользовавшись свойством S -матрицы

$$S_{aa'}(t, t') = \sum_{a''} S_{aa''}(t, t'') S_{a''a'}(t'', t'), \quad (101)$$

получаем [при $A = (M, M', K_1, M_1, K_2, M_2)$]

$$F_{KK'}^{(1)} = \sum_A \langle S_{KM, K_1M_1}(t_1, t_3) S_{K_1M_1, K'M'}(t_3, t_2) \times \\ \times S_{KM, K_2M_2}^*(t_3, t_2) S_{K_2M_2, K'M'}^*(t_2, t_4) \rangle.$$

Столкновения, происходящие в интервалах времени $t_3 < t < t_1$, $t_2 < t < t_3$, $t_4 < t < t_2$, независимы, так как эти интервалы не перекрываются, поэтому

$$F_{KK'}^{(1)} = \sum_A \langle S_{KM, K_1M_1}(t_1, t_3) \rangle \langle S_{K_1M_1, K'M'}(t_3, t_2) S_{KM, K_2M_2}^*(t_3, t_2) \rangle \times \\ \times \langle S_{K_2M_2, K'M'}^*(t_2, t_4) \rangle.$$

Аналогично (92)

$$\langle S_{KM, K'M'}(t, t') \rangle = \delta_{KK'} \delta_{MM'} S_K(t, t'); \quad (102)$$

$$S_K(t, t') = (2K+1)^{-1} \sum_M \langle S_{KM, K_M}(t, t') \rangle, \quad (103)$$

откуда следует

$$F_{KK'}^{(1)} = (2K' + 1) S_K(t_1, t_3) N_K(K'; t_3, t_2) S_{K'}^*(t_2, t_4); \quad (104)$$

$$N_K(K'; t, t') = (2K' + 1)^{-1} \sum_{MM'} \langle |S_{KM, K'M'}(t, t')|^2 \rangle. \quad (105)$$

Для второго случая аналогично получаем формулу

$$F_{KK'}^{(2)} = (2K' + 1) S_K(t_1, t_3) N_K(K'; t_3, t_4) S_{K'}(t_4, t_2). \quad (106)$$

Выражения $S_K(t, t')$ и $N_K(K'; t, t')$ вычислим по методу Вайскопфа — Вигнера [13, 18], который применяется при нахождении изменения матрицы плотности возбужденного атома в газе, проходящего в результате столкновений.

Из выражений (101) — (103) для $\tau_C \ll \Delta t \ll v_C^{-1}$ получаем

$$\begin{aligned} \Delta S_K(t, t') &\equiv S_K(t + \Delta t, t') - S_K(t, t') = \\ &= (2K + 1)^{-1} \sum_{M, K', M'} \langle [S_{KM, K'M'}(t + \Delta t, t) - \\ &\quad - \delta_{KK'} \delta_{MM'}] \rangle \langle S_{K'M', KM}(t, t') \rangle = \\ &= (2K + 1)^{-1} \sum_M \langle S_{KM, KM}(\Delta t, 0) - 1 \rangle S_K(t, t'). \end{aligned} \quad (107)$$

При одном столкновении S -матрица изменяется, вообще говоря, значительно, вероятность же двух и более столкновений в интервале Δt при $v_C \Delta t \ll 1$ пренебрежимо мала ($\sim (v_C \Delta t)^2$), поэтому, используя уравнение (97), получаем

$$\Delta S_{KM, K'M'} = S_{KM, K'M'}(\Delta t, 0) - \delta_{KK'} \delta_{MM'} = \Delta S_{KM, K'M'}^{(ct)} + \Delta S_{KM, K'M'}^{(cb)}; \quad (108)$$

$$\Delta S_{KM, K'M'}^{(cb)} = -\tilde{i}\epsilon_K \Delta t \delta_{KK'} \delta_{MM'};$$

$$\Delta S_{KM, K'M'}^{(ct)} = \Delta t N_X \left\langle v \int d^2\rho [S_{KM, K'M'}(\rho, v) - \delta_{KK'} \delta_{MM'}] \right\rangle, \quad (109)$$

где проводится усреднение по скоростям v молекул X; $S_{KM, K'M'}(\rho, v)$ — S -матрица комплекса после столкновения с молекулой X с присоединенным параметром ρ .

Из (107) — (109) получаем уравнение

$$\frac{\partial S_K(t, t')}{\partial t} = -(v_K + i\tilde{\epsilon}_K) S_K(t, t'); \quad (110)$$

$$\begin{aligned} v_K &= N_X (2K + 1)^{-1} \times \\ &\times \sum_M \left\langle v \int d^2\rho [1 - S_{KM, KM}(\rho, v)] \right\rangle. \end{aligned} \quad (111)$$

Согласно (98) и (104) $S_K(t', t') = 1$, тогда из (110) находим

$$S_K(t, t') = \exp [-(v_K + i\tilde{\epsilon}_K)(t - t')]. \quad (112)$$

Для нахождения $N_K(K'; t, t')$ докажем вспомогательные соотношения:

$$\langle S_{aa_1} S_{a'a_1}^* \rangle = \delta_{aa'} U_{aa_1}; \quad (113)$$

$$U_{aa'} = \langle |S_{aa'}|^2 \rangle; \quad S_{aa'} \equiv S_{aa'}(t, t');$$

$$\sum_{M'} U_{KM, K'M} = \frac{2K'+1}{2K+1} N_K(K'; t, t') \quad (114)$$

не зависит от M [использовано определение (105)]. Пусть при $t = t'$ матрица плотности комплекса равна $\rho_{aa'}(t')$, тогда при $t > t'$

$$\rho_{aa'}(t) = \sum_{a_1 a_2} \langle S_{aa_1} S_{a'a_2}^* \rangle \rho_{a_1 a_2}(t').$$

Рассмотрим начальное условие: $\rho_{aa'}(t') = \delta_{aa'} N_a(t')$ — диагональна, тогда

$$\rho_{aa'}(t) = \sum_{a_1} \langle S_{aa_1} S_{a'a_1}^* \rangle N_{a_1}(t'). \quad (115)$$

Вследствие изотропности газа, очевидно, что и при $t > t'$ матрица плотности остается диагональной

$$\rho_{aa'}(t) = \delta_{aa'} N_a(t), \quad (116)$$

где $N_a(t)$ — населенности состояний $a \equiv (K, M)$. Из (115) и (116) следует (113), а также уравнение, описывающее эволюцию населенностей,

$$N_a(t) = \sum_{a'} U_{aa'}(t, t') N_{a'}(t'). \quad (117)$$

Пусть теперь при $t = t'$ проекции M равновероятны:

$$N_a(t') \equiv N_{KM}(t') = (2K + 1)^{-1} N_K(t'). \quad (118)$$

Очевидно, и при $t > t'$

$$N_{KM}(t) = (2K + 1)^{-1} N_K(t), \quad (119)$$

где $N_K(t)$ — населенность вращательного состояния K . Из (117) — (119) следует (114) и уравнение эволюции населенностей N_K :

$$N_K(t) = \sum_{K'} N_K(K'; t, t') N_{K'}(t'). \quad (120)$$

Очевидно, $N_K(K'; t, t')$ зависит только от разности $t - t'$:

$$N_K(K'; t, t') = N_K(K'; t - t'). \quad (121)$$

Для начального условия

$$N_K(t = 0) = \delta_{KK'} \quad (122)$$

из (120), (121) получаем

$$N_K(t) = N_K(K', t) \equiv N_K(K'; t, 0). \quad (123)$$

Это означает, что матрицы $N_K(K', t)$ представляют собой населенности вращательных состояний комплекса, образующегося при $t = 0$

во вращательном состоянии K' . К такому же выводу приводит и непосредственное вычисление $N_K(K'; t, t')$ по методу Вайскопфа — Вигнера, которое аналогично (117) дает уравнение

$$\frac{dN_K(K', t)}{dt} = - \sum_{K''} \theta_{KK''} N_{K''}(K', t); \quad (124)$$

$$\begin{aligned} N_K(K', 0) &= \delta_{KK'}; \quad \theta_{KK'} = \Gamma_K^{(V)} \delta_{KK'} + \alpha_{KK'}; \\ \alpha_{KK'} &= (2K' + 1)^{-1} N_X \sum_{MM'} \left\langle v \int d^2\rho [\delta_{KK'} \delta_{MM'} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - |S_{KM, K'M'}(\rho, v)|^2] \right\rangle. \end{aligned} \quad (125)$$

Величина $W_{aa'} = |S_{aa'}(\rho, v)|^2$ представляет собой вероятность перехода комплекса $a \rightarrow a'$ при столкновении с молекулой X, характеризующемся параметрами (ρ, v) , поэтому скорость перехода $a \rightarrow a'$ определяется выражением

$$\begin{aligned} \lambda(a \rightarrow a') &= N_X \left\langle v \int d^2\rho W_{aa'} \right\rangle = \\ &= N_X \left\langle v \int d^2\rho |S_{a'a}(\rho, v)|^2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (126)$$

Вероятность упругого рассеяния $a \rightarrow a$ равна $|S_{aa}(\rho, v)|^2$, следовательно, скорость ухода комплекса из состояния a в другие состояния $a' \neq a$ записывается в виде

$$\begin{aligned} \lambda_a &= \sum_{a' \neq a} \lambda(a \rightarrow a') = \\ &= N_X \left\langle v \int d^2\rho [1 - |S_{aa}(\rho, v)|^2] \right\rangle, \end{aligned} \quad (127)$$

что согласуется с формулой (126), так как

$$\sum_{a'} |S_{a'a}(\rho, v)|^2 = 1.$$

Из (125) — (127) убеждаемся, что уравнения (124) описывают кинетику изменения населенности вращательных состояний комплекса.

Подставляя формулы (104), (106) и (112) в (99), находим

$$B_K(\tau = 0) = \sum_{K'} (2K' + 1) V_{K'p}^2 \tilde{N}_K(K') \Gamma_{K'} [\Delta_{K'p}^2 + \Gamma_{K'}^2/4]^{-1}, \quad (128)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{N}_K(K') &= \int_0^\infty dt N_K(K', t); \quad \Delta_{Kp} = \varepsilon_p - \varepsilon_K^r; \quad \varepsilon_K^r = \bar{\varepsilon}_K + v_K''; \\ \Gamma_K &= 2v_K' + \Gamma_K^{(V)}; \end{aligned} \quad (129)$$

$$v_K'' = \text{Im } v_K = -N_X (2K + 1)^{-1} \sum_M \left\langle v \int d^2\rho \text{Im } S_{KM, KM}(\rho, v) \right\rangle \quad (130)$$

и

$$\mathbf{v}'_K = \operatorname{Re} v_K = \frac{1}{2} N_X \langle v \sigma_{\text{tot}}^{(K)}(v) \rangle \quad (131)$$

— частоты сдвига и уширения резонанса;

$$\sigma_{\text{tot}}^{(K)}(v) = 2 \int d^2 p [1 - \operatorname{Re} S_K(p, v)] \quad (132)$$

— полное сечение процессов (76а), включая и процесс упругого рассеяния $KM \rightarrow KM$ (ср. с формулой (142.5) из [16]);

$$S_K(p, v) = (2K + 1)^{-1} \sum_M S_{KM, KM}(p, v),$$

где мы учли, что операции $\langle \dots \rangle_v^*$ усреднения по направлениям скорости $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/v$ и по проекциям момента комплекса $[(2K + 1)^{-1} \sum_M \dots]$ эквивалентны.

При $p < R_0$ [см. формулы (73), (74)] величина $S_K(p, v)$ быстро осциллирует при изменении p , а при $p > R_0$ величина $1 - \operatorname{Re} S_K(p, v)$ экспоненциально стремится к нулю на характерном размере $\Delta p \sim \sim 1/\eta \ll R_0$, поэтому $\sigma_{\text{tot}}^{(K)}(v) \approx 2\pi R_0^2$, т.е. формулы (68), (73), (74) остаются справедливыми и при учете врачательных степеней свободы комплекса, а также, очевидно, и молекулы X. Этот вывод фактически основан на соотношениях

$$R_0 \gg 1/\eta; \quad R_0 \gg \rho_0,$$

где $\rho_0 = 1,4$ а.е. — равновесное расстояние между ядрами в молекуле водорода.

Окончательно из формул (95), (81) и (128) получаем

$$\sigma_f(\varepsilon_p) = \sum_{K=0}^{\infty} \sigma_K(\varepsilon_p) w_K^{(f)}, \quad (133)$$

где

$$\sigma_K(\varepsilon_p) = \frac{\pi}{p^2} (2K + 1) \frac{\Gamma_{Kp}^{(e)} \Gamma_K}{\Delta_{Kp}^2 + \Gamma_K^2/4}$$

— сечение образования мезомолекулярных комплексов в K -м врачаельном состоянии [ср. с формулой (3)];

$$w_K^{(f)} = \lambda_f \sum_{K'} \tilde{N}_{K'}(K)$$

— вероятность ядерной реакции в комплексе, образовавшемся в K -м состоянии.

Рассмотрим предельный случай высоких плотностей (для $dd\mu$ $\varphi \geq 10^{-4}$, для $dt\mu$ $\varphi \geq 0,1$):

$$\Gamma_K^{(V)} \ll \lambda_{vp} \sim 10^{13} \varphi [3],$$

где λ — в с^{-1} , когда за время жизни комплекса $\sim(\Gamma_V)^{-1} \sim 10^{-12}$ с успевает завершиться вращательная релаксация [$\tau_{\text{вр}} = (\lambda_{\text{вр}})^{-1}$] и устанавливается Больцмановское распределение по вращательным уровням комплекса

$$N_K(t) \approx w_K^{\text{B}} \approx (2K+1) \exp(-\varepsilon_K^r/T); \quad \sum_K w_K^{\text{B}} = 1.$$

В результате реакций (2) населенности медленно уменьшаются:

$$N_K(t) = w_K^{\text{B}} \exp(-\Gamma_V t).$$

Из кинетических уравнений (124), учитывая, что $\sum_K \alpha_{KK'} = 0$, получаем

$$\Gamma_V = \sum_K w_K^{\text{B}} \Gamma_K^{(V)},$$

поэтому

$$\tilde{N}_K(K') \approx w_K^{\text{B}} / \Gamma_V; \quad w_K^{(f)} \approx \lambda_f / \Gamma_V.$$

В обратном предельном случае низких плотностей ($\varphi \leq 0,1$ для $d\mu/dt$), когда населенности изменяются по закону

$$N_K(K', t) \approx \delta_{KK'} \exp(-\Gamma_K^{(V)} t),$$

сечение также определяется формулой (133), в которой

$$w_K^{(f)} = \lambda_f / \Gamma_K^{(V)}.$$

Подчеркнем, что формула (133), полученная при единственном предположении $\Gamma_V \ll |\varepsilon_K^r - \varepsilon_{K'}^r|$ [ср. с (83)], которое выполняется для мезомолекул $d\mu/dt$ и $d\mu/dt$, применима при любом соотношении между Γ_K и расстоянием между вращательными уровнями комплекса $|\varepsilon_K^r - \varepsilon_{K'}^r| \geq 0,003$ эВ.

Отметим также, что интерференция между различными вращательными состояниями комплекса, указанная в работе [19], в действительности отсутствует [см. формулу (133)], что объясняется случайным характером столкновений.

5. ФОРМА ДАЛЬНИХ КРЫЛЬЕВ РЕЗОНАНСОВ

В этом разделе результаты разд. 2 обобщаются на случай комплекса с конечным временем жизни ($\Gamma_V \neq 0$).

Рассмотрим реакции (1), (2) в приближениях, принятых в разд. 4, предполагая дополнительно, что: 1) D_2 и С являются бесструктурными, 2) молекулы X движутся по классическим траекториям (границы применимости этого приближения обсуждаются в конце раздела). В данном разделе откажемся от приближения мгновенных столкновений Вайскопфа (79) и для возмущения уровня энергии комплекса,

обусловленного столкновениями, примем более общее соотношение

$$\kappa(t) = \sum_{j=1}^{n_X} U_{CX_j}(t), \quad (134)$$

справедливо при условии (8).

Как и в разд. 4, для суммарного сечения реакций (2б), (2в) и для формы резонанса получаем выражения

$$\sigma_f(\varepsilon_p) = 2\pi^2 \lambda_{ef} \Gamma_e I(\varepsilon_p); \quad (135)$$

$$I(\varepsilon_p) = \pi^{-1} \operatorname{Re} \left[\int_0^\infty dt e^{i(\varepsilon_p - \tilde{\varepsilon})t} \Phi(t) \right]; \quad (136)$$

$$\Phi(t) = \left\langle \exp \left[-i \int_0^t \kappa(\tau) d\tau \right] \right\rangle, \quad (137)$$

где $\Gamma_e \equiv \Gamma_e(\varepsilon_p)$; угловыми скобками в (137) обозначено усреднение по столкновениям; $\tilde{\varepsilon} = \bar{\varepsilon} - i\Gamma_v/2$ [см. (84), (85)].

Для расчета $\Phi(t)$ рассмотрим большой временной интервал $(-t_0/2, t_0/2)$, такой, что $t \ll t_0$. Вероятность n столкновений на этом интервале определяется формулой Пуассона

$$W_n = (\bar{n})^n (n!)^{-1} \exp(-\bar{n}), \quad (138)$$

где $\bar{n} = v_{Ct} t_0$ — среднее число столкновений. Очевидно,

$$\Phi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n \Phi_n(t), \quad (139)$$

где

$$\Phi_n(t) = \left\langle \exp \left[-i \sum_{m=1}^n \int_0^\infty U_m(\tau) d\tau \right] \right\rangle$$

— значение функции $\Phi(t)$ при условии, что на интервале $(-t_0/2, t_0/2)$ произошло n столкновений ($\Phi_0(t) = 1$); $U_m(t)$ — потенциальная энергия U_{CX} при m -м столкновении. Все моменты времени из этого интервала равноправны, поэтому вероятность того, что m -е столкновение произошло на интервале dt_m , равна dt_m/t_0 . Усредняя по t_m , получаем

$$\Phi_n(t) = \int_{-t_0/2}^{t_0/2} \frac{dt_1}{t_0} \cdots \int_{-t_0/2}^{t_0/2} \frac{dt_n}{t_0} \prod_{m=1}^n \left\langle \exp \left[-i \int_0^t U_m(\tau - t_m) d\tau \right] \right\rangle = z^n; \quad (140)$$

$$z = \left\langle \frac{1}{t_0} \int_{-t_0/2}^{t_0/2} dt' \exp \left[-i \int_0^t U(\tau - t') d\tau \right] \right\rangle,$$

где в последней формуле угловыми скобками обозначено усреднение по величине $U(t)$, т.е. усреднение по столкновениям (см. разд. 4). Из (138) — (140) следует

$$\begin{aligned}\Phi(t) &= \exp[\bar{n}(z-1)] = \\ &= \exp\left\{\frac{\bar{n}}{t_0} \int_{-t_0/2}^{t_0/2} dt' \left\langle \left[\exp\left(-i \int_0^t U(\tau-t') d\tau\right) - 1 \right] \right\rangle\right\}.\end{aligned}$$

При $|t'| \rightarrow \infty$ выражение, заключенное в последней формуле в квадратные скобки, обращается в нуль, что позволяет распространить интегрирование по dt' на интервал $(-\infty, +\infty)$. Учитывая также, что $\bar{n}/t_0 = v_C$, получаем

$$\Phi(t) = \exp\left\{v_C \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left\langle \left[\exp\left(-i \int_0^t U(\tau) - t'\right) d\tau\right) - 1 \right] \right\rangle\right\}. \quad (141)$$

Это выражение, однако, некорректно, так как мы не определили с самого начала, что называется столкновением. При правильном, но более громоздком вычислении аналогичным образом рассматриваются столкновения с прицельными параметрами из интервала $(\rho, \rho + d\rho)$ происходящие с частотой

$$dv = 2\pi\rho d\rho v_X N_X, \quad v_X = q_{XC}/\mu_{XC}.$$

Правильное выражение для $\Phi(t)$ очевидным образом получается из (141) [ср. с (21)]:

$$\Phi(t) = \exp(N_X \beta(t)); \quad (142)$$

$$\beta(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left\langle v_X \int d^2\rho \left[1 - \exp\left(-i \int_0^t U(\tau) - t'\right) d\tau\right) \right] \right\rangle, \quad (143)$$

где $U(t) \equiv U_{CX}(\rho, v_X, t)$ — потенциальная энергия системы С + Х в момент времени t при столкновении со скоростью v_X и прицельным параметром ρ . Угловыми скобками в (143) обозначено усреднение по скорости столкновения v_X .

В приближении Вайсконфа (79) имеем

$$U(t) = \eta(\rho, v_X) \delta(t), \quad \eta = \int_{-\infty}^{\infty} dt U(t),$$

откуда и из (149), (150) и (143) получаем лоренцеву формулу

$$\sigma_f(\epsilon_p) = \sigma_r(\epsilon_p) \equiv \frac{\pi}{p^2} \frac{\Gamma_e \Gamma}{(\epsilon_p - \bar{\epsilon}_r)^2 + \Gamma^2/4} \frac{\lambda_{ef}}{\Gamma_V}, \quad (144)$$

$$\bar{\epsilon}_r = \bar{\epsilon} + v''; \quad \Gamma = \Gamma_V + \Gamma_\varphi; \quad \Gamma_\varphi = 2v';$$

$$v' = N_X \left\langle v_X \int d^2\rho (1 - \cos \eta) \right\rangle;$$

$$v'' = -N_X \left\langle v_X \int d^2\rho \sin \eta \right\rangle.$$

Формула (144) справедлива только в резонансной области $|\Delta_p| \leq v'$ (см. разд. 2). При $|\Delta_p| > v'$ можно положить $\exp(N_X\beta) \approx \approx 1 + N_X\beta$, поэтому из (136) заключаем (в отличие от разд. 2 при $\Gamma_V \neq 0$ единица дает ненулевой вклад в σ_f)

$$\sigma_f(\varepsilon_p) \approx \sigma_V(\varepsilon_p) + \sigma_{qr}(\varepsilon_p); \quad (145)$$

$$\sigma_V(\varepsilon_p) = \frac{\pi}{p^2} \frac{\Gamma_e \lambda_{ef}}{\Delta_p^2 + \Gamma_V^2/2}, \quad (146)$$

где

$$\sigma_{qr}(\varepsilon_p) = N_X \frac{2\pi\lambda_{ef}\Gamma_e}{p^2\Gamma_V} \operatorname{Re} \left[\int_0^\infty dt e^{i(\varepsilon_p - \tilde{\varepsilon})t} \beta(t) \right] \quad (147)$$

— сечение реакций (2б) и (2в), происходящих в результате тройных столкновений (4), о чём свидетельствует множитель N_X .

Молекулы С и Х взаимодействуют по закону (72), откуда из (146), (147) следует

$$U(t) = \frac{1}{2} \mu_{XC} v_R^2 \operatorname{ch}^{-2}(\eta v_R t); \quad (148)$$

$$v_R = v_X (1 - \rho^2/R_0^2)^{1/2}; \quad (148)$$

$$\frac{\sigma_{qr}}{\sigma_V} \sim \frac{\pi^{5/2} N_X R_0^2 \Delta_p^2 \mu_X^2 C v_0}{\eta^4 \Gamma_V} G; \quad (149)$$

$$G = \exp \left(-\frac{3\pi |\Delta_p|}{2\eta v_0} + 2 \frac{\sqrt{2\mu_{XC} |\Delta_p|}}{\eta} \right);$$

$$v_0 = [\pi T |\Delta_p| / (\mu_{XC} \eta)]^{1/3}.$$

Отсюда следует, что при $0,1 \leq \varphi \leq 2$ сечения σ_{qr} и σ_V для $d\mu$ -молекул сравнимы ($\sigma_{qr}/\sigma_V \sim 1$) при расстоянии от резонанса

$$|\Delta_p| = \varepsilon_0 \approx 2 \cdot 10^{-4} \sqrt{T/\mu_{XC}} \Lambda^{3/2}, \quad (150)$$

где Δ_p — в эВ; $\Lambda = \ln(3 \cdot 10^7 \varphi)$; T — температура в К; приведенная масса μ_{XC} выражена в массах протона. В частности, при $\varphi = 1,2$ и $T = 23$ К $\varepsilon_0 \approx 0,04$ эВ. В интервал $|\Delta_p| \leq \varepsilon_0$, внутри которого можно положить $\Gamma_V = 0$, заведомо попадают все наиболее существенные при указанных условиях переходы $K_i \rightarrow K_f$, что обосновывает выводы работы [24], полученные в приближении $\Gamma_V \rightarrow 0$.

В реальном случае (при конечной ширине Γ_V) при $\varphi \leq 0,1$ в случае $d\mu$ -молекул можно положить $\sigma_f(\varepsilon_p) \approx \sigma_V(\varepsilon_p)$, т.е. столкновения несущественны при $\varphi \leq 0,1$. При $\varphi \geq 0,1$ столкновения значительно изменяют форму резонанса и условно можно выделить три характерные области: 1) резонансную ($|\Delta_p| \leq v'$, $\sigma_f \approx \sigma_r$); 2) квази-резонансную ($v' \leq |\Delta_p| \leq \varepsilon_0$, $\sigma_f \approx \sigma_{qr}$); 3) вакуумную ($|\Delta_p| \geq \varepsilon_0$, $\sigma_f \approx \sigma_V$). В дополнение к трем рассмотренным в разд. 2 харак-

терным случаем

$$\begin{aligned} 1) \quad |\varepsilon_r| &\leq \Gamma/2; \quad 2) \quad \Gamma/2 \leq \varepsilon_r \leq \varepsilon_0; \\ 3) \quad -\varepsilon_0 &\leq \varepsilon_r \leq -\Gamma/2 \end{aligned}$$

появляются еще два: 4) $\varepsilon_r \geq \varepsilon_0$; 5) $\varepsilon_r \leq -\varepsilon_0$, в которых скорость образования мезомолекул определяется выражениями

$$\begin{aligned} \lambda^{(4)} &= \lambda_{\text{Весм}} + \lambda_V; \quad \lambda^{(5)} = \lambda_V; \quad (151) \\ \lambda_V &= N\Gamma_V V^2 (\varepsilon_r^2 + \Gamma_V^2/4)^{-1}; \\ \bar{V}^2 &= \int_0^\infty d\varepsilon_p f(\varepsilon_p) V^2(\varepsilon_p). \end{aligned}$$

В частности, при низкой температуре

$$\bar{V}^2 \approx V^2(0); \quad \lambda_V \approx N\Gamma_V V^2(0) (\varepsilon_r^2 + \Gamma_V^2/4)^{-1}.$$

Последнее выражение приведено в работе [18], с той, однако, существенной разницей, что вместо Γ в выражение для λ_V входит Γ_V .

В случае экспоненциального потенциала взаимодействия между С и X (72) из формул (143) и (148) получаем

$$\begin{aligned} N_X \beta(t) &= 2R_0^2 N_X \sqrt{\frac{2\mu_{XC}}{T}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_0^\infty dv v \times \\ &\times \exp\left(-\frac{\mu_{XC}v^2}{2T}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{i\mu_{XC}v}{2\eta} (\operatorname{th}(\eta v(t-t')) + \operatorname{th}(\eta vt'))\right] - 1 \right\}. \quad (152) \end{aligned}$$

Следует иметь в виду, однако, что приближение классических траекторий молекул, в рамках которого получены выражения (143) и (152), применимо лишь при небольшом изменении энергии молекул X

$$|\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}| \ll \varepsilon_q, \quad (153)$$

что неверно для тройных столкновений (4), в которых $|\varepsilon_q - \varepsilon_{q'}| \sim \varepsilon_{q'}$.

По этой причине выражение для σ_{qr} , полученное в этом разделе, равно как и значение $I(\varepsilon_p)$ в квазирезонансной области, справедливы только по порядку. Тем не менее из-за резкой зависимости σ_{qr} от Δ_p оценка (150) для ε_0 надежна.

6. ДЕТАЛЬНАЯ ФОРМА РЕЗОНАНСОВ

Скорость образования мезомолекул определяется выражением

$$\lambda = \int d^3 p_t f(\mathbf{p}_t) \lambda(\mathbf{p}_t), \quad (154)$$

где $f(\mathbf{p}_t)$ — функция распределения мезоатомов по импульсам \mathbf{p}_t в л.с. (см. начало разд. 3). В области $\varepsilon_t \equiv p_t^2/(2m_t) \leq 150$ К, в кото-

рой существенны рассматриваемые в данной работе нелинейные по Φ эффекты, при любых T и Φ отличие $f(\mathbf{p}_t)$ от максвелловской $f(m_t, \mathbf{p}_t)$ (см. разд. 2) пренебрежимо мало [25, 26], поэтому далее полагаем $f(\mathbf{p}_t) \approx f(m_t, \mathbf{p}_t)$. Учтя формулы (15), (61) и соотношение

$$d^3 p_t d^3 p_d f(m_t, \mathbf{p}_t) f(m_d, \mathbf{p}_d) = d^3 p d^3 Q f(\mu, \mathbf{p}) f(m_C, \mathbf{Q}),$$

представим выражение (154) в виде (12) и (13), откуда для формы резонанса $I(\varepsilon_p)$ (напомним, что ε_p — кинетическая энергия относительного движения $t\mu + D_2$) получим формулу (136), в которой

$$\Phi(t) \equiv \Phi(t, \mathbf{p}) = \int d^3 Q f(m_C, \mathbf{Q}) e^{N_X \beta(t, \mathbf{p}, \mathbf{Q})}, \quad (155)$$

где $\beta(t, \mathbf{p}, \mathbf{Q})$ определяется выражением (65).

Для реакций в резонансной области $|\varepsilon_p - \varepsilon_r| \leq \Gamma/2$ из формул (33), (68), (136) и (155) получаем выражения

$$N_X \beta(t, \mathbf{p}, \mathbf{Q}) \approx -v'(Q) |t|,$$

$$I(\varepsilon_p) \approx \frac{1}{2\pi} \int d^3 Q f(m_C, \mathbf{Q}) \frac{\Gamma(Q)}{(\varepsilon_p - \varepsilon_r)^2 + \Gamma^2(Q)/4}; \quad (156)$$

$$\Gamma(Q) = \Gamma_V + \Gamma_\Phi(Q), \quad \Gamma_\Phi(Q) = 2v'(Q). \quad (157)$$

Отметим, что согласно (156) при учете движения D_2 и С форма, вообще говоря, отличается от лоренцевой даже в резонансной области.

Учтем вращательные степени свободы молекул и комплекса С. Согласно разд. 4 различные вращательные переходы $K_i \rightarrow K_f$ в реакции (75) дают независимые вклады в наблюдаемую скорость образования мезомолекул, для которой аналогично формуле (133) (см. также работу [27]) получаем выражение

$$\lambda = \sum_{K_i K_f} w_{K_i}^E \lambda_{K_i K_f} w_{K_f}^{(f)}, \quad (158)$$

где $w_{K_i}^E$ — равновесные населенности вращательных состояний молекул D_2 ; $\sum_{K_i} w_{K_i}^E = 1$; $w_{K_f}^{(f)} \equiv w_K^{(f)}$;

$$\lambda_{K_i K_f} = \int_0^\infty d\varepsilon_p f(\varepsilon_p) \lambda_{K_i K_f}(\varepsilon_p) \quad (159)$$

— парциальная скорость образования мезомолекул в реакции (75) [ср. с (12) и (13)]:

$$\lambda_{K_i K_f}(\varepsilon_p) = 2\pi N V_{K_i K_f}^2(\varepsilon_p) I_{K_i K_f}(\varepsilon_p); \quad (160)$$

$V_{K_i K_f}(\varepsilon_p)$ — матричный элемент перехода $K_i \rightarrow K_f$ [15, 20, 27]; $I_{K_i K_f}(\varepsilon_p)$ — форма резонанса, соответствующая этому переходу.

Для реакций в резонансной области $|\varepsilon_p - \varepsilon_r(K_i, K_f)| \ll \Gamma_{K_f}/2$, учитывая результаты разд. 4, получаем выражения

$$I_{K_i K_f}(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \int d^3Q f(m_C, Q) \Gamma_{K_f}(Q) [(\varepsilon_p - \varepsilon_r(K_i K_f))^2 + \Gamma_{K_f}^2(Q)/4]^{-1}; \quad (161)$$

$$\Gamma_{K_f}(Q) = \Gamma_{K_f}^{(V)} + \Gamma_{K_f}^{(\phi)}(Q), \quad \Gamma_{K_f}^{(\phi)}(Q) = 2v'_{K_f}(Q),$$

которые обобщают формулы (156) и (157). Выражение для $v'_{K_f}(Q)$ получается из (68) после замены σ_C полным сечением рассеяния $\sigma_{tot}^{K_f}(q_{xc})$. Напомним, однако, что разница между этими сечениями незначительна (см. разд. 4), поэтому в резонансной области применимо приближение бесструктурных молекул (ПБМ).

В квазирезонансной области погрешности, вносимые ПБМ, малы лишь при низких температурах ($T \lesssim T_0 \sim |\varepsilon_{K_f} - \varepsilon_{K'_f}| \sim 40$ К), когда вращательные степени свободы «заморожены», и возрастают при $T \gtrsim T_0$ [7]. При высоких температурах ($T \gtrsim 150$ К), когда основной вклад в наблюдаемую скорость образования мезомолекул λ дают переходы с $\varepsilon_r(K_i, K_f) \sim T > 0$, мезомолекулы образуются, главным образом, по резонансному механизму Весмана, а вклад от квазирезонансного механизма незначителен [см. оценку (44)]. В промежуточной области температур ($40 \lesssim T \lesssim 150$ К) в случае dt молекул $\lambda_{qr} \sim \lambda_r$ [26], поэтому значительны и неопределенности в λ , вносимые ПБМ.

7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В данной работе построена теория нелинейных по плотности газа механизмов образования мезомолекул, которые становятся существенными при высоких давлениях ($\varphi \gtrsim 0,1$). Теория справедлива, если столкновения молекулы D_2 и комплекса С с различными молекулами газа независимы, т.е. если выполняется соотношение (8).

Обсудим условие (8) более детально. Частота столкновений v_C определяется сечением $\sigma_C \approx 2\pi R_0^2$, т.е. размером $R_0 \sim 6$ а.е., а длительность столкновения τ_C при $T \gtrsim 5$ К (см. разд. 3) — значительно меньшим размером [$\Delta R \sim (2\eta)^{-1} \sim 0,6$ а.е.], поэтому основное предположение данной работы о независимости столкновений с различными молекулами, а значит, и ее результаты справедливы [особенно отчетливо это видно из разд. 5, результаты которого основаны на соотношениях (134), (138)] не только для плотного газа ($\varphi \lesssim 1$), но и для жидкости. Таким образом, мы не рассматривали коллективные фононные эффекты, которые существенны в твердой фазе. К ним относится, например, эффект передачи импульса мезоатома не отдельной молекуле D_2 , а всей кристаллической решетке, что аналогично эффекту Мёссбауэра.

Показано, что известные к настоящему времени два нелинейных по плотности газа механизма образования мезомолекул в тройных

[7] и парных [8] столкновениях, имеющие, на первый взгляд, совершенно различную физическую природу, в действительности являются двумя различными предельными случаями единого механизма образования мезомолекул, обобщающего механизм Весмана [2] на случай газа высокой плотности или жидкости.

Показано, что адекватной физической величиной, позволяющей строгим образом учесть столкновения с молекулами газа, является форма резонансов $I_{K_i K_f}(\epsilon_p)$ в с.ц.м. системы, образованной мезоатомом и молекулой ($t\mu + D_2$), и в различных приближениях получены выражения для $I(\epsilon_p)$.

При малой плотности дейтерий-тритиевой смеси ($\phi \leq 0,1$) форма резонансов является лоренцевой (с шириной Γ_V — см. разд. 1), а при $\phi \geq 0,1$ значительно отличается от нее. При $\phi \geq 0,1$ у функции $I(\epsilon_p)$ имеются три характерные области: резонансная, квазирезонансная и вакуумная (см. разд. 2 и 5). В резонансной области форма $I(\epsilon_p)$ описывается выражением (161) и приближенно является лоренцевой с шириной, определяемой выражениями (157), (68) [или приближенной формулой (74)]. Показано, что столкновительная ширина резонанса Γ_ϕ определяется только столкновениями комплекса С и не зависит от характера движения молекулы D_2 , что объясняется эффектом отдачи при «слиянии» мезоатома и молекулы D_2 в комплекс (см. разд. 3).

Показано, что феноменологическая теория [8] (см. также [19]), основанная на предположениях о лоренцевой форме резонансов, не применима к описанию реакций образования мезомолекул при энергиях $t\mu + D_2$, далеких от резонансной ($|\epsilon_p - \epsilon_r| \geq \Gamma/2$). При таких энергиях основную роль играет квазирезонансный механизм (4).

В данной работе, как и в статье [7], для описания тройных столкновений (4) использовано приближение бесструктурных молекул, применимое при низких температурах ($T \leq 40$). Для более точного описания реакций образования $dt\mu$ -молекул при $\phi \sim 1$ и $40 \text{ К} \leq T \leq 150 \text{ К}$ требуется провести сложный расчет скоростей образования мезомолекул $\lambda_{K_i K_f}$ в тройных столкновениях (4) с учетом вращательных степеней свободы молекул D_2 , X и комплекса С (см. конец разд. 6).

Представляет также интерес расчет формы резонанса в приближении бесструктурных молекул с конечной массой при произвольных ϵ_p , т. е. обобщение результатов разд. 3.

В заключение автору приятно поблагодарить Л. И. Пономарева, Ю. В. Петрова и М. П. Файфмана за большой интерес к работе и многочисленные полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

УДАРНОЕ УШИРЕНИЕ РЕЗОНАНСОВ В ГАЗЕ НЕПОДВИЖНЫХ МОЛЕКУЛ X

Формула (21) $\Phi(t) = e^{N_X \beta(t)}$ получена в разд. 2 в предположении о неподвижности молекулы D_2 и комплекса С. Покажем, что при условии (8) эта формула справедлива и в противоположном предельном случае, т. е. при образовании комплексов в поле неподвижных молекул X.

Следуя выводу разд. 3 о независимости ударной ширины резонансов от характера движения молекулы, полагаем $U_i = 0$, поэтому ВФ начального состояния ($i\mu +$ одна бесструктурная молекула D_2 в объеме Ω) имеет вид

$$\psi_i = \Omega^{-1} \exp(i\mathbf{p}_t \mathbf{r}_t + i\mathbf{p}_d \mathbf{r}_d) = \Omega^{-1} \exp(iS_{\mathbf{r}_{ta}} + iQ\rho) \equiv |\mathbf{p}_t, \mathbf{p}_d\rangle, \\ Q = \mathbf{p}_d + \mathbf{p}_t, \quad (\text{П.1})$$

где здесь и далее мы следуем обозначениям, приведенным в разд. 2, 3 и 6. Гамильтониан и ВФ конечного состояния $\psi_{\mathbf{p}_C}(\rho)$ (комплекс в поле неподвижных молекул X) имеют вид

$$\hat{H}_f = -\frac{1}{2m_C} \Delta_{\rho}^2 + U(\rho), \quad U(\rho) = \sum_{j=1}^{n_X} U(\rho - \mathbf{R}_j); \\ \hat{H}_f \psi_{\mathbf{p}_C}(\rho) = E_{p_C} \varphi_{\mathbf{p}_C}(\rho), \quad E_{p_C} = p_C^2 / (2m_C), \\ \psi_{\mathbf{p}_C}(\rho) = \Omega^{-1/2} \varphi_{\mathbf{p}_C}(\rho) \equiv |\mathbf{p}_C\rangle, \quad (\text{П.2})$$

где ρ и \mathbf{R}_j — координаты комплекса и j -й молекулы X соответственно.

Скорость образования комплекса при максвелловском распределении $t\mu$ -атомов и $\Gamma_V \ll T$ [см. формулу (9)] равна:

$$\lambda = \sum_{\rho_C \mathbf{p} \mathbf{Q}} w_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{Q}} 2\pi\delta(\varepsilon_r - \varepsilon_p + E_{p_C} - E_Q) \langle |\mathbf{p}_C| V(\mathbf{r}_{ta}) | \mathbf{p}_t \mathbf{p}_d \rangle|^2 = \\ = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}} V_p^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i(\varepsilon_r - \varepsilon_p)t] \Phi(t); \quad (\text{П.3})$$

$$\Phi(t) = \sum_{\mathbf{p} \mathbf{Q}} w_{\mathbf{Q}} \exp[i(E_{p_C} - E_Q)t] \langle |\langle \mathbf{p}_C |_{\mathbf{Q}} \rangle|^2 \rangle, \quad (\text{П.4})$$

где $|\mathbf{Q}\rangle = \Omega^{-1/2} \exp(iQ\rho)$; внешние угловые скобки означают усреднение по положениям \mathbf{R}_j молекул X. Очевидно, $\Phi(t) = \Phi^*(-t)$, поэтому из (П.3), (П.4) получаем

$$\lambda = \frac{2}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}} V_p^2 \sum_{\mathbf{Q}} w_{\mathbf{Q}} \operatorname{Re} \left\{ \int d^3\rho d^3\rho' \Omega^{-1} \times \right. \\ \left. \times \exp[iQ(\rho' - \rho)] \langle i\mathcal{G}^R(\rho, \rho'; E_Q + \varepsilon_p - \varepsilon_r) \rangle \right\}; \quad (\text{П.5})$$

$$\mathcal{G}^R(\rho, \rho'; \omega) = \sum_{\mathbf{p}_C} \frac{\varphi_{\mathbf{p}_C}(\rho) \varphi_{\mathbf{p}_C}^*(\rho')}{\omega - E_{p_C} + i0} \equiv \mathcal{G}(\rho, \rho'). \quad (\text{П.6})$$

Газ однороден, поэтому

$$\langle \mathcal{G}(\rho, \rho') \rangle = \mathcal{G}(\rho - \rho', \omega), \quad (\text{П.7})$$

где $\mathcal{G}(\rho - \rho', \omega)$ — функция, подлежащая вычислению. Из (П.5) — (П.7) следует

$$\lambda = -\frac{2}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}} V_p^2 \sum_{\mathbf{Q}} w_{\mathbf{Q}} \operatorname{Im} [\mathcal{G}(\mathbf{Q}, E + \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{r}})]. \quad (\text{П.8})$$

Функция Грина $\mathcal{G}(\rho, \rho')$ является решением уравнения

$$\left[\frac{1}{2m_C} \Delta_{\rho}^2 - U(\rho) + \omega \right] \mathcal{G}(\rho, \rho') = \delta(\rho - \rho'), \quad (\text{П.9})$$

откуда в координатном и импульсном представлении получаем уравнения

$$\mathcal{G}(\rho, \rho') = G_0(\rho - \rho') + \int G_0(\rho - \rho_1) U(\rho_1) \mathcal{G}(\rho_1, \rho') d^3 p_1; \quad (\text{П.10})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') G_0(\mathbf{p}) + G_0(\mathbf{p}) \times \\ &\times \int U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \mathcal{G}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}') \sum_{j=1}^{n_X} \exp[i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) \mathbf{R}_j] \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}; \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

$$G_0(\mathbf{p}) = 1/(\omega - E_p + i0).$$

Отметим, что согласно (П.7)

$$\langle \mathcal{G}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega). \quad (\text{П.12})$$

Дальнейшие вычисления $\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega)$ аналогичны теории примесной проводимости (см. [24], § 73) и справедливы в газовом приближении (8). Используя (П.11), для $\mathcal{G}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ по методу итераций получаем бесконечный ряд по степеням U , который удается просуммировать в «газовом» пределе (8). При последующем усреднении этого ряда по положениям молекул X возникают выражения вида ($N_X = n_X/\Omega$)

$$\left\langle \sum_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right\rangle = \sum_j \frac{1}{\Omega} \int d^3 R_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} = N_X (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}); \quad (\text{П.13})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{j_1 j_2} e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{q}_2 \mathbf{R}_{j_2}} \right\rangle &= \left\langle \sum_j e^{-i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \mathbf{R}_j} \right\rangle + \left\langle \sum_{j_1 \neq j_2} e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{q}_2 \mathbf{R}_{j_2}} \right\rangle = \\ &= \left\langle \sum_j e^{-i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \mathbf{R}_j} \right\rangle + \left\langle \sum_{j_1} e^{-i\mathbf{q}_1 \mathbf{R}_{j_1}} \right\rangle \left\langle \sum_{j_2} e^{-i\mathbf{q}_2 \mathbf{R}_{j_2}} \right\rangle = \\ &= N_X (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) + N_X^2 (2\pi)^6 \delta(\mathbf{q}_1) \delta(\mathbf{q}_2). \end{aligned}$$

Приведем выражение для $\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega)$ с точностью до членов третьего порядка по U :

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega) = G_0(\mathbf{p}) + N_X G_0^2(\mathbf{p}) A + N_X^2 G_0^2(\mathbf{p}) (B + C); \quad (\text{П.14})$$

$$A = U(0) + \int U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) G_0(\mathbf{p}_1) U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} +$$

$$+ \int U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) G_0(\mathbf{p}_1) U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) G_0(\mathbf{p}_2) U(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3};$$

$$B = G_0(\mathbf{p}) \left[U^2(0) + 2U(0) \int U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) G_0(\mathbf{p}_1) U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \right];$$

$$C = U(0) \int |U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)|^2 G_0^2(\mathbf{p}_1) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}, \quad U(0) \equiv U(\mathbf{p} = 0).$$

При $\omega = E_Q + \varepsilon_p - \varepsilon_r$ [см. (П.8)] и $|\varepsilon_p - \varepsilon_r| \sim \Gamma$ для $G_0(p)$ имеем $G_0(p) \sim \sim 1/\Gamma$, поэтому $B \sim U^2(0)/\Gamma$. Основной вклад в C дает область $p_1 \sim p$, поэтому

$$C \sim U^3(0) m_C^2/p, \quad C/B \sim U(0) m_C^2 \Gamma/p \sim N_X f^3 \ll 1,$$

где учтены соотношения (8); $\Gamma \sim N_X v f^2$, $f \sim m_C U(0)$; $f \equiv f(\theta)$ — амплитуда рассеяния комплекса на молекуле X; θ — угол рассеяния. Далее, при $\omega = E_Q + \varepsilon_p - \varepsilon_r$ в интегралах по импульсам, входящих в выражения для A и B , можно положить $G_0(p_1, \omega) \approx 1/(E_p - E_{p_1} + i0)$, что эквивалентно условию $T \gg \Gamma$. Из полученных таким образом выражений для A и B нетрудно увидеть, что при учете всех порядков по $U(p)$

$$A = -\frac{2\pi}{m_C} f_p(0); \quad B = G_0(p) \left[-\frac{2\pi}{m_C} f_p(0) \right]^2,$$

где $f_p(0)$ — амплитуда рассеяния на угол $\theta = 0$.

Таким образом, в газовом приближении ряд (П.14) сводится к геометрической прогрессии

$$\mathcal{G}(p, \omega) = G_0(p) \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\frac{2\pi N_X}{m_C} f_p(0) G_0(p) \right]^n = 1/[\omega - E_p - v^*(p)],$$

где

$$v^*(p) = -\frac{2\pi N_X}{m_C} f_p(0) = v'' - iv'.$$

Отсюда из (П.8) получаем

$$\lambda = 2\pi \Omega^{-1} \sum_p w_p V_p^2 I(\varepsilon_p); \quad (\text{П.15})$$

$$I(\varepsilon_p) = \frac{1}{2\pi} \sum_Q w_Q \frac{\Gamma(Q)}{[\varepsilon_p - \varepsilon_r - v''(Q)]^2 + \Gamma^2(Q)/4}; \quad (\text{П.16})$$

$$\Gamma(Q) = 2v'(Q) = \frac{4\pi N_X}{m_C} \operatorname{Im} f_Q(0) = \frac{4\pi N_X}{m_C Q} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \equiv \frac{N_X Q}{m_C} \sigma(Q); \quad (\text{П.17})$$

$$v''(Q) = -\frac{2\pi N_X}{m_C} \operatorname{Re} f_Q(0) = -\frac{\pi N_X}{m_C Q} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin(2\delta_l).$$

Формулы (П.15), (П.16) и (161) совпадают, что доказывает справедливость принятого в разд. 3 предположения о факторизуемости $\Phi(t)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Винницкий С. И., Пономарев Л. И., Пузынин И. В. и др. // ЖЭТФ. 1978 Т. 74. С. 849—855.
2. Весман Э. А. // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 5. С. 413—415.
3. Островский В. Н., Устимов В. И. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 1228—1234.
4. Lane A. M. // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 98A. P. 337—348.
5. Винницкий С. И., Пономарев Л. И., Файфман М. П. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 985—999.

6. Богданова Л. Н., Маркушин В. Е., Мележик В. С., Пономарев Л. И.// ЯФ. 1981. Т. 34. С. 1191—1204.
7. Men'shikov L. I., Ponomarev L. I.//Phys. Lett. 1986. Vol. 1678. P. 141—144.
8. Petrov Yu. V.//Phys. Lett. 1985. Vol. 163B. P. 28—37.
9. Jones S. E., Anderson A. N., Gaffrey A. J. e a.//Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 51. P. 1757—1767.
10. Jones S. E., Anderson A. N., Gaffrey A. J. e a.//IX Intern. Conf. on Atomic Phys., Seattle, Washington, 1984. P. 27.
11. Балин Д. В., Воробьев А. А., Воробьев Ан. А. и др.//Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. С. 318—323.
12. Breunlich W. H., Cargnelli M., Marton J. e.a. Preprint LBL—21366, Berkeley, 1986.
13. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963.
14. Fano U.//Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 1866—1884.
15. Меньшиков Л. И., Файфман М. П.//ЯФ. 1986. Т. 43. С. 650—661.
16. Ландау Л. Д., Либштадт Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
17. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.
18. Алексеев В. А., Андреева Т. А., Собельман И. И.//ЖЭТФ. 1972. Т. 62. С. 614—632.
19. Leon M. Preprint LA—UR 86—2894, Los Alamos, 1986.
20. Меньшиков Л. И.//ЯФ. 1985. Т. 42. С. 1184—1194.
21. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962.
22. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975.
23. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской механике. М.: Наука, 1971.
24. Меньшиков Л. И., Пономарев Л. И.//Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 471—473.
25. Меньшиков Л. И., Сомов Л. Н., Файфман М. П. Препринт ОИЯИ Р4-87-82. Дубна, 1987.
26. Меньшиков Л. И., Пономарев Л. И.//Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 329—332.
27. Меньшиков Л. И., Пономарев Л. И., Стриж Т. А., Файфман М. П.// ЖЭТФ. 1987. Т. 92. С. 1173—1187.