

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

1784 / 2-80

21/4-80
P4 - 13028

Л.И.Пономарев, С.Ю.Славянов, Л.Н.Сомов

ЗАДАЧА

ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

VIII. НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ,

СВЯЗЫВАЮЩИЕ СОСТОЯНИЯ

НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

Направлено в "Journal of Physics, B"

1980

1. Введение

Задаче трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении сводится к решению бесконечной системы интегродифференциальных уравнений^{/1/}, в которой эффективными потенциалами являются термы $E_j(R)$, соответствующие различным состояниям $|j\rangle$ задачи двух центров, и матричные элементы $Q_{ij}(R)$ и $H_{ij}(R)$, связывающие эти состояния. Термы и матричные элементы, связывающие состояния дискретного спектра, вычислены в работе^{/2/}. Матричные элементы, связывающие состояния дискретного и непрерывного спектров, вычислены в работе^{/3/}.

В данной работе вычислены сингулярные части матричных элементов $H_{ss'}(k, k', R)$ и $Q_{ss'}(k, k', R)$, связывающих состояния $|c\rangle = |ks\rangle$ и $|c'\rangle = |k's'\rangle$ непрерывного спектра задачи двух центров, а также найдена их асимптотика при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$.

Волновые функции $\phi_c(\vec{z}; R) \equiv \phi_s(\vec{z}; k, R)$ непрерывного спектра задачи двух центров определяются как решения уравнения Шредингера

$$\hat{h}_0 \phi_c(\vec{z}; R) = E_c(k) \phi_c(\vec{z}; R), \quad (1)$$

где $E_c(k) = k^2/2$ - энергия системы в состоянии

$|c\rangle = |ks\rangle \equiv |ksp\rangle$ с импульсом k , набором $s = \{q, m\}$ сферических квантовых чисел либо же набором $s = [n_2, m]$ параболических квантовых чисел и четностью $p = (g, u)$.

Значение q определяется равенством $q = 2n_2 + m + 1 - \frac{p + (-)^m}{2}$, где $p = \pm 1$ для g - и u - состояний соответственно.

Гамильтониан \hat{h}_0 задачи о движении отрицательно заряженной частицы c с зарядом $Z_c = -1$ в поле двух фиксированных кулоновских центров a и b с положительными зарядами $Z_a = Z_b = 1$ имеет вид

$$\hat{h}_0 = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{z}} - \frac{1}{z_a} - \frac{1}{z_b}, \quad (2)$$

где z_a и z_b - расстояния частицы c от зарядов Z_a и Z_b , удаленных на расстояние R друг от друга, а \vec{z} - расстояние до частицы c от середины отрезка R . Решения уравнения (1) удовлетворяют соотношению ортогональности:

$$\int d\vec{z} \phi_c^*(\vec{z}; R) \phi_c(\vec{z}; R) = \delta_{mm'} \delta_{qq'} \delta(k-k'). \quad (3)$$

Матричные элементы $H_{ss'}(k, k', R)$ и $Q_{ss'}(k, k', R)$ равны:

$$H_{ss'}(k, k', R) = \int d\vec{z} (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{z}}) \phi_s^*(\vec{z}; k, R) (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{z}}) \phi_{s'}(\vec{z}; k', R),$$

$$Q_{ss'}(k, k', R) = -\frac{R}{2} \int d\vec{z} \phi_s^*(\vec{z}; k, R) (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{z}}) \phi_{s'}(\vec{z}; k', R), \quad (4)$$

которые удобно представить в виде

$$H_{ss'} = H_{ss'}^{(+)} + \alpha H_{ss'}^{(-)} + \alpha^2 H_{ss'}^{(*)},$$

$$Q_{ss'} = Q_{ss'}^{(+)} + \alpha Q_{ss'}^{(-)}, \quad \alpha = \frac{M_b - M_a}{M_b + M_a}, \quad (5)$$

где M_a и M_b - массы ядер с зарядами Z_a и Z_b /1/.

2. Вычисление матричных элементов

Явный вид выражений для $H_{ss'}$ и $Q_{ss'}$ через однократные интегралы в сферических координатах $\vec{z} = \{\xi, \zeta, \varphi\}$ приведен в работе /2/. В этих координатах решения $\phi_s(\vec{z}; k, R)$ с заданным набором квантовых чисел s можно представить в виде

$$\phi_s(\vec{z}; k, R) = N_{qm}(k, R) \Pi_{mq}(\xi; k, R) \Sigma_{mq}(\zeta; k, R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{cases}. \quad (6)$$

Алгоритм вычисления радиальных (РКСФ) $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$ и угловых (УКСФ) $\Sigma_{mq}(\zeta; k, R)$ кулоновских сферических функций непрерывного спектра подробно изложен в работе /4/. Они определяются как регулярные решения задач Штурма-Лиувилля:

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \Pi_{mq}(\xi; k, R) + [-\lambda_{mq} + c^2(\xi^2 - 1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1}] \Pi_{mq}(\xi; k, R) = 0, \quad (7a)$$

$$\Pi_{mq}(1; k, R) < \infty, \quad 1 \leq \xi < \infty;$$

$$\Pi_{mq}(\xi; k, R) = (c\xi)^{-1} \sin(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{q+m}{2} \pi + \Delta_{mq}) + O\{(c\xi)^{-2}\} \quad (7b)$$

при $c\xi \gg 1$;

$$\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}\Xi_{mq}(z; k, R) + \left[\lambda_{mq} + c^2(1-z^2) + \beta z - \frac{m^2}{1-z^2} \right] \Xi_{mq}(z; k, R) = 0,$$

$$\Xi_{mq}(\pm 1; k, R) < \infty, \quad -1 \leq z \leq 1, \quad (7b)$$

где

$$a = R(Z_a + Z_g); \quad \beta = R(Z_g - Z_a); \quad c = \frac{kR}{2};$$

$\lambda_{mq} = \lambda_{mq}(k, R)$ - константа разделения, определяемая при заданных m, q, Z_a, Z_g как собственное значение задачи Штурма-Лиувилля (7b); $\Delta_{mq} = \Delta_{mq}(k, R)$ - фаза радиального решения, асимптотическое поведение которой при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ подробно исследовано в работе^{/5/}.

Нормировка $N_{mq}(k, R)$ решения (6) вычислена в работе^{/4/} и равна:

$$N_{mq}(k, R) = k \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2}, \quad (8)$$

если УКСФ нормированы условием

$$\int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(z; k, R) dz = 1. \quad (9)$$

Матричные элементы (4) могут быть представлены в виде

$$H_{ss'}(k, k', R) = H_{ss'}(k, R) \delta(k - k') + h_{ss'}(k, k', R),$$

$$Q_{ss'}(k, k', R) = Q_{ss'}(k, R) \delta(k - k') + q_{ss'}(k, k', R), \quad (10)$$

где $h_{ss'}(k, k', R)$ и $q_{ss'}(k, k', R)$ не содержат особенности при $k = k'$. В данной работе вычислены диагональные матричные элементы $H_{ss'}(k, R)$ и $Q_{ss'}(k, R)$. При решении задачи трех тел в адиабатическом представлении^{/7/},

для которой матричные элементы (10) служат эффективными потенциалами, величины $H_{ss'}(k, R)$ и $Q_{ss'}(k, R)$ являются ведущими и их необходимо учитывать в первую очередь.

Заменяя в интегралах (4) радиальную функцию $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$ ее асимптотическим выражением (7б), учитывая условие нормировки (9), а также используя известную формулу

$$\int_0^{\infty} \cos\{c(c')\xi\} d\xi = \pi \delta(c - c') = \frac{2\pi}{R} \delta(k - k'), \quad (11)$$

найдем выражение для $H_{ss'}(k, R)$ и $Q_{ss'}(k, R)$:

$$Q_{ss'}^{(+)}(k, R) = 0. \quad (12a)$$

Матричные элементы $H_{ss'}^{(+)}(k, R)$ и $H_{ss'}^{(*)}(k, R)$ отличны от нуля только для состояний s и s' с одинаковой четностью p :

$$H_{ss}^{(+)}(k, R) = \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \Xi_{mq}}{\partial R} \right)^2 dz + R^{-2} \int_{-1}^1 (1-z^2) \left(\frac{\partial \Xi_{mq}}{\partial z} \right)^2 dz, \quad (12б)$$

$$H_{ss}^{(*)}(k, R) = \frac{k^2}{2},$$

а матричные элементы $Q_{ss'}^{(-)}(k, R)$ и $H_{ss'}^{(-)}(k, R)$ отличны от нуля только для состояний s и s' с различной четностью p .

$$Q_{ss'}^{(-)}(k, R) = -\frac{k}{2} \sin(\Delta_{mq} - \Delta_{mq'} - \frac{q - q'}{2} \pi) \cdot \int_{-1}^1 z \Xi_{mq}(z; k, R) \Xi_{mq'}(z; k, R) dz, \quad (12в)$$

$$\begin{aligned}
H_{ss'}^{(+)}(k, R) = & \left\{ -\frac{k}{2} \sin\left(\Delta_{mq} - \Delta_{mq'} - \frac{q-q'}{2}\pi\right) \right\} \cdot \\
& \cdot \left[\int_{-1}^1 \left(\Sigma_{mq} \frac{\partial \Sigma_{mq'}}{\partial R} - \frac{\partial \Sigma_{mq}}{\partial R} \Sigma_{mq'} \right) z dz + \right. \\
& \left. + \frac{1}{R} \int_{-1}^1 \left(\Sigma_{mq} \frac{\partial \Sigma_{mq'}}{\partial z} - \frac{\partial \Sigma_{mq}}{\partial z} \Sigma_{mq'} \right) (1-z^2) dz \right] + \\
& + \frac{k}{2} \frac{\partial}{\partial R} (\Delta_{mq} + \Delta_{mq'}) \cos\left(\Delta_{mq} - \Delta_{mq'} - \frac{q-q'}{2}\pi\right) \cdot \\
& \cdot \int_{-1}^1 \Sigma_{mq} \Sigma_{mq'} z dz.
\end{aligned}$$

Легко видеть, что вычисление сингулярной части матричных элементов, связывающих состояния непрерывного спектра, сводится к вычислению интегралов по УКСФ. Алгоритм вычисления интегралов от УКСФ с точностью $\sim 10^{-5}$ изложен в работе^{/4/}.

На рис. 1а и 1б приведены диагональные матричные элементы $H_{ss}^{(+)}(k, R)$ для состояний с квантовыми числами $s = \{00\}$ и $s = \{10\}$ для значений $k = 0, 2; 0, 4; 1; 5; 10$.

На рис. 2а, 2б и 3а, 3б представлены матричные элементы $Q_{ss'}^{(-)}(k, R)$ и $H_{ss'}^{(-)}(k, R)$ для пар состояний $s = [00g] = \{00\}$, $[00u] = \{10\}$ и $[10g] = \{20\}$ и при значениях $k = 0, 2; 0, 4; 1; 5; 10$.

3. Асимптотика матричных элементов при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$

При $c \ll 1$ с помощью стандартной схемы теории возмущений можно получить для УКСФ разложения по степеням c^2 в виде^{/1/}

$$\Sigma_{mq}(z; k, R) = P_\ell^m(z) \left[\frac{2\ell+1}{2} \cdot \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} + O(c^2). \quad (13)$$

При $c \gg 1$, используя схему эталонного уравнения^{/1/}, можно получить асимптотику УКСФ в области $z \sim 0$, вне которой УКСФ экспоненциально малы.

$$\Sigma_{mq}(z; k, R) = c^{\frac{1}{2}} u_q(\sqrt{c}z) (1 + O(c^{-2})), \quad (14)$$

где $u_q(x)$ - нормированные волновые функции гармонического осциллятора. Воспользовавшись асимптотическим выражением для фазы рассеяния^{/5/}

$$\Delta_{mq}(k, R) = \sigma_\ell(k) + O(c^2) \quad \text{при } c \ll 1, \quad (15)$$

$$\Delta_{mq}(k, R) = -\frac{Z_a + Z_\ell}{k^2} \ln \frac{kR}{2} + O(c^2) \quad \text{при } c \gg 1,$$

где $\sigma_\ell(k)$ - кулоновская фаза рассеяния на притягивающем потенциале с зарядом $Z = Z_a + Z_\ell$, нетрудно получить асимптотику матричных элементов при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ (при конечных q, m и k ; $\ell = q + m$).

При $R \rightarrow 0$

$$H_{ss}^{(+)}(k, R) = \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} + k^2 \cdot \frac{m^2}{2(2\ell-1)(2\ell+3)} + k^2 O(c^2), \quad (16a)$$

$$Q_{ss'}^{(-)}(k, R) = -\frac{k}{2} \cos(\sigma_\ell - \sigma_{\ell+1}) \left[\frac{(\ell+m+1)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)} \right]^{\frac{1}{2}} + k \cdot O(c^2),$$

$$H_{ss'}^{(-)}(k, R) = \frac{2(\ell+1)}{R} Q_{ss'}^{(-)}(k, R) + k^2 \cdot O(c).$$

При $R \rightarrow \infty$

$$H_{ss}^{(+)}(k, R) = \frac{k}{4R} (2q+1) - \frac{3}{32R^2} [(2q+1)^2 + 5] + k^2 \cdot O(c^{-3}),$$

$$Q_{ss'}^{(-)}(k, R) = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{k(q+1)}{R} \right\}^{1/2} + k \cdot O(c^{-3/2}),$$

$$H_{ss'}^{(-)}(k, R) = k \cdot Q_{ss'}^{(-)}(k, R) + k^2 \cdot O(c^{-3/2}). \quad (I66)$$

Приведенная асимптотика справедлива для пар состояний $|c\rangle = |ks\rangle = |kq, m\rangle$ и $|c'\rangle = |ks'\rangle = |kq', m\rangle$, различающихся только четностью. Более общие формулы могут быть получены аналогично. Отметим, что асимптотика $H_{ss'}^{(-)}(k, R)$ при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ определяется только вторым слагаемым в выражении (I2в).

Из асимптотического вида $H_{ss'}^{(+)}(k, R)$ при $R \rightarrow 0$ видно, что учет диагонального матричного элемента $H_{ss'}^{(+)}(k, R)$ при численных расчетах в адиабатическом базисе весьма важен для получения правильной асимптотики волновой функции задачи трех тел при $R \ll 1$.

Отметим, что асимптотика рассматриваемых матричных элементов при $R \rightarrow \infty$ содержит дробные степени R , что существенно отличает ее от асимптотики матричных элементов, связывающих состояния дискретного спектра^{/6/} задачи двух центров, которая содержит лишь целые степени R , и от экспоненциально падающей асимптотики матричных элементов, связывающих состояния дискретного и непрерывного спектров^{/10/}.

4. Выводы

Вычисленные ведущие члены матричных элементов, связывающих состояния непрерывного спектра, вместе с матричными элементами, связывающими состояния дискретного спектра^{/2/}, и матричными элементами, связывающими состояния дискретного и непрерывного спектров^{/3/} задачи двух кулоновских центров, представляют со-

бою практически полный набор эффективных потенциалов задачи трех тел в адиабатическом представлении. Как показывает специальное исследование^{/7/}, они позволяют находить энергию связи трех тел с высокой точностью.

Вычисления несингулярных частей матричных элементов $h_{ss'}(k, k', R)$ и $q_{ss'}(k, k', R)$ связывающих состояния непрерывного спектра, представляет собой особую, и, по-видимому, довольно сложную вычислительную задачу.

При некоторых комбинациях значений k и R , при которых РКФ совпадают с одноцентровой кулоновской функцией в сферических координатах (ξ, ζ) и разлагаются в сходящиеся ряды по кулоновским функциям^{/5,8,9/}, эта задача, по-видимому, может быть решена.

Таблица I
Матричный элемент $\langle k00 | H^{(+)} | k00 \rangle$ при различных k и R

$R \backslash k$	0,4	1	2	5
3,	-	-	0,08266 0,11459	0,34368 0,36459
5,	-	0,01920 0,03113	0,07263 0,08125	0,22432 0,23125
10	-	0,01815 0,02031	0,04353 0,04531	-
15	0,00328 ^{a)} 0,00453 ^{b)}	0,01375 0,01458	0,03049 0,03125	-
20	0,00320 0,00383	0,01088 0,01133	-	-

a) Вычислено согласно алгоритму работы^{/3/}.

b) Вычислено по асимптотической формуле (I66).

Таблица 2
Матричный элемент $\langle k00 | Q^{(+)} | k10 \rangle$ при различных k и R .

$R \backslash k$	0,4	I	2	5
3	-	-	-0,38267 -0,40825	-0,64500 -0,64550
5	-	-0,18370 -0,2236I	-0,30895 -0,31623	-0,49988 -0,50000
10	-	-0,14800 -0,1581I	-0,22252 -0,2236I	-
15	-0,05714 ^{a)} -0,08165 ^{б)}	-0,12534 -0,12910	-0,18219 -0,18257	-
20	-0,05482 -0,0707I	-0,10992 -0,11180	-0,15794 -0,1581I	-

а) Вычислено согласно алгоритму работы /3/.

б) Вычислено по асимптотической формуле (I6б).

Таблица 3
Матричный элемент $\langle k00 | H^{(+)} | k10 \rangle$ при различных k и R .

$R \backslash k$	0,4	I	2	5
3	-	-	-0,78417 -0,81650	-3,11577 -3,22749
5	-	-0,24300 -0,2236I	-0,61189 -0,63246	-2,44893 2,50000
10	-	-0,16055 -0,1581I	-0,43774 -0,4472I	-
15	-0,04440 ^{a)} -0,03266 ^{б)}	-0,12862 -0,12910	-0,35967 -0,36515	-
20	-0,03534 -0,02828	-0,1109I -0,11180	-0,31257 -0,31623	-

а) Вычислено согласно алгоритму работы /3/.

б) Вычислено по асимптотической формуле (I6б).

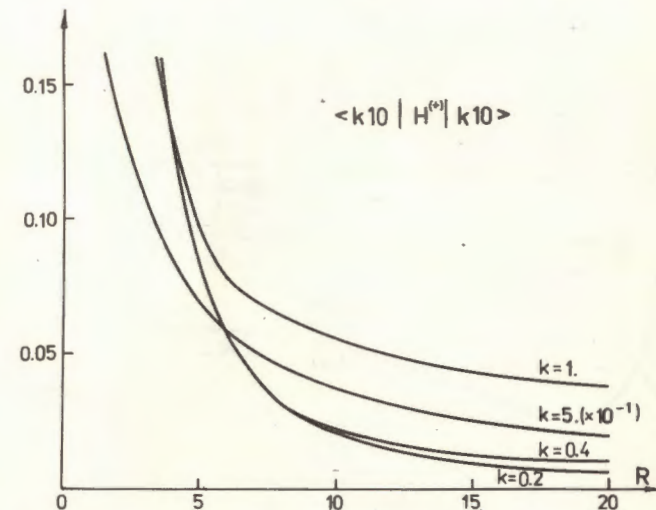
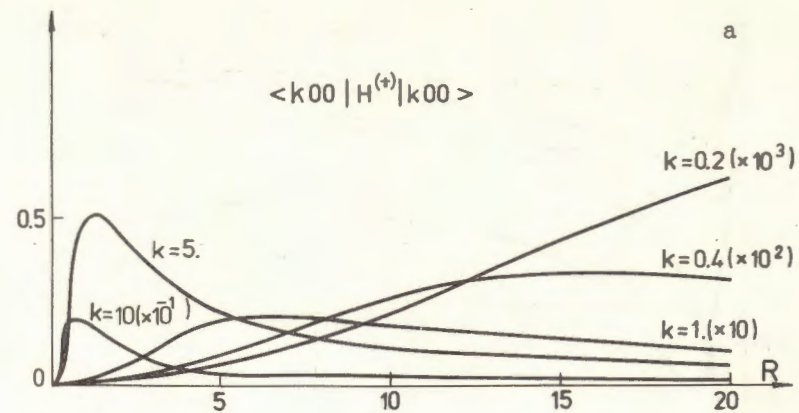


Рис. I. Матричные элементы.

$$H_{ss}^{(+)}(k, R) = \langle k00 | H^{(+)} | k00 \rangle \quad (a)$$

и

$$H_{ss}^{(+)}(k, R) = \langle k10 | H^{(+)} | k10 \rangle \quad (б)$$

для состояний $|c\rangle = |ks\rangle = |kq, m\rangle$
при значениях импульса $k = 0,2; 0,4; I; 5; 10$.

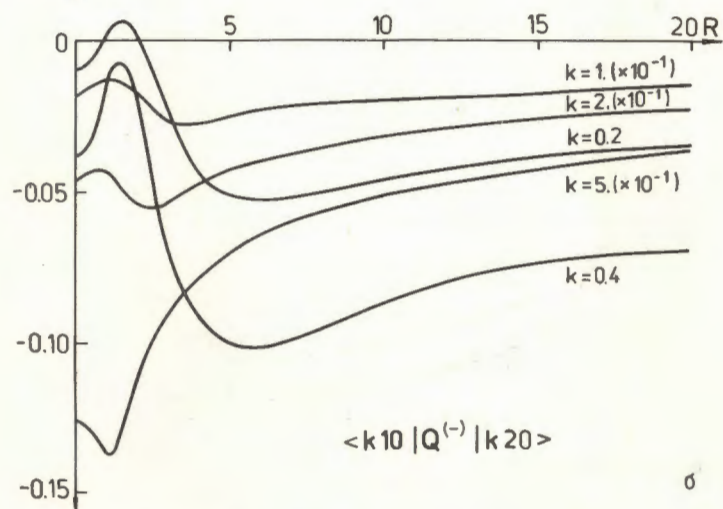
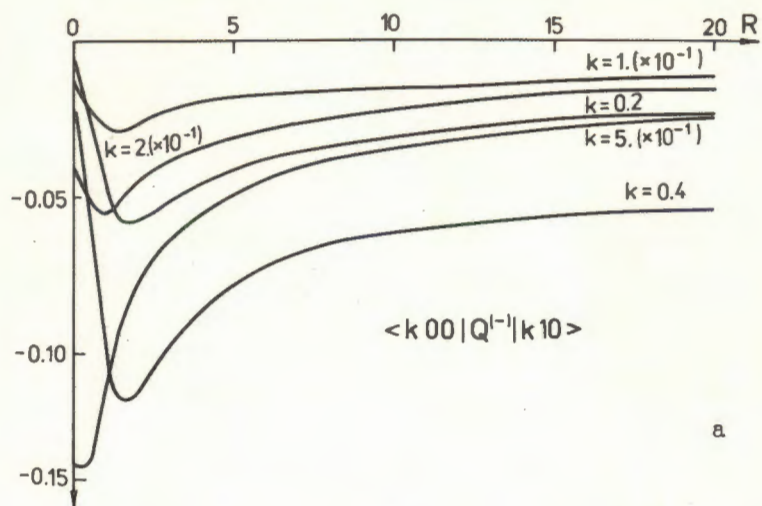


Рис. 2. Матричные элементы.

$$Q_{ss'}^{(-)}(k, R) = \langle k q m | Q^{(-)} | k q' m \rangle$$

и связывающие состояния $|c\rangle = |k q m\rangle$ и $|c'\rangle = |k q+1 m\rangle$ при значениях $m=0$ и $q=0(a), 1(\delta)$.

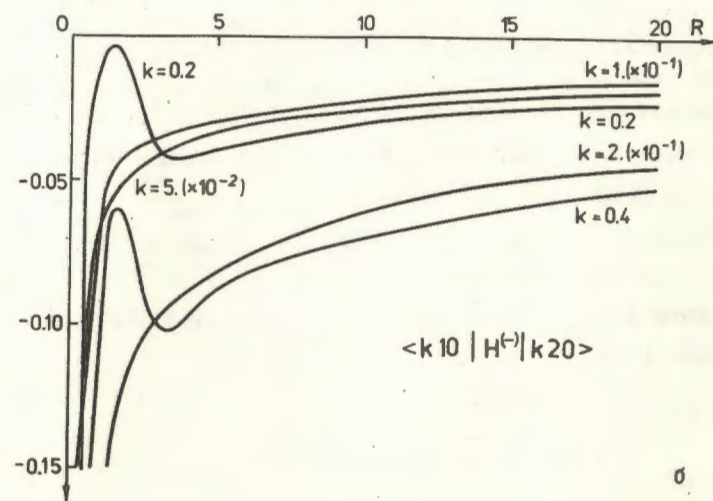
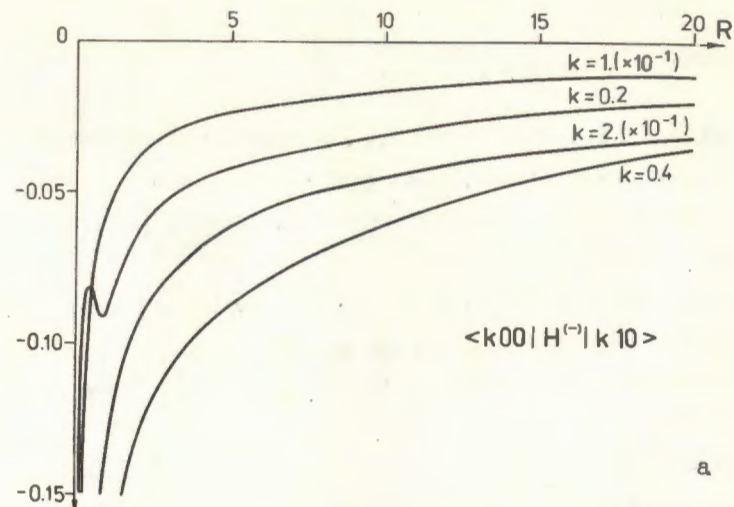


Рис. 3. Матричные элементы.

$$H_{ss'}^{(-)}(k, R) = \langle k q m | H^{(-)} | k q' m \rangle$$

для тех же пар состояний $|c\rangle$ и $|c'\rangle$, что и на рис. 2.

Л и т е р а т у р а

1. Комеров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферические и кулоновские сферические функции. М., Наука, 1976.
2. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Truskova N.F. J.Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1978, 11, p. 3861.
3. Ponomarev L.M., Puzynina T.P. and Somov L.N., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1977, 10, p. 1335.
4. Ponomarev L.I. and Somov L.M., J. Comp. Phys., 1976, 20, p. 183.
5. Abramov D.I., Kazakov A.I., Ponomarev L.I., Slavjanov S.Yu. and Somov L.N., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1979, 12, p. 1761.
6. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. J. Phys. B: Atom. and Molec. Phys., 1979, 9, p. 2255.
7. Виницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф. ОИЯИ Р4-13036, Дубна, 1980.
8. Абрамов Д.И., Комеров И.В. ТМФ, 1976, 29, с. 235.
9. Трускова Н.Ф. ОИЯИ Р2-11988, Дубна, 1978.
10. Абрамов Д.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н., ОИЯИ, Р4-11729, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел

26 декабря 1979 года.