

22/xi.66

С 323  
П-563

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 3011



ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Л.И. Пономарев

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА 3-х ТЕЛ,  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПО ЗАКОНУ КУЛОНА

1966

Р4 - 3011

Л.И. Пономарев

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА 3-х ТЕЛ,  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПО ЗАКОНУ КУЛОНА

4648/1 шр

Направлено в ЯФ

Объединенная библиотека  
Ядерной физики  
БИБЛИОТЕКА

Общее решение задачи двух центров <sup>1/1</sup>, полученное в работе <sup>2/2</sup>, позволяет по-новому подойти к решению многих задач, которые возникают при изучении процессов с участием 3-х частиц, взаимодействующих по закону Кулона. В частности, в этих задачах становится возможным практически осуществлять метод Борна-Оппенгеймера <sup>3/3</sup>, а также "метод возмущенных стационарных состояний", согласно терминологии Мотта и Мессии <sup>4/4</sup>.

Последнее особенно важно, так как в теории низкоэнергетического рассеяния атомов до сих пор не создано метода, равного по общности методу Борна для столкновений быстрых частиц.

Гамильтониан системы из 3-х частиц, взаимодействующих по закону Кулона, равен:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_{\vec{R}_1} - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_{\vec{R}_2} - \frac{\hbar^2}{2M_3} \Delta_{\vec{R}_3} - \frac{Z_1 Z_3}{|\vec{R}_3 - \vec{R}_1|} - \frac{Z_2 Z_3}{|\vec{R}_3 - \vec{R}_2|} + \frac{Z_1 Z_2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|}. \quad (1)$$

(Гамильтониан записан для случая взаимодействия одной отрицательной и двух положительных частиц. В дальнейшем для удобства будем называть отрицательную частицу с зарядом  $Z_3$  электроном, а положительные частицы с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$  - ядрами). Отделяя движение центра инерции в координатах Якоби <sup>5/5</sup>

$$\vec{R} = \frac{M_1 \vec{R}_1 + M_2 \vec{R}_2 + M_3 \vec{R}_3}{M_1 + M_2 + M_3}; \quad \vec{R}_2 - \vec{R}_1; \quad \vec{r} = \vec{R}_3 - \frac{M_1 \vec{R}_1 + M_2 \vec{R}_2}{M_1 + M_2}; \quad (2)$$

вводя обозначения:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}; \quad \frac{1}{M} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}; \quad \mu = M_1 + M_2 + M_3; \quad (3)$$

х) В своей книге "Теория атомных столкновений" они писали: "Этот метод вычисления амплитуд рассеяния приводит к значительно более точным результатам нежели предыдущие методы... Однако вследствие значительной трудности получения точных возмущенных функций этот метод имел до сих пор весьма ограниченное применение. Мы обсуждаем его здесь, так как надеемся, что в дальнейшем он окажется весьма плодотворным".

$$R = |\vec{R}_2 - \vec{R}_1|; \quad r_1 = |\vec{R}_3 - \vec{R}_1|; \quad r_2 = |\vec{R}_3 - \vec{R}_2|; \quad (3)$$

и выбирая единицы измерения, в которых  $\hbar = m = Z_3 = 1$ , получим:

$$H = -\frac{1}{2\mu} \Delta_{\vec{R}} + H$$

$$H = -\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + H_0 \quad (4)$$

$$H_0 = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}.$$

Согласно Борю и Оппенгеймеру<sup>/3/,/4/</sup> ищем решение уравнения Шредингера

$$H \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \epsilon \Psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (5)$$

в виде разложения

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_n \chi_n(\vec{R}) \phi_n(\vec{R}; \vec{r}), \quad (6)$$

где  $\phi_n(\vec{R}; \vec{r})$  — собственные функции оператора  $H_0$  при фиксированном значении  $\vec{R}$ ,  
 $n = \{N, \ell, m\}$  — полный набор квантовых чисел для решения уравнения Шредингера  
 задачи двух центров<sup>/1/,/2/</sup>;

$$H_0 \phi_n(\vec{R}; \vec{r}) = E_n(\vec{R}) \phi_n(\vec{R}; \vec{r}). \quad (7)$$

Подставляя разложение (6) в уравнение Шредингера (5), сведем его к следующей системе уравнений<sup>/5/</sup>:

$$-\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} \chi_n(\vec{R}) + \frac{1}{M} Q_{mn}(\vec{R}) \nabla_{\vec{R}} \chi_n(\vec{R}) + \frac{1}{2M} K_{mn}(\vec{R}) \chi_n(\vec{R}) + \\ + [E_m(\vec{R}) + \frac{Z_1 Z_2}{R}] \chi_n(\vec{R}) = \epsilon_m \chi_n(\vec{R}). \quad (8)$$

Разложив волновую функцию ядерного движения  $\chi_n(\vec{R})$  по парциальным волнам

$$\chi_n(\vec{R}) = \sum \chi_{n_k L}(\vec{R}) Y_{L\Lambda}(\Theta, \Phi) \quad (9)$$

и вводя обозначение  $\chi_j(\vec{R}) = \chi_{n_k L}(\vec{R})$ , можно свести задачу к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$-\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{d\chi_j}{dR} \right) + 2Q_{1j}(R) \frac{d\chi_j}{dR} + K_{1j}(R) \chi_j = \\ = 2M(\epsilon_j - W_1(R)) \chi_j. \quad (10)$$

В большинстве интересных случаев волновая функция ядерного движения  $\chi_j$  не зависит от угловых переменных  $\Theta$  и  $\Phi$ . Тогда:

$$W_j(R) = W_n(R) = E_n(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R} \quad (11)$$

$$Q_{ij}(R) = \frac{R}{R} \int d\vec{r} \phi_i(\vec{r}; R) (-\nabla_{\vec{r}}) \phi_j(\vec{r}; R)$$

$$K_{ij}(R) = \int d\vec{r} \phi_i(\vec{r}; R) (-\Delta_{\vec{r}}) \phi_j(\vec{r}; R),$$

где  $i = \{N' \ell' m' k' L' \Lambda'\}$ ,  $j = \{N \ell m k L \Lambda\}$ .

При этом, как легко видеть, в случае дискретного спектра ( $\epsilon_L < 0$ ) энергия системы  $\epsilon_i$  и волновые функции  $\chi_i(R)$  зависят от шести квантовых чисел: три  $(N \ell m)$  — от электронного движения и три  $(k L \Lambda)$  — от ядерного. Для  $k = L = \Lambda = 0$ , очевидно,  $\nu = i$ .

В работах<sup>/2/</sup> изложен алгоритм для вычисления волновых функций  $\phi_n(R; \vec{r})$  и термов  $W_n(R)$  задача двух центров, а также матричных элементов  $Q_{ij}(R)$  и  $K_{ij}(R)$  по этим функциям. На рис. 1 приведены диагональные матричные элементы  $K_{ii}$  для  $\sigma$ -термов системы  $Z_1$  и  $Z_2$  при  $Z_1 = Z_2 = 1$ ; при  $R \rightarrow 0$  они ведут себя как  $\frac{\ell(\ell+1)}{R^2}$ , а при  $R \rightarrow \infty$  стремятся к пределу  $1/4 n^2$ , где  $n$  — главное квантовое параболическое число терма. (Для  $\sigma$ -термов системы  $Z_1 = Z_2 = 1$   $n = N - \epsilon + (\ell/2)$ , где  $\epsilon \text{nt}(x)$  означает целую часть от  $x$ <sup>/3/</sup>).

Рис. 2 и 3 дают представление соответственно о диагональных и недиагональных матричных элементах системы  $Z_1$  и  $Z_2$  при  $Z_1 = 1$ ;  $Z_2 = 2$ ;

$$K_{ij} = K_{ij}^{(+)} + \kappa K_{ij}^{(-)} + \kappa^2 \tilde{K}_{ij}$$

$$Q_{ij} = Q_{ij}^{(+)} + \kappa Q_{ij}^{(-)} \quad (12)$$

$$\kappa = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1},$$

где  $M_1$  и  $M_2$  — массы ядер с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$ . Эти матричные элементы описывают переходы  $2p\sigma \rightarrow 1s\sigma$  и позволяют описать, например, процессы столкновений  $\alpha$ -частиц с атомами водорода.

## Возможные применения

Отметим некоторые задачи, которые теперь могут быть решены после преодоления математических трудностей, связанных с интегрированием системы уравнений (10).

1. Задачи о несимметричной перезарядке типа:



для решения которых пока не предложено единого удовлетворительного метода<sup>/8/</sup>. К ним, в частности, относится т.н. задача о перехвате в мезоатомной физике:



которую теперь можно решать численно по крайней мере в приближении двух взаимодействующих уровней  $F_m$  и  $F_n$ . Процессы такого типа сопровождают все опыты по изучению слабых взаимодействий  $\mu^-$ -мезонов в веществе и тщательно изучались экспериментально<sup>/7/</sup> и теоретически<sup>/8/</sup>. При теоретическом вычислении констант перехвата для реакции (14) предполагалось, что наибольший вклад в сечение перехвата  $\mu^-$ -мезона от водорода к углероду и кислороду дают пересечения термов при сравнительно небольших ( $R \approx 10$ ) расстояниях между ядрами. Из работ<sup>/2/</sup> следует, однако, что такие пересечения отсутствуют и потому указанный расчет необходимо повторить с учетом результатов этих работ.

2. К этому же типу относятся задачи о вычислении сечений процессов образования мезомолекул при столкновениях:



а также описание катализа ядерных реакций  $\mu^-$ -мезонами<sup>/5/</sup>:



3. До сих пор были сделаны только отдельные попытки<sup>/6,9/</sup> описать процессы радиационной перезарядки типа:



В рамках метода возмущенных стационарных состояний вероятность такого процесса определяется усреднением по ядерному движению вероятности  $A_{1j}(R)$  радиационного перехода при фиксированном значении  $R$ <sup>/10/</sup>:

$$A_{1j}(R) = \frac{4}{3} \alpha^3 \omega_0 m \omega_{1j}^3 |\vec{r}_{1j}|^2. \quad (18)$$

Здесь  $\alpha$  - постоянная тонкой структуры,

$$m = 207; \quad \omega_0 = 4,1 \cdot 10^{16} \text{ сек}$$

$$\omega_{1j} = E_i - E_j$$

$$\vec{r}_{1j} = \int d\tau \phi_i \vec{r} \phi_j \quad - \text{матричный элемент}$$

дипольного перехода между состояниями  $E_1$  и  $E_2$  системы  $p\mu^-Z$  при фиксированном значении  $R$ .

Результаты работы /2/ позволяют вычислить интеграл (18), а, следовательно, рассчитать и процесс (17).

4. Величина  $A_{1j}(R)$  определяет вероятность радиационных переходов в мезомолекулах. Ее теперь можно и интересно вычислять в связи с работами по поглощению медленных  $\pi^-$ -мезонов в водородосодержащих веществах /11/, а также для объяснения результатов последних работ /12/ по изучению структуры мезорентгеновской серии в химических соединениях.

5. Метод возмущенных стационарных состояний можно применять также при описании процессов столкновения протонов и позитронов с атомами водорода:



и т.д., при расчете которых ранее использовались другие методы.

6. В частности, к этому кругу задач относится вычисление времени жизни  $\pi^-$ -мезона в водороде /13/, знание которого необходимо во многих задачах физики мезонов.

7. В работе /2/ было обнаружено существование высоковозбужденных состояний молекулярных ионов типа  $Z_1, e Z_2$ . Численно решив уравнения:

$$-\frac{1}{2M} \frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{dX_1}{dR} \right) + \{ W_1(R) + \frac{1}{2M} K_{11}(R) \} X_1 = \epsilon_1 X_1, \tag{20}$$

найдем энергии  $\epsilon_1$  этих состояний.

### Энергия связи системы $e^+ e^- e^+$

Используем полученные результаты для вычисления энергии связи  $J$  системы  $e^+ e^- e^+$  (или, что то же, системы  $e^- e^+ e^-$ ). Решая уравнение (20) в приближении потенциала Морзе /14/, получим:

$$V(R) = W_0(R) + \frac{1}{2M} K_{00}(R) = A + D e^{-2a(R-R_0)} - 2D e^{-a(R-R_0)} \tag{21}$$

$$J = D - \frac{\omega_0}{2} (1 - \omega_0 / 8D);$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{M}}; \quad k = 2aD = V''(R_0).$$

При  $M_1 = M_2 = M$ , из формул (3) следует, что  $m = 2/3M_1$  и в этих единицах:

$$M = 3/4. \quad (22)$$

Используя результаты расчетов для  $W_0(R)$  и  $K_{00}(R)$ , получим также:

$$D = V(\infty) - V(R_0) = 0,154$$
$$A = V(\infty) = -0,333 \quad (23)$$

$$R_0 = 2; k = 0,12; \omega_0 = 0,40.$$

Окончательно:

$$J = 0,012 \text{ а.е.} = 0,33 \text{ эв.} \quad (24)$$

Вариационный расчет дает в этом случае <sup>/15/</sup>:

$$J = 0,326 \text{ эв.} \quad (25)$$

Согласно неожиданно хорошее, если учесть простоту использованных методов, и это является лишним аргументом в пользу правильности такого выбора нулевого приближения при решении задач подобного типа.

Отметим, что уровень в системе  $e^+e^-e^+$  существует лишь при учете адиабатических поправок  $\frac{1}{2M}K_{00}$ , без их учета параметры потенциала Морзе равны <sup>/14/</sup>:

$$D = 0,1026;$$
$$a = 0,6678; \quad (26)$$

и так как при  $M = 3/4$ ,  $\omega_0 > 4D$ , то формулы (21) неприменимы (см. рис. 4).

В заключение выражаю глубокую благодарность С.С. Герштейну за постоянное внимание и интерес к работе, а также Т.П. Пузыниной за большую помощь в численных расчетах на Э.В.М.

#### Л и т е р а т у р а

1. E. Teller, Z. F. Phys. 61, 458 (1930).  
W. G. Baber, H. R. Hasse, Proc. Camb. Phil. Soc. 31, 564 (1938).
- С.С. Герштейн, В.Д. Кривченко, ЖЭТФ, 40, 1481 (1961).
2. Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина, Препринт ОИЯИ, Р-2-3009, Дубна 1966.



3. M. Born, J. Oppenheimer, Ann. d. Phys. 84, 427 (1927).  
Z. f. Phys. 46, 814 (1928).  
Z. f. Phys. 50, 347 (1928).
4. Н. Мотт, Х. Мессен. Теория атомных столкновений, НОТИ, 1936.
5. S. Cohen, D. L. Judd, R. J. Riddell, Phys. Rev. 119, 384 (1960).
6. Дж. Хастед. Физика атомных столкновений. Москва 1965 г.
7. О.А. Займидорога, М.М. Кулюкин, Б. Понтекорво, Р.М. Суляев, А.И. Филиппов, В.И. Цупко-Ситников, Ю.А. Шербаков. ЖЭТФ 44, 1852 (1963).  
В.П. Джелепов, П.Ф. Ермолов, Ю.А. Кушниренко, В.И. Москалев, С.С. Герштейн. ЖЭТФ, 42, 439 (1962).  
С.Г. Басяладзе, П.Ф. Ермолов, К.О. Оганесян. Препринт ОИЯИ Р-2153, Дубна 1965.
8. С.С. Герштейн. ЖЭТФ, 43, 706 (1962).
9. N. F. Mott, N. S. W. Massey, The theory of atomic collisions. third edition, Oxford, 1965.
10. А.Ф. Дунайцев, В.И. Петрухин, Ю.Д. Прокошкин, В.И. Рыкалин. ЖЭТФ, 42, 1880 (1962).  
A. F. Dunaitsev, V. I. Petrukhin, Yu. D. Prokoshkin, Nuovo Cim. 34, 521 (1964).  
Л.И. Пономарев. Ядерная физика 2, 223 (1965).
11. В.Г. Зинов, А.Д. Конин, А.И. Мухин. Ядерная физика 2, 859 (1965).  
В.Г. Зинов, А.Д. Конин, А.И. Мухин. Препринт ОИЯИ Р-2039, Дубна 1965.
12. В.Г. Зинов, А.Д. Конин, А.И. Мухин. Ядерная физика, 2, 859 (1965).
13. H. Bethe, M. Leon, Phys. Rev. 127, 636 (1962).
14. Дж. Слэтер. Электронная структура молекул. Москва, 1965.
15. W. Kolos, C. C. J. Roothaan, R. A. Sack, Rev. Mod. Phys. 32, 178 (1960).

Рукопись поступила в издательский отдел  
4 ноября 1966 г.

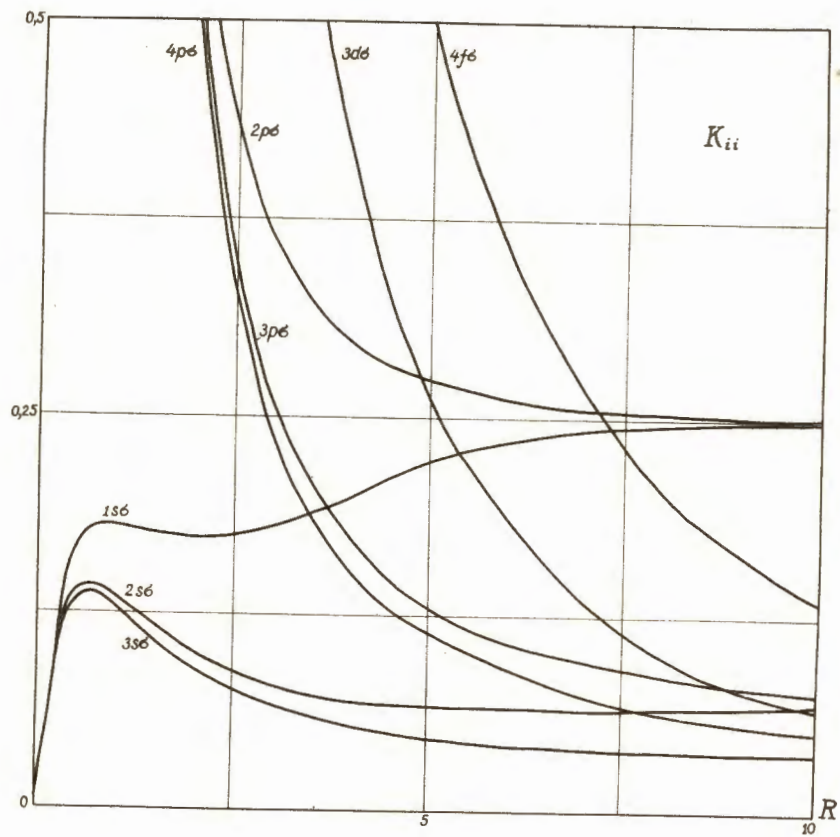


Рис. 1.

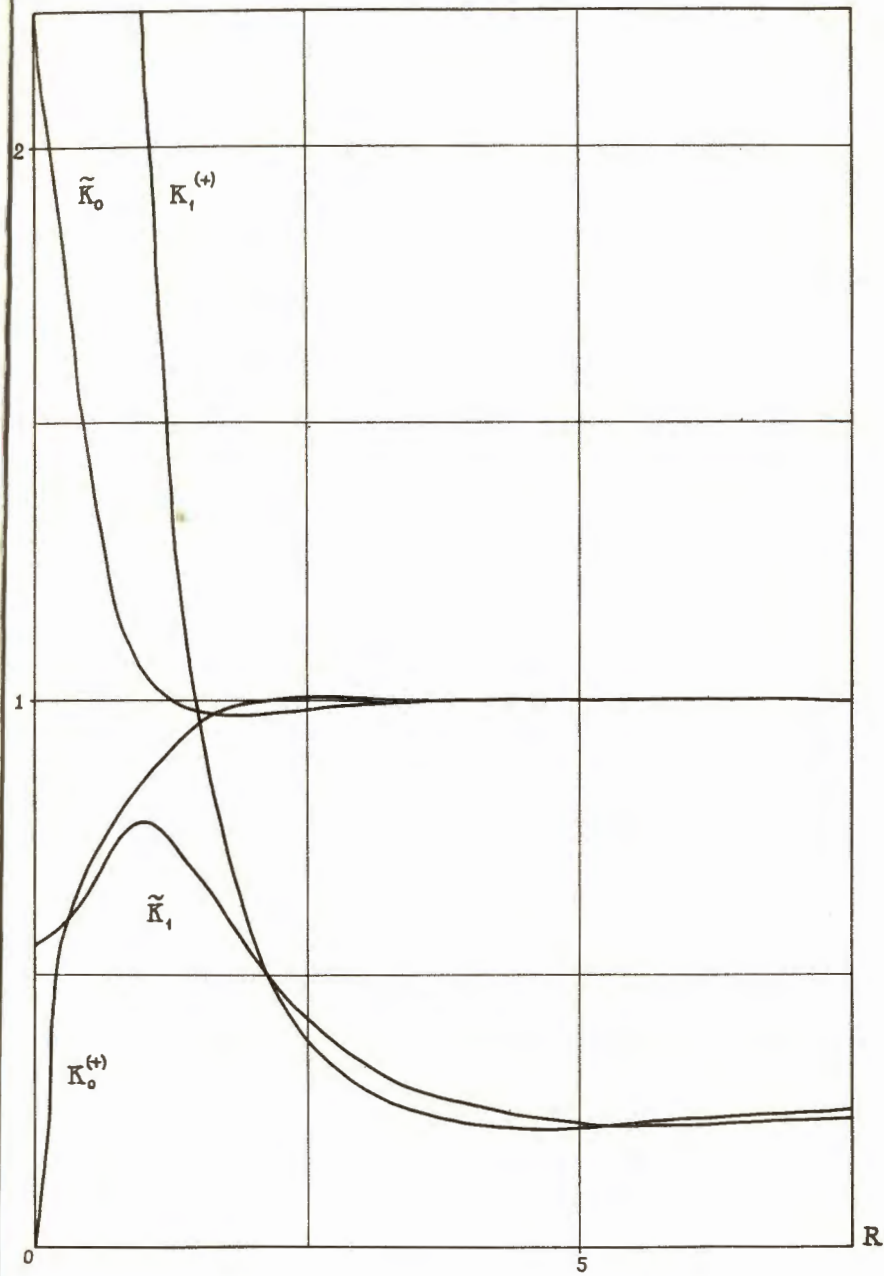


Рис. 2.

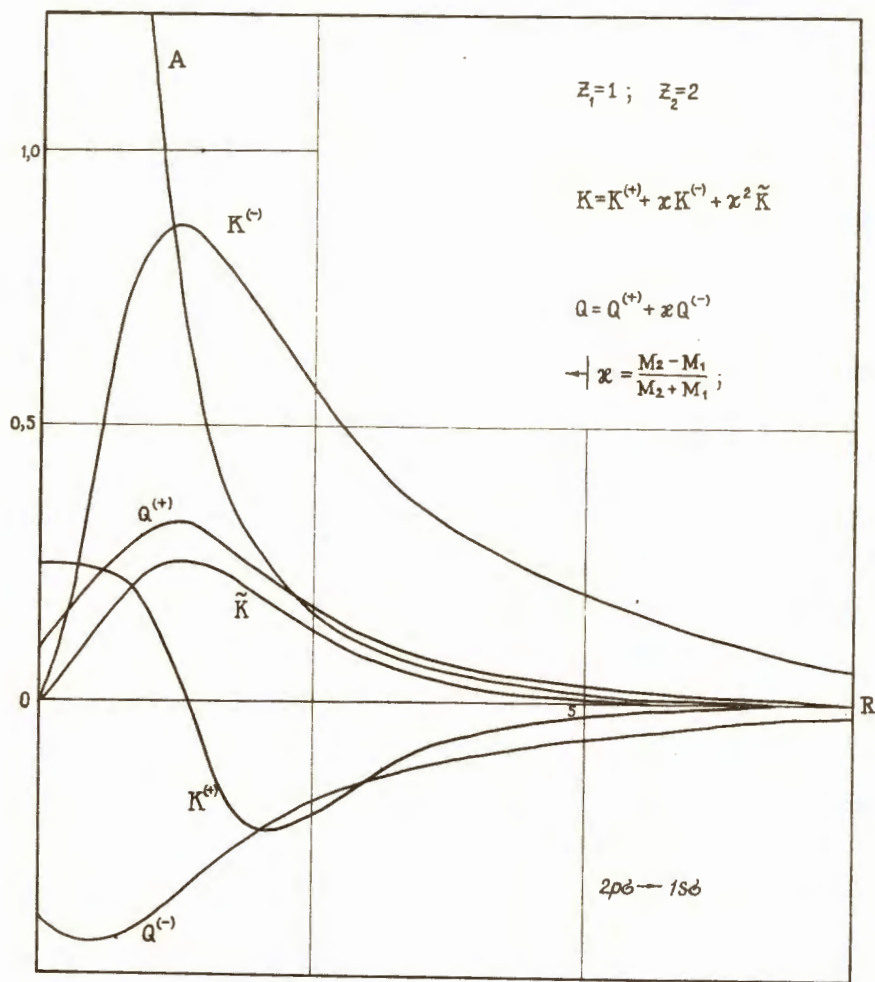


Рис. 3.

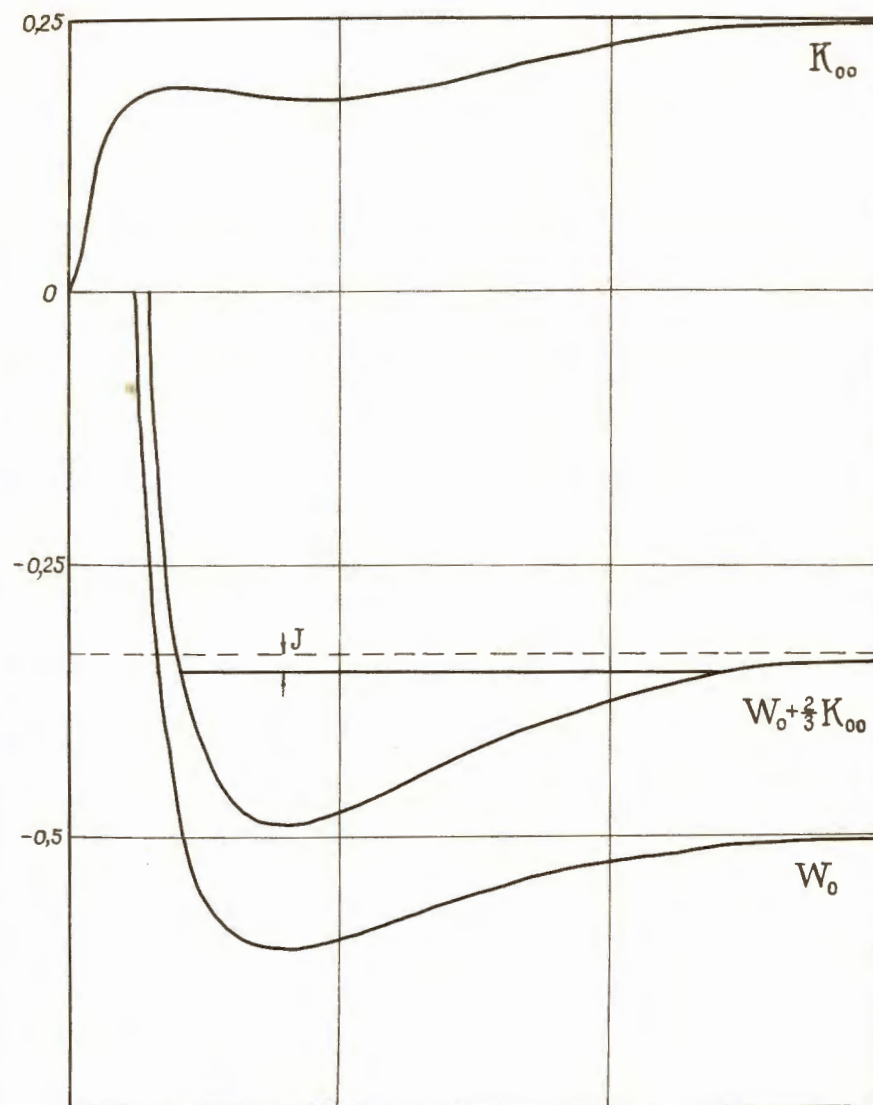


Рис. 4.