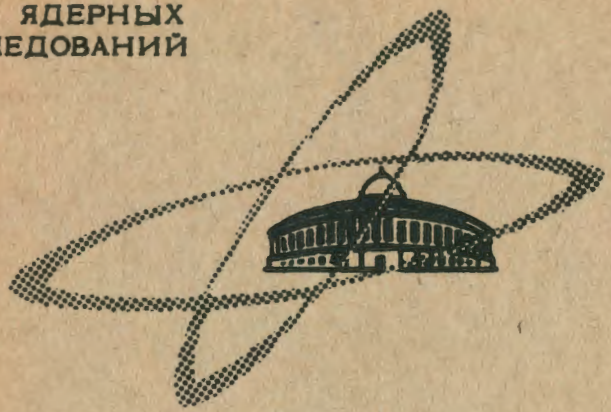


5608

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАП.

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



P4-5608

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

МЕДЛЕННЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ
В СИСТЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ,
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПО ЗАКОНУ КУЛОНА

I.Формулировка метода

1971

P4-5608

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

**МЕДЛЕННЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ
В СИСТЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ,
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПО ЗАКОНУ КУЛОНА**

I. Формулировка метода

Направлено в ЖЭТФ

**Научно-техническая
библиотека
ОИЯИ**

Введение

Квантовомеханическая задача трех тел значительно богаче содержанием по сравнению с хорошо изученной задачей потенциального взаимодействия двух частиц. По существу только с задачи трех тел начинается нетривиальная теория рассеяния, позволяющая изучать процессы с перераспределением частиц и энергии в системе. Вместе с тем технические трудности, связанные с решением задачи трех тел, требуют применения качественно новых методов и моделей.

Исключительная роль кулоновского взаимодействия в физике определяет то особое место, которое среди трехтельных задач занимает задача трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. На ее основе можно строго сформулировать ряд задач атомной и мезоатомной физики и решить их с точностью, обеспечивающей уверенное сравнение с экспериментом.

С другой стороны, кулоновская задача трех тел должна сохранить характерные черты задачи многих тел, не связанные со специфическим характером кулоновского взаимодействия, и мы надеемся, что это обстоятельство позволит в дальнейшем моделировать с ее помощью другие, более сложные системы.

Излагаемая схема вычислений формально применима к любой системе из трех частиц с кулоновским взаимодействием. Однако практически она удобна лишь для случая медленных столкновений в системе из двух положительно заряженных частиц (ядер) и более легкой отрицательно заряженной частицы (электрона или мезона), то есть для описания процессов типа



Для таких систем можно естественно разделить электронное и ядерное движения и выделить в задаче малый параметр - отношение массы электрона к массе ядра, что существенно упрощает ее решение. Такой подход к задаче трех тел является последовательной реализацией метода возбужденных стационарных состояний (В.С.С.) в задаче рассеяния. Метод В.С.С. давно известен в физике атомных столкновений, но до сих пор применяется лишь эпизодически. Более того, последнее время он стал вызывать возражения ^{/1/}. Основная причина такой непопулярности метода состоит в том, что для его применения в случае относительно простой реакции (1) необходимо предварительно решить задачу двух центров квантовой механики (то есть найти электронную часть полной волновой функции), а это уже само по себе представляет громоздкую и трудоемкую задачу. В последнее время, однако, эти трудности преодолены в ряде работ ^{/2,3/}, и тем самым устранено формальное препятствие для применения метода В.С.С. в задачах типа (1).

В настоящей работе последовательно излагается схема вычислений сечений различных реакций при медленных столкновениях в системе (1). Частные случаи использования этой схемы представлены в предыдущих работах авторов /4/.

Постановка задачи и обозначения

Гамильтониан системы из трех частиц с зарядами Z_1 , Z_2 , $-Z_3$ и массами M_1 , M_2 , M_3 равен:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_{\vec{R}_1} - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_{\vec{R}_2} - \frac{\hbar^2}{2M_3} \Delta_{\vec{R}_3} + \frac{Z_1 Z_2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_1|} - \\
 & - \frac{Z_1 Z_3}{|\vec{R}_3 - \vec{R}_1|} - \frac{Z_2 Z_3}{|\vec{R}_3 - \vec{R}_2|}.
 \end{aligned} \tag{2}$$

После введения координат Якоби /1/,

$$\begin{aligned}
 \vec{\mathcal{R}} &= \frac{M_1 \vec{R}_1 + M_2 \vec{R}_2 + M_3 \vec{R}_3}{M_1 + M_2 + M_3}, \\
 \vec{R} &= \vec{R}_2 - \vec{R}_1, \quad \vec{r} = \vec{R}_3 - \frac{M_1 \vec{R}_1 + M_2 \vec{R}_2}{M_1 + M_2},
 \end{aligned} \tag{3}$$

он преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M_t} \Delta_{\vec{\mathcal{R}}} - \frac{\hbar^2}{2M_4} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + \\
 & + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 Z_3}{r_1} - \frac{Z_2 Z_3}{r_2},
 \end{aligned} \tag{4}$$

где введены обозначения

$$M_t = M_1 + M_2 + M_3,$$

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2},$$

$$r_1 = |\vec{R}_3 - \vec{R}_1| \quad r_2 = |\vec{R}_3 - \vec{R}_2| \quad R = |\vec{R}_2 - \vec{R}_1|. \quad (5)$$

В дальнейшем для определенности условимся, что $M_3 < M_1, M_2$, частицу с массой M_3 и отрицательным зарядом $-Z_3$ будем называть электроном (или мезоном), а частицы M_1 и M_2 - ядрами, причем без потери общности всегда будем предполагать, что $Z_2 \geq Z_1$.

После отделения движения центра инерции трех частиц уравнение Шредингера системы приобретает вид

$$H \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r}), \quad (6)$$

где E - полная энергия трех тел в системе центра инерции, а гамильтониан H в единицах $\hbar = Z_3 = m = 1$ выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + H_0, \\ H_0 &= -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \\ M &= \frac{M_1 M_2 (M_1 + M_2 + M_3)}{M_3 (M_1 + M_2)^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь H_0 - гамильтониан задачи двух центров, то есть задачи о движении электрона в поле двух неподвижных ядер, удаленных на расстояние R .

Решив уравнение Шредингера

$$H_0 \phi_n(\vec{r}; R) = E_n(R) \phi_n(\vec{r}; R), \quad (8)$$

найдем собственное значение (термы) $E_n(R)$ и собственную функцию $\phi_n(\vec{r}; R)$ дискретного спектра задачи двух центров ($E_n(R) < 0$).

Согласно методу В.С.С. ищем решение исходного уравнения (6) в виде разложения

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{\{n\}} \phi(\vec{r}; R) \psi(\vec{R}) \quad (9)$$

по решениям уравнения (8). Подстановка этого разложения в уравнение (6) и усреднение по координатам электрона приводит к системе дифференциальных уравнений ^{*} для описания ядерного движения

$$\left[-\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} + E_n(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R} \right] \psi_n(\vec{R}) + \frac{1}{2M} \sum_{\{m\}} [2\vec{Q}_{nm}(\vec{R}) \nabla_{\vec{R}} + K_{nm}(\vec{R})] \psi_m(\vec{R}) = E_n(R) \psi_n(\vec{R}). \quad (10)$$

Здесь

$$\vec{Q}_{nm}(\vec{R}) = \int d\vec{r} \phi_n(\vec{r}; R) (-\nabla_{\vec{R}}) \phi_m(\vec{r}; R), \quad (11)$$

$$K_{nm}(\vec{R}) = \int d\vec{r} \phi_n(\vec{r}; R) (-\Delta_{\vec{R}}) \phi_m(\vec{r}; R)$$

^{*} В общем случае разложение (9) должно включать состояния непрерывного спектра задачи двух центров

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{\{n\}} \phi_n(\vec{r}; R) \psi_n(\vec{R}) + \int d\vec{k} \phi_k(\vec{r}; R) \psi_k(\vec{R}), \quad (9a)$$

и вместо системы дифференциальных уравнений (10) мы придем к системе интегродифференциальных уравнений. Если ограничиться рассмотрением медленных столкновений, то интегральный член в разложении (9a) можно опустить, хотя точные границы возникающей при этом погрешности оценить пока нельзя.

$$\begin{aligned}
&= \int d\mathbf{r} \nabla_{\vec{R}} \phi_n(\vec{r}; R) \nabla_{\vec{R}} \phi_m(\vec{r}; R) + \nabla_{\vec{R}} \vec{Q}_{nm}(\vec{R}) = \\
&= H_{nm}(\vec{R}) + \text{div} \vec{Q}_{nm}(\vec{R}) -
\end{aligned}$$

матричные элементы от операторов ядерного движения по волновым функциям задачи двух центров. Из определений (11) следуют важные соотношения для матричных элементов:

$$\begin{aligned}
K_{nm}(\vec{R}) - K_{mn}(\vec{R}) &= 2 \text{div} \vec{Q}_{nm}(\vec{R}), \\
H_{nm}(\vec{R}) = H_{mn}(\vec{R}) \quad Q_{nm}(\vec{R}) &= -Q_{mn}(\vec{R}).
\end{aligned} \tag{12}$$

При $R \rightarrow 0$ термы $E_n(R)$ и функции $\phi_n(\vec{r}; R)$ непрерывно переходят в уровни энергии и волновые функции водородоподобного атома с зарядом ядра $(Z_1 + Z_2)$ и набором сферических квантовых чисел $\{n\} = (N \ell m)$ ^{/5/}. При бесконечном удалении ядер электрон остается либо у ядра Z_1 , либо у ядра Z_2 . В соответствии с этим различают Z_1 -термы, которые при $R \rightarrow \infty$ переходят в уровни энергии водородоподобного атома с зарядом ядра Z_1 и набором параболических чисел $\{n\} = (n_1 n_2 m)$, и Z_2 -термы с набором $\{n'\} = (n'_1 n'_2 m')$. При этом волновые функции $\phi_n(\vec{r}; R)$ переходят в параболические атомные функции $\phi_n(\vec{r}_1)$ и $\phi_{n'}(\vec{r}_2)$ соответственно в Z_1 - и в Z_2 -водородоподобных атомах. Правила соответствия между различными наборами квантовых чисел для любого терма даны в работе ^{/5/}, асимптотические разложения термов и волновых функций при $R \gg 1$ найдены в работах ^{/6/}.

В области конечных R волновые функции $\phi_n(\vec{r}; R)$, термы $E_n(R)$, а также матричные элементы $\vec{Q}_{mn}(\vec{R})$ и

$K_{mn}(\vec{R})$ можно найти только с помощью численных расчетов. В настоящее время такие расчеты не вызывают принципиальных затруднений и уже выполнены для целого ряда систем^{/2,3/}. Более подробно свойства решений задачи двух центров изложены в работах^{/2,5,6/}.

Двухуровневое приближение метода В.С.С.

Двухуровневое приближение метода В.С.С. состоит в том, что в разложении (9) полной волновой функции ограничиваются двумя членами

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \phi_1(\vec{r}; R) \psi_1(\vec{R}) + \phi_2(\vec{r}; R) \psi_2(\vec{R}). \quad (9a)$$

Здесь $\phi_1(\vec{r}; R)$ - волновая функция Z_1 - терма, а $\phi_2(\vec{r}; R)$ - волновая функция Z_2 - терма. Первое слагаемое разложения (9a) при $R \rightarrow \infty$ представляет левую часть реакции (1), а второе - ее правую часть. Как мы покажем в дальнейшем, двухуровневое приближение можно достаточно строго обосновать только для переходов из основного состояния $e Z_1$ - атома в основное состояние $e Z_2$ - атома:

$$Z_1 e(1s) + Z_2 \rightarrow Z_1 + Z_2 e(1s). \quad (1a)$$

В этом приближении анализ существенно упрощается, поскольку матричные элементы (11) между σ -состояниями задачи двух центров сферически-симметричны. В приближении (9a) решение системы уравнений (10) ищем в виде

$$\psi_1(\vec{R}) = \frac{1}{R} \chi_1(R) P_L(\cos \theta). \quad (13)$$

В результате приходим к системе уравнений для радиальных функций $\chi_1(R)$ и $\chi_2(R)$:

$$\frac{d^2 \chi_1}{dR^2} + 2M \left[E - E_1(R) - \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{L(L+1)}{2MR^2} \right] \chi_1 =$$

$$= \sum_{j=1}^2 \left[(K_{ij}(R) - \frac{2}{R} Q_{ij}(R)) \chi_j + 2Q_{ij}(R) \frac{d\chi_j}{dR} \right], \quad (14)$$

где $Q_{ij}(R) = \frac{\vec{R}}{R} \vec{Q}_{ij}(R)$.

Из свойств матричных элементов (П. 2) следует, что

$$K_{ii}(\infty) = -\frac{1}{2}(\kappa \pm 1) E_1(\infty),$$

$$K_{ij}(\infty) = Q_{ij}(\infty) = 0; Q_{ij}(R) \equiv 0, (i,j) = (1,2), \quad (15)$$

где $\kappa = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1}$, а верхний и нижний знаки соответствуют

Z_1 - и Z_2 - термам. С учетом свойств (15) в асимптотической области $R \rightarrow \infty$ система (14) примет вид

$$\chi_1'' + 2M [E - E_1(\infty)] \chi_1 = 0. \quad (14a)$$

Выражение

$$E_1(\infty) = -\frac{Z_1^2}{2} \left[1 - \frac{1}{4M} (\kappa + 1)^2 \right] \quad (16)$$

и аналогичное ему слагаемое в уравнении для функции χ_2 представляют соответственно энергии изолированных ϵZ_1 - и ϵZ_2 -атомов в двухуровневом приближении (система единиц $\epsilon = \hbar = m = 1$).

Нетрудно убедиться, что эти выражения совпадают с точными значения-

ми энергии лишь с точностью до членов $\approx 1/M$ включительно ^{*}).

Для большинства задач (даже мезоатомных, где $M \approx 10$) указанная точность достаточна и все предыдущие расчеты ^{/4,7/} выполнены в этом приближении.

Граничные условия в методе В.С.С.

Основное возражение, которое обычно выдвигают против метода В.С.С., состоит в том, что он приводит к неверным асимптотическим значениям (16) для энергии изолированных атомов ^{/1/}, а вместе с этим и неправильным выражениям для импульсов рассеяния в отдельных каналах реакции. В действительности эта трудность не единственная, причем все существующие проблемы взаимосвязаны. Однако фактически они определяются не методом В.С.С., а его приближенной реализацией.

Заметим, прежде всего, что в методе В.С.С. канал реакции определяется набором параболических квантовых чисел:

^{*}) В важном частном случае $M_1 = M_2$, $\kappa = 0$, $\frac{1}{4M} = \frac{m}{2M_1}$,
 $\frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{2M_1}$. В атомных единицах $e = \frac{1}{h} = M_3 = 1$

$$E_1(\infty) = -\frac{Z_1^2}{2} \left(1 + \frac{1}{2M_1}\right)^{-1} \left[1 - \frac{1}{2M_1} \left(1 + \frac{1}{2M_1}\right)^{-1}\right] \approx -\frac{Z_1^2}{2} \left(1 - \frac{1}{M_1} + \frac{3}{4M_1^2}\right),$$

что лишь немного отличается от разложения точного выражения

$$E_1 = -\frac{Z_1^2}{2} \left(1 + \frac{1}{M_1}\right)^{-1} \approx -\frac{Z_1^2}{2} \left(1 - \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_1^2}\right). \quad (16a)$$

$$(Z_1 e)_{n n_1 n_2 m} + Z_2 \rightarrow Z_1 + (Z_2 e)_{n' n'_1 n'_2 m'} \quad (16)$$

Однако общепринято канал реакции определять набором сферических квантовых чисел:

$$(Z_1 e)_{n \ell m} + Z_2 \rightarrow Z_1 + (Z_2 e)_{n' \ell' m'} \quad (1в)$$

причем граничные условия в каналах с одинаковыми n и разными ℓ и m неразличимы. Поэтому при изучении реакции (1) даже в приближении σ -состояний ($m=m'=0$) мы должны решать $N = (n+n')$ - канальную задачу рассеяния χ' , чтобы в конечном результате выделить канал (1в) из линейной суперпозиции каналов (16). Только в случае реакции (1а), то есть для переходов из основного состояния в основное ($n = n' = 1$), можно ограничиться двухуровневым приближением.

Уже одно это соображение не позволяет в общем случае ограничиться двухуровневым приближением и вынуждает решать систему

$N > n + n'$ уравнений:

$$\frac{d^2 \chi_i}{dR^2} + [2ME - \frac{L(L+1)}{R}] \chi_i = \sum_{j=1}^N [\hat{K}_{ij}(R) \chi_j + 2Q_{ij}(R) \frac{d\chi_j}{dR}] \quad (14а)$$

$$\hat{K}_{ij}(R) = 2MW_1(R) \delta_{ij} + K_{ij}(R) - \frac{2}{R} Q_{ij}(R) \quad ,$$

$$W_i(R) = E_i(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N \quad .$$

*) Приближение σ - термов соответствует пренебрежению влиянием мезона на вращение межъядерной оси в процессе рассеяния и при медленных столкновениях физически оправдано. В общем случае его оправдать труднее ^{18/}, поэтому, строго говоря, число каналов возрастает еще быстрее: $N = n^2 + (n')^2$. Это минимальное число каналов задачи (1в) физически соответствует двухканальному приближению в случае реакции (1а).

Корректно поставленная многоканальная задача рассеяния должна иметь асимптотический вид

$$\tilde{\chi}_i'' + k_i^2 \tilde{\chi}_i = 0. \quad (17)$$

Однако в общем случае для системы (14а) это условие не выполнено, поскольку при $R \rightarrow \infty$ матрицы коэффициентов $\hat{K}(R)$ и $Q(R)$ имеют блочную структуру

$$\left(\begin{array}{c|c} eZ_1 & 0 \\ \hline 0 & eZ_2 \end{array} \right),$$

где диагональные блоки заполнены матричными элементами по волновым функциям Z_1 - и Z_2 - термов соответственно.

В приложении I на частном примере показано, что если при вычислении сечений реакции (16) учитывать по меньшей мере все асимптотически вырожденные σ - состояния, то

$$\sum_{\{i\}} Q_{ij}(\infty) \frac{d\chi_i}{dR} = 0, \quad (18)$$

хотя отдельные $Q_{ij}(\infty) \neq 0$.

Соотношение (18) необходимо для удовлетворения условий (17), но оно недостаточно, поскольку в исходном базисе χ_i матрица $\hat{K}(R)$ недиагональна. Однако, переходя к новому базису $\tilde{\chi}_i$ с помощью ортогонального преобразования A ,

$$\begin{aligned} \tilde{\chi} &= A \chi, \\ \tilde{K}(R) &= A \hat{K}(R) A^{-1}, \quad \tilde{Q}(R) = A Q(R) A^{-1}, \end{aligned} \quad (19)$$

которое определяется из условия диагональности преобразованной матрицы $\tilde{K}(R)$ при $R \rightarrow \infty$, можно записать эквивалентную систему уравнений

$$\frac{d^2 \chi_i}{dR^2} + \left[2ME - \frac{L(L+1)}{R^2} \right] \tilde{\chi}_i = \sum_{\{j\}} \left[\tilde{K}_{ij}(R) \tilde{\chi}_j + 2\tilde{Q}_{ij}(R) \frac{d\tilde{\chi}_j}{dR} \right], \quad (146)$$

для которой граничные условия (17) выполнены.

При этом

$$k_i^2 = 2M\epsilon_i = 2ME - \tilde{K}_{ii}(\infty), \quad (20)$$

а значение E фиксировано выбором начала отсчета энергии столкновения ϵ в одном из каналов реакции. Если все каналы реакции открыты, то энергия столкновения ϵ отсчитывается от верхнего уровня E_N , а полная энергия системы E определяется из условия

$$E = \epsilon + \frac{1}{2M} \tilde{K}_{NN}(\infty). \quad (20a)$$

Отметим важный факт, который мы докажем в приложении II на частном примере основного термина задачи двух центров. Оказывается, одновременно с диагонализацией (19) матрицы $\hat{K}(R)$ мы уточняем значение E_1 энергии изолированного атома, а вместе с ним и значение импульса (20) в каждом канале реакции. Полученное там по теории возмущений выражение для $\tilde{E}_1 = \frac{1}{2M} \tilde{K}_{11}(\infty)$ имеет вид

$$\tilde{E}_1 = E_1 \left[1 - \frac{1}{4M} (\kappa+1)^2 + \frac{0,337}{16M^2} (\kappa+1)^4 \right]. \quad (21)$$

Соотношение (21) получено в предположении, что разложение (9a) включает дискретные состояния задачи двух центров. С учетом непрерывного спектра оно примет вид:

$$\tilde{E}_1 = E_1 + \frac{1}{2M} H_{11} + \frac{1}{(2M)^2} \left(\sum_{n=2}^{\infty} \frac{H_{1n} H_{n1}}{E_1 - E_n} + \int dk \frac{H_{1k} H_{k1}}{E + \frac{k^2}{2M}} \right). \quad (21a)$$

В случае $M_1 = M_2$ придем к формуле

$$\tilde{E}_1 = E_1 \left[1 - \frac{1}{M} + \frac{3}{4M_1^2} + \frac{1}{4M_1^2} (S_{\text{дискр.}} + S_{\text{непр.}}) \right], \quad (21b)$$

где $S_{\text{дискр.}} = 0,337$ и $S_{\text{непр.}} = 0,663$ (14/ *), то есть учет непрерывного спектра приводит для основного состояния к истинному разложению (16а) с точностью до членов $\approx 1/M_1^2$ включительно. При этом вклад непрерывного спектра составляет $\approx 1/6$ от общего вклада членов $\approx 1/M_1^2$ (**).

Таким образом, последовательный учет высших состояний в методе В.С.С. приводит к правильным асимптотическим значениям энергий изолированных атомов, а трудности с граничными условиями вызваны лишь двухуровневым приближением метода.

Метод фазовых функций

В удобных обозначениях система уравнений (14б) примет вид

$$L_i \tilde{\chi}_i = K_{ij} \tilde{\chi}_j + 2 Q_{ij} \frac{d \tilde{\chi}_j}{dR}, \quad (14в)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Здесь

$$L_i = \frac{d^2}{dR^2} + k_i^2 - \frac{L(L+1)}{R^2} \quad (22)$$

и введены обозначения:

$$K_{ij} = \tilde{K}_{ij}(R) - \tilde{K}_{ij}(\infty), \quad Q_{ij} = \tilde{Q}_{ij}(R), \quad (23)$$

$$k_i^2 = 2ME - \tilde{K}_{ii}(\infty).$$

*) Условие $S_{\text{дискр.}} + S_{\text{непр.}} = 1$ в общем случае следует из сравнения точного решения для энергии водородоподобного атома и решения, полученного по теории возмущений.

**) Что само по себе интересно, поскольку в изолированном атоме аналогичный вклад составляет $2/3$ (14/).

Задача рассеяния (14в) решена, если известна соответствующая ей матрица рассеяния S . Метод фазовых функций /9/ позволяет перейти от линейной системы дифференциальных уравнений второго порядка (14в) к системе нелинейных уравнений первого порядка для матрицы $S(R)$, удовлетворяющей условию $S(\infty) = S$.

Возможны различные способы параметризации S -матрицы. В дальнейшем мы используем параметры Мак-Хейла-Тэлера $t_{ij}(R)$, которые при $R \rightarrow \infty$ переходят в матричные элементы t_{ij} матрицы реакции T . Для них уравнения метода фазовых функций примут вид:

$$\frac{d}{dR} t_{ij}(R) = -a_{i\alpha} (K_{\alpha\beta} \tilde{a}_{\beta i} + 2 Q_{\alpha\beta} \tilde{a}'_{\beta i}), \quad (24)$$

$$t_{ij}(0) = 0, \quad t_{ij}(\infty) = t_{ij},$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} a_{i\alpha} &= \delta_{i\alpha} u_{\alpha} + t_{i\alpha}(R) v_{\alpha}, \\ \tilde{a}_{\beta i} &= \delta_{\beta i} u_{\beta} + t_{\beta i}(R) v_{\beta}, \\ \tilde{a}'_{\beta i} &= \delta_{\beta i} u'_{\beta} + t_{\beta i}(R) v'_{\beta}, \end{aligned} \quad (25)$$

а

$$\begin{aligned} u_i &= \sqrt{\frac{\pi R}{2}} j_L(k_i R), \\ v_i &= -\sqrt{\frac{\pi R}{2}} n_L(k_i R) - \end{aligned} \quad (26)$$

два линейно-независимых решения свободного уравнения

$$L_i \tilde{X}_i = 0 \quad (27)$$

с асимптотикой при $R \rightarrow \infty$

$$u_i \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_i}} \sin \left(k_i R - \frac{\pi L}{2} \right), \quad (26a)$$

$$v_i \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_i}} \cos \left(k_i R - \frac{\pi L}{2} \right).$$

Матрица рассеяния S и сечения σ_{ij} различных каналов реакции выражаются через элементы матрицы T обычным образом^{/10/}:

$$S^L = (I + iT^L)(I - iT^L)^{-1},$$

$$\sigma_{ij}^L = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \|S_{ij}^L - \delta_{ij}\|^2 = \sum_{L=0}^{\infty} \sigma_{ij}^L. \quad (28)$$

В таком подходе S - матрица всегда унитарна, поскольку соответствующая ей T - матрица симметрична. Равенство $t_{ij} = t_{ji}$ следует из системы уравнений (24) с учетом условия дивергенции (12) и доказано в приложении III. Там же дан простой вывод системы уравнений (24).

В двухуровневом приближении формулы для сечений (28) легко записать в развернутом виде:

$$\sigma_{ij}^L = \frac{4\pi}{k_i^2} (2L+1) \frac{\delta_{ij}^2 D^2 + (t_{ij}^L)^2}{(D-1)^2 + (t_{11}^L + t_{22}^L)^2}, \quad (29)$$

$$D = \det T^L = t_{11}^L t_{22}^L - (t_{12}^L)^2.$$

При анализе реакций (1a) параметризация сечений (29) оказывается чрезвычайно удобной.

Мы не станем здесь касаться подробностей и технических трудностей, которые возникают при практической реализации метода фазовых

функций. Некоторые из них можно найти в приложении III, в монографиях /9/ и в работах авторов /4/.

Заключение

При медленных столкновениях в системе трех тел, когда длина волны де Бройля частиц сравнима с размерами области взаимодействия и необходимо учитывать взаимное влияние всех трех частиц, приближенные методы решения квантовомеханической задачи трех тел непригодны.

В этих условиях последовательная реализация метода В.С.С. обладает достаточной общностью и необходимой строгостью, однако требует решения многоканальной задачи рассеяния. Поэтому практически метод В.С.С. удобно применять только в двухканальном приближении, следовательно, для реакций типа (1а).

При медленных столкновениях это приближение достаточно обосновано. Его можно улучшить, если вместо эффективных потенциалов $\hat{K}_{ij}(R)$ двухканальной задачи использовать "поправленные" за счет высших состояний потенциалы $\tilde{K}_{ij}(R)$. Последнее обстоятельство несущественно в атомных задачах, но может оказаться важным при решении задач мезоатомной физики, где параметр разложения $1/2M \approx 0,1$ уже не мал.

Практическое использование /4/ изложенной методики доказало ее обоснованность для целого класса задач.

Приложение I

Операторы V_R^{\rightarrow} и Δ_R^{\rightarrow} в эллипсоидальных координатах выглядят довольно громоздко /2,3/, однако в пределе $R \rightarrow \infty$, когда

решения задачи двух центров переходят в волновые функции водородоподобного атома, они упрощаются и в сферических координатах $r, t = \hat{r} \hat{R}$ приобретают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{\hat{R}} &= \frac{1}{2} (\kappa \pm 1) \left[\hat{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{t}{r} \frac{\partial}{\partial t} \right) + \hat{R} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial t} \right], \\ \Delta_{\hat{R}} &= \frac{1}{4} (\kappa \pm 1)^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} (\kappa \pm 1)^2 \left(E_1 + \frac{Z}{r} \right), \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

где верхний знак отвечает Z_1 - термам, а \hat{r} и \hat{R} - соответствующие единичные векторы. Для вычисления матричных элементов от операторов (П. 1) надо воспользоваться разложением параболических волновых функций по сферическим /11/. В частном случае, когда одна из волновых функций соответствует основному состоянию, найдем:

$$\begin{aligned} Q_{n_1}(\infty) &= -Q_{1n}(\infty) = \langle n n_1 n_2 m | -\mathbf{V}_{\hat{R}} | 1000 \rangle = \\ &= Z (\kappa \pm 1) \frac{4n}{(n^2-1)^2} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^n (n_2 - n_1), \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

$$K_{n_1}(\infty) = K_{1n}(\infty) = \langle n n_1 n_2 m | -\Delta_{\hat{R}} | 1000 \rangle = Z^2 (\kappa \pm 1)^2 \frac{2}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^n. \quad (\text{П.3})$$

Видно, что K_{1n} зависит только от главного квантового числа n , а Q_{1n} , кроме того, - от разности $n_2 - n_1$. Последнее свойство Q_{1n} позволяет доказать важное равенство

$$\sum_{\{\alpha\}} Q_{1\alpha}(\infty) \frac{dX_{\alpha}}{dR} = \sum_n \left[\sum_{n_2=0}^{n-1} Q_{1000, n n_1 n_2 0}(\infty) \right] \frac{dX_n}{dR} = 0. \quad (\text{П.4})$$

В самом деле, хотя в общем случае волновая функция ядерного движения χ_α зависит от шести квантовых чисел:

$$\chi_\alpha = \chi_{k L \Lambda n n_2 m} \quad , \quad (\text{ П. 5})$$

но в асимптотической области χ_α уже не зависит от n_2 и m , поскольку при $R \rightarrow \infty$ от них не зависит энергия E_n изолированного атома, а вместе с ней и значение (20) энергии $\epsilon_n = E - E_n(\infty)$. С учетом этого обстоятельства сумма в скобках обращается в нуль, что можно установить непосредственно, используя явное выражение (П. 2).

В дальнейшем при вычислении поправок к энергии нам понадобится сумма ряда теорий возмущений:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{n-1} \frac{K_{1n} K_{n1}}{E_1 - E_n} = - \frac{Z^2}{2} (\kappa \pm 1)^4 \frac{1}{4} \sum_{n=2}^{\infty} \alpha_n = \\ &= - \frac{Z^2}{2} (\kappa \pm 1)^4 \frac{0,337}{4} \quad , \end{aligned} \quad (\text{ П. 6})$$

где

$$\alpha_n = 64 n^3 \frac{(n-1)^{2n-3}}{(n+1)^{2n+3}} \quad . \quad (\text{ П. 7})$$

Приложение II

Уравнение Шредингера трехтельной задачи

$$\left(-\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + H_0 \right) \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E \Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad , \quad (\text{ П. 8})$$

где, как обычно,

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{\{n\}} \phi_n(\vec{r}; \vec{R}) \psi_n(\vec{R}), \quad (\text{П. 9})$$

$$H_0 \phi_n(\vec{r}; \vec{R}) = E_n(\vec{R}) \phi_n(\vec{r}; \vec{R}), \quad (\text{П. 10})$$

в приближении σ - термов при $R \rightarrow \infty$ приводится к следующей системе уравнений Шредингера для радиальных волновых функций ядерного движения:

$$-\chi_n'' + 2M \sum_m [E_n \delta_{nm} + \frac{1}{2M} H_{nm}] \chi_m = 2ME \chi_n, \quad (\text{П. 11})$$

$$E_n = E_n(\infty), \quad H_{nm} = H_{mn} = K_{mn}(\infty).$$

В скалярном произведении (П. 9) вектора-строки $\phi_n(\vec{r}; \vec{R})$ на вектор-столбец $\psi_n(\vec{R})$ правомерна подстановка

$$\sum_{\{n\}} \phi_n(\vec{r}; \vec{R}) \psi_n(\vec{R}) = \sum_{\{n\}} \phi_n(\vec{r}; \vec{R}) A^{-1} A \psi_n(\vec{R}) = \sum \tilde{\phi}_n(\vec{r}; \vec{R}) \tilde{\psi}_n(\vec{R}). \quad (\text{П. 12})$$

Ортогональное преобразование A определим из условия диагонализации (П. 11) в преобразованном базисе $\tilde{\chi}_n$.

Рассматривая оператор ядерного движения $-\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}}$ как возмущение, из условия

$$\left(-\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + H_0\right) \tilde{\phi}_n(\vec{r}; \vec{R}) = \tilde{E}_n \tilde{\phi}_n(\vec{r}; \vec{R}) \quad (\text{П. 13})$$

можно найти матрицу преобразования A по теории возмущений, выбирая за нулевое приближение для $\tilde{\phi}_n(\vec{r}; \vec{R})$ решения задачи двух центров (П. 10).

$$A_{ij} = \delta_{ij} + \frac{1}{2M} \frac{H_{ij}}{E_i - E_j} (1 - \delta_{ij}) + \quad (\text{П.14})$$

$$+ \frac{1}{(2M)^2} \sum_{\substack{a \neq i \\ a \neq j}} \left[\frac{H_{ia} H_{aj}}{(E_i - E_a)(E_i - E_j)} - \frac{1}{2} \frac{H_{ia} H_{aj}}{(E_i - E_a)^2} \delta_{ij} - \frac{H_{ij} H_{ij}}{(E_i - E_j)^2} (1 - \delta_{ij}) \right].$$

В случае симметричной перезарядки потенциалы $\hat{K}_{ij}(R) = 2MW_i(R)\delta_{ij} + K_{ij}(R) - \frac{2}{R} Q_{ij}(R) = 2MW_i(R)\delta_{ij} + R_{ij}(R)$ в уравнениях (14а) преобразуются по формулам

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{ij}(R) &= 2MW_i(R)\delta_{ij} + R_{ij}(R) + \\ &+ \frac{1}{2M} [S_{ia}R_{aj}(R) + R_{ia}(R)S_{aj} - S_{ia}[W_i(R) - W_a(R)]S_{aj}], \quad (\text{П.15}) \end{aligned}$$

$$S_{ia} = \frac{H_{ia}}{E_i - E_a}, \quad R_{ia}(R) = K_{ia}(R) - \frac{2}{R} Q_{ia}(R), \quad R_{ia}(\infty) = H_{ia}.$$

Эти формулы осуществляют диагонализацию системы (14б) с точностью до $1/M^2$ включительно. Для энергии основного состояния \tilde{E}_1 они приводят к результату

$$\tilde{E}_1 = E_1 + \frac{1}{2M} H_{11} + \frac{1}{(2M)^2} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{H_{1n} H_{n1}}{E_1 - E_n}. \quad (\text{П.16})$$

Первый член в этой сумме соответствует энергии терма при закрепленных ядрах в пределе $R \rightarrow \infty$, второй дает адиабатические поправки на движение ядер, а третий учитывает поправки к терму $\approx 1/M^2$ от высших состояний.

Отметим, что матрица преобразования (П.14) зависит только от главных квантовых чисел термов n и n' и потому не нарушает условия (П.4), обеспечивающего асимптотическую форму уравнений (17).

Приложение III

Пусть дана система связанных уравнений Шредингера

$$L_{ij} \psi_j = K_{ij} \psi_j + 2 Q_{ij} \frac{d\psi_j}{dR}, \quad (\text{П. 17})$$

где L_{ij} - дифференциальный оператор второго порядка типа (22), имеющий два линейно-независимых решения, u_i и v_i , с асимптотикой (26а) и вронскианом

$$u_i' v_i - u_i v_i' = 1. \quad (\text{П. 18})$$

В матричном виде предыдущие соотношения примут вид

$$L\Psi = K\Psi + 2Q\Psi', \quad (\text{П. 19})$$

$$u'v - uv' = I. \quad (\text{П. 19а})$$

где L , u и v - диагональные матрицы соответственно операторов L_{ij} и решений u_i и v_i ; I - единичная матрица; K и Q - матрицы, построенные из элементов K_{ij} и Q_{ij} ; а Ψ - вектор-столбец решений ψ_j , удовлетворяющих граничным условиям задачи рассеяния.

Общее решение системы (П. 19) ищем в виде

$$\Psi = uA + vB = (u + vT)A \quad (\text{П. 20})$$

при дополнительном условии

$$uA' + vB' = 0. \quad (\text{П. 21})$$

Здесь A и B - матрицы произвольных коэффициентов, зависящих от R , выбор которых определяется граничными условиями задачи, а

$$T(R) = BA^{-1} . \quad (П.22)$$

По определению, $T(\infty) = T$ и равна матрице реакции. После подстановки решения (П. 20) в уравнение (П. 17) с учетом дополнительного условия (П. 21) получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} u' A' A^{-1} + v' B' A^{-1} &= K(u + vT) + 2Q(u' + v'T) , \\ u A' A^{-1} + v B' A^{-1} &= 0 . \end{aligned} \quad (П.23)$$

Домножая слева первое из уравнений на $u + Tv$, а второе на $u' + Tv'$ и вычитая его из первого, с учетом соотношения (П.19а) придем к уравнению

$$T' = -(u + Tv) [K(u + vT) + 2Q(u' + v'T)] \quad (П.24)$$

для матрицы $T(R)$. Эта система нелинейных уравнений первого порядка эквивалентна системе линейных уравнений второго порядка (146) и достаточно удобна в практических расчетах.

Вычтем из уравнения (П.19) транспонированное уравнение

$$L \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \tilde{K} + 2 \tilde{\Psi}' \tilde{Q} , \quad (П.25)$$

после чего с учетом равенства (12) придем к соотношению

$$\tilde{\Psi} \Psi' - \tilde{\Psi}' \Psi = 2 \tilde{\Psi}' Q \Psi . \quad (П.26)$$

Используя формулы (П. 20), (П.19а) и (П. 22), получим окончательно

$$\tilde{T} - T = 2(u + \tilde{T}v) Q(u + vT) . \quad (П.27)$$

Соотношение (П.27) справедливо при любом значении R и может служить для контроля точности при интегрировании системы уравнений (П.24). При $R \rightarrow \infty$ $Q \rightarrow 0$ и $T = \tilde{T}$, т.е. матрица

реакции симметрична в соответствии с общими требованиями. В N -канальной задаче рассеяния $\frac{N(N+1)}{2}$ матричных элементов

$t_{ij} = t_{ji}$ составляют минимальный набор параметров, необходимый для параметризации унитарной S -матрицы.

Физическая матрица реакции T соответствует такому разбиению гамильтониана задачи (146), при котором L_1 имеет стандартный вид:

$$L_1 = \frac{d^2}{dR^2} + k_1^2 - \frac{L(L+1)}{R^2}, \quad (\text{П. 28})$$

и в этом случае

$$\begin{aligned} u_1 &= \sqrt{\frac{\pi R}{2}} j_L(k_1 R) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_1}} \sin \xi_1, \\ v_1 &= -\sqrt{\frac{\pi R}{2}} n_L(k_1 R) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_1}} \cos \xi_1, \\ \xi_1 &= k_1 R - \frac{\pi L}{2}. \end{aligned} \quad (\text{П. 29})$$

Иногда удобно отнести к оператору L_1 часть потенциальной энергии (например, дальнедействующий кулоновский член) или, наоборот, вынести центробежный член из L_1 /13/. В этом случае новые стандартные решения \bar{u}_1 и \bar{v}_1 уравнения (27) с оператором \bar{L}_1 имеют асимптотику

$$\begin{aligned} \bar{u}_1 &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_1}} \sin \bar{\xi}_1, \\ \bar{v}_1 &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_1}} \cos \bar{\xi}_1, \end{aligned} \quad R \rightarrow \infty. \quad (\text{П. 30})$$

Решив для такого разбиения гамильтониана уравнения (П. 24) метода фазовых функций, найдем нефизическую матрицу реакции \bar{T} . Искомая матрица реакции T определяется затем из соотношения

$$T = (\cos \delta \bar{T} + \sin \delta) (\cos \delta - \sin \delta \bar{T})^{-1}, \quad (\text{П. 31})$$

где $\cos \delta = \{ \cos \delta_i \}$ и $\sin \delta = \{ \sin \delta_i \}$ - диагональные матрицы, а $\delta_i = \bar{\xi}_i - \xi_i$.

В случае $Z_2 > 1$ некоторые из потенциалов $\approx K_{ij}(R)$ при $R \rightarrow \infty$ убывают как $1/R$. Как показывает опыт, в этом случае удобно оператор \bar{L}_i и решения \bar{u}_i и \bar{v}_i выбрать в виде:

$$\begin{aligned} \bar{L}_i &= \frac{d^2}{dR^2} + k_i^2 + \frac{Z}{R} - \frac{L(L+1)}{R^2}, \\ \bar{u}_i &= F_L(k_i R; \eta_i), \\ \bar{v}_i &= G_L(k_i R; \eta_i). \end{aligned} \quad \eta_i = \frac{Z}{k_i}, \quad (\text{П. 32})$$

Физическая матрица реакции вычисляется из соотношения (П. 31) при значении

$$\delta = \sigma_L = \arg \Gamma(L + 1 - i \frac{Z}{k}), \quad (\text{П. 33})$$

а нормировка кулоновских функций определяется асимптотикой:

$$F_L(k_i R; \eta_i) \underset{R \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{k_i}} \sin(k_i R + \eta_i \ln 2k_i R - \frac{\pi L}{2} + \sigma_L). \quad (\text{П. 34})$$

Литература

1. Н.Ф. Мотт, Г.Ю. Мэсси. Теория атомных столкновений, Мир, Москва, 1969;

- D.R. Bates, H.S.W. Massey, A.L. Stewart. Proc.Roy.Soc., A215, 437 (1953).
2. Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина. ЖЭТФ, 52, 1273 (1967).
ЖВМ и МФ, 9, 1256 (1968); Препринты ОИЯИ, P2-3009, P2-3012,
Дубна, 1966, P4-3175, P4-3405, Дубна, 1967, P4-5040, Дубна, 1970.
 3. G. Hunter, B.F. Gray, H.O. Prichard. J.Chem.Phys., 45,
3806 (1966); G. Hunter, H.O. Prichard. J.Chem.Phys.,46, 2146,
2153 (1967).
 4. А.В. Матвеевко, Л.И. Пономарев. ЖЭТФ, 57, 2084 (1969); ЖЭТФ, 58,
1640 (1970); ЖЭТФ, 59, 1598 (1970).
 5. С.С. Герштейн, В.Д. Кривченков. ЖЭТФ, 40, 1491 (1961).
 6. I.V. Komarov, S.Yu. Slavjanov. Proc.Phys.Soc., ser. 2,1, No 6,
1066 (1968);
Вестник ЛГУ, Физика, химия, в.3, № 16, 30 (1968).
 7. С.С. Герштейн. ЖЭТФ, 34, 463 (1958); ЖЭТФ, 40, 698 (1961);
S. Cohen, D.L. Judd, R.J. Riddell. Phys.Rev., 119, 384 (1960).
 8. Атомные и молекулярные процессы, Под ред. Д. Бейтса. Москва,
Мир, 1964.
 9. В.В. Бабинов. Метод фазовых функций в квантовой механике, Наука,
Москва, 1968;
F. Calogero. Variable Phase Approach to Potential Scattering,
Academic Press, New York and London, 1967.
 10. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.П. Переломов. Рассеяние, реакции и
распады в нерелятивистской квантовой механике, Наука, Москва,
1966.
 11. V. Rojansky. Phys.Rev., 33, 1 (1929).
 12. Г. Бете. Квантовая механика простейших систем. ОНТИ, М.-Л., , 1935.
 13. A. Degasperis. Nuovo Cimento, 34, 1667 (1964).
 14. R.E. Trees. Phys.Rev., 102, 1553 (1956).

Рукопись поступила в издательский отдел

5 февраля 1971 года.