

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

4514/2-80

22/9-80

P4-80-442

Ф.Р.Вукайлович,* Л.И.Пономарев, Л.Н.Сомов

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ.
III. АСИМПТОТИКА РЕШЕНИЙ ПРИ $R \rightarrow \infty$

Направлено в "J. of Phys. B".

* Институт физики "Борис Кидрич", Белград,
Югославия.

1980

Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И., Сомов Л.Н.

P4-80-442

Адиабатическое представление
в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием.

III. Асимптотика решений при $R \rightarrow \infty$.

Найдена асимптотика решений системы дифференциальных уравнений, описывающих систему трех тел в адиабатическом представлении в пределе больших межъядерных расстояний. Показано, что найденная асимптотика согласована с физическими граничными условиями задачи трех тел.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1980

Vukajlovic F.R., Ponomarev L.I., Somov L.N.

Adiabatic Representation in the Three-Body Problem

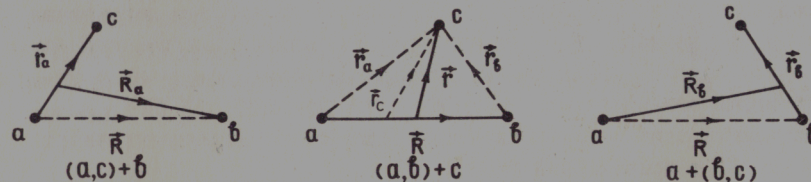
I. Введение

Уравнение Шредингера задачи трех тел с кулоновским взаимодействием с массами и зарядами (M_a, Z_a) , (M_b, Z_b) и $(m_c, -Z_c)$ после отделения движения центра инерции системы может быть записано в трех альтернативных системах координат Якоби: (\vec{z}_a, \vec{R}_a) , (\vec{z}_b, \vec{R}_b) и (\vec{z}_c, \vec{R}) (см. рис. 1). Каждая из этих координатных систем соответствует разбиению системы трех тел на подсистемы, которые характеризуются своими приведенными массами:

$$(a+c)+b, (\vec{z}_a, \vec{R}_a), \frac{1}{m_a} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_a}, \frac{1}{M_a} = \frac{1}{M_b} + \frac{1}{m_c+M_a}; \quad (Ia)$$

$$a+(b+c), (\vec{z}_b, \vec{R}_b), \frac{1}{m_b} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_b}, \frac{1}{M_b} = \frac{1}{M_a} + \frac{1}{m_c+M_b}; \quad (Ib)$$

$$(a+b)+c, (\vec{z}_c, \vec{R}), \frac{1}{m_o} = \frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b}, \frac{1}{m_o} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_a+M_b}. \quad (Iv)$$



При решении задачи в адиабатическом представлении используется система координат (\vec{z}', \vec{R}) , которая отличается от системы (Iv) заменой $\vec{z}_c \rightarrow \vec{z}' = \vec{z}_c + \frac{\alpha}{2} \vec{R}$, где $\alpha = (M_b - M_a)/(M_b + M_a)$,

что соответствует переносу начала вектора \vec{z}_c из центра масс подсистемы (a, b) в геометрический центр отрезка R . Выбор системы координат (\vec{z}, \vec{R}) диктуется свойствами адиабатического базиса $|j\rangle = \Phi_j(\vec{z}; R)$ /1/, по которому разлагается решение $\Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R})$ уравнения Шредингера задачи трех тел:

$$(\hat{H} - E_{n\tau}) \Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R}) = 0, \quad (2)$$

$$\Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R}) = \sum_j \{ \Phi_{ja}(\vec{z}; R) \chi_{ja}^{\tau}(\vec{R}) + \Phi_{je}(\vec{z}; R) \chi_{je}^{\tau}(\vec{R}) \},$$

$$\chi_j^{\tau}(\vec{R}) = R^{-1} \chi_j(R) D_{mm_j}^{\tau}(\Phi, \Theta, 0). \quad (3)$$

Здесь: $(n\tau)$ - полный набор квантовых чисел задачи трех тел; $\Phi_{ja}(\vec{z}; R)$ и $\Phi_{je}(\vec{z}; R)$ - линейные комбинации решений задачи двух центров $\Phi_j(\vec{z}; R)$, которые при $R \rightarrow \infty$ переходят в волновые функции изолированных атомов соответственно, (a, c) и (b, c) - в параболических координатах /1/; (j) - набор квантовых чисел задачи двух центров; (Φ, Θ) - угловые переменные вектора \vec{R} ; $D_{mm_j}^{\tau}(\Phi, \Theta, 0)$ - нормированные функции Вигнера, а сумма \sum включает как суммирование по дискретному, так и интегрирование по непрерывному спектрам задачи двух центров, причем квантовое число m принимает как положительные, так и отрицательные значения. (Более подробно введенные величины обсуждаются в предыдущих работах авторов /2-3/.)

После подстановки разложения (3) в исходное уравнение (2), усреднения по координатам \vec{z} , а также по угловым переменным Θ и Φ вектора \vec{R} задача трех тел сводится к решению бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений с эффективными потенциалами $U_{ij}(R)$ для функций $\chi_j(R)$, описывающих относительное движение одноименно заряженных частиц a и b с приведенной массой M .

При численной реализации адиабатического метода из этой бесконечной системы выделяют конечную подсистему достаточно большой размерности N (такая запись предполагает, что предва-

рительно, как обычно, проведена дискретизация непрерывного спектра /3/)

$$\left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2ME_{n\tau} \right) - U_{ii}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^N U_{ij}(R) \chi_j(R), \quad (4)$$

где

$$\chi_j(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ja}(R) \\ \chi_{je}(R) \end{pmatrix}, \quad U_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ia,ja}(R) & U_{ia,je}(R) \\ U_{ie,ja}(R) & U_{ie,je}(R) \end{pmatrix}, \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{ij}. \quad (4a)$$

В асимптотической области $R \rightarrow \infty$ недиагональные матричные элементы $U_{ia,je}(R)$ и $U_{ie,ja}(R)$ экспоненциально малы /7/, т.е. система (4) распадается на две независимые подсистемы, описывающие движение в каналах a и b соответственно (Ia) и (Ib)).

Двухкомпонентная структура системы уравнений (4) физически соответствует двум возможным разбиениям системы (a, b, c) на подсистемы (Ia) и (Ib) и, в частности, позволяет описывать неупругие процессы с перераспределением частиц типа

$$(a, c) + b \rightarrow a + (b, c). \quad (5)$$

Для этого, однако, необходимо дополнить систему уравнений (4) граничными условиями при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$.

Граничные условия задачи трех тел (5) (т.е. физическая асимптотика решений $\Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R})$ при $R \rightarrow \infty$ без учета развала системы на три частицы) имеют простой вид лишь в координатах (\vec{z}_a, \vec{R}_a) и (\vec{z}_b, \vec{R}_b) :

$$\Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R}) = \begin{cases} \Psi_{n\tau}^{(a)}(\vec{z}, \vec{R}) = \Psi_n(m_a, \vec{z}_a) \chi_n^{\tau}(M_a, \vec{R}_a), & (6a) \\ \Psi_{n\tau}^{(b)}(\vec{z}, \vec{R}) = \Psi_n(m_b, \vec{z}_b) \chi_n^{\tau}(M_b, \vec{R}_b), & (6b) \end{cases}$$

где функции $\Psi_n(m_a, \vec{z}_a)$ и $\Psi_n(m_e, \vec{z}_e)$ описывают связанные подсистемы (a, c) и (e, c) в состоянии n , а функции $\chi_n^c(M_a, \vec{R}_a)$ и $\chi_n^c(M_e, \vec{R}_e)$ - относительное движение атома (a, c) и ядра e , атома (e, c) и ядра a с приведенными массами M_a и M_e соответственно.

В важном частном случае связанного состояния системы трех тел в основном состоянии $n=1$ по движению частицы с асимптотика решений (6) имеет вид:

$$\Psi_{1c}(\vec{z}, \vec{R}) = \begin{cases} A_{1a} \Psi_1(m_a, \vec{z}_a) R_a^{-1} \exp\{-p_{1a} R_a\} D_{mm_J}^J(\Phi_a, \Theta_a, 0), \\ A_{1e} \Psi_1(m_e, \vec{z}_e) R_e^{-1} \exp\{-p_{1e} R_e\} D_{mm_J}^J(\Phi_e, \Theta_e, 0), \end{cases} \quad (7)$$

где

$$p_{1a}^2 = -2 M_a E_{1a}, \quad p_{1e}^2 = -2 M_e E_{1e},$$

$E_{1a} = E_{nc} - E_{1a}$ и $E_{1e} = E_{nc} - E_{1e}$ - энергии системы трех тел, отсчитанные от значений E_{1a} и E_{1e} энергий основного состояния атомов (a, c) и (e, c) соответственно, а A_{1a} и A_{1e} - произвольные константы.

В нашей предыдущей работе^{/3/} с помощью канонического преобразования специального вида найден главный член асимптотики (7).

В данной работе непосредственным решением системы (4) при $R \gg 1$ найден явный вид асимптотики решений $\chi_j(R)$ с точностью $\sim (2M)^{-1}$ и показано, что при подстановке их в разложение (3) оно приводит к физическим граничным условиям (6) и (7).

2. Решение системы уравнений (4) при $R \rightarrow \infty$

Матрицу эффективных потенциалов $U(R) = \{U_{ij}(R)\}$ систе-

мы уравнений (4) можно представить в виде^{/2-3/} (в дальнейшем ограничимся случаем $Z_a = Z_e = Z_c = 1$):

$$U(R) = \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \hat{I} + 2M W(R) + H(R) + B(R) + \frac{dQ(R)}{dR} + 2Q(R) \frac{d}{dR}, \quad (8)$$

где $W_{ij}(R) = w_i(R) \delta_{ij}$, $w_i(R) = E_i(R) + \frac{1}{R}$, $E_i(R)$ - термы задачи двух центров, а $H_{ij}(R)$, $B_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$ - матрицы потенциалов, вычисленные в работах^{/4-6/}. Их асимптотика при $R \rightarrow \infty$ для состояний $|i\rangle$ и $|j\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров имеет вид^{/7/}

$$W_i(R) = E_i^{(0)} + E_i^{(2)} R^{-2} + O(R^{-3}), \quad (9)$$

$$H_{ij}(R) = H_{ij}^{(0)} + H_{ij}^{(1)} R^{-1} + H_{ij}^{(2)} R^{-2} + O(R^{-3}),$$

$$Q_{ij}(R) = Q_{ij}^{(0)} + Q_{ij}^{(1)} R^{-1} + Q_{ij}^{(2)} R^{-2} + O(R^{-3}), \quad (10)$$

$$B_{ij}(R) = B_{ij}^{(0)} + B_{ij}^{(1)} R^{-1} + B_{ij}^{(2)} R^{-2} + O(R^{-3}),$$

где $H_{ij}^{(0)}$, $H_{ij}^{(1)}$ и т.д. - известные числовые матрицы.

При подстановке разложений (9) и (10) в уравнение (4) оно приобретает вид

$$\hat{I} \left\{ \frac{d^2}{dR^2} - \tilde{P}_i^2 - 2M E_i^{(2)} R^{-2} - H_{ii}^{(2)} R^{-2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} \left\{ H_{ij}^{(0)} + (H_{ij}^{(1)} + B_{ij}^{(1)}) R^{-1} + (H_{ij}^{(2)} + B_{ij}^{(2)} - Q_{ij}^{(1)}) R^{-2} + 2(Q_{ij}^{(0)} + Q_{ij}^{(1)} R^{-1} + Q_{ij}^{(2)} R^{-2}) \frac{d}{dR} \right\} \chi_j(R), \quad (11)$$

где

$$\tilde{P}_i^2 = -2M (E_{nc} - E_i^{(0)}) \hat{I} + H_{ii}^{(0)}, \quad (12)$$

$$H_{ii}^{(1)} \equiv 0.$$

Во всем дальнейшем изложении будем предполагать, что $M_a \geq M_e$, и использовать разложение гамильтониана \hat{H} на "потенциальную" \hat{h}_a и "кинетическую" \hat{T}_a части, соответствующие правильному пределу диссоциации $(a, b, c) \rightarrow (a, c) + b$ при $R \rightarrow \infty$ [2]. В соответствии с этим все величины будем выражать в единицах $e = \hbar = m_a = 1$, где m_a - приведенная масса подсистемы (a, c) . При таком разложении $\hat{H} = M = M_0/m_a$ и справедливы соотношения [2-3]:

$$\hat{H} = \hat{T}_a + \hat{h}_a + R^{-1},$$

$$\hat{T}_a = -\frac{1}{2M} \left\{ \left(\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{z}} \right)^2 - \left(\frac{1+\alpha}{2} \right)^2 \Delta_{\vec{z}} \right\},$$

$$\hat{h}_a = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{z}} - \frac{1}{z_a} - \frac{1}{z_e} \quad (I3)$$

и, кроме того,

$$H_{i_a, j_a}(\infty) = 0,$$

$$(2M)^{-1} U_{j_a, i_a}(\infty) = E_{j_a}^{(0)} = E_{i_a} = -\frac{1}{2}. \quad (I4)$$

Последнее значение, которое равно энергии основного состояния изолированного атома (a, c) , принимается обычно за начало отсчета энергий $E_{n\sigma}$.

Системы типа (II) с постоянными коэффициентами рассмотрены, например, в монографии [9], где можно найти изложение метода построения их решений в равномерно сходящиеся ряды на вещественной оси в окрестности иррегулярной особой точки $R = \infty$.

Вектор-столбец решений $X(R) = \{X_i(R)\}$, соответствующих связанному состоянию системы трех тел ($\tilde{p}_i^2 > 0$) при $R \rightarrow \infty$ представим в виде

$$X(R) = (C + D \cdot R^{-1} + G \cdot R^{-2}) e^{-pR}, \quad (I5)$$

где C, D и G - постоянные векторы коэффициентов.

Подстановка разложения (I5) в систему уравнений (II) приводит к системе уравнений для векторов C, D и G :

$$\left\{ (p^2 - \tilde{p}^2) \hat{I} - H^{(0)} + 2p Q^{(0)} \right\} C = 0,$$

$$\left\{ (p^2 - \tilde{p}^2) \hat{I} - H^{(0)} + 2p Q^{(0)} \right\} D = \left\{ H^{(1)} + B^{(1)} - 2p Q^{(1)} \right\} C,$$

$$\left\{ (p^2 - \tilde{p}^2) \hat{I} - H^{(0)} + 2p Q^{(0)} \right\} G = \left\{ H^{(2)} + B^{(2)} - 2p Q^{(2)} - 2Q^{(0)} - 2p \hat{I} \right\} D + \left\{ (J(J+1) - 2m^2 + 2ME^{(2)}) \hat{I} + H^{(2)} + B^{(2)} - Q^{(2)} - 2p Q^{(2)} \right\} C \quad (I6)$$

которая имеет нетривиальное решение лишь при условии равенства нулю детерминанта:

$$\det \left\{ (p^2 - \tilde{p}^2) \hat{I} - H^{(0)} + 2p Q^{(0)} \right\} = 0. \quad (I7)$$

Из уравнения (I7) найдем последовательность корней p_s^2 :

$$p_1^2 < p_2^2 < \dots < p_s^2 < \dots < p_N^2, \quad (I8)$$

после чего общее решение системы (II) можно представить в виде

$$X(R) = \sum_s \left\{ C^{(s)} + D^{(s)} R^{-1} + G^{(s)} R^{-2} \right\} e^{-p_s R} \quad (I9a)$$

или в матричном виде:

$$X_i(R) = \sum_s (C_{is} + D_{is} R^{-1} + G_{is} R^{-2}) e^{-p_s R} A_s, \quad (I9b)$$

где A_s - вектор - столбец произвольных коэффициентов.

Для нахождения корней p_s^2 уравнения (I7) с точностью $\sim (2M)^{-3}$ достаточно использовать усеченную матрицу потенциалов $U_{ij}(R)$, в которой при каждом фиксированном s отличен от нуля лишь строка $U_{sj}(R)$ и столбец $U_{is}(R)$. (В силу определения (I2) и свойства $Q_{ii}^{(0)} \equiv 0$ диагональные элементы матрицы $U_{ii}(\infty) = 0$):

$$\begin{pmatrix} p^2 - \tilde{p}_1^2 & 0 & 0 & \dots & 2p Q_{1s}^{(0)} - H_{1s}^{(0)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & p^2 - \tilde{p}_2^2 & 0 & \dots & 2p Q_{2s}^{(0)} - H_{2s}^{(0)} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 2p Q_{s1}^{(0)} - H_{s1}^{(0)} & 2p Q_{s2}^{(0)} - H_{s2}^{(0)} & \dots & p^2 - \tilde{p}_s^2 & \dots & 2p Q_{sN}^{(0)} - H_{sN}^{(0)} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 2p Q_{Ns}^{(0)} - H_{Ns}^{(0)} & 0 & \dots & p^2 - \tilde{p}_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1s} \\ C_{2s} \\ \vdots \\ C_{ss} \\ \vdots \\ C_{Ns} \end{pmatrix} = 0. \quad (20)$$

Нахождение корней p_s^2 детерминанта матрицы (20) сводится к решению трансцендентного уравнения^{/10/}:

$$p^2 - \tilde{p}_s^2 - 4p^2 \sum_i \frac{Q_{si}^{(0)} Q_{is}^{(0)}}{p^2 - \tilde{p}_i^2} - \sum_i \frac{H_{si}^{(0)} H_{is}^{(0)}}{p^2 - \tilde{p}_i^2} = 0. \quad (21)$$

(При выводе этого соотношения использованы свойства симметрии матричных элементов: $H_{ij} = H_{ji}$, $Q_{ij} = -Q_{ji}$). Решая уравнение (21) методом последовательных приближений, с точностью $\sim (2M)^{-3}$ найдем:

$$p_s^2 = \frac{\tilde{p}_s^2 + \beta_s}{1 - \alpha_s}, \quad (22)$$

где

$$\alpha_s \equiv \alpha = 4 \sum_i \frac{Q_{si}^{(0)} Q_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2}, \quad \beta_s = \sum_i \frac{H_{si}^{(0)} H_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2}. \quad (23)$$

При подстановке значений (22) в уравнения (16) найдем также

$$C_{is} = \left(\delta_{is} + \frac{2p_s Q_{is}^{(0)} - H_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_i^2 - p_s^2} \right). \quad (24)$$

Полагая в знаменателе (24) $p_s^2 = \tilde{p}_s^2$, выразим асимптотику решений $\chi_i(R)$ с точностью $\sim (2M)^{-2}$ через асимптотику эффективных потенциалов $U_{ij}(R)$:

$$\begin{aligned} \chi_i(R) &= \sum_s A_s \chi_i^{(s)}(p_s, R) = \\ &= \sum_s A_s \left\{ \delta_{is} + \frac{2p_s Q_{is}^{(0)} - H_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_i^2 - \tilde{p}_s^2} \right\} e^{-p_s R}. \end{aligned} \quad (25a)$$

В случае задачи рассеяния или связанного состояния системы трех тел в возбужденном состоянии n частицы c на все значения p_s будут действительными и часть из них станет попарно комплексно-сопряженными: $p_s \rightarrow \pm i p_s$. В этом случае решение (25a) следует видоизменить очевидным образом:

$$\begin{aligned} \chi_i^{(v)}(R) &= \sum_{s=1}^{N_0} \left\{ A_s^{(v)} \chi_i^{(s)}(ip_s, R) + \bar{A}_s^{(v)} \chi_i^{(s)}(-ip_s, R) \right\} + \\ &+ \sum_{s=N_0+1}^N A_s \chi_i^{(s)}(p_s, R), \quad v = 1, 2, \dots, N_0, \end{aligned} \quad (25b)$$

где N_0 - число открытых каналов.

Формулы (22)-(25) решают задачу о нахождении главного члена асимптотики решений системы (4). Покажем теперь, что решение (3) при подстановке в него асимптотики (25) удовлетворяет физическим граничным условиям (6) задачи трех тел.

3. Явный вид асимптотики решений

При разложении (13) исходного гамильтониана \hat{H} матричные элементы $Q_{si}^{(0)}$ и $H_{si}^{(0)}$ имеют вид^{/2,3/}:

$$Q_{si}^{(0)} = \begin{pmatrix} 1+\alpha & 0 \\ 0 & -(1-\alpha) \end{pmatrix} q_{si}, \quad H_{si}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4\alpha \end{pmatrix} h_{si}^{(*)}, \quad (26)$$

где

$$q_{si} = \frac{1}{2} \langle s | -\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} | i \rangle = \frac{1}{2} (E_s - E_i) \langle s | \mathbf{z} | i \rangle,$$

$$h_{si}^{(*)} = \frac{1}{2} \langle s | -\frac{1}{2} \Delta \mathbf{z} | i \rangle, \quad h_{ii}^{(*)} = -\frac{1}{2} E_i, \quad (27)$$

$\langle \mathbf{z} | i \rangle = \psi_i(\mathbf{z})$ - волновые функции изолированного атома водорода в состоянии $|i\rangle$, $E_i \equiv E_i^{(0)}$

Используя правила сумм^{/3/}

$$4 \sum_i \frac{q_{si} q_{is}}{E_s - E_i} = \frac{1}{2}, \quad \sum_i \frac{h_{si}^{(*)} h_{is}^{(*)}}{E_s - E_i} = \frac{1}{4} E_s, \quad (28)$$

с учетом соотношений (12), (25) и (27) найдем

$$\begin{aligned} \tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2 &= 2M(E_s - E_i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\alpha}{M} \end{pmatrix}, \\ \alpha_s &= \frac{1}{4M} \begin{pmatrix} (1+\alpha)^2 & 0 \\ 0 & (1-\alpha)^2 (1 + \frac{\alpha}{M})^{-1} \end{pmatrix}, \quad \beta_s = \frac{1}{2M} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4\alpha^2 (1 + \frac{\alpha}{M})^{-1} \end{pmatrix} E_s. \end{aligned} \quad (29)$$

Принимая также во внимание равенства^{/3/}

$$M_a = M \left\{ 1 - \frac{(1+\alpha)^2}{4M} \right\}^{-1},$$

$$M_b = M \left\{ 1 - \frac{(1-\alpha)^2}{4M} (1 - \frac{\alpha}{M}) \right\}^{-1},$$

$$E_{st} = \left(1 - \frac{\alpha}{M} \right)^{-1} E_{sa} = \gamma E_{sa}, \quad (30)$$

из соотношений (22) и (29) найдем выражения для величин p_{sa} и p_{se} в каналах a и b :

$$\begin{aligned} p_{sa}^2 &= -2M_a \varepsilon_{sa}, \\ p_{se}^2 &= -2M_b \varepsilon_{se} + O\left\{\left(\frac{\alpha}{M}\right)^2\right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\varepsilon_{sa} = E_{nc} - E_{sa}, \quad \varepsilon_{se} = E_{nc} - E_{se},$$

E_{sa} и E_{se} - энергии атомов (a,c) и (b,c) в состоянии s . Как видно из (31), вторая итерация при решении секулярного уравнения (21) приводит к точному значению (31) импульса p_{sa} в канале $(a,c) + b$ и к значению p_{se} , которое отличается от истинного лишь членами $\sim \left(\frac{\alpha}{M}\right)^2$.

Полученный результат справедлив, строго говоря, лишь при использовании полного набора решений задачи двух центров, т.е. в пределе $N \rightarrow \infty$ для системы уравнений (4). Однако численные исследования^{/3, II/} показывают, что для достижения точности $\sim (2M)^{-2}$ при вычислении величин (29) и (31), а также энергий E_s системы трех тел достаточно использовать ~ 20 состояний дискретного спектра задачи двух центров и ~ 10 состояний непрерывного спектра при значениях $0,2 \leq k \leq 5$. При таком выборе N точность соотношений (31) не нарушается.

Поскольку в пределе $R \rightarrow \infty$ система уравнений (4) факторизуется на две независимые подсистемы, соответствующие каналам a и b , то асимптотику полного решения (3) можно представить в виде суммы

$$\Psi_{nc}(\vec{z}, \vec{R}) = \sum_{s \rightarrow \infty} \left\{ A_{sa} \Psi_{nc}^{(sa)}(\vec{z}, R) + A_{se} \Psi_{nc}^{(se)}(\vec{z}, R) \right\} R^{-1} D_{mm}^J(\Phi, \theta, 0), \quad (32)$$

где A_{sa} и A_{se} - константы, а

$$\Psi_{nc}^{(sa)}(\vec{z}, R) = \sum_i \Psi_i(m_a, \vec{z}_a) \chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}, R) = \sum_i |ia\rangle \chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}, R),$$

$$\Psi_{nc}^{(se)}(\vec{z}, R) = \sum_i \Psi_i(m_b, \vec{z}_b) \chi_{ib}^{(s)}(p_{se}, R) = \sum_i |ib\rangle \chi_{ib}^{(s)}(p_{se}, R). \quad (33)$$

Здесь мы ввели обозначения^{/I/}

$$|ia\rangle = \Psi_i(m_a, \vec{z}_a) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_{ia}(\vec{z}; R),$$

$$|ib\rangle = \Psi_i(m_b, \vec{z}_b) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_{ib}(\vec{z}; R). \quad (34)$$

С учетом соотношений (25a), (26), (27) и (28) получим

$$\chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}, R) = \left\{ \delta_{is} + \frac{1+\alpha}{2M} p_{sa} \langle i|z|s\rangle \right\} e^{-p_{sa}R},$$

$$\begin{aligned} \chi_{ib}^{(s)}(p_{se}, R) &= \left\{ \delta_{is} - \frac{1-\alpha}{2M} \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} p_{se} \langle i|z|s\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{M} \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} \frac{\langle i|-\frac{1}{2}\Delta z|s\rangle}{E_i - E_s} \right\} e^{-p_{se}R} \approx \end{aligned}$$

$$\approx \left\{ \delta_{ij} + \frac{\alpha}{M} \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} \frac{\langle i|-\frac{1}{2}\Delta z|j\rangle}{E_i - E_j} \right\} \left\{ \delta_{js} - \frac{1-\alpha}{2M} \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} p_{se} \langle j|z|s\rangle \right\} e^{-p_{se}R}. \quad (35)$$

С точностью $\sim (2M)^{-2}$ справедливы соотношения

$$\chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}, R) \approx \langle ia| e^{ap_{sa}R} |sa\rangle e^{-p_{sa}R}, \quad (36a)$$

$$\chi_{ib}^{(s)}(p_{se}, R) \approx \left\{ \langle ib|j\rangle + \frac{\alpha}{M} \frac{\langle i|-\frac{1}{2}\Delta z|j\rangle}{E_i - E_j} \right\} \langle j|e^{-\tilde{b} p_{se}R} |s\rangle e^{-p_{se}R}, \quad (36b)$$

причем

$$\alpha = \frac{1+\alpha}{2M} = \frac{m_c}{m_c + M_a}, \quad \tilde{b} = \gamma \frac{1-\alpha}{2M} = \frac{m_c}{m_c + M_b},$$

$$\tilde{b} = \frac{1-\alpha}{2M} \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} = \gamma^{-1} \tilde{b} + O(\alpha M^{-2}). \quad (37)$$

Обе функции (34) удовлетворяют одному и тому же уравнению с гамильтонианом \hat{h}_a (13) в пределе $R \rightarrow \infty$:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta z - \frac{1}{z}\right) |i\rangle = E_i |i\rangle, \quad (38a)$$

т.е. описывают состояние $|i\rangle$ изолированного атома с массой m_a , которая совпадает с приведенной массой атома (a,c) и отличается от приведенной массы m_b атома (b,c) . Истинная волновая функция $|j\rangle$ атома (b,c) удовлетворяет уравнению (в единицах $m_a = 1$)

$$\left(-\frac{1}{2\gamma} \Delta_{\vec{z}} - \frac{1}{2}\right) |\bar{j}\ell\rangle = \gamma E_j |\bar{j}\ell\rangle, \quad (38б)$$

и поскольку

$$\gamma = \frac{m_\ell}{m_a} = \left(1 - \frac{\alpha}{M}\right)^{-1},$$

то функция $|\bar{j}\ell\rangle$ с точностью $\sim (2M)^{-2}$ удовлетворяет уравнению (38б)

$$\begin{aligned} |\bar{j}\ell\rangle &= \Psi_j(m_\ell, \vec{z}_\ell) = \Psi_j(\gamma \vec{z}) \approx \\ &\approx |\bar{j}\ell\rangle = |\bar{j}\ell\rangle + \frac{\alpha}{M} |\bar{i}\ell\rangle \cdot \frac{\langle \bar{i}\ell | -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{z}} | \bar{j}\ell \rangle}{E_i - E_j}. \end{aligned} \quad (38)$$

Принимая во внимание это соотношение, равенство (36б) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} X_{i\ell}^{(s)}(p_{se}, R) &\approx \sum_j \langle \bar{i}\ell | \bar{j}\ell \rangle \langle \bar{j}\ell | e^{-\gamma^2 p_{se} z} | s\ell \rangle e^{-p_{se} R} \approx \\ &\approx \sum_j \langle \bar{i}\ell | \bar{j}\ell \rangle \langle \bar{j}\ell | e^{-\beta p_{se} z} | \bar{s}\ell \rangle e^{-p_{se} R} = \\ &= \langle \bar{i}\ell | e^{-\beta p_{se} z} | \bar{s}\ell \rangle e^{-p_{se} R}. \end{aligned} \quad (39)$$

Подставляя выражения (36а) и (39) в соотношения (33), получим:

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}^{(sa)}(\vec{z}, R) &= \sum_i |ia\rangle \langle ia| e^{a p_{sa} z} |sa\rangle e^{-p_{sa} R} = \\ &= |sa\rangle e^{-p_{sa} R}, \end{aligned} \quad (40а)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}^{(s\ell)}(\vec{z}, R) &= \sum_i |i\ell\rangle \langle i\ell| e^{-\beta p_{s\ell} z} |s\ell\rangle e^{-p_{s\ell} R} = \\ &= |\bar{s}\ell\rangle e^{-p_{s\ell} R}, \end{aligned} \quad (40б)$$

где мы использовали соотношения

$$\begin{aligned} R_a &= |\vec{R} - a \vec{z}_a| = R - a z + O(a^2 R^{-2}), \\ R_\ell &= |\vec{R} + \beta \vec{z}_\ell| = R + \beta z + O(\beta^2 R^{-2}). \end{aligned} \quad (41)$$

Наконец, подставляя выражения (40) в (32), получим окончательно:

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R}) &= \sum_{R \rightarrow \infty} \left\{ A_{sa} \phi_s(m_a, \vec{z}_a) e^{-p_{sa} R_a} R_a^{-1} D_{mm_s}^J(\phi_a, \theta_a, 0) + \right. \\ &\left. + A_{s\ell} \phi_s(m_\ell, \vec{z}_\ell) e^{-p_{s\ell} R_\ell} R_\ell^{-1} D_{mm_s}^J(\phi_\ell, \theta_\ell, 0) \right\}. \end{aligned} \quad (42)$$

т.е. правильную физическую асимптотику (6) в общем виде. (При переходе от соотношений (32) к соотношениям (42) мы использовали равенства $\theta_a \approx \theta_\ell \approx \theta$, которые справедливы с точностью $\sim R^{-1}$). Значения коэффициентов A_{sa} и $A_{s\ell}$ выйдутся в зависимости от типа решаемых задач. Например, в важном частном случае связанного состояния системы трех тел в состоянии $n=1$ при $Z_a = Z_\ell$, $M_a \geq M_\ell$ при $R \rightarrow \infty$ в сумме (42) асимптотику определяет главный член $s = n = 1$, причем $A_{1a} = A_{1\ell}$.

4. Обсуждение результатов

Сделаем несколько замечаний по поводу предыдущих вычислений. Прежде всего, ограничение по точности $\sim (2M)^{-2}$ при вычислении значений p_{sa}^2 и $p_{s\ell}^2$ (31) является несущественным и обусловлено приближенным решением секулярного уравнения (17) в форме (21). При численном решении исходного секулярного уравнения (17) отличие вычисленных значений p_s^2 от точных зависит лишь от размерности N системы (4) и в пределе $N \rightarrow \infty$ должно исчезнуть. Разумеется, это утверждение пока не доказано строго и является экстраполяцией результата, полученного в данной работе во втором порядке теории возмущений, и отчасти основывается на опыте численных расчетов. Трудно, однако, сомневаться в его справедливости.

Такой же экстраполяцией является переход от формул (35) к формулам (36а) и (39). Покажем, что такая экстраполяция не лишена, однако, оснований. Рассмотрим для этого состояние $|n\tau\rangle$ системы трех тел с полной энергией $E_{n\tau}$, которое при $R \rightarrow \infty$ распадается на атом (a, c) в состоянии $|n\rangle$ с энергией E_{na} и ядро ℓ . Волновая функция такой системы при $R \rightarrow \infty$ в соответствии с (6) имеет вид

$$\Psi_{n\tau}(\vec{z}, \vec{R}) = A_{na} \Psi_n(m_a, \vec{z}_a) e^{-p_{na} R_a} R_a^{-1} D_{mm_s}^J(\phi_a, \theta_a, 0), \quad (43)$$

$$p_{na} = \left\{ -2Ma(E_{n\tau} - E_{na}) \right\}^{1/2}.$$

(В случае задачи рассеяния, т.е. при $E_{n\tau} > E_{na}$, необходимо заменить $p \rightarrow \pm ip$, как в (25б)).

Воспользовавшись обозначениями (34) и соотношением (4I), можно записать радиальную часть асимптотики (43) в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}(\vec{z}, R) &= \Psi_n(m_a, \vec{z}_a) e^{-pnaR} = |na\rangle e^{apna\vec{z}_a} e^{-pnaR} = \\ &= \sum_i |ia\rangle \langle ia| e^{apna\vec{z}_a} |na\rangle e^{-pnaR}, \end{aligned} \quad (44)$$

который совпадает с выражением (40a) при $s=n$.

Отсюда следует важный вывод: формулы (37a) и (39) можно использовать для построения асимптотики решений системы уравнений (4), минуя формулы (25), с которыми они совпадают в первом порядке теории возмущений. Учитывая все сказанное, можно сформулировать следующий рецепт построения асимптотики решений системы уравнений (4) по заданной физической асимптотике (6) состояния $|n\tau\rangle$ задачи трех тел.

Если $|ia\rangle$ и $|i\beta\rangle$ - волновые функции изолированных атомов (a,c) и (β,c) с эффективной массой, соответствующей выбранному разбиению системы трех тел на подсистемы (Ia)-(Ib), то асимптотика функций $\chi_i(R)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \chi_{ia}(R) &= \langle ia| e^{apna\vec{z}} |\bar{na}\rangle e^{-pnaR} \\ \chi_{i\beta}(R) &= \langle i\beta| e^{-\beta pnc\vec{z}} |\bar{n\beta}\rangle e^{-pncR}, \end{aligned} \quad (45)$$

где $|\bar{na}\rangle$ и $|\bar{n\beta}\rangle$ - волновые функции атомов (a,c) и (β,c) с истинными приведенными массами m_a и m_β . При разбиении (I3) имеем $|na\rangle = |\bar{na}\rangle$, при разбиении (Ib) в качестве единицы массы используется m_0 и в соответствии с этим

$$\begin{aligned} |\bar{na}\rangle &= \Psi_n(\gamma_a \vec{z}), \quad |\bar{n\beta}\rangle = \Psi_n(\gamma_\beta \vec{z}), \\ \gamma_a &= \frac{m_a}{m_0}, \quad \gamma_\beta = \frac{m_\beta}{m_0}. \end{aligned} \quad (46)$$

С учетом этого замечания матрицы преобразования (45) в явном виде можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle ia| e^{apna\vec{z}} |\bar{na}\rangle &= \int d\vec{z} \psi_i(\vec{z}) e^{apna\vec{z}} \psi_n(\gamma_a \vec{z}), \\ \langle i\beta| e^{-\beta pnc\vec{z}} |\bar{n\beta}\rangle &= \int d\vec{z} \psi_i(\vec{z}) e^{-\beta pnc\vec{z}} \psi_n(\gamma_\beta \vec{z}), \end{aligned} \quad (47)$$

где выбор функций $\langle ia|$ и $\langle i\beta|$ диктуется лишь соображениями удобства, но функции $|\bar{na}\rangle$ и $|\bar{n\beta}\rangle$ должны совпадать с истинными функциями изолированных атомов (a,c) и (β,c) в параболических координатах.

5. Заключение

В данной работе показано, что асимптотика решений системы уравнений (4) согласована с физическими граничными условиями (6) задачи трех тел. При доказательстве этого утверждения существенно использована полнота адиабатического базиса $|i\rangle$, однако с заданной точностью оно справедливо также при использовании конечного, но достаточно большого набора N базисных функций $|i\rangle$. В связи с этим многочисленные попытки удовлетворить граничным условиям (6) в двухуровневом приближении адиабатического метода ($N=1$) без применения всей системы эффективных потенциалов $U_{ij}(R)$ следует признать непоследовательными. (Обзор работ этого направления дан в предыдущей статье авторов^{/3/}).

Практическая важность полученных формул состоит в том, что они позволяют сузить интервал изменения R при интегрировании системы (4). Это особенно важно при вычислении энергии слабосвязанных состояний системы трех тел, например, системы $e^+e^-e^+$, или мезомолекул $d\bar{d}\mu$ и $d\bar{d}\mu$ ^{/12/}.

Полученные в данной работе результаты существенны также для корректной постановки граничных условий в многоканальной задаче рассеяния при описании процессов перераспределения частиц в системе трех тел.

Отметим также аналогию между уравнением (2I) для спектра энергий системы, "матричной транзитивной экспонентой" в формулах (47) и различными преобразованиями подобного типа, используемыми при описании экситонов, в теории сверхтекучести и т.д. ^{/12/}. Не исключено, что отмеченная аналогия простирается достаточно далеко и может оказаться полезной при описании различных свойств системы трех тел.

В заключение авторы выражают благодарность С.И.Виницкому, Л.Иксару и М.П.Файфману за плодотворные дискуссии в процессе работы над данной статьей, а также Ю.Н.Демкову и И.В.Комарову за обсуждение результатов.

Литература

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. "Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции", 1976, М., "Наука".
2. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., 1979, J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 12, p. 567.
3. Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., Vucajlović F.R., 1980, J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 13, p. 847.
4. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F., 1978, J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 11, p. 1861-73.
5. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N., 1977, J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 10, p. 1335.
6. Пономарев Л.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н. ОИЯИ Р4-13028, Дубна, 1980.
7. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., 1976, J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 9, p. 2255.
8. Абрамов Д.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н. ОИЯИ Р4-80-82, Дубна, 1980.
9. Смирнов В.И. Курс высшей математики, 1958, Физматгиз, М., т. III, ч. 2, с. 469.
10. Мотт Н., Снеддон И. "Волновая механика и ее применения", с. 98, М., "Наука", 1966.
11. 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.
12. Ч.Киттель. "Квантовая теория твердых тел". ИЛ, М., 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 июня 1980 года.