82-810

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

28/12-83

10.2.83

Р4-82-810

В.Б.Беляев, С.Е.Бренер,
Р.М.Галимзянов, А.Л.Зубарев

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВСКОГО ТИПА ДЛЯ ЗАДАЧИ ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ

Направлено в журнал "Zeitschrift für Physik A"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрение 3-частичных систем с кулоновским взаимодействием, состоящих из двух тяжелых и одной легкой, имеет большую историю. При небольших относительных энергиях частиц обычно исходят из соображений, восходящих к Борну и Оппенгеймеру /1/. Эти соображения основываются на простой идее о том, что свойства такой 3-частичной системы могут быть рассчитаны в рамках гипотезы об адиабатическом характере движения тяжелых частиц.

Действительно, для нахождения таких характеристик связанного состояния трех частиц, как спектр и средние размеры, адиабатическая гипотеза, по-видимому, является достаточной.

Однако если интересоваться поведением волновой функции трех частиц при малых расстояниях /порядка ядерных/ между ядрами, то кинетическая и потенциальная энергии тяжелых частиц приобретают величину порядка нескольких МэВ и движение ядер перестает быть адиабатическим.

Следует отметить, что традиционная реализация адиабатической гипотезы в значительной мере основана на факте разделимости переменных в задаче двух кулоновских центров. В предлагаемой работе мы не будем следовать этой традиции, а воспользуемся некоторыми структурными особенностями 3-частичных уравнений.

В литературе существует распространенное убеждение, что уравнения Фаддеева или их альтернативные модификации в силу их фредгольмовости оказываются наиболее адекватным средством рассмотрения задачи рассеяния при энергиях, превышающих порог развала мишени. Это действительно так, однако и при рассмотрении связанных состояний трех частиц эти уравнения значительно более эффективны, чем уравнение Шредингера, поскольку они формулируются для компонент волновой функции, обладающих физическими асимптотиками. Эта особенность структуры 3-частичных уравнений фаддеевского типа как раз и оказывается решающей для получения приближенного решения рассматриваемой кулоновской задачи.

2. УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВСКОГО ТИПА

Итак, для задачи движения легкой частицы 1 с отрицательным единичным зарядом в поле двух тяжелых единичных положительно заряженных кулоновских центров 2 и 3 запишем следующую систему уравнений:

$$(E - H_0 - V_{12})\psi_1 = a_{11}\psi_1 + a_{12}\psi_2 \,,$$
$$(E - H_0 - V_{13})\psi_2 = a_{21}\psi_1 + a_{22}\psi_2 \,, \qquad /1/$$

где $\psi = \psi_1 + \psi_2$ - волновая функция задачи; $\vec r$ - радиус-вектор частицы 1 относительно ядра 2; $\vec\rho$ - радиус-вектор ядра 3 относительно ядра 2; $\vec r_3 = \vec\rho - \vec r_1$ - радиус-вектор ядра 3 относительно частицы 1;

$$V_{12}(\vec r_1) = -\frac{1}{r_1}\,; \quad V_{23}(\vec\rho) = \frac{1}{\rho}\,; \quad V_{13}(\vec r_3) = -\frac{1}{r_3}\,.$$

Для того чтобы система /1/ была эквивалентна уравнению Шредингера, коэффициенты a_{ij} в правых частях уравнений должны подчиняться определенным условиям, а именно:

$$a_{11} + a_{21} = V_{13} + V_{23}\,,$$
$$a_{12} + a_{22} = V_{12} + V_{23}\,. \qquad /2/$$

Будем искать решение /1/ в виде

$$\psi_1 = \sum_n F_n(\vec\rho)\phi_n(\vec r_1)\,,$$
$$\psi_2 = \sum_{\bar n} F_{\bar n}(\vec\rho)\phi_{\bar n}(\vec r_3)\,, \qquad /3/$$

здесь $\phi_n(\vec r_1)$ и $\phi_{\bar n}(\vec r_3)$ - собственные водородоподобные функции связанной системы легкой частицы 1 и ядра 2, частицы 1 и ядра 3 соответственно. В суммах /3/ предполагается и интегрирование по непрерывному спектру. Найдем простейший вид коэффициентов a_{ij}, удовлетворяющих /2/ и позволяющих ограничиться минимальным числом состояний в /3/.

Возможны 4 случая, когда a_{ij} выражены через один из операторов V_{ij}:

1) $a_{11} = V_{13}\,, \quad a_{21} = V_{23}\,, \quad a_{12} = V_{12}\,, \quad a_{22} = V_{23}\,;$

2) $a_{11} = V_{23}\,, \quad a_{21} = V_{13}\,, \quad a_{12} = V_{12}\,, \quad a_{22} = V_{23}\,;$

3) $a_{11} = V_{13}\,, \quad a_{21} = V_{23}\,, \quad a_{12} = V_{23}\,, \quad a_{22} = V_{12}\,;$

4) $a_{11} = V_{23}\,, \quad a_{21} = V_{13}\,, \quad a_{12} = V_{23}\,, \quad a_{22} = V_{12}\,.$

Выделим в точных уравнениях /1/ в первом уравнении h_1, а во втором - h_2, где

$$h_1 = -\frac{1}{2m_1}\Delta_{\vec r_1} + V_{12}(\vec r_1)\,; \quad h_2 = -\frac{1}{2m_2}\Delta_{\vec r_3} + V_{13}(\vec r_3)\,, \qquad /4/$$

m_1 и m_2 - приведенные массы частиц 1,2 и 1,3 соответственно. Тогда при $\rho \to \infty$ в первом канале мы получаем связанное состояние частиц 1,2, а во втором - частиц 1,3.

Если пренебречь кинетической энергией относительного движения тяжелых частиц, то при подстановке /3/ в /1/ для получения уравнений сильной связи каналов в случаях 1–4 выделяются члены вида $1/\rho$ в эффективной энергии взаимодействия тяжелых частиц, что не отвечает асимптотике термов при $\rho \to \infty$ [/2/]. Таким образом, выбор коэффициентов /1/-/4/ не является физическим.

Случаи, когда a_{ij} выражаются через два оператора V_{ij}, можно в общем записать так:

$$a_{11} = V_{13} + X\,; \quad a_{21} = V_{23} - X\,; \quad a_{12} = V_{12} + Y\,; \quad a_{22} = V_{23} - Y\,. \qquad /5/$$

Если $X = V_{23}$, $Y = -V_{12}$, то из /1/ получаются тривиальные уравнения. Отметим, что если $a_{11} \neq 0$ или $a_{22} \neq 0$, то всегда возникают члены типа $1/\rho$ в эффективной энергии. Таким образом, в случае $X = -V_{13}$, $Y = V_{23}$ получаются простейшие уравнения типа /1/, которые в адиабатическом приближении имеют вид

$$
\begin{aligned}
[E - h_1(\vec r_1)]\psi_1 &= [V_{12}(\vec r_1) + V_{23}(\vec\rho)]\psi_2\,,\\
[E - h_2(\vec r_3)]\psi_2 &= [V_{13}(\vec r_3) + V_{23}(\vec\rho)]\psi_1\,.
\end{aligned}
\qquad /6/
$$

Требование $a_{11} = a_{22} = 0$ делает эти уравнения единственными. Подставляя /3/ в /6/ и переходя в представление полного момента, получаем

$$
\begin{aligned}
(E - E_m) f_m^{LM} &= \sum_{\bar n} V^{(1)}_{m\bar n} f_{\bar n}^{LM}\,,\\
(E - E_{\bar m}) f_{\bar m}^{LM} &= \sum_{n} V^{(2)}_{\bar m n} f_{n}^{LM}\,,
\end{aligned}
\qquad /7/
$$

где

$$m \equiv (m, \ell_r, \ell_\rho); \quad \bar m \equiv (\bar m, \bar\ell_r, \bar\ell_\rho); \quad n \equiv (n, \ell'_r, \ell'_\rho); \quad \bar n \equiv (\bar n, \bar\ell'_r, \bar\ell'_\rho);$$

$$V^{(1)}_{m\bar n} = \sum_{\substack{\bar\mu_r,\,\bar\mu'_\rho\\ \mu_r\,\mu_\rho}} C^{LM}_{\ell_r\mu_r\ell_\rho\mu_\rho}\, C^{LM}_{\bar\ell_r\bar\mu_r\bar\ell'_\rho\bar\mu'_\rho} \int Y^*_{\ell_\rho\mu_\rho}(\hat{\vec\rho})\, Y^*_{\ell_r\mu_r}(\hat{\vec r}_1)\, d\Omega_{\vec\rho}\, d\Omega_{\vec r_1} \times$$

$$\times R_{m\ell_r}(r_1)(V_{12} + V_{23}) R_{\bar n\bar\ell_r}(r_3)\, Y_{\bar\ell_r\bar\mu_r}(\hat r_3)\, Y_{\bar\ell'_\rho\bar\mu'_\rho}(\hat\rho)\, r_1^2\, dr_1\,;$$

$$V^{(2)}_{\bar m n} = \sum_{\substack{\mu_r\,\mu'_\rho\\ \bar\mu_r\,\bar\mu_\rho}} C^{LM}_{\bar\ell_r\bar\mu_r\bar\ell_\rho\bar\mu_\rho}\, C^{LM}_{\ell_r\mu_r\ell'_\rho\mu'_\rho} \int Y^*_{\bar\ell_\rho\bar\mu_\rho}(\hat\rho)\, Y^*_{\bar\ell_r\bar\mu_r}(\hat r_3)\, d\Omega_{\vec\rho}\, d\Omega_{\vec r_3} \times$$

$$\times R_{\bar m\bar\ell_r}(r_3)(V_{13} + V_{23}) R_{n\ell_r}(r_1)\, r_3^2\, dr_3\, Y_{\ell_r\mu_r}(\hat r_1)\, Y_{\ell'_\rho\mu'_\rho}(\hat\rho).$$

Применяя теперь процедуру $V_{mn} \approx V^N_{mn} = \sum_{ij}^{N} V_{mi}\, d^{-1}_{ij}\, V_{jn}$ и ограничиваясь случаем N=1, после стандартных преобразований [/3/] получаем

$$
\begin{aligned}
V^{(2)}_{\bar 1 1} F_1 &= \sum_m V^{(2)}_{\bar 1 m}(E - E_m)^{-1} V^{(1)}_{m\bar 1} F_2\,,\\
V^{(1)}_{1\bar 1} F_2 &= \sum_{\bar m} V^{(1)}_{1\bar m}(E - E_{\bar m})^{-1} V^{(2)}_{\bar m 1} F_1\,.
\end{aligned}
\qquad /8/
$$

Данная система уравнений типа сильной связи каналов является алгебраической, что позволяет точно найти зависимость энергии рассматриваемой системы от расстояния ρ между ядрами 2 и 3, то есть построить эффективный потенциал для атомных и мезоатомных систем $pp\mu$, $dT\mu$, ${}^3He\,d\mu$ и т.п.

3. РАСЧЕТЫ

Для определения действенности полученной системы /8/ находился эффективный потенциал однократно ионизованной молекулы водорода H_2^+ с полным моментом $L = 0$. Так как в данном случае массы частиц 2 и 3 одинаковы, система /8/ вырождается в уравнение

$$V^{(2)}_{\bar 1 1} F = \sum_m V^{(2)}_{\bar 1 m}(E - E_m)^{-1} V^{(1)}_{m\bar 1} F\,. \qquad /9/$$

На рис.1 представлены эффективные потенциалы $E(\rho)$, отсчитываемые от основного уровня атома водорода. Кривая 1 соответствует учету 1S -состояния в правой части /9/, кривая 2 - учету состояний 1S и 2S, кривая 3 - учету состояний 1S, 2S и 2P.

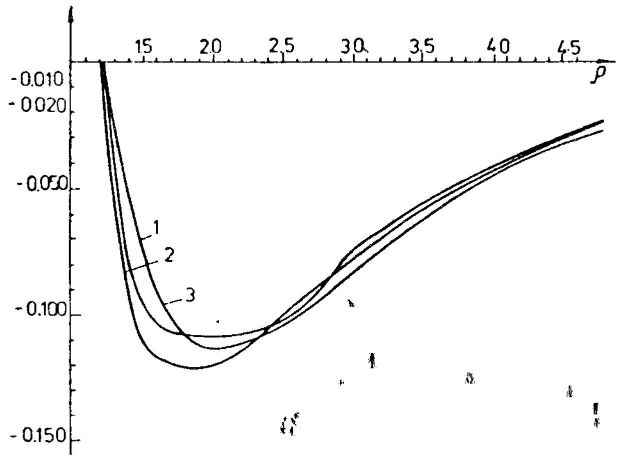

Рис.1

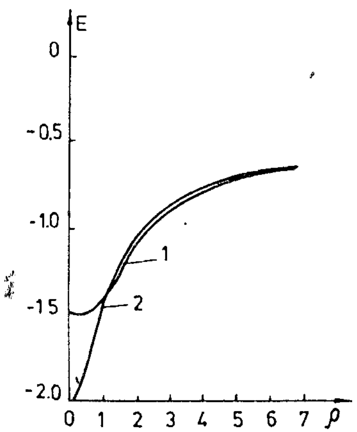

Рис.2

На рис.2 проводится сравнение полученного основного терма H_2^+ при учете $1S$-состояния /кривая 1/ с результатом точного расчета [2] /кривая 2/. Из рисунков видно, что уже учет основного состояния достаточен для хорошего описания эффективного потенциала и основного терма при $\rho \geq 1$. Это неудивительно, так как рассмотренные уравнения /6/ содержат асимптотики реальной задачи.

В качестве другой иллюстрации действенности /8/ с учетом основного состояния мезоатома $d\mu$ был найден эффективный потенциал системы $dd\mu$, оказавшийся равным

$$E(\rho) = \left(-\frac{2}{3}m^2\rho + \frac{1}{\rho}\right)e^{-m\rho}, \qquad /10/$$

где m - приведенная масса d и μ /отсчет энергии ведется от основного уровня $d\mu$ /. Полученный потенциал аппроксимировался потенциалом Морзе

$$V_\mu = D\left[e^{-2\alpha(\rho - R_0)} - 2e^{-\alpha(\rho - R_0)}\right]$$

с параметрами $R_0=2{,}19$; $D=0{,}107$; $\alpha=0{,}72$, что дает вращательно-колебательные уровни $E(v=0)=-327$ эВ, $E(v=1)=-28$ эВ. В результате сравнения с данными [4] видим, что рассмотренная методика действительно уже на первом шаге дает достаточно хорошие результаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферические и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
2. Зубарев А.Л. ЯФ, 1978, 28, с. 566.
3. Комаров И.В. В сб.: Вопросы теории атомных столкновений. Вып.1. Изд-во Ленинградского университета, 1975.
4. Виницкий С.И. и др. ОИЯИ, Р4-13036, Дубна, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 докабря 1982 года.

Беляев В.Б. и др. Р4-82-810

Решение уравнений фаддеевского типа для задачи двух кулоновских центров

Рассмотрено движение легкой заряженной частицы в поле двух кулоновских центров. Использовалась система уравнений для компонент полной волновой функции, обладающих требуемой асимптотикой. Вычислены эффективные потенциалы для молекулярного иона водорода и мезомолекулярного иона $dd\mu$. В последнем случае найден спектр мезомолекулы в состоянии с полным орбитальным моментом $L=0$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Belyaev V.B. et al. P4-82-810

Solution of Faddeev Type Equations for Two Coulomb Centers Problem

The movement of a light particle in the field of two coulomb centers is considered. A system of equations for components of the total wave function with the appropriate asymptotic behaviour was used without using separation of variables. Effective potentials for a molecular ion of the hydrogen and the μ-mesic ion $dd\mu$ are calculated. In the latter system the spectrum of a mesic molecule in a state with the total angular momentum $L=0$ is found.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.