

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

M 335

P4-88-438

А.В.Матвеевко

ТРЕХТЕЛЬНОЕ МОЛЕКУЛЯРНОЕ
ОПИСАНИЕ РЕАКЦИИ ПЕРЕДАЧИ

Направлено в Оргкомитет V Международной
конференции по кластерным аспектам
в ядерных и субъядерных системах, Киото,
Япония, июль 1988 г.

1988

1. ВВЕДЕНИЕ

Если одно из сталкивающихся ядер может быть описано как бесструктурный кор плюс валентный нуклон, а второе - как голый кор, то применима трехтельная модель, и мы приходим к реакции



В хорошо известной адиабатической картине этого процесса на первом этапе решается задача о движении валентной частицы в поле двух неподвижных центров. Собственные значения этой задачи затем играют роль эффективных потенциалов для взаимодействия двух коров.

Этот подход известен уже более 60 лет^{/1/} в молекулярной физике, а в настоящее время широко используется, в частности, при изучении кластерных аспектов в ядерной физике. Тем не менее он имеет принципиальные дефекты, которые широко обсуждались, но устранены только недавно^{/2/}, благодаря чему впервые построена точная теория рассеяния в системе трех частиц с учетом образования молекулярного комплекса в процессе рассеяния. Исходный адиабатический гамильтониан системы трех частиц был преобразован, и переопределено обычное разбиение полной динамической системы на быструю и медленную части. Наиболее существенное различие между старым и новым адиабатическим описанием состоит в том, что расстояние между двумя кораи, которое являлось медленной переменной в методе Борна - Оппенгеймера, уступает место гиперрадиусу системы трех частиц. В результате преобразования адиабатический гамильтониан Борна - Оппенгеймера переходит в адиабатический гиперсферический гамильтониан^{/3/}. Важное следствие предложенного преобразования - вывод о том, что адиабатический гиперсферический подход оптимален.

Следовательно, возникает задача построения эффективного метода решения соответствующего уравнения Шредингера. При этом встают следующие вопросы:

1. Какие пять переменных /кроме гиперрадиуса/ должны быть выбраны?
2. Какие зависимые переменные важны для предварительного анализа проблемы?

3. Как решать соответствующее уравнение Шредингера?
4. Почему гиперрадиус предпочтительней по сравнению с межъядерным расстоянием?
5. Остаются ли трудности в новом адиабатическом описании?
6. Какие факты свидетельствуют в пользу гиперсферического адиабатического описания?

2. ВЫБОР ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТ

Большинство вопросов, которые будут ниже рассмотрены, не связаны с выбором оператора потенциальной энергии. В этой связи мы в качестве примера выберем систему с хорошо определенной потенциальной энергией - ион $dt\mu^-$, который широко обсуждается в последнее время.

Гиперрадиус R для системы трех частиц: тритона t , дейтона d и отрицательного мюона μ^- , определяется формулой

$$R^2 = X^2 + \frac{m}{M} x^2, \quad /2/$$

где M и m есть приведенные массы систем (t, d) и $(t + d, \mu)$,

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{m_t} + \frac{1}{m_d}, \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_\mu} + \frac{1}{(m_t + m_d)}, \quad /3/$$

\vec{X} задает относительное положение тритона и дейтона, а \vec{x} - положение мюона относительно центра масс $d+t$ /см. рис. 1/. В гиперсферических координатах гамильтониан системы $dt\mu^-$ имеет вид

$$H = -\frac{1}{2M} \frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} R^5 \frac{\partial}{\partial R} + \bar{h}, \quad /4/$$

где

$$\bar{h} = \frac{1}{2MR^2} \hat{t} + \frac{\hat{c}}{R}, \quad \frac{\hat{c}}{R} = \frac{1}{X} - \frac{1}{x_t} - \frac{1}{x_d}. \quad /5/$$

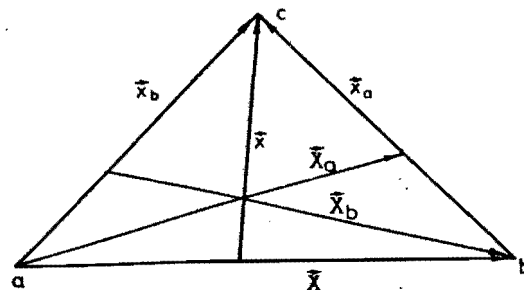


Рис. 1. Координаты для системы трех частиц. В нашем случае $a=t$, $b=d$ и $c=\mu^-$.

Объединенный институт
ядерной энергии
БНБ

Здесь \hat{H} - адиабатический гиперсферический гамильтониан, который параметрически зависит от R и пяти гиперсферических безразмерных переменных, совокупность которых мы обозначим через \hat{O} . Собственные функции $\hat{\phi}_n(\hat{O}; R)$ и собственные значения $\epsilon_n(R)$ оператора \hat{H} получаются в результате решения уравнения Шредингера

$$[\hat{H} - \epsilon_n(R)] \hat{\phi}_n(\hat{O}; R) = 0. \quad /6/$$

Шесть первых собственных значений $\epsilon_n(R)$ для состояний с полным угловым моментом $J = 0$ приведены на рис. 2. Видно, что при $R \rightarrow \infty$ $dt\mu$ -ион распадается на мезоатом водорода и ядро. Поскольку есть две возможности распада: либо $t\mu$, либо $d\mu$ -атом, возникают два семейства потенциальных кривых $\epsilon_n(R)$. Нижняя потенциальная кривая имеет довольно глубокий минимум. Три терма семейства $n = 2$ / n - главное квантовое число мезоатома водорода/ сильно взаимодействуют при $R \approx 12$ /квазипересечении термов/ /рис. 3/. Наиболее распространенным набором координат \hat{O} является пятерка $\{\alpha, \hat{x}, \hat{X}\}$, где \hat{x} и \hat{X} обозначают сферические углы векторов \vec{x} и \vec{X} соответственно, а

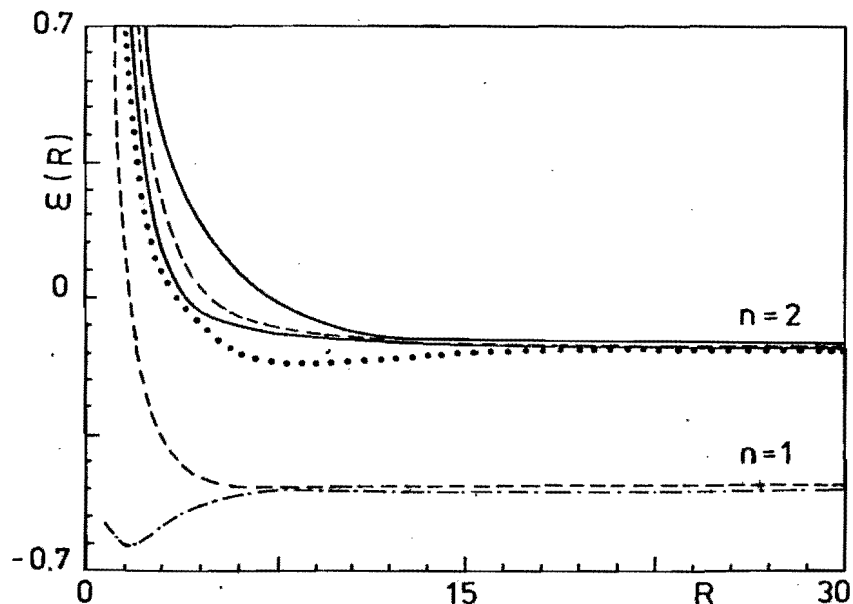


Рис. 2. Адиабатические потенциальные кривые /термы/ $\epsilon(R)$ для $dt\mu$ -случай $J=0$ как функции гиперрадиуса.

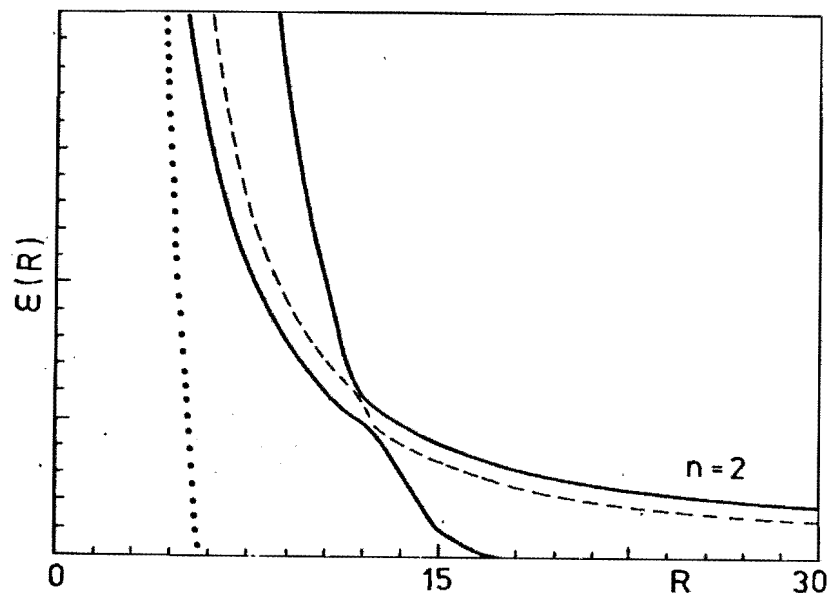


Рис. 3. Область квазипересечения термов для $n = 2$ семейства потенциальных кривых.

$$\alpha = \arctan(\sqrt{M} X / \sqrt{m} x). \quad /7/$$

В этом случае оператор \hat{t} из гамильтониана /5/ имеет вид

$$\hat{t} = -(\sin \alpha \cos \alpha)^{-1} \frac{d}{d\alpha} \sin \alpha \cos \alpha \frac{d}{d\alpha} + \frac{\vec{\ell}^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{\vec{L}^2}{\sin^2 \alpha}; \quad /8/$$

здесь $\vec{\ell} = -i\vec{x} \times \nabla_{\vec{x}}$ и $\vec{L} = -i\vec{X} \times \nabla_{\vec{X}}$, а элемент объема dV запишется как

$$dV = v_0 R^5 dR d\hat{O},$$

$$d\hat{O} = (\sin \alpha \cos \alpha)^2 d\alpha d\hat{x} d\hat{X}, \quad /9/$$

$$v_0 = [M^{1/2} (m_a + m_b + m_c) (m_a m_b m_c)^{-1/2}]^3.$$

Скалярное произведение для решений задачи /6/ мы определим формулой

$$(\hat{\phi}_i | \hat{\phi}_j) = \int d\hat{O} \hat{\phi}_i^* \hat{\phi}_j. \quad /10/$$

Здесь \hat{H} - адиабатический гиперсферический гамильтониан, который параметрически зависит от R и пяти гиперсферических безразмерных переменных, совокупность которых мы обозначим через \hat{O} . Собственные функции $\hat{\phi}_n(\hat{O}; R)$ и собственные значения $\epsilon_n(R)$ оператора \hat{H} получаются в результате решения уравнения Шредингера

$$[\hat{H} - \epsilon_n(R)] \hat{\phi}_n(\hat{O}; R) = 0. \quad /6/$$

Шесть первых собственных значений $\epsilon_n(R)$ для состояний с полным угловым моментом $J = 0$ приведены на рис. 2. Видно, что при $R \rightarrow \infty$ $d\mu$ -ион распадается на мезоатом водорода и ядро. Поскольку есть две возможности распада: либо $t\mu$, либо $d\mu$ -атом, возникают два семейства потенциальных кривых $\epsilon_n(R)$. Нижняя потенциальная кривая имеет довольно глубокий минимум. Три терма семейства $n = 2$ /д - главное квантовое число мезоатома водорода/ сильно взаимодействуют при $R \approx 12$ /квазипересечении термов/ /рис. 3/. Наиболее распространенным набором координат \hat{O} является пятерка $\{\alpha, \hat{x}, \hat{X}\}$, где \hat{x} и \hat{X} обозначают сферические углы векторов \vec{x} и \vec{X} соответственно, а

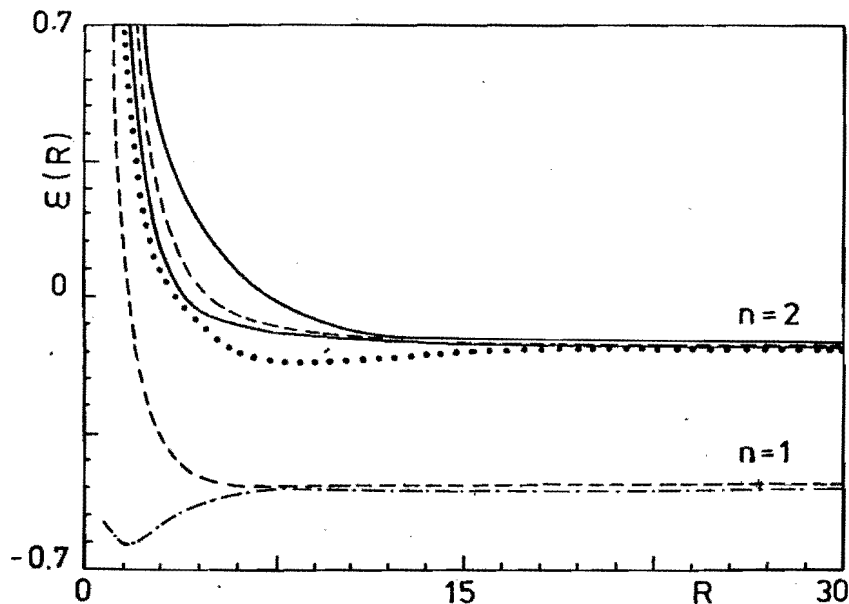


Рис. 2. Адиабатические потенциальные кривые /термы/ $\epsilon(R)$ для $d\mu^-$ /случай $J=0$ / как функции гиперрадиуса.

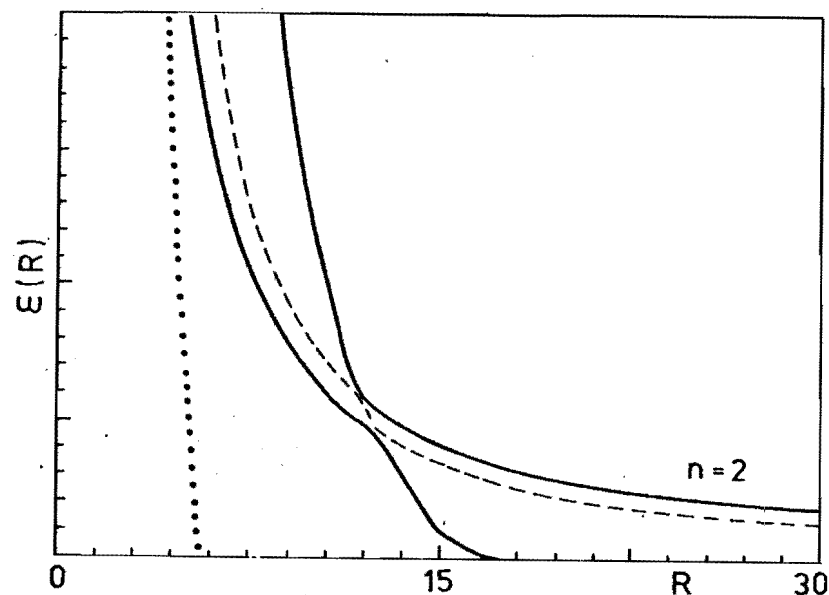


Рис. 3. Область квазипересечения термов для $n = 2$ семейства потенциальных кривых.

$$\alpha = \arctan(\sqrt{M} X / \sqrt{m} x). \quad /7/$$

В этом случае оператор \hat{t} из гамильтониана /5/ имеет вид

$$\hat{t} = -(\sin \alpha \cos \alpha)^{-1} \frac{d}{d\alpha} \sin \alpha \cos \alpha \frac{d}{d\alpha} + \frac{\vec{\ell}^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{\vec{L}^2}{\sin^2 \alpha}; \quad /8/$$

здесь $\vec{\ell} = -i\vec{x} \times \nabla_{\vec{x}}$ и $\vec{L} = -i\vec{X} \times \nabla_{\vec{X}}$, а элемент объема dV запишется как

$$dV = v_0 R^5 dR d\hat{O},$$

$$d\hat{O} = (\sin \alpha \cos \alpha)^2 d\alpha d\hat{x} d\hat{X}, \quad /9/$$

$$v_0 = [M^{1/2} (m_a + m_b + m_c) (m_a m_b m_c)^{-1/2}]^3.$$

Скалярное произведение для решений задачи /6/ мы определим формулой

$$(\hat{\phi}_i | \hat{\phi}_j) = \int d\hat{O} \hat{\phi}_i^* \hat{\phi}_j. \quad /10/$$

Из явного выражения для оператора /8/ следует, что уравнения $\sin \alpha = 0$ и $\cos \alpha = 0$ определяют особые точки оператора /8/. Отметим, что эти особенности являются следствием выбора координат и приводят к неоправданному усложнению задачи. Эта искусственная проблема устраняется, если ввести пару гиперсферических координат ξ, η . Действительно, определив

$$\xi = \frac{r_d + r_t}{R}, \quad \eta = \frac{r_d - r_t}{R}, \quad /11/$$

придем к следующему выражению для $\bar{h}^{/4/}$:

$$\bar{h} = -\frac{\rho^2}{2m} \nabla_{\mathbf{x}}^2 + \frac{\rho}{2MR^2} (\mathbf{j}^2 - \hat{B} - J_{\hat{\mathbf{x}}}^2) + \frac{\hat{q}}{MR^2} + \frac{\hat{c}}{R}. \quad /12/$$

Здесь J - полный угловой момент системы, $J_{\hat{\mathbf{x}}}$ - его проекция на вектор $\hat{\mathbf{x}}$,

$$\rho = 1 + \frac{m \mathbf{x}^2}{MX^2}, \quad /13/$$

$$\hat{q} = \frac{1}{\rho} \hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\hat{\mathbf{x}}}, \quad /14/$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}^2 = \frac{4}{R^2} \left[\hat{a}_{\xi\eta} + \frac{1}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right], \quad /15/$$

$$a_{\xi\eta} = \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right]. \quad /16/$$

Оператор \hat{B} является оператором кориолисова взаимодействия /см., например, /2/. Таким образом, если выбрать пару "гиперсферических углов" ξ, η , то особые точки оператора кинетической энергии совпадают с особыми точками оператора потенциальной энергии.

3. ВРАЩАЮЩАЯСЯ СИСТЕМА КООРДИНАТ

Гамильтониан динамической задачи двух центров \bar{h} зависит от пяти переменных. Выбор определенной комбинации $\hat{0}$ не меняет ситуацию. Существенное упрощение задачи происходит после проведения парциального анализа общего решения уравнения /6/. Для этого нужно потребовать, чтобы собственные функции гамильтониана \bar{h} являлись также собственными функциями операторов: \mathbf{j}^2 - квадрат

полного углового момента и \hat{p} - полной четности. При этом оказывается, что процедура построения соответствующих решений выглядит максимально простой и естественной, если в качестве трех из пяти гиперуглов выбрать значения углов Эйлера, которые задают связь исходной лабораторной и вращающейся систем координат /2/. Введение относительных координат ξ, η фактически содержит такую процедуру, а гамильтониан /12/ - пример соответствующего оператора во вращающейся системе координат, когда ось квантования совпадает с направлением вектора $\hat{\mathbf{x}}^{/2/}$. Такой выбор вращающихся осей оказывается неудачным, поскольку оператор кориолисова взаимодействия \hat{B} порождает нефизическое дальное действие в областях диссоциации, когда $R \rightarrow \infty$. Как мы показали ранее /2/, эта проблема устраняется, если в качестве гиперуглов выбрать координаты $\hat{0} = \{\xi, \eta, \alpha, \beta, \gamma\}$, причем α, β, γ задают вращение, которое в качестве ортов подвижной системы координат фиксирует орты, задающие направления главных осей тензора инерции системы трех частиц. В этом случае вращающаяся ось квантования не совпадает с направлением вектора $\hat{\mathbf{x}}$.

Таким образом, мы зафиксировали полный набор из шести координат для формулировки задачи трех тел в системе центра масс. Это набор $\{R, \xi, \eta, \alpha, \beta, \gamma\}$. Гиперрадиус R является наиболее удобной переменной для анализа решения в точке тройного столкновения. Ортогональные координаты ξ, η обеспечивают простую форму оператора \bar{h} динамической задачи двух центров и удобны при построении решения в точках парных столкновений. Переменные α, β, γ обеспечивают простоту парциального анализа задачи трех тел и, кроме того, позволяют правильно описать поведение решений динамической задачи двух центров в области парных столкновений, когда $J \neq 0$. После проведения парциального анализа, который сводится к интегрированию по переменным α, β, γ , гамильтониан задачи трех тел превращается в систему трехмерных уравнений Шредингера /2/.

4. ВЫБОР ЗАВИСИМЫХ ПЕРЕМЕННЫХ ДЛЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО АНАЛИЗА ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

В этом разделе мы ограничимся простейшим случаем состояний с $J = 0$ и $\rho = 1$. Собственные функции оператора \bar{h} будем искать в виде $\bar{\phi}(\xi, \eta; R) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \phi(\xi, \eta; R)$. Такая замена функции приводит к упрощению гамильтониана \bar{h} , который переходит в

$$\bar{h}^{J=0} = -\frac{1}{2m} \rho^2 \hat{a}_{\xi\eta} - \frac{\sqrt{\rho}}{R} \left(\frac{2}{\xi + \eta} + \frac{2}{\xi - \eta} - 1 \right) - \frac{3}{2MR^2}. \quad /17/$$

Здесь оператор $\hat{a}_{\xi\eta}$ задается формулой /16/. Точки парных столкновений фиксируются условиями $R(\xi \pm \eta) \rightarrow 0; R \rightarrow \infty$. Нефизические особенности в операторе /17/ отсутствуют. Три независимых переменных входят в выражение /17/ явным образом. Это "двухчастичные" комбинации $\xi \pm \eta$ и коллективная /"трехчастичная"/ переменная ρ . Параметр R также является коллективным. Отметим, что $\rho = \frac{1}{\sin^2 \alpha}$, где α задается формулой /6/. Можно предположить, что в разных областях конфигурационного пространства при анализе собственных функций оператора /17/ наиболее удобны, вообще говоря, разные комбинации двухчастичных и коллективных переменных. Соответствующий анализ был проведен нами для $dt\mu$ -системы и дал возможность построить простые и эффективные аналитические функции для вариационного анализа оператора /17/. В общем случае, для состояний с $J \neq 0$, число важных зависимых коллективных переменных возрастает.

5. АДИАБАТИЧЕСКИЙ БАЗИС МЕТОДА БОРНА - ОППЕНГЕЙМЕРА И АДИАБАТИЧЕСКИЙ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИЙ БАЗИС

Как уже отмечалось во введении, метод Борна - Оппенгеймера уже на протяжении многих лет успешно применяется в молекулярной физике. Он оказался также весьма полезным при изучении мезомолекулярных систем, во всяком случае, так было при получении спектра низколежащих состояний, когда при разложении полной волновой функции системы достаточно взять несколько базисных адиабатических состояний. Однако при рассмотрении наиболее интересных слабосвязанных состояний $dt\mu$ -и $dd\mu$ -ионов метод оказался малоэффективным. Для иллюстрации этого утверждения приведем в хронологическом порядке результаты вычисления энергии связи возбужденного $J=1, p=-1$ состояния $dd\mu$ -иона^{/6/}: 1,96 эВ /1978 г./, 1,91 эВ /1980 г./, 1,94 эВ /1982 г./, 1,956±0,001 эВ /1985 г./^{/6/}. Уже первый серьезный вариационный расчет опроверг этот результат^{/7/}, здесь для энергии связи получена оценка 1,974 эВ.

Имеют место два серьезных обстоятельства, в силу которых приведенные выше результаты адиабатических расчетов $dd\mu$ расходятся /или сходятся к неверному пределу/: 1/ состояния традиционного /Б.О./ адиабатического базиса имеют неправильное поведение в особых точках исходного трехчастичного гамильтониана; 2/ квантовые числа соответствующей задачи двух центров не отвечают трехчастичным интегралам движения, и, наоборот, оператор, порождающий базис Борна - Оппенгеймера, не коммутирует с операторами квадрата полного углового момента и полной четности задачи трех тел, которые порождают точные интегралы движения.

Простейшие расчеты /одноуровневое приближение/ продемонстрировали фактическое превосходство адиабатического гиперсферического подхода^{/2/}. Следует отметить, что подход такого типа впервые использовался при изучении атома гелия^{/3/}. Он оказался также весьма успешным при рассмотрении системы e^+e^+ , состоящей из частиц с одинаковыми массами^{/8,9/}. Совсем недавно продемонстрирована высокая эффективность адиабатического метода в задачах молекулярной физики^{/10/}. Таким образом, класс физических задач, для которых метод может оказаться полезным, оказывается чрезвычайно широким.

6. ТРУДНОСТИ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПОДХОДА

Квадрат гиперрадиуса пропорционален следу тензора инерции системы трех частиц. Как мы уже отмечали, главные оси тензора инерции, в свою очередь, задают направления ортов вращающейся системы координат, которая оказывается оптимальной для записи квантовомеханического гамильтониана задачи трех тел. Можно сказать, что тензор инерции играет особо важную роль в адиабатическом подходе.

В областях диссоциации гиперрадиус становится пропорциональным соответствующему якобиевскому вектору, который соединяет центр масс двухчастичного кластера и третью частицу и является удобным для описания реакции /1/ динамической переменной. Мы воспользовались этим обстоятельством при построении соответствующей теории рассеяния^{/2/}. Это оказалось возможным, поскольку ведущие члены нефизических дальнедействий между различными асимптотическими состояниями процесса /1/ исчезают в результате перехода от адиабатического базиса Борна - Оппенгеймера к адиабатическому гиперсферическому базису^{/2/}. Однако, как это было впервые обнаружено в работе^{/11/} и недавно подтверждено нашими расчетами^{/12/}, матричные элементы оператора d/dR между адиабатическими состояниями, переходящими в состояния одного и того же двухчастичного кластера, пропорциональны $1/R$ при $R \rightarrow \infty$. Основная причина такого поведения состоит в том, что, как уже указывалось, R асимптотически переходит, но не совпадает с соответствующими переменными Якоби. В двухуровневом описании процесса /1/ эта проблема, к счастью, не существует. Для общего случая она пока не разрешена.

Автор признателен проф. Я.Абе, проф. Т.Исихара и Хирочи Фукуда за многочисленные полезные обсуждения свойств адиабатического базиса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Born M., Oppenheimer J.R., - Ann.Phys. (Leipzig), 1927, 84, p.457.
2. Matveenko A.V., Abe Y. Few-Body Systems, 1987, 2, p.127.
3. Macek J.H. - J.Phys., 1968, B1, p.861.
4. Matveenko A.V. - Phys.Lett., 1983, 119B, p.11.
5. Vinitisky A.I., Ponomarev L.I. - Nuclei and Particle Physics, 1982, 13, p.1336.
6. Gocheva A. et al. - Phys.Lett., 1985, 153B, p.349.
7. Frolov A.M., Efros V.O. - J.Phys., 1985, B18, p.265.
8. Botero J. - Phys.Rev., 1987, 35A, p.36.
9. Kaschiev M., Matveenko A.V. - J.Phys., 1985, B18, p.L645.
10. Macek J., Jerjian K.A. - Phys.Rev., 1986, A33, p.233.
11. Macek J. - Phys.Rev., 1985, A31, p.2162.
12. Hara S., Fukuda H., Ishihara T., Matveenko A.V. - Phys.Lett., 1988, 130A, p.22.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 июня 1988 года.

Матвеенко А.В.

P4-88-438

Трехтельное молекулярное описание реакции передачи

Предложен практический подход для описания молекулярных состояний в системе трех частиц. В основе метода лежит старая адиабатическая идея Борна и Оппенгеймера, которая в современном виде совпадает с одним из вариантов адиабатического гиперсферического подхода. Физически обоснованный выбор системы координат и предварительный анализ аналитического поведения решений в особых точках уравнения Шредингера позволяют сформулировать эффективную процедуру для численного решения задачи.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод автора.

Matveenko A.V.

P4-88-438

Three-Body Molecular Description
of the Transfer Reaction

A unified approach to the description of molecular states in a three-body system is proposed. The method is based on the old adiabatic idea of Born and Oppenheimer and in its present form looks like a modification of the hyperspherical adiabatic method. The proper choice of the coordinate system and the preliminary analytic analysis of the singularities of the problem are argued to be important for a further development of a powerful numerical procedure for solving the problem.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988