ЦБ

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4-86-244

С.И.Виницкий, М.Б.Кадомцев

АСИМПТОТИКА ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ В ЕСТЕСТВЕННЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Направлено в "Journal of Physics B : Letters to the Editor"

1986

В недавней работе /I/ были введены естественные переменные в задаче трех тел, позволяющие корректно описывать процессы рассеяния в адиабатическом базисе. Эти координаты переходят в правильные пары координат Якоби при разведении сталкивающихся атомных фрагментов на расстояние $R\to\infty$. При этом относительное движение фрагментов описывается с правильной приведенной массой, а волновые функции адиабатического базиса переходят в функции соответствующего изолированного атома.

В настоящей работе рассмотрена асимптотика задачи двух центров в естественных переменных при значении гиперрадиуса $\mathcal{R}\gg 1$. Вычислена соответствующая асимптотика эффективных потенциалов – матричных элементов полного гамильтониана, и получена система уравнений по медленной переменной $\mathcal{R}$. Использование естественных координат приводит к тому, что в этой системе уравнений отсутствует сильная кинематическая связь в каналах, присущая стандартному адиабатическому представлению /2/. При этом, однако, остается слабая $\sim \mathcal{R}^{-1}\partial/\partial\mathcal{R}$ кинематическая связь в каналах, обусловленная отличием $\mathcal{R}$ от модуля соответствующего якобиевского вектора на величину $O(\mathcal{R}^{-1})$. Показано, что учет связи при больших значениях $\mathcal{R}$ приводит к правильной асимптотике полной волновой функции, согласованной с физическими граничными условиями задачи рассеяния.

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц a, b и c с массами M_a, M_b и M_c и зарядами Z_a, Z_b и $Z_c=-1$ $(e=\hbar=1)$. Естественные координаты $\vec r\,'$, $\mathcal{R}$ связаны с обычными якобиевскими координатами $\vec r_c$, R (см. рисунок) соотношениями /I/

$$\vec r\,' = \vec r_c/R\,,\quad \mathcal{R}=\sqrt{\rho}\,R=\left\{1+\frac{m}{M}\left(\frac{r_c}{R}\right)^2\right\}^{1/2}, \tag{I}$$

где $\quad m^{-1}=M_c^{-1}+(M_a+M_b)^{-1},\quad M^{-1}=M_a^{-1}+M_b^{-1}.$

Компоненты вектора $\vec r\,'$ берутся в системе координат $\{x'y'z'\}$ с осью z', направленной по $\vec R = R\vec e_R$. Поскольку мы интересуемся поведением волновой функции при $R\to\infty$, мы будем отсчитывать вектор $\vec r\,'$ от одного из ядер (для определенности от ядра b), т.е. вместо $\vec r\,'$ введем вектор $\vec r_b\,'$:

$$\vec r_b\,' = \vec r\,' - M_a/(M_a+M_b)\,\vec e_R\,, \tag{2}$$

тогда

$$\rho = 1+\frac{m}{M}\left(\vec r_b\,' + \frac{M_a}{M_a+M_b}\vec e_R\right)^2 = \frac{m}{m_b}\rho_b = \frac{m}{m_b}\left(1+2\frac{m_b}{M_b}r_b'\cos\vartheta_b + \frac{m_b}{M}r_b'^2\right), \tag{3}$$

где $m_b = M_c M_b/(M_a+M_b)$ – приведенная масса частицы c в атоме (bc). В координатах $\vec r_b\,', \mathcal{R}$ при нулевом полном моменте уравнение Шредингера, рассмотренное в работе /I/, имеет вид

$$\left\{-\frac{1}{2M}\frac{1}{\mathcal{R}^2}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}\mathcal{R}^2\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} + h + \frac{3}{8M\mathcal{R}^2}\right\}X = EX\,, \tag{4}$$

здесь

$$h = -\frac{1}{2m}\frac{\rho^2}{\mathcal{R}^2}\Delta_{\vec r\,'} + \sqrt{\rho}\,V = -\frac{m}{m_b}\frac{\rho_b^2}{2m_b\mathcal{R}^2}\Delta_{\vec r_b\,'} + \sqrt{\frac{m}{m_b}\rho_b}\;V\,,$$
$$V = -\frac{1}{\mathcal{R}}\left\{\frac{Z_b}{r_b'} - Z_aZ_b + \frac{Z_a}{|\vec r_b\,' + \vec e_R|}\right\} \tag{5}$$

– гамильтониан быстрой подсистемы, а скалярное произведение $(X,X) = \int d\tau\, X^*X$ определено с элементом объема

$$d\tau = 4\pi\rho^{-2}\mathcal{R}^2 d\vec r\,' d\mathcal{R} = 4\pi\left(\frac{m_b}{m}\right)^2\rho_b^{-2}\mathcal{R}^2 d\vec r_b\,' d\mathcal{R}\,. \tag{6}$$

От переменных $\vec r_b\,', \mathcal{R}$ перейдем к более удобным переменным

$$\vec r = \sqrt{\frac{m_b}{m}}\,\mathcal{R}\,\vec r_b\,',\qquad \mathcal{R}_b = \sqrt{\frac{m_b}{m}}\,\mathcal{R} = \sqrt{\frac{M}{\mu_b}}\,\mathcal{R}\,, \tag{7}$$

которые имеют простой физический смысл при $\mathcal{R}\gg 1$. Действительно, вектор $\vec r$

$$r = \sqrt{\frac{m_b}{m}}\sqrt{\rho}\,R\,r_b' = \sqrt{\rho_b}\,r_b = \left\{1+2\frac{m_b}{M_b}\frac{r_b}{R}\cos\vartheta_b + \frac{m_b}{M}\left(\frac{r_b}{R}\right)^2\right\}^{1/2} r_b \approx$$
$$\approx\left\{1+\frac{m_b}{M_b}\frac{r_b}{R}\cos\vartheta_b\right\} r_b$$

переходит при $r_b^{-1} R \gg 1$ с точностью $O\left(\frac{m_b}{M_b}\frac{r_b}{R}\right)$ в якобиевский вектор $\vec{r}_b$ атома (bc): (см.рисунок). Соответственно медленная переменная $\mathcal{R}_b$

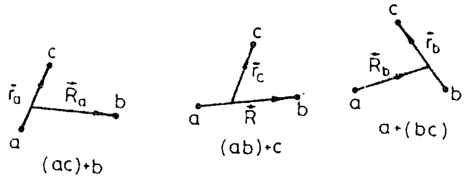
$$\mathcal{R}_b = \sqrt{\frac{m_b}{m}}\sqrt{\rho}\, R = \sqrt{\rho_b}\, R =$$

$$= \left\{ R^2 + 2\frac{m_b}{M_b} r_b' R^2 \cos\vartheta_b + \left(\frac{m_b}{M_b}\right)^2 (r_b' R)^2 + \left(\frac{m_b}{M} - \frac{m_b^2}{M_b^2}\right)(r_b' R)^2 \right\}^{1/2} = \tag{8}$$

$$= \left\{ R_b^2 + \frac{m_b}{\mu_b} r_b^2 \right\}^{1/2} \approx \left\{ 1 + \frac{1}{2}\frac{m_b}{\mu_b}\left(\frac{r_b}{R_b}\right)^2 \right\} R_b$$

$$\mu_b = \frac{M_a(M_b+M_c)}{M_a+M_b+M_c} = \left(\frac{1}{M} - \frac{m_b}{M_b^2}\right)^{-1}$$

переходит при $r_b^{-1} R_b \gg 1$ с относительной точностью $O\left\{\left(\frac{m_b}{\mu_b}\right)\frac{r_b}{R_b}\right\}^2$ в модуль якобиевского вектора $\vec{R}_b = \vec{R} + \frac{M_c}{M_b+M_c}\vec{r}_b = \vec{R} + \frac{m_b}{M_b}\vec{r}_b$ (см.рисунок), μ_b – приведенная масса в канале $a+(bc)$. В переменных (7) уравнение (4) приобретает вид (здесь и далее выбраны единицы $e = \hbar = m_b = 1$ и опущен индекс b при $\mathcal{R}_b$ и μ_b):



Координаты Якоби для системы трех частиц.

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{1}{\mathcal{R}^2}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}\mathcal{R}^2\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} - \frac{1}{\mu}(\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} - \frac{1}{2\mu\mathcal{R}^2}\left\{(\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})^2 + (\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})\right\} + \right.$$

$$\left. + h + \frac{3}{8\mu\mathcal{R}^2} \right] X = E X, \tag{9}$$

где

$$h = -\frac{1}{2}\rho_b^2\Delta_{\vec{r}} + \sqrt{\rho_b}\, V, \quad \rho_b = 1 + \frac{2}{M_b}\frac{z}{\mathcal{R}} + \frac{1}{M}\frac{r^2}{\mathcal{R}^2},$$

$$V = -\left\{ \frac{Z_b}{r} - \frac{Z_a Z_b}{\mathcal{R}} + \frac{Z_a}{|\vec{r} + \mathcal{R}\vec{e}_R|} \right\},$$

а элемент объема (6) равен

$$d\tau = 4\pi\left(\frac{1}{m}\right)^{1/2}\rho_b^{-2}\mathcal{R}^{-1} d\vec{r}\, d\mathcal{R}.$$

Далее от функции X перейдем к функции $X_b = m^{-1/4}\rho_b^{-1}\mathcal{R}^{-1/2} X$, тогда уравнение (9), гамильтониан h и элемент объема изменяются следующим образом : $d\tau = 4\pi\, d\vec{r}\, d\mathcal{R}$,

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\mathcal{R}^2} + \frac{1}{\mu} Q \frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} + \frac{1}{2\mu\mathcal{R}^2} H + h_b - E \right] X_b = 0, \tag{10}$$

где $Q = -(3/2 + \vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})$, $H = -[(\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})^2 + 2(\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})]$,

$$h_b = -\frac{1}{2}\rho_b^2\Delta_{\vec{r}} - \rho_b\left\{\frac{2}{M_b}\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{2}{M}\frac{1}{\mathcal{R}^2} Q\right\} + \sqrt{\rho_b}\, V.$$

Выполненный переход от уравнения (4) к уравнению (10) позволил явно выделить операторы $Q\mathcal{R}^{-1}\partial/\partial\mathcal{R}$ и $\mathcal{R}^{-2} H$, ответственные за слабую кинематическую связь в канале $a + (bc)$.

Действуя стандартным образом, представим волновую функцию в виде разложения

$$X_b(\vec{r}, \mathcal{R}) = \sum_i \Psi_i(\vec{r}; \mathcal{R})\, X_{bi}(\mathcal{R}) \tag{11}$$

по адиабатическому базису Ψ_i – волновым функциям быстрой подсистемы

$$h_b \Psi_i(\vec{r}; \mathcal{R}) = E_i(\mathcal{R})\Psi_i(\vec{r}; \mathcal{R}),$$

$$(\Psi_i, \Psi_i) = \int d\vec{r}\, \Psi_i^*(\vec{r}; \mathcal{R})\Psi_i(\vec{r}; \mathcal{R}). \tag{12}$$

Рассмотрим асимптотику задачи двух центров (12) при $r^{-1}\mathcal{R} \gg 1$ с помощью схемы ТВ, предложенной в работе /3/. Для этого умножим уравнение (12) слева на r :

$$\left[-\frac{1}{2} r\left(1 + \frac{2z}{M_b\mathcal{R}} + \frac{r^2}{M\mathcal{R}^2}\right)\Delta_{\vec{r}} - r\left(1 + \frac{2z}{M_b\mathcal{R}} + \frac{r^2}{M\mathcal{R}^2}\right)\left\{\frac{2}{M_b}\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{2}{M}\frac{1}{\mathcal{R}^2} Q\right\} - \right.$$

$$\left. - r\left(1 + \frac{2z}{M_b\mathcal{R}} + \frac{r^2}{M\mathcal{R}^2}\right)^{1/2}\left\{\frac{Z_b}{r} - \frac{Z_a Z_b}{\mathcal{R}} + \frac{Z_a}{|\vec{r} + \mathcal{R}\vec{e}_R|}\right\} - r E(\mathcal{R}) \right]\Psi = 0 \tag{13}$$

и будем искать решение (12) в виде

$$E(\mathcal{R}) = E^{(0)} + \mathcal{R}^{-1} E^{(1)} + \mathcal{R}^{-2} E^{(2)} + \ldots, \quad \Psi = \Psi^{(0)} + \mathcal{R}^{-1}\Psi^{(1)} + \ldots, \tag{14}$$

где $E^{(0)} = -Z_b^2/2n^2$ и $\Psi^{(0)}$ – соответственно энергия и волновая функция атома (bc) с гамильтонианом $h^{(0)} = -1/2\Delta_{\vec{r}} - Z_b/r$ в состоянии с фиксированным главным квантовым числом n. Сохраняя в (13) члены с точностью $O(\mathcal{R}^{-2})$, имеем

$$\{-\frac{1}{2}r\Delta_{\vec r} - Z_b - rE^{(0)} - \mathcal{R}^{-1}V^{(1)} - \mathcal{R}^{-2}V^{(2)}\}\Psi = 0, \qquad (15)$$

где $$V^{(1)} = (-Z_a(Z_b-1) + E^{(1)})r + \frac{2}{M_b}\left[r\frac{\partial}{\partial z} + z\left(r\Delta_{\vec r} + \frac{Z_b}{2}\right)\right],$$

$$V^{(2)} = -Z_a r z\{1 + M_b^{-1}(Z_b-1)\} + E^{(2)}r + Z_b\left[\frac{r^2}{2M} - \frac{z^2}{2M_b^2}\right] + $$
$$+ \left(\frac{2}{M_b}\right)^2 z r\frac{\partial}{\partial z} + \frac{r}{2}\left[\left(\frac{2}{M_b}\right)^2 z^2 + \frac{2}{M}r^2\right]\Delta_{\vec r} + \frac{r}{M}(3 + 2\vec r\cdot\nabla_{\vec r}).$$

Тогда, действуя согласно /3/, получаем

$$E^{(1)} = Z_a(Z_b-1), \quad E^{(2)} = \lambda_{nqm}, \qquad (16)$$

где λ_{nqm} – собственные значения эквивалентного оператора возмущения в n -слое:

$$\Lambda = -\frac{3}{2}\frac{Z_a n}{Z_b}\{1 + M_b^{-1}(Z_b-1)\}A_z + \frac{1}{2\mu}\frac{3}{2}\vec l^2 - \frac{1}{4\mu}(n^2+2). \qquad (17)$$

Здесь A_z и $\vec l^2$ – соответственно проекция на ось z вектора Рунге – Ленца и квадрат орбитального момента атома (bc). Собственные значения λ_{nqm} и правильные функции нулевого приближения

$$\Psi^{(0)}_{nqm} = \sum_{n_2=0}^{n-m-1} a^q_{n_2}\Psi^{(0)}_{n_1n_2m}, \quad n = n_1+n_2+m+1, \qquad (18)$$

в представлении кулоновских параболических функций $\Psi^{(0)}_{n_1n_2m}$ находятся в результате решения секулярного уравнения

$$\sum_{n_2'=0}^{n-m-1}\{\langle n_1n_2m|\Lambda|n_1'n_2'm\rangle - \lambda_{nqm}\delta_{n_2n_2'}\}a^q_{n_2'} = 0. \qquad (19)$$

Явные выражения для $\langle n_1n_2m|\Lambda|n_1'n_2'm\rangle$ легко составляются из известных матричных элементов /4/:

$$\langle n_1n_2m|A_z|n_1'n_2'm\rangle = (n_2-n_1)\delta_{n_2n_2'},$$
$$\langle n_1n_2m|\vec l^2|n_1'n_2'm\rangle = \frac12\{n^2-1+m^2-(n_1-n_2)^2\}\delta_{n_2n_2'} - \qquad (20)$$
$$- \{(n_2+1)n_1(n_1+m)(n_2+m+1)\}^{1/2}\delta_{n_2',n_2+1} -$$
$$- \{n_2(n_1+1)(n_1+m+1)(n_2+m)\}^{1/2}\delta_{n_2',n_2-1}.$$

Таким образом, решение (19) вместе с решением аналогичного секулярного уравнения в канале $b+(ac)$ позволяют построить классификацию состояний задачи двух центров в естественных переменных в пределе разъединенных атомов.

Для нахождения асимптотики волновой функции (11) проще, однако, воспользоваться собственными функциями оператора $\tilde h_b = h + H/2\mu\mathcal{R}^2$, явно присутствующего в уравнении (10). Поскольку эквивалентный оператор H в n - слое равен

$$H = -\frac12\vec l^2 + \frac12(n^2+2),$$

то соответствующий $\tilde h_b$ эквивалентный оператор $\tilde\Lambda = \Lambda + (2\mu)^{-1}H$ имеет вид

$$\tilde\Lambda = -\frac32\frac{Z_a n}{Z_b}(1+M_b^{-1}(Z_b-1))A_z + \frac{1}{2\mu}\vec l^2. \qquad (21)$$

Правильные функции нулевого приближения $\tilde\Psi^{(0)}_{nqm}$ и собственные значения $\tilde\lambda_{nqm}$ находятся в результате решения секулярного уравнения (19) при замене Λ на $\tilde\Lambda$. Усредняя (10) по этим функциям, получаем систему уравнений для функций $\chi_{bi}(\mathcal R)$ с точностью $O(\mathcal R^{-2})$:

$$\left\{\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{d\mathcal R^2} + (E - V_{ii}(\mathcal R))\right\}\chi_{bi}(\mathcal R) = \sum_j \frac1\mu Q_{ij}\frac1{\mathcal R}\frac{\partial}{\partial\mathcal R}\chi_{bj}(\mathcal R), \qquad (22)$$

где

$$Q_{ij} = \frac12\langle\tilde\Psi^{(0)}_{nqm}|[h^{(0)}, r^2]|\tilde\Psi^{(0)}_{n'q'm}\rangle = \frac12(E^{(0)}_n - E^{(0)}_{n'})\langle\tilde\Psi^{(0)}_{nqm}|r^2|\tilde\Psi^{(0)}_{n'q'm}\rangle, \qquad (23)$$

$$V_{ii}(\mathcal R) = E^{(0)}_n + Z_a(Z_b-1)\mathcal R^{-1} + \lambda_{nqm}\mathcal R^{-2}.$$

Систему уравнений (22) можно также получить, исходя из уравнения Шредингера, записанного в якобиевских переменных $\vec r_b$, $\vec R_b$ (см. рисунок):

$$\left\{-\frac{1}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial R_b^2} + h^{(0)} + \frac{\vec l^2}{2\mu R_b^2} + \frac{Z_aZ_b}{|\vec R_b - M_b^{-1}\vec r_b|} - \frac{Z_a}{|\vec R_b + (M_b-1)M_b^{-1}\vec r_b|} - E\right\}\chi_b = 0. \qquad (24)$$

Здесь вектор $\vec r_b$ задан в системе координат с осью z, направленной по вектору $\vec R_b$, $h^{(0)} = -\frac12\Delta_{\vec r_b} - Z_b/r_b$, а элемент объема равен $d\tau = 4\pi\, d\vec r_b\, dR_b$. Переходя в (24) от R_b к $\mathcal R = \sqrt{R_b^2 + \mu^{-1}r_b^2}$

согласно (8) и удерживая при $R_b/r_b \gg 1$ члены $O(\mathcal{R}^{-2})$, имеем

$$\left\{-\frac{1}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\mathcal{R}^2} - \frac{1}{\mu}\left(3/2 + (\vec r_b\cdot\nabla_{\vec r_b})\right)\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} + \tilde h_b - E\right\}\chi_b = 0, \qquad (25)$$

где

$$\tilde h_b = h^{(0)} + \frac{Z_a(Z_b-1)}{\mathcal R} + \frac{1}{2\mu\mathcal R^2}\vec l^{\,2} + \frac{1}{\mathcal R^2} Z_a\{1+M_b^{-1}(Z_b-1)\} z . \qquad (26)$$

Эквивалентный оператор $\tilde h_b$ в n -слое совпадает с $\tilde\Lambda$ (21), поэтому, усредняя (25) по правильным функциям нулевого приближения $\tilde h_b$, получаем систему уравнений, совпадающую с (22). Может показаться, что использование естественных переменных (I) только усложняет асимптотический вид уравнения (24) в канале $a+(bc)$, поскольку появляется слабая кинематическая связь $\sim\mathcal R^{-1}\partial/\partial\mathcal R$. В действительности, однако, это минимальное усложнение есть следствие единого описания каналов $a+(bc)$ и $b+(ac)$ с помощью одного ортогонального набора двухцентровых функций в естественных переменных. Последнее означает, что в данном подходе отсутствуют трудности, присущие методу сильной связи каналов и решена проблема введения криволинейных координат в адиабатическом базисе. (История данного вопроса освещена в работе /5/).

Покажем теперь, как формулируются физические граничные условия задачи рассеяния в естественных переменных. Для этого рассмотрим асимптотику решений системы уравнений (22) в случае одного открытого канала $i = |000\rangle$ и $Z_b = 1$, т.е. $k_0^2 = 2\mu(E - E_0^{(0)})$ и $k_i^2 = 2\mu(E - E_i^{(0)}) < 0$, где $E_i^{(0)} = -1/2n^2$. Тогда, оставляя в системе уравнений (22) главные члены, нетрудно получить

$$\left\{\frac{d^2}{d\mathcal R^2} + k_0^2\left(1 - \frac{2\langle 0|r^2|0\rangle}{2\mu\mathcal R^2}\right)\right\}\chi_{b0} = 0,$$

$$\frac{d\chi_{bj}}{d\mathcal R} = \frac{k_0^2\langle j|r^2|0\rangle}{2\mu\mathcal R}\chi_{b0}. \qquad (27)$$

Здесь использовали правило сумм:

$$2\sum_{j\neq 0}\frac{Q_{0j}Q_{j0}}{E_0^{(0)}-E_j^{(0)}} = \langle 0|r^2Q|0\rangle = \langle 0|r^2|0\rangle .$$

Решение системы (27) можно записать следующим образом ($k_0\langle 0|r^2|0\rangle \ll 2\mu\mathcal R$):

$$\chi_{b0}(\mathcal R) \approx \sin\left\{k_0\mathcal R\left(1 - \frac{\langle 0|r^2|0\rangle}{2\mu\mathcal R^2}\right) + \delta\right\} \approx$$

$$\approx \sin\{k_0\mathcal R + \delta\} - \frac{k_0}{2\mu\mathcal R}\langle 0|r^2|0\rangle\cos(k_0\mathcal R+\delta),$$

$$\chi_{bj}(\mathcal R) \approx -\frac{k_0\langle j|r^2|0\rangle}{2\mu\mathcal R}\cos(k_0\mathcal R+\delta). \qquad (28)$$

Доумножая (28) на $\Psi_0^{(0)}$ и $\Psi_j^{(0)}$ и суммируя по j, найдем асимптотику полной волновой функции (II) с точностью $O(\mathcal R^{-1})$:

$$\chi_b(\vec r,\mathcal R) = \Psi_0^{(0)}\chi_{b0} + \sum_{j\neq 0}\Psi_j^{(0)}\chi_{bj} =$$

$$\approx \Psi_0^{(0)}(\vec r)\left\{\sin(k_0\mathcal R+\delta) - \frac{k_0\langle 0|r^2|0\rangle}{2\mu\mathcal R}\cos(k_0\mathcal R+\delta)\right\} - \qquad (29)$$

$$- \frac{k_0}{2\mu\mathcal R}\cos(k_0\mathcal R+\delta)\sum_{j\neq 0}\langle 0|r^2|j\rangle\Psi_j^{(0)}(\vec r).$$

Используя свойство полноты $|j\rangle\langle j| = 1$, имеем

$$\chi_b(\vec r,\mathcal R)\approx\Psi_0^{(0)}(\vec r)\left\{\sin(k_0\mathcal R+\delta) - \frac{k_0 r^2}{2\mu\mathcal R}\cos(k_0\mathcal R+\delta)\right\}. \qquad (30)$$

При условии $k_0 r^2 \ll 2\mu\mathcal R$ получим

$$\chi_b(\vec r,\mathcal R)\approx\Psi_0^{(0)}(\vec r)\sin\left\{k_0\left(\mathcal R - \frac{r^2}{2\mu\mathcal R}\right)+\delta\right\}\approx\Psi_0^{(0)}(\vec r)\sin(k_0 R_b+\delta). \qquad (31)$$

Таким образом, мы показали, что учет слабой кинематической связи в уравнениях (22) приводит к восстановлению модуля якобиевского вектора $R_b\approx\mathcal R - r^2/2\mu\mathcal R$ (см. (8)) в асимптотике полной волновой функции (II) при больших, но конечных $\mathcal R$. Это означает, что асимптотика решений $\chi_{bi}(\mathcal R)$ адиабатической системы уравнений в естественных переменных согласована с физическими граничными условиями (31) задачи рассеяния в канале $a+(bc)$. Очевидно, что в канале $b+(ac)$ физические граничные условия также удовлетворяются, поскольку и в этом случае естественные переменные (I) переходят в соответствующую якобиевскую пару $\vec r_a, \vec R_a$ (см. рисунок).

Возможность точной и достаточно простой постановки физических граничных условий в модифицированном адиабатическом представлении связана с тем, что в отличие от стандартного [2] в нем с самого начала учитывается конечность масс частиц M_a и M_b. С другой стороны это приводит к тому, что при решении конкретных задач рассеяния необходимо вычислять термы и волновые функции задачи двух центров в естественных для каждого набора масс M_a и M_b. С этой точки зрения данный подход является развитием адиабатического метода, предложенного в работах [6,7] для описания гелиоподобных систем в приближении бесконечно тяжелой массы ядра.

В заключение авторы благодарят Е.А. Соловьева за полезные обсуждения и Л.И. Пономарева за постоянный интерес к работе.

Литература

1. Soloviev E.A., Vinitsky S.I. J. Phys. B, 1985, v.18, p. 557.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т. 13, с. 1336.
3. Kadomtsev M.B., Vinitsky S.I. J. Phys. A., 1985, v. 18, p. 689.
4. Mardoyan L.G., Pogosyan G.S., Sissakian A.N., Ter-Antonyan V.M. Preprint JINR, E2-84-516, Dubna, 1984.
5. Delos J.B. Rev. Mod. Phys., 1981, 53, 287.
6. Fano U. Rep. Progr. Phys., 1983, v. 46, p. 97.
7. Macek J. Phys. Rev. A., 1985, v. 31, p. 2162.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 апреля 1986 года.

Виницкий С.И., Кадомцев М.Б. P4-86-244

Асимптотика эффективных потенциалов и волновых функций задачи трех тел в естественных переменных

Для двухцентровой кулоновской задачи в естественных переменных при больших расстояниях между центрами построен эквивалентный оператор, снимающий вырождение в слое с главным квантовым числом n. Усреднение полного гамильтониана по адиабатическим правильным функциям нулевого приближения позволяет написать асимптотическую систему уравнений для трехчастичной задачи. Найдено решение этой системы уравнений и показано, что оно согласуется с физическими граничными условиями задачи рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод Г.Г.Сандуковской

Vinitsky S.I., Kadomtsev M.B. P4-86-244

Asymptotics of Effective Potentials and Wave Functions of the Three-Body Problem in Suitable Coordinates

An equivalent operator removing degeneration in a layer with the principal quantum number n is recognised for the two-center Coulomb problem in suitable coordinates at large distances between the centres. Averaging of the total Hamiltonian over the correct zero-order adiabatic functions allows one to write down the asymptotic system of equations. The solution of this system of equations is found, that is compatible with the physical boundary conditions of the scattering problem.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986