

УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА—ХАНА В КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОБЛЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ

Е. М. Гандыль, А. Л. Зубарев

Ташкентский государственный университет, Ташкент

Исследуется возможность описания связанных состояний и реакций с перераспределением в квантовомеханических системах трех заряженных частиц в формализме уравнений Фаддеева—Хана.

Обсуждается применение модифицированного метода сильной связи каналов для решения рассматриваемых уравнений. Показано, что используемый метод оказывается достаточно эффективным для широкого класса систем (одноцентровые, двухцентровые, системы с конечными массами, полуклассические системы).

A possibility of describing bound states and redistribution reactions in the quantum-mechanical systems of three charged particles within the formalism of the Faddeev—Hahn equations is being investigated.

The application of a modified strong coupling channel method to the solution of the equations under consideration is discussed. The method used is shown to appear sufficiently effective for a wide class of systems (one-, two-center, systems with finite masses, semiclassical systems).

ВВЕДЕНИЕ

В квантовомеханической проблеме малого числа тел можно выделить широкий класс задач, в которых начальное и конечное состояния содержат только два кластера. Нас в дальнейшем будут интересовать в основном связанные состояния и реакции в системе трех тел при энергиях ниже порога развала, т. е.

$$\begin{array}{l} 1 + (23) \rightarrow 1 + (23) \\ \quad \searrow \\ \quad \quad 2 + (13). \end{array} \quad (1)$$

В литературе существует распространенное убеждение, что уравнения Фаддеева или их альтернативные модификации оказываются наиболее адекватным средством рассмотрения задачи рассеяния при энергиях, превышающих порог развала мишени. Это действительно так, однако и при низких энергиях, в том числе и в задачах на связанные состояния трех частиц, эти уравнения оказываются более эффективными, чем уравнение Шредингера, поскольку они формулируются для компонент волновой функции, обладающих физическими асимптотиками. Кроме того, эффективность приближенных ме-

тодов решения уравнений Фаддеева обусловлена тем, что компоненты волновой функции более гладкие по сравнению с полной волновой функцией системы трех тел [1].

Для описания процессов (1) естественно воспользоваться фаддеевской редукцией трехчастичной волновой функции на две компоненты

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2. \quad (2)$$

Здесь Ψ_1 квадратично-интегрируема по переменной r_{23} , а Ψ_2 квадратично-интегрируема по переменной r_{13} .

Систему уравнений для определения Ψ_i в общем случае запишем в виде

$$\left. \begin{aligned} (E - H_0 - V_{23}) \Psi_1 &= a_{11} \Psi_1 + a_{12} \Psi_2; \\ (E - H_0 - V_{13}) \Psi_2 &= a_{21} \Psi_1 + a_{22} \Psi_2. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Из (2) следует, что

$$(E - H_0 - V_{12} - V_{13} - V_{23}) (\Psi_1 + \Psi_2) = 0, \quad (4)$$

т. е.

$$\left. \begin{aligned} a_{21} &= V_{12} + V_{13} - a_{11}; \\ a_{12} &= V_{12} + V_{23} - a_{22}. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Таким образом, мы получаем семейство уравнений Фаддеева — Хана [2]

$$\left. \begin{aligned} (E - H_0 - V_{23} - a_{11}) \Psi_1 &= (V_{12} + V_{23} - a_{22}) \Psi_2; \\ (E - H_0 - V_{13} - a_{22}) \Psi_2 &= (V_{12} + V_{13} - a_{11}) \Psi_1, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

которые рассматривались также в [3—8].

Произвол в выборе операторов a_{11} и a_{22} можно использовать для того, чтобы получить уравнения с наперед заданными свойствами. Прежде всего потребуем отсутствия «духовых» решений, т. е. решений, обладающих свойством: $\Psi_i \neq 0$, $\Psi_1 + \Psi_2 = 0$. Предположив существование духов $\Psi_1 = \varphi$, $\Psi_2 = -\varphi$ из (6), получим

$$(E - H_0 + V_{12} - a_{11} - a_{22}) \varphi = 0. \quad (7)$$

Таким образом, требование отсутствия нефизических решений уравнений Фаддеева — Хана эквивалентно требованию того, чтобы уравнение (7) не имело нетривиальных решений при заданных граничных условиях. Очевидно, что при энергии ниже порога развала даже простейший выбор $a_{11} = a_{22} = 0$, приводящий к уравнениям

$$\left. \begin{aligned} (E - H_0 - V_{23}) \Psi_1 &= (V_{12} + V_{23}) \Psi_2, \\ (E - H_0 - V_{13}) \Psi_2 &= (V_{12} + V_{13}) \Psi_1, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

обеспечивает отсутствие духов. Однако для того, чтобы однозначно фиксировать операторы a_{11} , a_{22} , условия отсутствия нефизических решений недостаточно. При выборе этих операторов следует учиты-

вать специфику конкретных физических задач. Так, например, рассмотрим систему трех заряженных частиц: $Z_1 > 0$, $Z_2 > 0$, $Z_3 = -1$.

В этом случае естественно выбрать [9]

$$\left. \begin{aligned} a_{11} &= \frac{Z_1(Z_2-1)}{\rho_1} - V_p^{(1)}(\rho_1); \\ a_{22} &= \frac{Z_2(Z_1-1)}{\rho_2} - V_p^{(2)}(\rho_2), \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где первый член описывает кулоновское взаимодействие с центром тяжести мишени, а поляризационный потенциал V_p можно представить, например, так

$$V_p(\rho) = \begin{cases} \beta/\rho^4, & \rho \geq b; \\ 0, & \rho < b. \end{cases} \quad (10)$$

Известно, что волновая функция системы трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, удовлетворяет соотношениям [10]

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r_{ij}} \tilde{\Psi} \Big|_{r_{ij}=0} = Z_i Z_j \mu_{ij} e^2 \tilde{\Psi} \Big|_{r_{ij}=0},$$

где $i \neq j \neq k$, Z_i — заряд i -й частицы; μ_{ij} — приведенная масса; r_{ij} , ρ_k — координаты Якоби;

$$\tilde{\Psi} = \int \Psi d^3\rho_k d\hat{r}_{ij}.$$

Аналогичные тождества можно сформулировать для компонент волновой функции, исходя из уравнений Фаддеева:

$$\begin{aligned} (E - H_0 - V_{12}) \Psi_3 &= V_{12} (\Psi_1 + \Psi_2); \\ (E - H_0 - V_{13}) \Psi_2 &= V_{13} (\Psi_1 + \Psi_3); \\ (E - H_0 - V_{23}) \Psi_1 &= V_{23} (\Psi_2 + \Psi_3), \end{aligned}$$

если $V_{ij}(r_{ij})$ при малых r_{ij} имеют асимптотику

$$V_{ij} = \frac{\alpha_{ij}}{r_{ij}} + \dots$$

В этом случае для состояний с полным моментом $L = 0$ имеем ($i \neq j \neq k$)

$$\begin{aligned} \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r_{ij}} \tilde{\Psi}_k \Big|_{r_{ij}=0} &= \alpha_{ij} \mu_{ij} (\tilde{\Psi}_i + \tilde{\Psi}_j + \tilde{\Psi}_k) \Big|_{r_{ij}=0}; \\ \frac{\partial}{\partial r_{ij}} \tilde{\Psi}_i \Big|_{r_{ij}=0} &= \frac{\partial}{\partial r_{ij}} \tilde{\Psi}_j \Big|_{r_{ij}=0} = 0. \end{aligned}$$

Для уравнений (8) соответствующие условия имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial r_{12}} \frac{\tilde{\Psi}_1}{\tilde{\Psi}_2} \Big|_{r_{12}=0} = \frac{\partial}{\partial r_{12}} \frac{\tilde{\Psi}_2}{\tilde{\Psi}_1} \Big|_{r_{12}=0} = \alpha_{12} \mu_{12} / \hbar^2;$$

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r_{23}} \tilde{\Psi}_1 \Big|_{r_{23}=0} = \alpha_{23} \mu_{23} (\tilde{\Psi}_1 + \tilde{\Psi}_2) \Big|_{r_{23}=0}, \quad \frac{\partial}{\partial r_{23}} \tilde{\Psi}_2 \Big|_{r_{23}=0} = 0;$$

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r_{13}} \tilde{\Psi}_2 \Big|_{r_{13}=0} = \alpha_{13} \mu_{13} (\tilde{\Psi}_1 + \tilde{\Psi}_2) \Big|_{r_{13}=0}, \quad \frac{\partial}{\partial r_{13}} \tilde{\Psi}_1 \Big|_{r_{13}=0} = 0.$$

Остановимся на некоторых примерах использования уравнений (8). Так, в [11] исследовалось основное состояние молекулярного иона водорода в приближении фиксированных центров. Уравнения (8) решались в $1s$ -приближении метода сильной связи каналов. Авторы работы [12] для этой же задачи исследовали сходимость метода сильной связи каналов и метода конечных элементов. Отмечается более быстрая сходимость последнего метода. В [13] уравнения типа (8) использовались для описания четырехчастичной системы — молекулы водорода. Рассматриваемая система представлялась в виде двух кластеров $H + H$. Так же, как и в [11], расчеты были выполнены в $1s$ -приближении. Трехчастичная модель прямых ядерных реакций с перераспределением применялась в [14] для описания процессов $^{16}\text{O} (d, p) ^{17}\text{O}$, $^{16}\text{O} (\alpha, ^3\text{He}) ^{17}\text{O}$, $^{19}\text{F} (^3\text{He}, d) ^{20}\text{Ne}$ на основе (8). Применение уравнений вида (8) в задачах рассеяния электронов и протонов на легких атомах обсуждалось в [15—18].

Следует сказать, что в большинстве перечисленных работ отмечается достаточно высокая эффективность $1s$ -приближения метода сильной связи каналов. Мы также сосредоточим свое внимание на использовании этого метода для решения уравнений (8). Интегральные уравнения метода сильной связи каналов получены в разд. 1. Вывод уравнений выполнен при условии, когда $a_{11} = a_{22} = 0$. Эти результаты легко переносятся и на более общий случай

$$a_{ii} = a_{ii} (| a_i \mathbf{r}_i + b_i \mathbf{r}_i |),$$

где a_i, b_i — некоторые константы. В разд. 2 на примере рассеяния электронов на атомах водорода исследуется выбор операторов a_{11}, a_{22} в виде линейной комбинации потенциалов V_{12}, V_{13}, V_{23} . Рассматривается также расчет, когда в качестве a_{ii} взят поляризационный потенциал (10). Расчетам связанных состояний отрицательного иона водорода, атома гелия и μ -молекулярных ионов изотопов водорода посвящен разд. 3. В разд. 4 рассмотрены низкоэнергетические столкновения мезоатомов водорода. Применение уравнений (8) к задаче двух фиксированных центров обсуждается в разд. 5. В разд. 6 рассматривается полуклассическая задача трех тел. Построены нестационарные уравнения, которые используются для расчета сечения резонансной перезарядки протонов на атомах водорода при низких энергиях. Предлагаемый обзор основан на результатах работ [9, 19—32].

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим систему трех тел с произвольными центральными двухчастичными взаимодействиями V_{ij} . Обозначим \mathbf{R}_i — координаты, m_i — массу i -й частицы. Пусть далее $i \neq j \neq k$; $i = 1, 2$; $k = 3$. Введем координаты Якоби ρ_i, \mathbf{r}_i

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k; \quad \rho_i = \mathbf{R}_i - \frac{m_j \mathbf{R}_j + m_k \mathbf{R}_k}{m_j + m_k} \quad (11)$$

и, выбрав систему единиц $\hbar = e = m_3 = 1$, запишем систему уравнений (8) в принятых обозначениях

$$\left(E + \frac{1}{2M_i} \Delta_{\rho_i} + \frac{1}{2\mu_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} - u_i \right) \Psi_i = (u_i + u_k) \Psi_j, \quad (12)$$

где

$$\Psi = \sum_i \Psi_i; \quad (13)$$

$$\mu_i^{-1} = m_j^{-1} + 1; \quad M_i^{-1} = m_i^{-1} + (m_j + 1)^{-1}; \quad (14)$$

$$u_i = V_{jk}. \quad (15)$$

Векторы в различных системах координат Якоби связаны соотношениями

$$\rho_i = -\alpha_j \rho_j + \mathbf{r}_j / \gamma; \quad \mathbf{r}_i = \rho_j + \alpha_i \mathbf{r}_j, \quad (16)$$

где

$$\alpha_i = m_i / (m_i + 1); \quad \gamma = (1 - \alpha_i \alpha_j)^{-1}. \quad (17)$$

Из (16) следует

$$\rho_i = \mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{r}_i; \quad \mathbf{r}_i = \gamma (\alpha_i \rho_i + \rho_j), \quad (18)$$

кроме того,

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \gamma [\rho_i / (m_i + 1) - \rho_j / (m_j + 1)]; \quad (19)$$

$$\mathbf{r}_k = \rho_i - \mathbf{r}_i / (m_j + 1) = \mathbf{r}_j / (m_i + 1) - \rho_j. \quad (20)$$

Для того чтобы отделить угловой момент, разложим компоненты волновой функции по биполярным гармоникам [34]

$$[Y_\lambda(\hat{\rho}) Y_l(\hat{r})]_{LM} = \sum_{\mu m} C_{\lambda\mu lm}^{LM} Y_{\lambda\mu}(\hat{\rho}) Y_{lm}(\hat{r}), \quad (21)$$

где $\hat{\rho}, \hat{r}$ — угловые координаты векторов ρ, \mathbf{r} ; $C_{\lambda\mu lm}^{LM}$ — коэффициенты Клебша — Гордана; Y_{lm} — сферические функции. Подставив разложение

$$\Psi_i(\rho_i, \mathbf{r}_i) = \sum_{LM\lambda l} \Phi_{LM\lambda l}^i(\rho_i, r_i) [Y_\lambda(\hat{\rho}_i) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM} \quad (22)$$

в (12), умножив на $[Y_{\lambda'}(\hat{\rho}_i) Y_{l'}(\hat{r}_i)]_{L'M'}^*$ и проинтегрировав по угловым координатам $\hat{\rho}_i, \hat{r}_i$, получим систему уравнений, которые в слу-

чае центральных потенциалов имеют вид

$$\left\{ E + \frac{1}{2M_i \rho_i^2} \left[\frac{\partial}{\partial \rho_i} \left(\rho_i^2 \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \lambda(\lambda + 1) \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2\mu_i r_i^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) - l(l + 1) \right] - u_i \right\} \Phi_{LM\lambda l}^i(\rho_i, r_i) = \\ = \int \hat{d}\rho_i \hat{d}r_i \sum_{\lambda' l'} W_{\lambda l \lambda' l'}^{ijLM} \Phi_{LM\lambda' l'}^j(\rho_j, r_j), \quad (23)$$

где мы обозначили

$$W_{\lambda l \lambda' l'}^{ijLM} = (u_i + u_k) [Y_\lambda(\hat{\rho}_i) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM}^* [Y_{\lambda'}(\hat{\rho}_j) Y_{l'}(\hat{r}_j)]_{LM}. \quad (24)$$

Для того чтобы перейти от уравнений (23) к одномерным интегральным уравнениям, воспользуемся хорошо известным методом сильной связи каналов [35]. Суть метода, нашедшего широкое применение при решении уравнений Шредингера, коротко заключается в следующем.

Выделим в операторе Гамильтона системы трех тел H гамильтониан некоторой подсистемы, например 2—3,

$$h_1 = h_1^0 + u_1, \quad (25)$$

где h_1^0 — оператор кинетической энергии относительного движения частиц в выделенной подсистеме, разложим волновую функцию Ψ по собственным функциям оператора h_1

$$h_1 \varphi_n^1(\mathbf{r}_1) = E_n^1 \varphi_n^1(\mathbf{r}_1), \quad (26)$$

а затем ограничимся в разложении конечным числом членов N , тогда

$$\Psi = \sum_n^N F_n(\rho_1) \varphi_n^1(\mathbf{r}_1). \quad (27)$$

После подстановки разложения (27) в уравнение Шредингера и отделения углового момента получим систему одномерных уравнений. Обобщение этого метода на случай уравнений Фаддеева — Хана очевидно. Для этого кроме гамильтониана подсистемы 2—3 рассмотрим также гамильтониан подсистемы 1—3

$$h_2 = h_2^0 + u_2 \quad (28)$$

с собственными функциями

$$h_2 \varphi_n^2(\mathbf{r}_2) = E_n^2 \varphi_n^2(\mathbf{r}_2), \quad (29)$$

а вместо разложения (27) запишем разложение компонент трехчастичной волновой функции Ψ_1 и Ψ_2

$$\Psi_1(\rho_1, \mathbf{r}_1) = \sum_n^N f_n^1(\rho_1) \varphi_n^1(\mathbf{r}_1), \\ \Psi_2(\rho_2, \mathbf{r}_2) = \sum_u^N f_n^2(\rho_2) \varphi_n^2(\mathbf{r}_2). \quad (30)$$

Интересно сравнить применение метода сильной связи каналов к уравнениям Фаддеева — Хана и Шредингера. Допустим, что мы решили обе задачи и нашли неизвестные функции F_n, f_n^1, f_n^2 в разложениях (27) и (30) при заданном N . Полная волновая функция системы трех тел выражается через f_n^1 и f_n^2 следующим образом:

$$\Psi = \sum_n^N f_n^1(\rho_1) \varphi_n^1(\mathbf{r}_1) + \sum_n^N f_n^2(\rho_2) \varphi_n^2(\mathbf{r}_2). \quad (31)$$

Чтобы сравнить (31) и (27), разложим вторую сумму в (31) по функциям φ_n^1 . В силу неортогональности φ_n^1 и φ_n^2 в это разложение войдут все состояния подсистемы 2—3

$$\Psi = \sum_n^N f_n^1(\rho_1) \varphi_n^1(\mathbf{r}_1) + \left(\sum + \int \right) g_n(\rho_1) \varphi_n^1(\mathbf{r}_1). \quad (32)$$

Из сравнения (27) и (32) видно, что последнее разложение, а следовательно, и разложение (31) частично учитывает вклад состояний с $n > N$, в том числе и вклад состояний непрерывного спектра, при сравнимой трудоемкости получения решения.

Чтобы оценить, насколько существенными являются дополнительные члены разложения (31), рассмотрим решение задачи на связанные состояния трех заряженных частиц методом сильной связи каналов в 1s-приближении, т. е. когда в разложении (27) оставлен один член, при условиях: $m_1, m_2 > m_3$, заряды первой и второй частиц равны +1; заряд третьей частицы равен -1. В этом случае уравнение Шредингера примет вид

$$\left(E + \frac{1}{2M} \Delta_\rho + \frac{1}{2\mu} \Delta_r + \frac{1}{r} - \frac{1}{|\rho - \mathbf{r}/(m+1)|} + \frac{1}{|\rho + \mathbf{r}m/(m+1)|} \right) \Psi = 0, \quad (33)$$

где мы обозначили $\rho = \rho_1$; $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$; $m = m_2$; $\mu = \mu_1$, $M = M_1$, а для $F_{1s}(\rho)$ получим следующее уравнение:

$$\left[E - E_{1s} + \frac{1}{2M\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - V_{1s}(\rho) \right] F_{1s}(\rho) = 0, \quad (34)$$

где эффективная энергия V_{1s} имеет вид

$$V_{1s}(\rho) = \frac{\mu}{16\pi^2} \int d^3r d\hat{\rho} \exp(-2\mu r) \times \left[\frac{1}{|\rho - \mathbf{r}/(m+1)|} - \frac{1}{|\rho + \mathbf{r}m/(m+1)|} \right]. \quad (35)$$

Если воспользоваться соотношением [34]

$$\frac{1}{|x-y|} = \frac{4\pi}{y} \sum_l \frac{1}{2l+1} \left(\frac{x}{y} \right)^l \sum_m Y_{lm}^*(\hat{x}) Y_{lm}(\hat{y}), \quad x < y,$$

то после несложных вычислений получим

$$V_{1s}(\rho) = \mu^3 \left[\int_{\rho^{(m+1)/m}}^{\rho^{(m+1)}} r^2 dr \exp(-2\mu r) \left(\frac{1}{\rho} - \frac{m+1}{mr} \right) + (m+1) \int_{\rho^{(m+1)}}^{\infty} r^2 dr \exp(-2\mu r) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{mr} \right) \right], \quad (36)$$

откуда вытекает, что $V_{1s}(\rho) > 0$ при всех ρ и, следовательно, для рассматриваемых систем 1s-приближение метода сильной связи каналов в применении к уравнению Шредингера не позволяет получить связанного состояния. В то же время, как отмечалось во введении, использование метода сильной связи каналов для решения уравнений Фаддеева — Хана уже в 1s-приближении оказывается достаточно эффективным. Очевидно, что метод сильной связи каналов является не единственным методом, сводящим уравнения Фаддеева — Хана к системе одномерных уравнений. Так, например, используя конечномерную аппроксимацию гамильтонианов подсистем [36]

$$h_1 \rightarrow h_1^{(N)} = \sum_n^N E_n^1 | \varphi_n^1 \rangle \langle \varphi_n^1 |;$$

$$h_2 \rightarrow h_2^{(M)} = \sum_n^M E_n^2 | \varphi_n^2 \rangle \langle \varphi_n^2 |,$$

можно получить систему одномерных уравнений.

Перейдем к выводу уравнений метода сильной связи каналов, исходя из уравнений Фаддеева — Хана. Воспользуемся для этого уравнениями (23), в которых уже выполнено отделение углового момента.

Запишем разложение

$$\Phi_{LM\lambda l}^i(\rho_i, r_i) = \frac{1}{\rho_i} \sum_n f_{LM\lambda l}^i(\rho_i) R_{nl}^i(r_i), \quad (37)$$

где функции R_{nl}^i определяются уравнениями

$$\left\{ E_n^i + \frac{1}{2\mu_i r_i^2} \left[\frac{\partial}{\partial r_i} \left(r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) - l(l+1) \right] - u_i \right\} R_{nl}^i(r_i) = 0, \quad (38)$$

подставим (37) в (23), умножим на $R_{n'l'}^i$ и проинтегрируем по $r_i^2 dr_i$. Тогда из (23) получим

$$\left[E - E_n^i + \frac{1}{2M_i} \left(\frac{d^2}{d\rho_i^2} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\rho_i^2} \right) \right] f_\alpha^i(\rho_i) = \int d^3r_i d\hat{\rho}_i(\rho_i/\rho_j) \times \times \sum_{\alpha'} Q_{\alpha\alpha'}^{ij} f_{\alpha'}^j(\rho_j), \quad (39)$$

где

$$Q_{\alpha\alpha'}^{ij} = R_{nl}^i(r_i) W_{\lambda l \lambda' l'}^{i j LM} R_{n'l'}^j(r_j). \quad (40)$$

Здесь мы обозначили $\alpha \equiv n\lambda l$ и опустили для краткости индексы LM , так как они одинаковые у всех функций. В случае связанных состояний интегральная форма уравнений (39) имеет вид

$$f_{\alpha}^i(\rho_i) = 2M_i \int d^3\rho_i d^3r_i G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_i) \frac{1}{\rho_i \rho_j} \sum_{\alpha'} Q_{\alpha\alpha'}^{ij} f_{\alpha'}^j(\rho_j), \quad (41)$$

где

$$\kappa_n^i = \sqrt{2M_i(E_n^i - E)}; \quad (42)$$

$$G_{\lambda}(\kappa, \rho', \rho) = -\sqrt{\rho\rho'} \times \begin{cases} I_{\lambda+1/2}(\kappa\rho) K_{\lambda+1/2}(\kappa\rho'), & \rho < \rho', \\ I_{\lambda+1/2}(\kappa\rho') K_{\lambda+1/2}(\kappa\rho), & \rho' < \rho; \end{cases} \quad (43)$$

$I_{\nu}(x)$, $K_{\nu}(x)$ — модифицированные функции Бесселя.

Чтобы получить интегральные уравнения для задач рассеяния при энергиях ниже порога развала, достаточно добавить соответствующие неоднородные члены в (41) и переписать, исходя из граничных условий, соотношения (42), (43).

Следует сказать, что, хотя в нашей записи функции $f_{\alpha}^j(\rho_j)$ зависят лишь от одного скалярного аргумента, уравнения (41) не являются одномерными, так как в силу (16) модуль вектора ρ_j зависит от двух векторов $-\rho_i$, \mathbf{r}_i , по которым производится интегрирование в правой части (41).

Для того чтобы получить одномерные интегральные уравнения, которые соответствуют уравнениям (41), перейдем от интегрирования по ρ_i , \mathbf{r}_i к интегрированию по ρ_i , ρ_j . Якобиан этого преобразования равен γ^3 . Система интегральных уравнений, получающаяся после замены переменных интегрирования в (41), имеет вид

$$f_{\alpha}^i(\rho_i) = 2M_i \gamma^3 \int d\rho_i d\rho_j G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_i) \sum_{\alpha'} S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) f_{\alpha'}^j(\rho_j), \quad (44)$$

где

$$S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) = \rho_i \rho_j \int d\hat{\rho}_i d\hat{\rho}_j R_{nl}^i(r_i) R_{n'l'}^j(r_j) (u_i + u_k) \times \\ \times [Y_{\lambda}(\hat{\rho}_i) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM}^* [Y_{\lambda'}(\hat{\rho}_j) Y_{l'}(\hat{r}_j)]_{LM}. \quad (45)$$

Четырехкратное интегрирование в (45) можно свести к однократному и получить для функций $S_{\alpha\alpha'}^{ij}$ следующее представление в виде суммы одномерных интегралов:

$$S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) = \frac{1}{2} \rho_i \rho_j \sum_{\nu=0}^l \sum_{\nu'=0}^{l'} \Pi_{L\nu l\nu' l'\nu'} \Gamma_{l\nu} \Gamma_{l'\nu'} \times \\ \times \left(\frac{\alpha_i \rho_i}{\rho_j} \right)^{\nu} \left(\frac{\alpha_j \rho_j}{\rho_i} \right)^{\nu'} \sum_{\sigma=|\lambda-\nu|}^{\lambda+\nu} \sum_{\sigma'=|\lambda'-\nu'|}^{\lambda'+\nu'} (-1)^{l+\sigma-\nu-L} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \Pi_{\sigma\sigma'} C_{\nu 0 \lambda 0}^{\sigma 0} C_{\nu' 0 \lambda' 0}^{\sigma' 0} \left\{ \begin{matrix} \nu & l-\nu & l \\ L & \lambda & \sigma \end{matrix} \right\} \times \\
& \times \left\{ \begin{matrix} \nu' & l'-\nu' & l' \\ L & \lambda' & \sigma' \end{matrix} \right\} \sum_{\tau} (2\tau+1)^{3/2} C_{\tau 0 \sigma' 0}^{l'-\nu 0} \times \\
& \times C_{\tau 0 \sigma 0}^{l'-\nu' 0} \left\{ \begin{matrix} \tau & l'-\nu' & \sigma \\ \tau & \sigma' & l-\nu \\ 0 & L & L \end{matrix} \right\} \int_0^{\pi} \sin \omega d\omega (u_i + u_k) \times \\
& \times R_{nl}^i R_{n'l'}^j \left(\frac{\gamma \rho_i}{r_i} \right)^l \left(\frac{\gamma \rho_j}{r_j} \right)^{l'} P_{\tau}(\cos \omega),
\end{aligned}$$

где ω — угол между векторами ρ_i, ρ_j ; $\Gamma_{ab} = \sqrt{(2a+1)! / (2b+1)!(2a-2b+1)!}$; $\Pi_{ab\dots c} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)\dots(2c+1)}$; $\left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \end{matrix} \right\}$ — $6j$ -символы Вигнера [34]; $\left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \end{matrix} \right\}$ — $9j$ -символы [34]; $P_{\tau}(\cos \omega)$ — полиномы Лежандра [34].

2. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ ВОДОРОДА

В рассматриваемой задаче, в отличие от ядерных систем, мы имеем дело, во-первых, с более определенными входными данными, поскольку двухчастичное взаимодействие определяется законом Кулона и, во-вторых, в этой задаче накоплен значительный опыт аккуратных расчетов — например, расчеты Шварца [37]. Эти два обстоятельства дают уникальную возможность использовать эту систему для проверки эффективности метода. Как уже отмечалось во введении, задача рассеяния электронов на атомах водорода с использованием уравнений вида (8) обсуждалась в [15, 17, 18]. В данном разделе мы рассмотрим s -волновое e -H-рассеяние на основе уравнений (6) с ненулевыми операторами a_{11}, a_{22} .

Исследуем возможность представления операторов a_{11}, a_{22} в виде линейной комбинации потенциалов V_{ij} [19]

$$\left. \begin{aligned} a_{11} &= g(V_{12} + V_{13}); \\ a_{22} &= g(V_{12} + V_{23}), \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

где g — некоторая произвольная постоянная. Заметим, что точное решение уравнений (6) при условии (46) не зависит от выбора g , тогда как приближенное решение не обладает этим свойством. Пусть далее частицы 1 и 2 — электроны, частица 3 — протон. Будем считать, что масса протона бесконечно велика и примем систему единиц $\hbar = e = m_e = 1$. Тогда в обозначениях разд. 1 уравнения (6) с учетом (46) можно записать в виде

$$\left(E + \frac{1}{2} \Delta_{r_i} + \frac{1}{2} \Delta_{r_j} - u_i \right) \Psi_i = g(u_j + u_k) \Psi_i + (1-g)(u_i + u_k) \Psi_i. \quad (47)$$

Для учета тождественности частиц 1 и 2 вместо (22), (39) запишем разложение

$$\Psi_i^\pm = \frac{(\pm 1)^j}{r_i} \sum_{nl} f_{nl}^\pm(r_j) R_{nl}(r_i) [Y_l(\hat{r}_i) Y_l(\hat{r}_j)]_{00}. \quad (48)$$

Выбор знака в (48) определяет симметрию полной волновой функции. Далее, действуя как обычно, получаем уравнение метода сильной связи каналов:

$$\begin{aligned} & \left[E - E_n + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr_j^2} - \frac{l(l+1)}{r_j^2} \right) \right] f_{nl}^\pm(r_j) = \\ & = \sum_{n'l'} \left[A_{nl'n'l'}^j(r_j) f_{n'l'}^\pm(r_j) \pm \int d^3r_i d\hat{r}_j B_{nl'n'l'}^i(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) f_{n'l'}^\pm(r_i) \right], \quad (49) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A_{nl'n'l'}^j(r_j) &= g \int d^3r_i d\hat{r}_j R_{nl}(r_i) [Y_l(\hat{r}_i) Y_l(\hat{r}_j)]_{00}^* (u_j + u_k) \times \\ & \times R_{n'l'}(r_i) [Y_{l'}(\hat{r}_i) Y_{l'}(\hat{r}_j)]_{00}; \quad (50) \\ B_{nl'n'l'}^i(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= (1-g) r_i r_j R_{nl}(r_i) [Y_l(\hat{r}_i) Y_l(\hat{r}_j)]_{00}^* \times \\ & \times (u_i + u_k) R_{n'l'}(r_j) [Y_{l'}(\hat{r}_i) Y_{l'}(\hat{r}_j)]_{00}. \end{aligned}$$

Из (50) видно, что

$$\begin{aligned} A_{nl'n'l'}^1(r_1) &= A_{nl'n'l'}^2(r_2); \\ B_{nl'n'l'}^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= B_{nl'n'l'}^2(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \end{aligned}$$

Следовательно, уравнения (49) не зависят от индексов i, j и действительно определяют одни и те же функции f_{nl}^\pm .

Если в разложении (48) ограничиться только одним членом, то интегралы в (49), (50) легко вычисляются и для функции $f(r) = f_{1s}(r)$ получаем интегриродифференциальное уравнение

$$\left(\frac{1}{2} \frac{dl}{dr^2} + E + \frac{1}{2} \right) f^\pm(r) = A(r) f^\pm(r) \pm \int dr' B(r, r') f^\pm(r'), \quad (51)$$

где

$$\begin{aligned} A(r) &= -g \exp(-2r) \frac{r+1}{r}; \\ B(r, r') &= 4(1-g) r r' \exp[-(r+r')] \left(\gamma_0(r, r') - \frac{1}{r} \right); \\ \gamma_0(r, r') &= \begin{cases} \frac{1}{r'}, & r < r', \\ \frac{1}{r}, & r' < r. \end{cases} \end{aligned}$$

Длина рассеяния в этом приближении определяется следующим образом:

$$a^s(g) = -2 \int dr \exp(-2r) (4r + 8 - 3gr - 7g) \varphi^\pm(r);$$

$$a^t(g) = -2 \int dr \exp(-2r) (4r + 8 - 5gr - 9g) \varphi^\pm(r),$$

где $\varphi^\pm(r) = \lim_{k \rightarrow 0} f^\pm(r)/k$; a^s , a^t — синглетная и триплетная длины рассеяния соответственно. Результаты численных расчетов представлены в табл. 1. Величина Δ , приведенная в четвертой колонке

Таблица 1. Зависимость синглетной и триплетной длин рассеяния от параметра g

g	a^s	a^t	Δ	g	a^s	a^t	Δ	g	a^s	a^t	Δ
-1,0	5,493	2,454	1,157	-0,3	5,874	2,227	0,549	0,4	7,366	1,745	1,425
-0,9	5,528	2,428	1,096	-0,2	5,970	2,183	0,419	0,5	8,004	1,605	2,203
-0,8	5,568	2,400	1,028	-0,1	6,086	2,133	0,485	0,6	0,059	1,412	3,451
-0,7	5,624	2,370	0,952	0,0	6,228	2,078	0,562	0,7	11,135	1,119	5,82
-0,6	5,665	2,338	0,869	0,1	6,405	2,015	0,686	0,8	17,084	0,599	12,289
-0,5	5,725	2,304	0,775	0,2	6,634	1,942	0,842	0,9	184,07	-0,659	180,533
-0,4	5,794	2,267	0,669	0,3	6,939	1,854	1,059	1,0	-9,586	-9,586	26,906

таблицы, равна сумме отклонений вычисленных значений от результатов Шварца [37], т. е.

$$\Delta = |a^s - 5,965| + |a^t - 1,7686|.$$

Как видно из табл. 1, рассматриваемый метод оказывается наиболее эффективным при значениях g , близких к нулю.

Фазы рассеяния, рассчитанные при $g = 0$, представлены в табл. 2. Сравнение с результатами Шварца [37] подтверждают эффектив-

Таблица 2. Фазовые сдвиги упругого рассеяния электронов на атомах водорода

k	Уравнения Фаддеева — Хана *		Расчеты Шварца [37]	
	синглет	триплет	синглет	триплет
0,1	2,541	2,935	2,553	2,9388
0,2	2,039	2,737	2,0673	2,7171
0,3	1,646	2,554	1,6904	2,4996
0,4	1,334	2,394	1,4146	2,2938
0,5	1,080	2,264	1,202	2,1046
0,6	0,871	2,170	1,041	1,9329
0,7	0,697	2,121	0,930	1,7797
0,8	0,552	2,126	0,908	1,643

* Эти результаты получены Р. А. Султановым.

ность применения $1s$ -приближения метода сильной связи каналов для решения уравнений (8). Отметим, что аналогичный метод использовался в [15, 17, 18]. Результаты, приведенные в табл. 2, практически совпадают с данными [15, 17, 18].

Прежде чем перейти к анализу другого выбора операторов a_{11} , a_{22} в (6), следует сказать, что применение метода сильной связи каналов в $1s$ -приближении фактически означает, что мы не учитываем асимптотику взаимодействия, возникающую из-за поляризации мишени. В связи с этим естественно выбрать в качестве операторов a_{11} , a_{22} поляризационный потенциал (10). Уравнения (6) в этом случае примут вид [33]

$$\left[\left(E + \frac{1}{2} \Delta_{r_i} + \frac{1}{2} \Delta_{r_j} - u_i - V_p(r_j) \right) \Psi_i = [u_i + u_k - V_p(r_i)] \Psi_j. \quad (52)$$

Не останавливаясь на выводе уравнений метода сильной связи каналов, который лишь в деталях отличается от вывода на основе уравнений (47), приведем результаты численных расчетов [33] длины синглетного и триплетного рассеяния электронов на атомах водорода в $1s$ -приближении метода сильной связи каналов при следующих значениях параметров поляризационного потенциала (10): $\beta = 2,25$, $b = 8$. Как видно из табл. 3, такой выбор операторов a_{11} , a_{22} приводит к существенному улучшению результатов как в синглетном, так и в триплетном e^- Н-рассеянии.

Таблица 3. Длина рассеяния электронов на атомах водорода

Метод	Синглет	Триплет
Уравнения (8)	6,213	2,067
Уравнения (52)	5,98	1,70
Шварц [37]	5,965	1,769

3. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ТРЕХ ТЕЛ

В данном разделе мы остановимся на некоторых примерах использования уравнений (8) в задачах на связанные состояния трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Энергия связи отрицательного иона водорода и атома гелия в состоянии с полным моментом $L = 0$ вычислялась в [24]. В расчетах использовались уравнения (47) при $g = 0$, которые решались в $1s$ -приближении метода сильной связи каналов. Значения энергии связи, полученные в [24], составляют: $E = -1,03$ Ry для H^- и $E = -5,708$ Ry для атома гелия. Приведем для сравнения вариаци-

ционные оценки энергии связи соответствующих состояний этих систем: $E = -4,0555 \text{ Ry}$ [37], $E = -5,8074 \text{ Ry}$ [38].

Перейдем теперь к случаю, когда массы всех трех частиц конечны. Воспользуемся результатами разд. 1, где были получены уравнения метода сильной связи каналов (44) для системы трех тел с конечными массами. Прежде всего, перепишем уравнения (44) следующим образом:

$$f_{\alpha}^i(\rho_i) = 2M_i\gamma^3 \sum_{\alpha'} \int d\rho_j K_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) f_{\alpha'}^j(\rho_j), \quad (53)$$

где мы обозначили

$$K_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) = \int d\rho_i G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_i) S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j), \quad (54)$$

и воспользуемся для вычисления интегралов (54) формулой механических квадратур

$$K_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_i, \rho_j) = \sum_{a=1}^N w_a G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_a) S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_a, \rho_j), \quad (55)$$

где ρ_a — узлы; w_a — веса; $a = 1, 2, \dots, N$; N — порядок квадратурной формулы. Пусть

$$z_{\alpha a}^i = \sum_{\alpha'} \int d\rho_j S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_a, \rho_j) f_{\alpha'}^j(\rho_j). \quad (56)$$

Тогда из (53), (55), (56) следует

$$f_{\alpha}^i(\rho_i) = 2M_i\gamma^3 \sum_{a=1}^N w_a G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_a) z_{\alpha a}^i. \quad (57)$$

Подставив (57) в (56), получим систему линейных однородных уравнений, которым удовлетворяют $z_{\alpha a}^i$:

$$z_{\alpha a}^i = \sum_{\alpha' a'} A_{\alpha\alpha' a' a}^{ij} z_{\alpha' a'}^j, \quad (58)$$

где

$$A_{\alpha\alpha' a' a}^{ij} = 2M_j\gamma^3 w_a \int d\rho S_{\alpha\alpha'}^{ij}(\rho_a, \rho) G_{\lambda}(\kappa_n^j, \rho, \rho_a).$$

Условие, определяющее собственные значения энергии, имеет вид

$$\det(\delta_{\alpha\alpha' a' a} - \sum_{\alpha'' a''} A_{\alpha\alpha'' a'' a'}^{12} A_{\alpha'' a'' a' a}^{21}) = 0, \quad (59)$$

а для компонент волновой функции в состояниях с заданным полным моментом L и его проекцией M из (22), (37) и (57) получаем полуаналитическое представление

$$\Psi_i = \frac{2M_i\gamma^3}{\rho_i} \sum_{\alpha a} w_a z_{\alpha a}^i G_{\lambda}(\kappa_n^i, \rho_i, \rho_a) R_{ni}^i(\mathbf{r}_i) [Y_{\lambda}(\hat{\rho}_i) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM}. \quad (60)$$

Отметим, что единственным приближением, сделанным при переходе от системы интегродифференциальных уравнений (39), полученных в рамках метода сильной связи каналов, к системе алгебраических уравнений (58), является замена интегралов (54) квадратурными суммами (55). Так как подынтегральная функция в (54) не содержит неизвестных функций $f_{\alpha}^i, f_{\alpha}^j$, то можно контролировать погрешность, возникающую при замене (54) на (55).

В качестве примера рассмотрим расчет энергий связи μ -молекулярных ионов изотопов водорода в состояниях с полным моментом $L = 0$ и $L = 1$ [23, 31]. Результаты, полученные в 1s-приближении метода сильной связи каналов, приведены в табл. 4. Для сравнения

Таблица 4. Энергия связи μ -молекулярных ионов изотопов водорода, эВ

Система	$L = 0$			$L = 1$		
	[23, 31]	[39]	[38]	[31]	[39]	[38]
$pp\mu$	-263,1	-253,0	-253,153	-118,6	-107,0	-107,267
$pd\mu$	-236,4	-221,5	-221,551	-113,4	-97,4	-97,66
$pt\mu$	-231,4	-214,0	-213,841	-117,1	-99,0	-99,13
$dd\mu$	-345,9	-325,0	-325,074	-247,7	-226,6	-226,683
$dd\mu^*$	-23,6	-35,8	-35,9	—	-1,94	-1,95
$dt\mu$	-342,6	-319,2	-319,14	-257,7	-232,4	-232,48
$dt\mu^*$	-22,5	-34,9	-34,84	—	-0,68	-0,6
$tt\mu$	-390,4	-363,0	-362,904	-319,8	-289,2	-289,146
$tt\mu^*$	-71,8	-83,9	-83,78	-37,2	-45,2	-45,22

в той же таблице приведены результаты расчетов в адиабатическом представлении [39] и вариационных расчетов [38]. Значения энергии связи отсчитываются от основного уровня мезоатома с наиболее тяжелым ядром и даны в электрон-вольтах. Возбужденные состояния отмечены «*».

В табл. 5 приведены результаты расчетов, в которых в разложении метода сильной связи каналов учитывались члены с $n \leq 2$,

Таблица 5. Энергия связи μ -молекулярных ионов $dd\mu$ и $dt\mu$, эВ

Система	E	E^*
$dd\mu (L=0)$	-327,8	-37,2
$dd\mu (L=1)$	-222,1	-1,1*
$dt\mu (L=0)$	-324,0	-35,5

* Результат был получен Р. А. Султановым.

$\lambda, l \leq 1$. Как видно из сравнения с результатами работ [38, 39], в этом случае удается добиться существенного улучшения точности расчетов, в том числе получить слабосвязанное состояние в системе $dd\mu$ с $L = 1$.

4. РЕАКЦИИ ПЕРЕХВАТА В МЕДЛЕННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ЧАСТИЦ С КОНЕЧНЫМИ МАССАМИ

Применение уравнений Фаддеева — Хана к описанию процессов рассеяния частиц с конечными массами мы рассмотрим на примере медленных столкновений в системах $p\mu + d$ и $p\mu + t$.

Ограничимся случаем нулевого полного момента и примем следующую нумерацию частиц: 1 — протон, 2 — ядро дейтерия или трития, 3 — мюон.

Для решения соответствующих задач рассеяния неоднородных интегральных уравнений воспользуемся описанной в предыдущем разделе заменой интегралов (54) квадратурными суммами (55).

В результате получим систему неоднородных алгебраических уравнений, определяющих коэффициенты полуаналитического представления компонент трехчастичной волновой функции $z_{\alpha a}^i$. Исходя из асимптотического поведения Ψ_1 и Ψ_2 , найдем амплитуду рассматриваемых процессов, которая в 1s-приближении метода сильной связи каналов имеет вид

$$A = -\frac{M_1}{k_1} \int_0^\infty \sin k_1 x \int_0^\infty S_{1010}(x, y) f_{10}^2(y) dx dy,$$

где

$$k_1^2 = 2M_1 E + M_1 (\mu_1 - \mu_2);$$

E — энергия столкновения, отсчитываемая от основного уровня мезоатома $p\mu$. Сечение реакций $p\mu + d \rightarrow p + d\mu$ и $p\mu + t \rightarrow p + t\mu$ определяется выражением

$$\sigma = 4\pi \frac{k_1 M_2}{k_2 M_1} |A|^2,$$

где

$$k_2^2 = 2M_2 E.$$

В табл. 6 приведены результаты численных расчетов * сечения σ и скорости λ реакции перехвата, которая определяется следующим образом:

$$\lambda = \sigma v,$$

где v — скорость относительного движения тяжелой частицы (d или t) и мезоатома. Для сравнения в той же таблице приведены данные работы [40].

* Результаты были получены С. Е. Бренером (см. также [22]).

Таблица 6. Сечения и скорости реакции перехвата
 в низкоэнергетических столкновениях мезоатомов изотопов водорода

E, эВ	Уравнения Фаддеева — Хана		[40]	
	$\sigma, 10^{-20} \text{ см}^2$	$\lambda, 10^{-13} \text{ см}^3/\text{с}$	$\sigma, 10^{-20} \text{ см}^2$	$\lambda, 10^{-13} \text{ см}^3/\text{с}$
$p\mu + d \rightarrow p + d\mu$				
0,001	508	2,6	730	3,9
0,01	160	2,6	230	3,9
$p\mu + t \rightarrow p + t\mu$				
0,001	240	1,2	350	1,8
0,01	76	1,2	110	1,7

Следует сказать, что, ограничиваясь только 1s-приближением метода сильной связи каналов, мы не учитываем асимптотику взаимодействия, возникающего из-за поляризации мишени. Однако, несмотря на это обстоятельство, уже отмечавшееся в разд. 2, результаты, полученные при решении уравнений Фаддеева — Хана, согласуются с экспериментальными данными: $\lambda = (2,8 \pm 0,9) \times 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ [41] и $\lambda = (3,4 \pm 0,3) \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ [42].

5. ДВА ФИКСИРОВАННЫХ ЦЕНТРА

Рассмотрим систему уравнений *

$$\left(E_i + \frac{1}{2\mu_i} \{\Delta_{r_i} - u_i\} \right) \Psi_i = (u_i + u_k) \Psi_j, \quad (61)$$

которые получаются из уравнений (12), если движение по координатам ρ_i можно считать медленным. Разложение метода сильной связи каналов в этом случае имеет вид

$$\Psi_i = \sum_{\alpha} f_{LM\alpha}^i R_{nl}^i(r_i) [Y_{\lambda}(\hat{\rho}) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM}, \quad (62)$$

где $\alpha \equiv n\lambda l$, функции R_{nl} и $[Y_{\lambda} Y_l]_{LM}$ имеют тот же смысл, что и в разд. 2, а коэффициенты $f_{LM\alpha}^i$ зависят от $\rho = r_k$ лишь как от параметра. Подставив (62) в (61), нетрудно получить систему уравнений для коэффициента $f_{LM\alpha}^i$

$$(E - E_n) f_{LM\alpha}^i = \sum_{\alpha'} W_{\alpha\alpha'}^{ij} f_{LM\alpha'}^j, \quad (63)$$

* При изложении этого раздела мы следуем работе [26].

где

$$W_{\alpha\alpha'}^{ij} = \int d^3r_i d\hat{\rho} [Y_\lambda(\hat{\rho}) Y_l(\hat{r}_i)]_{LM} R_{nl}^i(r_i) (u_i + u_k) R_{nl}^j(r_j) \times \\ \times [Y_{\lambda'}(\hat{\rho}) Y_{l'}(\hat{r}_j)]_{LM}. \quad (64)$$

Прежде чем перейти к решению полученных уравнений, воспользуемся следующей процедурой [36].

Пусть

$$\tilde{W}_{\alpha\beta}^{ij} = \frac{W_{\alpha 1}^{ij} W_{1\beta}^{ij}}{W_{11}^{ij}}, \quad (65)$$

где $\alpha = 1$ соответствует $n = 1$, $\lambda, l = 0$.

Заменим в (63) $W_{\alpha\alpha'}^{ij}$ на $\tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{ij}$, умножим на $W_{1\alpha}^{ji}$ и просуммируем по α . Тогда, опуская для краткости индексы LM , получаем

$$W_{11}^{ji} F_i = \sum_{\alpha} W_{1\alpha}^{ji} (E - E_n^i)^{-1} W_{\alpha 1}^{ij} F_j, \quad (66)$$

где

$$W_{11}^{ji} F_i = \sum_{\alpha} W_{1\alpha}^{ji} f_{i\alpha}^i. \quad (67)$$

Данная система уравнений типа сильной связи каналов является алгебраической, что позволяет точно найти зависимость энергии рассматриваемой системы от расстояния ρ между частицами 1 и 2, т. е. построить эффективный потенциал для молекулярных и мезоатомных систем H_2^+ , $\text{pp}\mu^-$, $d\text{t}\mu^-$, ${}^3\text{He } d\mu^-$ и т. п.

Действенность полученной системы уравнений (66) демонстрируется расчетом эффективного потенциала однократно ионизованной молекулы водорода H_2^+ с полным моментом $L = 0$. Так как в данном случае массы частиц 1 и 2 одинаковы, система уравнений (66) вырождается в уравнение

$$W_{11}^{21} F = \sum_{\alpha} W_{1\alpha}^{21} (E - E_n)^{-1} W_{\alpha 1}^{12} F. \quad (68)$$

В табл. 7 представлены значения минимальной энергии E_{min} и равновесного расстояния R_0 , полученные с учетом различного числа

Таблица 7. Значения E_{min} и R_0 , полученные с учетом различного числа членов в (68)

Учитываемые состояния	E_{min}	R_0
1s	-0,4132	2,072
1s + 2s	-0,4217	1,85
1s + 2s + 2p	-0,4087	1,90

членов в (68). О точности приведенных результатов можно судить из сравнения с известными точными значениями [43]: $E_{\text{min}} = -0,1026$, $R_0 = 2,0$.

В качестве другой иллюстрации действенности уравнений (66) был найден эффективный потенциал мезомолекулярного иона $dd\mu$, оказавшийся равным

$$E(\rho) = \left(\frac{1}{\rho} - \frac{2}{3} m^2 \rho \right) \exp(-m\rho),$$

где m — приведенная масса d и μ , отсчет энергии ведется от основного уровня мезоатома дейтерия. При расчетах использовалось 1s-приближение. Полученный потенциал аппроксимировался потенциалом Морзе

$$V_\mu = D \{ \exp[-2a(\rho - R_0)] - 2 \exp[-a(\rho - R_0)] \}$$

с параметрами: $R_0 = 2,19$; $D = 0,107$; $a = 0,72$, что приводит к уровням энергии $E(v=0) = -327$ эВ, $E(v=1) = -28$ эВ. Сравнивая с известными результатами [38, 39], видим, что рассмотренная методика и в этом случае уже на первом шаге дает достаточно хорошие результаты.

6. ПОЛУКЛАССИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА ТРЕХ ТЕЛ

Остановимся на применении уравнений Фаддеева — Хана к решению квантовомеханической задачи о движении частицы в поле двух потенциалов, движущихся по классическим траекториям $\mathbf{R}_1(t)$ и $\mathbf{R}_2(t)$.

Впервые задача о движении одной квантовой и двух классических частиц на основе уравнений типа уравнений Фаддеева была исследована в [44]. В [45] эта теория применялась для описания реакций с тяжелыми ионами в модели сепарабельных потенциалов. Полу-классическая модель трех кулоновских частиц в таком формализме рассматривалась в [32]. Там же обсуждался вопрос о применении метода сильной связи каналов для решения полученных уравнений (см. также [46]). Следует отметить, что применение уравнений типа уравнений Фаддеева к этой задаче, видимо, может дать корректное решение проблемы ионизации*.

Итак, запишем уравнения Шредингера

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) - \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) \right] \Psi = 0, \quad (69)$$

m — масса легкой квантовой частицы; $\hat{V}_i(\mathbf{R}_i)$ — «движущиеся» потенциалы.

Представим Ψ в виде

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (70)$$

* Авторы выражают благодарность Я. Реваи, который указал им на эту возможность.

и перепишем (69)

$$\left. \begin{aligned} \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) \right] \Psi_1 &= a_{11} \Psi_1 + a_{12} \Psi_2; \\ \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) \right] \Psi_2 &= a_{21} \Psi_1 + a_{22} \Psi_2. \end{aligned} \right\} \quad (71)$$

Тогда

$$a_{12} = \hat{V}_1 - a_{22}; \quad a_{21} = \hat{V}_2 - a_{11}. \quad (72)$$

Наиболее естественно выбрать операторы $a_{11} = a_{22} = 0$. Уравнения в этом случае будут наиболее близкими к уравнениям Фаддеева (конечно, существуют и другие возможности, которые должны определяться физикой задачи), т. е.

$$\left. \begin{aligned} \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) \right] \Psi_1 &= \hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) \Psi_2; \\ \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) \right] \Psi_2 &= \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) \Psi_1. \end{aligned} \right\} \quad (73)$$

Предположим, что потенциалы \hat{V}_i локальны, т. е.

$$\hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) = V_1(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1(t)|), \quad \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) = V_2(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2(t)|),$$

и введем функции Φ_{1n} и Φ_{2n}

$$\left. \begin{aligned} \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_1(\mathbf{R}_1(t)) \right] \Phi_{1n} &= 0; \\ \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \hat{V}_2(\mathbf{R}_2(t)) \right] \Phi_{2n} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (74)$$

Нетрудно убедиться, что

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{1n} &= \exp \left[im\dot{\mathbf{R}}_1(\mathbf{r}) + i \left(E_n^1 - \frac{1}{2} m\dot{\mathbf{R}}_1^2 \right) t \right] \varphi_{E_n^1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1); \\ \Phi_{2n} &= \exp \left[im\dot{\mathbf{R}}_2(\mathbf{r}) + i \left(E_n^2 - \frac{1}{2} m\dot{\mathbf{R}}_2^2 \right) t \right] \varphi_{E_n^2}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2), \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

а $\varphi_{E_n^1}$ и $\varphi_{E_n^2}$ удовлетворяют уравнению

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V_1(\mathbf{x}) \right] \varphi_{E_n^1}(\mathbf{x}) &= E_n^1 \varphi_{E_n^1}(\mathbf{x}); \\ \left[-\frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V_2(\mathbf{x}) \right] \varphi_{E_n^2}(\mathbf{x}) &= E_n^2 \varphi_{E_n^2}(\mathbf{x}). \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

Как и в работе [32], для решения (73) воспользуемся методом сильной связи каналов

$$\Psi_1 = \left(\sum + \int \right)_n \Phi_{1n} c_n^1(t); \quad \Psi_2 = \left(\sum + \int \right)_n \Phi_{2n} c_n^2(t). \quad (77)$$

Тогда для амплитуд $c_n^i(t)$ получаем систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} c_n^1(t) &= \delta_{nn_0} - i \int_{-\infty}^t \left(\sum + \int \right)_n \Gamma_{nn'}^1(t') c_n^2(t') dt'; \\ c_n^2(t) &= -i \int_{-\infty}^t \left(\sum + \int \right)_n \Gamma_{nn'}^2(t') c_n^1(t') dt'; \\ \Gamma_{nn'}^1(t) &= \int d^3r \Phi_{1n}^* V_1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \Phi_{2n'}; \\ \Gamma_{nn'}^2(t) &= \int d^3r \Phi_{2n}^* V_2(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) \Phi_{1n'} \end{aligned} \right\} \quad (78)$$

которая отвечает начальным условиям

$$\Psi_1(t) = \Phi_{1n_0}; \quad \Psi_2(t) = 0.$$

$$t = -\infty \qquad \qquad t = -\infty$$

Если скорости тяжелых частиц меньше скорости легкой частицы, то для ядер (78) естественно воспользоваться приближением

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_{nn'}^1(t) &= e^{-i(E_n^1 - E_{n'}^2)t} \int d^3r \varphi_n^1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) V_1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \varphi_{n'}^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2), \\ \Gamma_{nn'}^2(t) &= e^{-i(E_n^2 - E_{n'}^1)t} \int d^3r \varphi_n^2(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) V_2(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) \varphi_{n'}^1(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1). \end{aligned} \right\} \quad (79)$$

Для иллюстрации в табл. 8 приводятся результаты расчета сечения резонансной перезарядки протонов на атомах водорода $p + \text{H}(1s) \rightarrow \text{H}(1s) + p$ при низких энергиях (последняя колонка [32]), при этом траектории $\mathbf{R}_i(t)$ были взяты прямолинейными, для ядер использовалось приближение (79), а в (77) удерживались только $1s$ -состояния.

Из табл. 8 видно, что в $1s$ -приближении метод уравнений Фаддеева — Хана дает хорошие результаты.

Таблица 8. Сечение резонансной перезарядки протонов, см^2 , на атомах водорода ($a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2$)

E , эВ	[47]	[48]	[32]
1	$4,5 \cdot 10^{-15}$	$4,7 \cdot 10^{-15}$	$4,6 \cdot 10^{-15}$
5	$3,7 \cdot 10^{-15}$	—	$3,8 \cdot 10^{-15}$
10	—	$40,7, \pi a_0^2$	$39,3, \pi a_0^2$
100	—	$29,1, \pi a_0^2$	$24,8, \pi a_0^2$
1 000	—	$18,8, \pi a_0^2$	$15,5, \pi a_0^2$
10 000	—	$9,8, \pi a_0^2$	$8,3, \pi a_0^2$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном обзоре мы сосредоточили внимание на описании связанных состояний и процессов рассеяния с перераспределениями в системах трех заряженных частиц при низких энергиях на основе уравнений Фаддеева — Хана. В частности, было продемонстрировано, что для широкого класса трехтельных систем (одноцентровые, двухцентровые, системы с конечными массами, полуклассические системы) приближения $1s$ и $1s - 2s - 2p$ метода сильной связи каналов приводят к достаточно хорошему описанию. Ситуация становится еще более благоприятной, если в явном виде учесть взаимодействие, возникающее за счет поляризации мишени [уравнение (52)]. В этом случае даже $1s$ -приближение приводит к очень точным результатам.

Что касается учета более высоких состояний, то нам представляется нецелесообразным пытаться уточнять результаты, оставаясь в рамках метода сильной связи каналов, так как сходимость может оказаться медленной [49]. Ситуация здесь напоминает методы сепаратризации, когда основной вклад дают несколько первых членов.

То обстоятельство, что метод сильной связи каналов для уравнений Фаддеева — Хана на первом шаге приводит к достаточно точным результатам, позволяет надеяться, что уравнения такого типа могут стать теоретической основой метода резонирующих групп в теории ядерных реакций, когда учитываются только открытые каналы.

Авторы выражают глубокую благодарность товарищам по работе В. Б. Беляеву, Р. Л. Братанову, С. Е. Бренеру, Р. М. Галимзянову, Р. А. Султанову за поддержку, интерес к работе и обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
2. Hahn Y. // Phys. Rev. 1968. Vol. 169. P. 794—804; Nucl. Phys. 1969. Vol. A132. P. 353—368.
3. Kouri D. J., Levin F. S. // Phys. Lett. 1974. Vol. 50B. P. 421—424.
4. Hahn Y., Kouri D. J., Levin F. S. // Phys. Rev. 1974. Vol. C10. P. 1615—1622.
5. Kouri D. J., Levin F. S. // Nucl. Phys. 1975. Vol. A250. P. 127—140; Vol. A253. P. 395—428.
6. Tobocman W. // Phys. Rev. 1974. Vol. C9. P. 2466—2468; Vol. C10. P. 60—66; 1975. Vol. C11. P. 43—49; Vol. C12. P. 741; 1146—1151.
7. Levin F. S. // Phys. Rev. 1980. Vol. C21. P. 2199—2210.
8. Беляев В. Б. Лекции по теории малочастичных систем. М.: Энергоатомиздат, 1986.
9. Zubarev A. L. // Few-body problems in physics/Ed. L. D. Faddeev, T. I. Kopaleishvili (Tbilisi, 1984), World Scientific, Singapore, 1984. P. 514—522.
10. Kato T. // Comm. Pure Appl. Math. 1957. Vol. 10. P. 151—177; Pack R. T., Brown W. B. // J. Chem. Phys. 1966. Vol. 45. P. 556—559.
11. Levin F. S., Krüger H. // Phys. Rev. 1977. Vol. A15. P. 2147—2165.

12. Ford W. K., Levin F. S.//Phys. Lett. 1982. Vol. 109B. P. 155—160.
13. Levin F. S., Krüger H.//Phys. Rev. 1977. Vol. A16. P. 836—843.
14. Greben J. M., Levin F. S.//Nucl. Phys. 1979. Vol. A325. P. 145—170; Phys. Rev. 1977. Vol. 71B. P. 252—256.
15. Hahn Y., Dirks J. F., Chen A. C.//Phys. Rev. 1975. Vol. A12. P. 816—822.
16. Chen A. C., Hahn Y.//Phys. Rev. 1975. Vol. A12. P. 823—829.
17. Baer M., Kouri D. J.//J. Math. Phys. 1973. Vol. 14. P. 1637—1641.
18. Kouri D. J., Craigie M., Secrest D.//J. Chem. Phys. 1974. Vol. 60. P. 1851—1858.
19. Бренер С. Е., Гандыль Е. М., Зубарев А. Л., Султанов Р. А.//Всероссийская конференция по теории систем нескольких частиц с сильным взаимодействием. Л.: Изд-во ЛГУ, 1983. P. 22—24.
20. Gandyl E. M., Sultanov R. A., Zubarev A. L.//Particles and Nuclei.//Tenth Intern. Conf. (Heidelberg, 1984)/F. Cuttner, B. Povh, G. zu Putlitz Editors. Vol. II. P. 135.
21. Brener S. E., Gandyl E. M., Zubarev A. L., Sultanov R. A.//Proceedings of the 10th Intern. Conf. on the Few Body Problems in Physics (Karlsruhe, 1983)/Ed. by B. Zeitnitz. Amsterdam, 1984. Vol. II. P. 701—702.
22. Brener S. E., Zubarev A. L.//Few Body Problems in Physics. IX European Conference, Tbilisi, August 25—31, (Poster Section Papers), Tbilisi, 1984. P. 12—13.
23. Гандыль Е. М., Зубарев А. Л.//IX Всесоюзная конференция по теории атомов и атомных спектров. Ужгород, Изд. УжГУ, 1985. С. 96.
24. Зубарев А. Л., Султанов Р. А.//Там же. С. 97.
25. Бренер С. Е., Зубарев А. Л.//IX Всесоюзная конференция по физике электронных и атомных столкновений. Рига, 1984. С. 137.
26. Belyaev V. B., Brener S. E., Galimzyanov R. M., Zubarev A. L.//Z. Phys. 1984. Vol. A317. P. 15—18.
27. Brener S. E., Galimzyanov R. M., Zubarev A. L.//Czech. J. Phys. 1982. Vol. B32. P. 316—318.
28. Gandyl E. M., Zubarev A. L.//Tenth Intern. Conf. on Atomic Physics (ICAP-X)/Ed. H. Narumi, I. Shimamura. Tokyo, 1986. P. 94—95.
29. Brener S. E., Zubarev A. L.//Ibid. P. 104—105.
30. Bratanov R. L., Sultanov R. A., Zubarev A. L.//Ibid. P. 354—355.
31. Гандыль Е. М., Зубарев А. Л., Султанов Р. А.//Материалы III научного семинара «Автоионизационные явления в атомах», М.: Изд-во МГУ, 1986. С. 144—145.
32. Зубарев А. Л., Султанов Р. А.//Международное совещание по теории малочастичных и кварк-адронных систем. Дубна, 16—20 июня 1987. Дубна, 1987. С. 15.
33. Братанов Р. Л., Зубарев А. Л.//Там же, С. 118.
34. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
35. Жигунов В. П., Захарьев Б. Н. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. М.: Атомиздат, 1974.
36. Зубарев А. Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоиздат, 1981.
37. Schwartz C.//Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 1468—1471.
38. Фролов А. М., Эфрос В. Д.//Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. С. 449—452.
39. Виницкий С. И., Пономарев Л. И.//ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336—1418.
40. Матвеев А. В., Пономарев Л. И.//ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 1593—1607.
41. Джелепов В. П., Ермолов П. Ф., Фильченков В. В., Москалев В. И.//ЖЭТФ. 1966. Т. 50. С. 1235—1251.
42. Bleser E. I., Anderson E. W., Lederman L. M. e.a.//Phys. Rev. 1963. Vol. 132. P. 2679—2691.
43. Комаров Н. В.//Вопросы теории атомных столкновений. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. Т. 1. С. 23—27.

44. Revai J. // Nucl. Phys. 1985. Vol. A438. P. 512—524.
 45. Milek B., Reif R., Revai J. // Phys. Lett. 1985. Vol. 150B. P. 65—70.
 46. Войткив А. Б., Паззерский В. А. // Оптика и спектроскопия. 1986. Т. 61. С. 1184—1186.
 47. Матвеев А. В., Пономарев Л. И. // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 2084—2094.
 48. Dalgarno A., Yadov H. N. // Proc. Phys. Soc. 1953. Vol. A66. P. 173—177.
 49. Друкарев Г. Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>И. Н. Вишневский, В. А. Желтоножский, В. М. Коломиец</i> Ядерное возбуждение при аннигиляции позитронов	237
<i>И. Роттер</i> Описание ядерных состояний как структур в открытой квантовомеханической системе	274
<i>Е. Зайдель, Д. Зелигер, А. Майстер, Э. Миттаг, В. Пилъц</i> Влияние атомных, молекулярных и твердотельных эффектов на нейтронное резонансное сечение	307
<i>И. С. Гулькаргов</i> Рассеяние электронов на ядрах и переходные плотности заряда	346
<i>Е. М. Гандыль, А. Л. Зубарев</i> Уравнения Фаддеева — Хана в квантовомеханической проблеме трех тел	415

CONTENTS

<i>I. N. Vtshnevskii, V. A. Zheltonozhskii, V. M. Kolomietz</i> Nuclear excitation by positron annihilation	237
<i>I. Rotter</i> Description of nuclear states as structures in an open quantum mechanical system	274
<i>K. Seidel, D. Seeliger, A. Meister, S. Mittag, W. Pilz</i> Influence of atomic, molecular, and solid states effects on neutron resonance cross-section	307
<i>I. S. Gulkarov</i> Electron scattering of nuclei and transition charge densities	346
<i>E. M. Gandyly, A. L. Zubarev</i> The Faddeev-Hann equations in the quantum-mechanical three-body problem	415