Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.9, стр.450 - 454 10 ноября 1992 г.

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ТРЕХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

*Э.О.Альт, А.М.Мухамеджанов**

Институт физики Университета г.Майнца,
Д-6500, Майнц, ФРГ
**Институт ядерной физики АН Узбекистана*
702132, Ташкент, Узбекистан

Поступила в редакцию 25 августа 1992 г.

Найдено в аналитическом виде асимптотическое решение уравнения Шредингера для трех заряженных частиц в континууме в области, где две частицы разделены слабо по сравнению с расстоянием до третьей частицы.

Для расчета сечений различных процессов с тремя заряженными частицами в конечном состоянии (ионизация в атомной физике или развал в ядерной) нужно знать асимптотику трехчастичной кулоновской волновой функции рассеяния в области, где частицы какой-либо пары разделены слабо по сравнению с расстоянием до третьей частицы. В данной работе мы приводим исключительно простое аналитическое выражение для асимптотического решения (АР) уравнения Шредингера (УШ) в указанной области, которое до сих пор не было известно, хотя давно обсуждается в литературе [1,2].

Рассмотрим систему трех несвязанных заряженных частиц с массой m_α и зарядом e_α, $\alpha = 1,2,3$, для описания которой используем якобиевские переменные: $\mathbf{r}_\alpha$ – радиус-вектор между частицами β и γ (пары α), $\mathbf{k}_\alpha$ – их относительный импульс, $\mu_\alpha = m_\beta m_\gamma / m_{\beta\gamma}$, $\vec{\rho}_\alpha$ – радиус-вектор между частицей α и центром масс пары α, $\mathbf{q}_\alpha$ – канонически сопряженный $\vec{\rho}_\alpha$ относительный импульс; $M_\alpha = m_\alpha m_{\beta\gamma}/M$, $M = \sum_{\alpha=1}^{3} m_\alpha$, $m_{\beta\gamma} = m_\beta + m_\gamma$.

УШ, описывающее систему трех заряженных частиц в континууме, имеет вид:

$$(E - T_{\mathbf{r}_\alpha} - T_{\vec{\rho}_\alpha} - V)\Psi^{(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = 0, \tag{1}$$

где $E = k_\alpha^2/2\mu_\alpha + q_\alpha^2/2M_\alpha$ – полная энергия системы, $\alpha = 1,2,3$, $V = \sum_{\alpha=1}^{3} V_\alpha$, V_α – потенциал взаимодействия между частицами пары α, для простоты пока предполагаемый чисто кулоновским, $V_\alpha = V_\alpha^C$, $T_{\mathbf{r}_\alpha} = -(1/2\mu_\alpha)\Delta_{\mathbf{r}_\alpha}$, $T_{\vec{\rho}_\alpha} = -(1/2M_\alpha)\Delta_{\vec{\rho}_\alpha}$. Используется система единиц, в которой $\hbar = c = 1$.

Определим асимптотические области: 1) Ω_0 : все $r_\alpha \to \infty$, $\alpha = 1,2,3$, но так, что ни одно из отношений $r_\alpha/\rho_\alpha \to 0$, то есть все частицы разделены сильно; 2) Ω_α: частицы пары α разделены слабо, то есть $r_\alpha/\rho_\alpha \to 0$, $\rho_\alpha \to \infty$, причем r_α может тоже стремиться к ∞, но слабее ρ_α.

В старшем порядке (с точностью до членов $\sim r_\alpha/\rho_\alpha^2$) из (1) получаем асимптотическое уравнение в Ω_α

$$(E - T_{\mathbf{r}_\alpha} - T_{\vec{\rho}_\alpha} - V_\alpha^C - v_\alpha^C)\Psi^{(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = 0, \tag{2}$$

где $v_\alpha^C(\rho_\alpha) = e_{\beta\gamma} e_\alpha/\rho_\alpha$, $e_{\beta\gamma} = e_\beta + e_\gamma$, причем пренебречь v_α^C в (2) нельзя, поскольку при $\rho_\alpha \to \infty$ он убывает слишком медленно и влияет на асимптотику волновой функции. Под АР уравнения (1) в Ω_α мы подразумеваем решение, удовлетворяющее (2) с точностью до членов $\sim 1/\rho_\alpha^2$, r_α/ρ_α^2 (в дальнейшем для простоты мы будем просто писать $\sim 1/\rho_\alpha^2$) и являющееся одновременно старшим членом асимптотики решения уравнения (1) $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha)$ в области Ω_α. Последнее обстоятельство очень существенно, поскольку АР уравнения (2) неоднозначно. Например, в виду разделения переменных в (2) одним из его решений является

$$\Phi_0^{(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = \psi^{(+)}_{C,\mathbf{k}_\alpha}(\mathbf{r}_\alpha)\bar{\psi}^{(+)}_{C,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha). \tag{4}$$

Здесь $\psi^{(+)}_{C,\mathbf{k}_\alpha}(\bar{\psi}^{(+)}_{C,\mathbf{q}_\alpha})$ – двухчастичная кулоновская волновая функция рассеяния, описывающая относительное движение частиц пары α (частицы α и центра масс (β,γ)) в потенциале V_α^C (v_α^C). Но как легко увидеть на примере системы с $V_\alpha^C = 0$ и $m_\alpha = \infty$, где аналитическое решение известно, старший член $\Phi_0^{(+)}$ в Ω_α не совпадает со старшим членом асимптотики решения (1) в Ω_α.

Чтобы найти АР в Ω_α, рассмотрим кулоновски искаженную плоскую волну, являющуюся АР в Ω_0 (вне особых направлений, отвечающих $\hat{\mathbf{k}}_\nu\hat{\mathbf{r}}_\nu = 1$, $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/p$) [2-4]:

$$\Psi_0^{(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = e^{i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha}e^{i\mathbf{q}_\alpha\vec{\rho}_\alpha}\prod_{\nu=1}^{3} e^{i\eta_\nu \ln\zeta_\nu}, \tag{5}$$

$\eta_\alpha = e_\beta e_\gamma \mu_\alpha/k_\alpha$, $\zeta_\alpha = k_\alpha r_\alpha - \mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha$. Прямой подстановкой можно убедиться, что при $V_\alpha^C = 0$ старший член $\Psi_0^{(+)}$ в Ω_α

$$\Psi_{0\alpha}^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = e^{i\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha}\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha), \tag{6}$$

$$\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha) = e^{i\mathbf{q}_\alpha\vec{\rho}_\alpha}\prod_{\nu=\beta,\gamma} e^{i\eta_\nu \ln\zeta_\nu^{(\alpha)}}, \tag{7}$$

является АР уравнения (1) в Ω_α и асимптотического уравнения (2) в неособом направлении $(\hat{\mathbf{k}}_\nu\hat{\vec{\rho}}_\alpha \neq 1,\ \nu = \beta,\gamma)$. Здесь:

$$\zeta_\nu^{(\alpha)} = k_\nu\rho_\alpha - \epsilon_{\alpha\nu}\mathbf{k}_\nu\vec{\rho}_\alpha, \qquad \tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha) = \mathbf{k}_\alpha + \mathbf{a}^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)/\rho_\alpha, \tag{8}$$

$$\mathbf{a}^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha) = \sum_{\nu=\beta,\gamma} \mathbf{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha), \tag{9}$$

$$\mathbf{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha) = -\eta_\nu(m_\nu/m_{\beta\gamma})(\epsilon_{\alpha\nu}\hat{\vec{\rho}}_\alpha - \hat{\mathbf{k}}_\nu)/(1 - \epsilon_{\alpha\nu}\hat{\vec{\rho}}_\alpha\hat{\mathbf{k}}_\nu), \qquad \nu = \beta,\gamma, \tag{10}$$

$\epsilon_{\alpha\nu} = -\epsilon_{\nu\alpha}$, $\epsilon_{\alpha\alpha} = 0$, $\epsilon_{\alpha\nu} = 1$ – для всех $(\alpha\nu)$, являющихся циклическими перестановками (1,2,3). При получении (6) использовано разложение

$$\ln\zeta_\nu = \ln\zeta_\nu^{(\alpha)} + \frac{\mathbf{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha}{\rho_\alpha} + O\left(\frac{1}{\rho_\alpha^2}\right). \tag{11}$$

Учет фазового фактора $\exp[i\mathbf{a}^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha/\rho_\alpha]$ в (6) необходим, поскольку при подстановке (6) в (2) после действия оператора $T_{\mathbf{r}_\alpha}$ на $\exp[i\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha]$ появляется член $\sim 1/\rho_\alpha$, то есть того же порядка, что и v_α^C. Действие же $T_{\vec{\rho}_\alpha}$ на $\exp[i\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha]$ можно не учитывать, поскольку $\vec{\nabla}_{\vec{\rho}_\alpha}\exp[i\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha] \sim 1/\rho_\alpha^2$.

Из (6) очевидно, что при $V_\alpha^C \neq 0$ искомое АР следует искать в виде

$$\Psi_\alpha^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = \psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha), \tag{12}$$

где $\psi_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$ – неизвестная функция. Подставляя (12) в (2), получаем уравнение для $\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$

$$\left(\frac{\tilde{k}^2_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}{2\mu_\alpha} - T_{\mathbf{r}_\alpha} - V_\alpha^C\right)\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha) = O\left(\frac{1}{\rho_\alpha^2}\right), \tag{13}$$

решение которого

$$\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha) = e^{i\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha}\tilde{N}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)F(-i\tilde{\eta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha), 1; i\tilde{\zeta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)) + O\left(\frac{1}{\rho_\alpha^2}\right), \tag{14}$$

$$\tilde{\zeta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha) = \tilde{k}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)r_\alpha - \tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)\mathbf{r}_\alpha, \tilde{\eta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha) = e_\beta e_\gamma \mu_\alpha/\tilde{k}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha),$$

$$\tilde{N}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha) = \exp[-\pi\tilde{\eta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)/2]\Gamma(1 + i\tilde{\eta}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)),$$

$F(a, b; x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. Итак выражение (12), где $\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$ и $\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha)$ даются формулами (14) и (7), и есть искомое АР уравнения (2) в Ω_α и одновременно старший член асимптотики решения (1) в Ω_α в неособом направлении ($\hat{\mathbf{k}}_\nu\hat{\vec{\rho}}_\alpha \neq 1$, $\nu = \beta, \gamma$). Из (12) можно сделать следующие выводы.

АР формально может быть представлено в виде произведения волновых функций $\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$ и $\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha)$, которые можно рассматривать как волновые функции, описывающие относительное движение частиц пары α и частицы α и центра масс пары α, соответственно, поскольку первая волновая функция удовлетворяет уравнению (13), а вторая – уравнению

$$\left(\frac{q_\alpha^2}{2M_\alpha} - T_{\vec{\rho}_\alpha} - v_\alpha^C - \frac{\mathbf{a}^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)\mathbf{k}_\alpha}{\mu_\alpha}\frac{1}{\rho_\alpha}\right)\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha) = O\left(\frac{1}{\rho_\alpha^2}\right). \tag{15}$$

Но каждая из функций в (12), в отличие от (4), не является двухчастичной, а несет в себе трехчастичные эффекты. В первой функции это проявляется в появлении эффективного импульса $\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)$ вместо $\mathbf{k}_\alpha$, что является результатом влияния частицы α на относительное движение частиц пары α: дальнодействующее кулоновское взаимодействие α с β и γ приводит к изменению импульсов частиц пары α, а следовательно, и к изменению $\mathbf{k}_\alpha$. Волновая функция $\chi^{as(+)}_{\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{q}_\alpha}(\vec{\rho}_\alpha)$ зависит не только от $\vec{\rho}_\alpha$ и $\mathbf{q}_\alpha$, но и от $\mathbf{k}_\beta$ и $\mathbf{k}_\gamma$ в отдельности, что отражает тот факт, что система (β, γ) – несвязанная. Тем самым мы показали, что АР в Ω_α в случае, когда система (β, γ) – несвязанная, принципиально отличается от АР в Ω_α для связанной пары (β, γ) и частицей α в континууме [2,4].

Мы можем дать обобщение АР (12), которое справедливо во всех асимптотических областях Ω_α, $\alpha = 0, 1, 2, 3$, за исключением особых направлений. Рассмотрим волновую функцию

$$\Psi^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha, \vec{\rho}_\alpha) = e^{i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha}e^{i\mathbf{q}_\alpha\vec{\rho}_\alpha}\prod_{\nu=1}^{3}\tilde{N}_\nu(R, \hat{\vec{\rho}}_\nu)F(-i\tilde{\eta}_\nu(R, \hat{\vec{\rho}}_\nu), 1;\ i\tilde{\zeta}_\nu(R, \hat{\vec{\rho}}_\nu)), \tag{16}$$

$$\tilde{\zeta}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu) = \tilde{k}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu)r_\nu - \tilde{\mathbf{k}}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu)\mathbf{r}_\nu,$$

$$\tilde{\mathbf{k}}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu) = \mathbf{k}_\nu + \frac{2\mathrm{a}^{(\nu)}(\hat{\vec{\rho}}_\nu)}{R}, \quad R = \sum_{\nu=1}^{3} r_\nu, \tag{17}$$

$$\tilde{\eta}_\alpha(R,\hat{\vec{\rho}}_\alpha) = \frac{e_\beta e_\gamma \mu_\alpha}{\tilde{k}_\alpha(R,\hat{\vec{\rho}}_\alpha)}, \quad \alpha = 1,2,3,$$

$$N_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu) = \exp[-\pi\tilde{\eta}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu)/2]\Gamma(1 + i\tilde{\eta}_\nu(R,\hat{\vec{\rho}}_\nu)).$$

Причиной выбора R вместо ρ_ν (такой выбор неоднозначен) является то обстоятельство, что в Ω_0 существуют направления, в которых при $r_\alpha \to \infty$, $\alpha = 1,2,3$, одно из расстояний ρ_ν остается конечным. В любой из областей Ω_α ($\alpha = 1,2,3$) в старшем порядке $\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(R,\hat{\vec{\rho}}_\alpha)$ совпадает с $\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)$ (формула (8)), а старший член асимптотики $\Psi^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha,\vec{\rho}_\alpha)$ в Ω_α дается выражением (12). В области Ω_0 старший член асимптотики выражения (16) дается искаженной плоской волной (формула (5)).

Таким образом, в неособых направлениях асимптотика $\Psi^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha,\vec{\rho}_\alpha)$ в любой из асимптотических областей Ω_α, $\alpha = 0,1,2,3$, в старшем порядке является АР уравнения (1) в этой области. Выражение (16) позволяет сшить АР в различных областях Ω_α ($\alpha = 0,1,2,3$).

Еще одно важное для практики замечание. В особых направлениях, где, по крайней мере, одно из $\mathrm{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)$ обращается в ∞, выражения для АР становятся сингулярными, что создает проблему при их практическом использовании. Мы предлагаем один из возможных рецептов для преодоления этой трудности. Для этого воспользуемся соотношением, справедливым при $\rho_\alpha \to \infty$ и $\hat{\mathbf{k}}_\nu\hat{\vec{\rho}}_\alpha \neq 1$,

$$\frac{\mathrm{a}_\nu^{(\alpha)}(\vec{\rho}_\alpha)}{\rho_\alpha} \approx ik_\nu \frac{m_\nu}{m_{\beta\gamma}}(\epsilon_{\alpha\nu}\hat{\vec{\rho}}_\alpha - \hat{\mathbf{k}}_\nu)\frac{d\ln F(-i\eta_\nu, 1; i\zeta_\nu^{(\alpha)})}{d\zeta_\nu^{(\alpha)}} = \tag{18}$$

$$= \eta_\nu k_\nu \frac{m_\nu}{m_{\beta\gamma}}(\epsilon_{\alpha\nu}\hat{\vec{\rho}}_\alpha - \mathbf{k}_\nu)\frac{F(1-i\eta_\nu, 1; i\zeta_\nu^{(\alpha)})}{F(-i\eta_\nu, 1; i\zeta_\nu^{(\alpha)})}, \quad \nu = \beta,\gamma. \tag{19}$$

Правая часть (19) в неособом направлении с точностью до членов $\sim 1/\rho_\alpha^2$ совпадает с $\mathrm{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)/\rho_\alpha$ и является регулярной и в особом направлении. Поэтому если $\mathrm{a}_\nu^{(\alpha)}(\hat{\vec{\rho}}_\alpha)/\rho_\alpha$ заменить на выражение (19), то модифицированная таким образом $\Psi_\alpha^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha,\vec{\rho}_\alpha)$ будет по-прежнему АР уравнения (1) в неособых направлениях Ω_α, оставаясь в то же время регулярной и в особом направлении ($\hat{\mathbf{k}}_\nu\hat{\vec{\rho}}_\alpha = 1$, $\nu = \beta,\gamma$), где, конечно, $\Psi_\alpha^{as(+)}(\mathbf{r}_\alpha,\vec{\rho}_\alpha)$ уже не является АР.

До сих пор мы рассматривали АР при $V_\alpha = V_\alpha^C$. В случае $V_\alpha = V_\alpha^N + V_\alpha^C$, где V_α^N – потенциал ядерного взаимодействия частиц β и γ, $\psi^{(+)}_{C,\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$ в (12) должна быть заменена на $\psi^{(+)}_{\tilde{\mathbf{k}}_\alpha(\vec{\rho}_\alpha)}(\mathbf{r}_\alpha)$, являющуюся решением уравнения (13) с потенциалом V_α вместо V_α^C.

Работа поддержана Немецким научно-исследовательским обществом, контракт No 436 USB-113-1-0.

1. P.L.Altik, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16**, 3543 (1983).
2. С.П.Меркурьев, Л.Д.Фаддеев, Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц, М.: Наука, 1985.
3. L.Rosenberg, Phys. Rev. D **8**, 1833 (1972); P.J.Redmond, unpublished.
4. R.J.Peterkop, Theory of Ionisation of Atoms by Electron Impact, Boulder: University of Colorado Press, 1977.