

В 14

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ АН СССР

препринт

А.И.Вайнштейн, В.М.Галицкий

**резонансная передача возбуждения
при столкновениях медленных атомов**



НОВОСИБИРСК 1965

v +

А н н о т а ц и я

Рассматривается процесс передачи возбуждения при столкновениях двух медленных атомов, находящихся в $2p$ и $1s$ состояниях. Найдена S - матрица процесса и сечение $\sigma = \frac{\mu}{v}$.

Для водорода $\mu = 0,122$, а для других газов выражается через отношение интенсивностей дипольного излучения.

I. Представляет интерес рассмотрение процесса передачи возбуждения при медленном столкновении двух одинаковых атомов, один из которых находится в $2p$, а другой в $1s$ состоянии. Взаимодействие таких атомов - это резонансное диполь-дипольное взаимодействие. Как видно из рассмотрения, сечение передачи возбуждения обратно пропорционально скорости столкновения.

Этот процесс может иметь значение при рассмотрении некоторых явлений происходящих в газах. Так, например, если пучок невозбужденных атомов пролетает через нагретый газ, то атомы пучка возбуждаются и уносят энергию. Процесс передачи возбуждения может определять теплопередачу при наличии в газе градиента температур. Он приводит к некоторым интерференционным эффектам и влияет на форму спектральной линии в излучении газа.

Мы рассмотрим скорости столкновений, лежащие в интервале:

$$\frac{1}{M} \ll v \ll 1 \quad (1)$$

где M - масса ядра.

(Используется атомная система единиц $\hbar = c = m = 1$). Сечение передачи возбуждения обратно пропорционально скорости, процесс является резонансным. Существенны прицельные параметры:

$$\rho \sim \frac{1}{v} \quad (2)$$

много больше атомных размеров. Поэтому мы воспользуемся параметрическим методом, то есть движение ядер будем описывать как движение материальных точек классической механики по определённым траекториям, а волновые функции электронов найдём, пользуясь гамильтонианом, зависящим от времени. Траектории ядер будем считать прямыми, что обеспечивается условием

$$v \gg \frac{1}{M}$$

Все приближения, сделанные в работе, основываются лишь

на предположении, что скорость столкновения находится в интервале (1). Подробно сделанные приближения мы обсудим ниже.

2. Будем рассматривать столкновение атомов водорода. Обобщение для других газов очевидно, и мы сделаем это при обсуждении результата.

Воспользуемся для рассмотрения процесса системой центра инерции. Назовём первым атом, который при $t = -\infty$ находился в $2p$ состоянии. Пусть радиус-вектор первого ядра \vec{R} , $-\vec{R}$ - второго, \vec{r}_1, \vec{r}_2 - радиус-вектора электронов. Эффектами, связанными с тождественностью электронов, можно пренебречь, так как существенны прицельные параметры много больше атомных размеров. Уравнение для электронной волновой функции имеет вид

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = H(t) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|} - \frac{1}{|\vec{r}_2 + \vec{R}|}, \quad (3)$$

$$V = -\frac{1}{|\vec{r}_1 + \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{R}|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{2R}$$

$\vec{R}(t)$ - функция времени.

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$$

$$R = \sqrt{\rho^2 + v^2 t^2}$$

ρ - половина прицельного параметра.

Ищем $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ в виде

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = e^{i\vec{v}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \sum a_n(t) u_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) e^{-iE_n t}$$

$$H_0 u_n = E_n u_n \quad (4)$$

u_n представляется в виде произведения кулоновских функций

с аргументами $\vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{R}$, $\vec{\rho}_2 = \vec{r}_2 + \vec{R}$. Подставляя (4) в (3), получим

$$i \dot{a}_k = \sum a_n V_{kn} e^{-i(E_n - E_k)t} \quad (5)$$

В (5) нет членов типа $(u_k u_n)$, благодаря введению в разложение (4) $\exp[i\vec{v}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]$, что связано с преобразованием волновой функции при переходе к движущейся системе координат.

Так как существенные $\rho \sim \frac{1}{v}$ много больше атомных размеров, то разлагая V по степеням $\frac{1}{R}$, сохраним лишь резонансное диполь-дипольное взаимодействие

$$V = \frac{R^2 (\vec{\rho}_1 \vec{\rho}_2) - 3(\vec{\rho}_1 \vec{R})(\vec{\rho}_2 \vec{R})}{8R^5} \quad (6)$$

$$\vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{R}, \quad \vec{\rho}_2 = \vec{r}_2 + \vec{R}$$

Решая (5) по теории возмущений легко видеть, что переходы в состояния с другой энергией малы при $\rho \gg 1$.

Поэтому в уравнениях (5) оставим a_n , соответствующие состояниям с одинаковой энергией, равной сумме энергий $1s$ и $2p$ уровней. Таких состояний шесть:

$$u_x = \varphi_{2px}(\vec{\rho}_1) \varphi_{1s}(\vec{\rho}_2), \quad u_y = \varphi_{2py}(\vec{\rho}_1) \varphi_{1s}(\vec{\rho}_2), \quad u_z = \varphi_{2pz}(\vec{\rho}_1) \varphi_{1s}(\vec{\rho}_2) \quad (7)$$

$$\tilde{u}_x = \varphi_{1s}(\vec{\rho}_1) \varphi_{2px}(\vec{\rho}_2), \quad \tilde{u}_y = \varphi_{1s}(\vec{\rho}_1) \varphi_{2py}(\vec{\rho}_2), \quad \tilde{u}_z = \varphi_{1s}(\vec{\rho}_1) \varphi_{2pz}(\vec{\rho}_2)$$

$\varphi_{1s}(\vec{\rho}), \varphi_{2px,y,z}(\vec{\rho})$ - кулоновские состояния, где использованы угловые функции

$$Y_{1x} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r}, \quad Y_{1y} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r}, \quad Y_{1z} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \quad (7)$$

вместо $Y_{lm}(\varphi, \theta)$. Ось z выбрана вдоль \vec{v} , ось x выбрана так, что плоскость столкновения совпадает с плоскостью xz .

Необходимо отметить, что состояние $\psi_{2s}(\vec{p}_1)\psi_{1s}(\vec{p}_2)$ не войдет в уравнения, хотя оно имеет ту же энергию, что и рассматриваемые состояния. Это связано с тем, что матричные элементы $\langle \psi_{2s}(\vec{p}_1)\psi_{1s}(\vec{p}_2) | V | n \rangle$, где $|n\rangle$ - состояние с той же энергией, равны нулю, даже с учётом всех мультипольностей.

Уравнения для $a_n(t)$ после вычисления всех матричных элементов получаются следующими:

$$\begin{cases} i\dot{\tilde{a}}_z = -2\gamma\tilde{a}_z - \beta\tilde{a}_x \\ i\dot{\tilde{a}}_x = -\beta\tilde{a}_z + (\gamma - \delta)\tilde{a}_x \\ i\dot{\tilde{a}}_y = (\gamma + \delta)\tilde{a}_y \end{cases} \quad \begin{cases} i\dot{a}_z = -2\gamma a_z - \beta a_x \\ i\dot{a}_x = -\beta a_z + (\gamma - \delta)a_x \\ i\dot{a}_y = (\gamma + \delta)a_y \end{cases} \quad (8)$$

Величины β, γ, δ имеют вид

$$\beta = A \frac{\rho v t}{R^5}, \quad \gamma = A \frac{1}{3R^3} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{\rho^2}{R^2}\right), \quad \delta = A \frac{\rho^2}{3R^5} \quad (9)$$

$$A = \frac{2^{12}}{3^9}$$

После введения новых функций

$$q_z = \frac{a_z + \tilde{a}_z}{\sqrt{2}}, \quad q_x = -\frac{a_x + \tilde{a}_x}{\sqrt{2}}, \quad q_y = -i \frac{a_y + \tilde{a}_y}{\sqrt{2}}, \quad (10)$$

$$p_z = \frac{a_z - \tilde{a}_z}{\sqrt{2}}, \quad p_x = -\frac{a_x - \tilde{a}_x}{\sqrt{2}}, \quad p_y = -i \frac{a_y - \tilde{a}_y}{\sqrt{2}},$$

система (8) расщепляется

$$\begin{cases} i\dot{q}_z = -2\gamma q_z + \beta q_x \\ i\dot{q}_x = \beta q_z + (\gamma - \delta)q_x \\ i\dot{q}_y = (\gamma + \delta)q_y \end{cases} \quad \begin{cases} -i\dot{p}_z = -2\gamma p_z + \beta p_x \\ -i\dot{p}_x = \beta p_z + (\gamma - \delta)p_x \\ -i\dot{p}_y = (\gamma + \delta)p_y \end{cases} \quad (11)$$

Физический смысл этого расщепления весьма прозрачен. Оно связано с тем, в рассматриваемой задаче есть два точных квантовых числа, чётность волновой функции при инверсии координат электронов и чётность при отражении координат электронов относительно плоскости столкновения. По отношению к инверсии состояния $q_{z,x,y}$ - нечётные, а $p_{z,x,y}$ - четные. Состояния q_y, p_y - нечётные, а все остальные чётные при отражении относительно плоскости столкновения. Эти квантовые числа соответствуют классификации термов квазимолекулы /1/.

Введём новую переменную ξ

$$\xi = \frac{\rho v t}{\sqrt{1 + (\rho v t)^2}} \quad (12)$$

Когда t меняется от $-\infty$ до $+\infty$, ξ проходит интервал от -1 до $+1$. (11) перейдёт в

$$\begin{cases} \frac{d}{d\xi} q'_z = \left[-\frac{1}{2} + \frac{3}{2}(1-2\xi^2)\right] q'_z + 3\xi\sqrt{1-\xi^2} q'_x \\ \frac{d}{d\xi} q'_x = 3\xi\sqrt{1-\xi^2} q'_z + \left[-\frac{1}{2} - \frac{3}{2}(1-2\xi^2)\right] q'_x \\ \frac{d}{d\xi} q'_y = q'_y \end{cases} \quad (13)$$

Штрихом обозначено дифференцирование по ξ .

$$B = \frac{2^{12}}{3^{10}} \frac{1}{\rho^2 v} \quad (14)$$

Уравнения для $p_{z,x,y}$ получаются из (13) комплексным сопряжением. Из (13) определяем q_y

$$q_y = c e^{-iB\xi} \quad (15)$$

От q_z, q_x переходим к u, v

$$q_z = u e^{i\frac{B}{2}\xi}, \quad q_x = v e^{i\frac{B}{2}\xi} \quad (16)$$

$$\begin{cases} \frac{2i}{3B} u' = (1 - 2\xi^2)u + 2\xi\sqrt{1-\xi^2}v \\ \frac{2i}{3B} v' = 2\xi\sqrt{1-\xi^2}u - (1 - 2\xi^2)v \end{cases} \quad (17)$$

Легко проверить, что для (17) выполнено:

1) $|u|^2 + |v|^2 = 1$

2) если $\begin{pmatrix} u(\xi) \\ v(\xi) \end{pmatrix}$ - решение, то $\begin{pmatrix} v(-\xi) \\ u(-\xi) \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} v^*(\xi) \\ -u^*(\xi) \end{pmatrix}$ тоже решения.

Используя эти свойства, нетрудно убедиться, что при переходе от $\xi = -1$ к $\xi = +1$, решение переходит следующим образом

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} f e^{i\varphi} \\ g \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -g \\ f e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \quad (18)$$

$$f^2 + g^2 = 1$$

где f, g, φ - действительные функции параметра B .

Найти аналитическое решение системы (17) и тем самым определить f, g, φ удаётся только в случае, когда $B \gg 1$, либо $B \ll 1$.

При $B \ll 1$, решение находим по теории возмущений и получаем

$$f = 1, \quad g = -\frac{3\pi B^2}{4}, \quad \varphi = -B \quad (19)$$

При $B \gg 1$ решение находится с помощью квазиклассики (см. приложение I).

$$f = -1, \quad g = \sqrt{\frac{2\pi}{3B}} \cos\left(3B - \frac{\pi}{4}\right), \quad \varphi = 3B \quad (20)$$

Точные значения f, g, φ получены численным решением системы (17) на ЭВМ.

3. Выразим результат столкновения через f, g, φ . Введём вектор

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_z \\ a_x \\ a_y \\ a_x \\ a_y \end{pmatrix} \quad (21)$$

Состояние Ψ_{out} после столкновения можно выразить через состояние при $t = -\infty$ Ψ_{in} с помощью матрицы S .

$$\Psi_{out} = S \Psi_{in} \quad S S^+ = 1 \quad (22)$$

Матрица S имеет вид

$$S = \begin{vmatrix} R & \mathcal{T} \\ \mathcal{T} & R \end{vmatrix} \quad (23)$$

где R и \mathcal{T} - матрицы 3×3

$$R = \begin{vmatrix} f \cos(B+\varphi) & g \cos B & 0 \\ -g \cos B & f \cos(B+\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & \cos 2B \end{vmatrix} \quad (24)$$

$$\mathcal{T} = i \begin{vmatrix} f \sin(B+\varphi) & g \sin B & 0 \\ -g \sin B & f \sin(B+\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & -\sin 2B \end{vmatrix} \quad (25)$$

Начальное и конечное состояния заданы в системе координат, связанной с плоскостью столкновения. Введём систему координат x_1, y_1, z_1 , в которой ось z_1 , направлена, как и раньше, по скорости, а оси x_1, y_1 составляют угол α с осями X, Y . В этой системе состояние будем задавать век-

тором Φ .

$$\Phi = \begin{pmatrix} a_- \\ a_0 \\ a_+ \\ \bar{a}_- \\ \bar{a}_0 \\ \bar{a}_+ \end{pmatrix} \quad (26)$$

a_-, a_0, a_+ задают амплитуды вероятностей различных проекций момента первого атома на ось Z_1 , совпадающую с направлением скорости, при невозбужденном втором атоме. $\bar{a}_-, \bar{a}_0, \bar{a}_+$ имеют тот же смысл с перестановкой атомов.

Вектора Φ и Ψ связаны унитарным преобразованием

$$\Psi = U\Phi \quad UU^\dagger = 1 \quad (27)$$

Матрица U имеет вид

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{e^{-i\alpha}}{\sqrt{2}} \\ i\frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} & 0 & i\frac{e^{-i\alpha}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (28)$$

Вектор Φ_{in} переводится в Φ_{out} матрицей S'

$$\Phi_{out} = S'\Phi_{in}, \quad S' = U^\dagger S U \quad (29)$$

Нас будет интересовать случай, когда при $t = -\infty$ первый атом был возбужден, и его состояние было полностью неполяризованным, а второй атом находился в основном состоянии. Матрица плотности имела вид

$$\rho_{in} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

Каждый элемент в (30) это матрица 3×3 . При $t = +\infty$ матрица плотности будет

$$\rho_{out} = S' \rho_{in} S'^\dagger \quad (31)$$

Произведя усреднение в (31) по азимутальному углу α , ρ_{out} запишем в виде

$$\rho_{out} = \begin{pmatrix} \rho_1 & \rho_{12} \\ \rho_{12}^\dagger & \rho_2 \end{pmatrix} \quad (32)$$

Легко видеть, что при усреднении по α , мы получим $\rho_1, \rho_2, \rho_{12}$ диагональными. Матричные элементы ρ_1 имеют смысл вероятности найти первый атом в состоянии с проекцией момента на ось Z_1 $-1, +1, 0$, а второй атом в основном состоянии. Матричные элементы ρ_2 имеют аналогичный смысл, когда возбужден второй атом.

Для $\rho_{12}, \rho_1, \rho_2$ выполнено

$$\rho_{12} \rho_{12}^\dagger = \rho_1 \rho_2 \quad \rho_1 + \rho_2 = \frac{1}{3} \quad (33)$$

ρ_{12} описывает корреляции между состоянием, в котором возбужден первый и невозбужден второй атом, и состоянием, в котором возбужден второй и невозбужден первый атом. Так как абсолютная величина ρ_{12} определена через ρ_1 (33), то физически интересна лишь фаза ρ_{12} , которая соответствует относительной фазе состояний и сказывается в интерференционных эффектах, если мы рассмотрим излучение.

С помощью матриц единичного момента

$$M_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad M_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{vmatrix}, \quad M_z = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (34)$$

$\rho_1, \rho_2, \rho_{12}$ можно записать в удобной форме, не связанной с выбором определённой системы координат.

$$\rho_{12} = \left\{ h_{12} \left(\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2} \right) + k_{12} \frac{v_i v_k}{v^2} \right\} M_i M_k \quad (35)$$

где

$$\begin{cases} h_1 = \frac{1}{6} [f^2 \cos^2(B+\varphi) + g^2 \cos^2 B] \\ k_1 = \frac{1}{6} [f^2 \cos^2(B-\varphi) - f^2 \cos^2(B+\varphi) + \cos^2 2B] \end{cases} \quad (36)$$

$$\begin{cases} h_2 = \frac{1}{6} [f^2 \sin^2(B+\varphi) + g^2 \sin^2 B] \\ k_2 = \frac{1}{6} [f^2 \sin^2(B-\varphi) + \sin^2 2B - f^2 \sin^2(B+\varphi)] \end{cases} \quad (37)$$

$$\begin{cases} h_{12} = -\frac{i}{12} [f^2 \sin 2(B+\varphi) + g^2 \sin 2B] \\ k_{12} = -\frac{i}{12} [f^2 \sin 2(B-\varphi) - f^2 \sin 2(B+\varphi) - \sin 4B] \end{cases} \quad (38)$$

h - вероятность того, что проекция момента на \vec{v} равна ± 1 , k - вероятность найти нулевую проекцию момента на \vec{v} .

4. Сечение передачи возбуждения находится интегрированием полной вероятности по прицельному параметру.

$$\sigma = \frac{\pi}{2} \int_0^\infty w(\rho) \rho d\rho \quad (39)$$

(Мы учли, что ρ - половина прицельного параметра).

$$w = 3\rho \rho_2 = \frac{1}{3} \{ \sin^2 2B + 2 \sin^2 B + 2f^2 \cos 2B \sin^2 B \} \quad (40)$$

В области больших прицельных параметров, воспользовавшись результатом теории возмущений (19), получим, что $w(\rho)$ ведёт себя как

$$w \sim \frac{8}{3} \frac{1}{(\rho^2 v)^2}$$

При $\rho \ll \frac{1}{\sqrt{v}}$, где применима адиабатика (20), $w(\rho)$ быстро осциллирует возле $\frac{1}{2}$. Поэтому ясно, что основной вклад в сечение даёт $\rho \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$, то есть $B \sim 1$.

(39) можно записать в виде

$$\sigma = \frac{\mu}{v} \quad (41)$$

где μ - численный коэффициент, равный

$$\mu = \frac{\pi \cdot 2^{10}}{3^{10}} \int_0^\infty \frac{w(B)}{B^2} dB \quad (42)$$

Оценка для μ даёт $\mu \sim 0,2$

Для получения точного значения μ необходимо численное интегрирование. Легко видеть, что если бы мы рассматривали не водород, а другой газ, то необходимо лишь заменить матричные элементы диполь-дипольного взаимодействия, и разница сводится к замене:

$$B \rightarrow \frac{\langle \alpha \rangle^2}{\langle \alpha_i \rangle^2} B \quad (43)$$

где $\langle r \rangle$ - матричный элемент координаты между $1s$ и $2p$ состояниями, а $\langle r_0 \rangle$ - та же величина для водорода. Для сечений имеем

$$\sigma = \frac{\langle r \rangle^2}{\langle r_0 \rangle^2} \frac{\mu}{v} \quad (44)$$

Величина $\langle r \rangle^2$ непосредственно связана с интенсивностью дипольного излучения. Поэтому

$$\sigma = \frac{I}{I_0} \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^4 \frac{\mu}{v}$$

где I - интенсивность дипольного излучения, а ω - частота испускаемых квантов.

Численное интегрирование на ЭВМ даёт для μ величину $\mu = 0,122$

5. Рассмотрим теперь область применимости сделанных приближений. Условие использования адиабатического приближения состоит в том, чтобы скорость ядер была много меньше атомных скоростей.

$$v \ll 1 \quad (45)$$

С другой стороны движение ядер можно описывать классически, когда длина волны много меньше прицельного параметра.

$$\frac{1}{Mv} \ll \rho \quad (46)$$

Так как характерные $\rho \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$, то (44) даёт

$$v \gg \frac{1}{M^2} \quad (47)$$

Траектории ядер можно считать прямыми, если переданный импульс много меньше Mv

$$\Delta p \sim \frac{1}{\rho} \cdot \frac{p}{v} \ll Mv$$

Подставляя $\rho \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$, получим

$$v \gg \frac{1}{M} \quad (48)$$

Мы рассматривали только диполь-дипольное взаимодействие. Следующий член разложения изменил бы энергию интересующих нас термов квазимолекулы на величину $\sim \frac{1}{R^2}$. Это относится также к учёту состояний с одной энергией в уравнениях, так как это соответствует первому приближению в определении энергии, а второе приближение дало бы поправку $\sim \frac{1}{R^2}$. Вероятность перехода возбуждения можно оценить по формуле /2/.

$$W \sim \sin^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta E}{2} dt \right] \quad (49)$$

Учёт члена $\sim \frac{1}{R^2}$ в ΔE дал бы добавку в сечении $\Delta \sigma \sim \sqrt{v}$, чем заведомо можно пренебречь, так как $v \ll 1$.

Сравним время столкновения $\tau \sim \frac{1}{v}$ со временем излучения $\tau_{изл} \sim c^3$, где $c = 137$ - скорость света в атомных единицах.

Для $\rho \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$

$$\frac{\tau}{\tau_{изл}} \sim \frac{1}{c^3 v^{3/2}}$$

и мы видим, что при

$$v \gg \frac{1}{c^2} \approx 10^{-4}$$

время столкновения много меньше времени излучения.

В заключение благодарим В.Сынаха и О.Тумачёк за проведение численных расчётов. Авторы признательны В.Покровскому и А.Чаплику за ценные советы и благодарны В.Соколову и И.Хриповичу за обсуждение работы.

Приложение I

Рассмотрим решение системы (I9) в случае $B \gg 1$.
Введём новые функции \tilde{u}, \tilde{v}

$$\begin{aligned}\tilde{u} &= \xi u - \sqrt{1-\xi^2} v \\ \tilde{v} &= \sqrt{1-\xi^2} u + \xi v\end{aligned}\quad (I.I)$$

Эта замена соответствует переходу в систему координат, связанную с осью квазимолекулы. Уравнения для \tilde{u}, \tilde{v}

$$\begin{aligned}i \frac{d\tilde{u}}{d\xi} &= -c \tilde{u} + \frac{i}{\sqrt{1-\xi^2}} \tilde{v} \\ i \frac{d\tilde{v}}{d\xi} &= -\frac{i}{\sqrt{1-\xi^2}} \tilde{u} + c \tilde{v}\end{aligned}\quad (2.I)$$

Мы ввели

$$c = \frac{3B}{2}$$

Для \tilde{u}, \tilde{v} легко получить уравнения второго порядка (знак над u и v мы будем в дальнейшем опускать)

$$u'' - \frac{\xi}{1-\xi^2} u' + \left[c^2 + \frac{ic\xi}{1-\xi^2} + \frac{1}{1-\xi^2} \right] u = 0 \quad (3.I)$$

$$v'' - \frac{\xi}{1-\xi^2} v' + \left[c^2 - \frac{ic\xi}{1-\xi^2} + \frac{1}{1-\xi^2} \right] v = 0 \quad (4.I)$$

Будем рассматривать решение с начальными данными

$$u(\xi)|_{\xi=-1} = 1, \quad v(\xi)|_{\xi=-1} = 0 \quad (5.I)$$

Для уравнений (3.I), (4.I) имеем

$$u(\xi)|_{\xi=-1} = 1, \quad \sqrt{1-\xi^2} u'(\xi)|_{\xi=-1} = 0 \quad (6.I)$$

$$v(\xi)|_{\xi=-1} = 0, \quad \sqrt{1-\xi^2} v'(\xi)|_{\xi=-1} = -1 \quad (7.I)$$

Построение решения произведём следующим образом:

1. Вблизи $\xi = \pm 1$ находим точное решение уравнений (3.I), (4.I), пригодное для $|1-\xi^2| \ll 1$

2. В средней области решаем (3.I), (4.I) квазиклассически. В случае $c \gg 1$ можно показать, что область применимости квазиклассического решения:

$$|1-\xi^2| \gg \frac{1}{c}$$

3. При $c \gg 1$ существуют области $\frac{1}{c} \ll |1-\xi^2| \ll 1$, в которых применимо как квазиклассическое решение, так и решение, полученное вблизи ± 1 . Поэтому, сшивая эти решения, пройдем от -1 до $+1$.

Вблизи -1 , вводя переменную y

$$y = 1 + \xi \quad (8.I)$$

получим уравнения

$$u'' + \left(\frac{1}{2y} - \frac{1}{4} \right) u' + \left[\frac{1}{2y} (-ic+1) + c^2 + \frac{ic}{4} + \frac{1}{4} \right] u = 0 \quad (9.I)$$

$$v'' + \left(\frac{1}{2y} - \frac{1}{4} \right) v' + \left[\frac{1}{2y} (ic+1) + c^2 - \frac{ic}{4} + \frac{1}{4} \right] v = 0 \quad (10.I)$$

Решениями уравнений (9.I), (10.I), удовлетворяющими (6.I),

(7.1) будут

$$u = e^{(i\lambda + \frac{1}{2})y} \Phi(\alpha, \frac{1}{2}, -2i\lambda y), \quad (11.1)$$

$$v = -e^{(i\lambda + \frac{1}{2})y} \sqrt{2y} \Phi(1-\alpha, \frac{3}{2}, -2i\lambda y), \quad (12.1)$$

где

$$\lambda = \sqrt{c^2 + \frac{ic}{4} + \frac{15}{64}}, \quad \alpha = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{c}{\lambda} - \frac{9i}{8\lambda} \right] \quad (13.1)$$

а $\Phi(\alpha, \gamma, z)$ - вырожденная гипергеометрическая функция.

Квазиклассические решения (3.1) ищем в виде

$$u = \frac{1}{\sqrt{\rho}} e^{iSp} \mathcal{F} (1 - \mathcal{F}^2)^{-\frac{1}{4}}$$

Общее решение имеет вид

$$u = \gamma e^{ic\mathcal{F}} + \delta (1 - \mathcal{F}^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-ic\mathcal{F}} \quad (14.1)$$

Решение для v получается комплексным сопряжением

$$v = \mu e^{-ic\mathcal{F}} + \gamma e^{ic\mathcal{F}} (1 - \mathcal{F}^2)^{-\frac{1}{2}} \quad (15.1)$$

Вблизи $\mathcal{F} = \pm 1$ решения уравнений (3.1), (4.1) имеют вид

$$u = e^{(i\lambda + \frac{1}{2})t} \left[\bar{\mathcal{F}} \Phi\left(\frac{1}{2} - \alpha, \frac{1}{2}, -2i\lambda t\right) + e^{t^{\frac{1}{2}}} \Phi\left(1 - \alpha, \frac{3}{2}, -2i\lambda t\right) \right] \quad (16.1)$$

$$v = e^{(i\lambda + \frac{1}{2})t} \left[\eta \Phi\left(\alpha, \frac{1}{2}, -2i\lambda t\right) + \pi t^{\frac{1}{2}} \Phi\left(\alpha + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -2i\lambda t\right) \right]$$

где $\xi = 1 - \mathcal{F} \quad (17.1)$

Сшивая решения в областях

$$\frac{1}{c} \ll |1 - \xi| \ll 1 \quad (18.1)$$

с помощью асимптотик [1]

$$\Phi(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha - \gamma}$$

получим, оставляя первые члены в разложении по $\frac{1}{c}$

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} e^{2ic} \\ -\sqrt{\frac{\pi}{c}} \cos(2c - \frac{\pi}{4}) \end{pmatrix} \quad (19.1)$$

Возвращаясь к u, v от \tilde{u}, \tilde{v} имеем

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -e^{-2ic} \\ \sqrt{\frac{\pi}{c}} \cos(2c - \frac{\pi}{4}) \end{pmatrix} \quad (20.1)$$

Из (20.1) находим f, g, φ

$$f = -1, \quad g = \sqrt{\frac{2\pi}{3B}} \cos(3B - \frac{\pi}{4}), \quad \varphi = 3B \quad (21.1)$$

Л и т е р а т у р а

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц "Квантовая механика." Физматгиз, 1963. стр. 329-331, стр.692
2. О.Б.Фирсов. ЖЭТФ 21 ; 1001, 1951.
3. М.И.Дьяконов, В.И.Перель, ЖЭТФ, 48, 345, 1964.

Ответственный за выпуск Хриплович И.Б.

Подписано к печати *МНО2616* /8.3.65.

тираж 200

Заказ №

Бесплатно

Отпечатано на ротапинтере в Инсти-
туте ядерной физики СО АН СССР