

ПРЕДПОРОГОВЫЕ РЕЗОНАНСЫ В ТРЕХЧАСТИЧНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

Ф. М. Пенков*

Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 20 октября 1998 г.

Рассмотрена задача резонансного рассеяния легкой частицы на паре тождественных частиц в ефимовском пределе. Получено аналитическое выражение для ширины резонансов. Расчеты сравниваются с решением интегральных уравнений Фаддеева в широкой области масс легкой частицы. Показано, что ширины предпороговых резонансов в амплитуде рассеяния, полученные из интегральных уравнений с потенциалами Ямагучи, хорошо описываются аналитическим выражением, что позволяет использовать это выражение в области масс, недоступной для численных расчетов. Делается вывод о практически неограниченном времени жизни высоковозбужденных отрицательных молекулярных ионов.

1. ВВЕДЕНИЕ

В недавних публикациях [1–3] были рассмотрены экзотические состояния систем из нейтральных атомов и электрона. Эти состояния характеризуются большими (десятки ангстрем) размерами и являются отражением эффектов трехтельной динамики при малых энергиях связи в парах. Так, прямым анализом [1] уравнений Фаддеева был получен эффективный потенциал взаимодействия двух нейтральных атомов в присутствии электрона. Этот потенциал является локальным в области¹⁾

$$\max(r_0) \ll r \ll \min(\kappa^{-1}) \quad (1)$$

(r_0 — радиус действия парных сил, а κ — волновое число связанного или виртуального состояния пары) и содержит не только характерные для эффекта Ефимова [4] дальнедействующие компоненты типа $1/r^2$, но и слагаемые квазикулоновского вида (типа $1/r$), которые и дают основной вклад в спектр отрицательных двухатомных молекулярных ионов с небольшой энергией связи (реальной или виртуальной) электрона и атома. В частности, экспериментальные данные по рассеянию электрона на атоме гелия позволяют сделать заключение о возможности существования связанного состояния системы He_2^- даже в отсутствие атом-атомного взаимодействия [2]. Более того, рассмотрение системы, состоящей из трех нейтральных атомов щелочных металлов и электрона [3], показывает, что порожденное электроном эффективное взаимодействие обеспечивает существование более тысячи связанных состояний. Предполагалось, что подобные системы могут служить началом образования кластеров в сильно разреженных газах. Однако предыдущий анализ не является полным при существовании атом-атомного взаимодействия с энергией связи, большей энергии связи трехчастичной системы. В этом

*E-mail: penkov@thsun1.jinr.dubna.su

¹⁾ В этой работе постоянная Планка $\hbar = 1$.

случае возможны распад системы на молекулу и свободный электрон и превращение связанных состояний трехчастичного комплекса в резонансы со временем жизни, определяемым ширинами этих резонансов.

Настоящая работа посвящена изучению этих ширин в рамках трехчастичной задачи рассеяния легкой частицы на связанной паре тяжелых частиц. При этом, как и в работах [1, 2], будут рассматриваться системы, в которых длины парного рассеяния значительно превышают радиусы действия парных сил, отвечая условиям эффекта Ефимова:

$$\kappa r_0 \ll 1. \quad (2)$$

Энергия связи атомов выбирается конечной, тогда как энергия связи в парах электрон—атом будет положена нулю для упрощения аналитических выкладок. Таким образом, порог перестройки системы совпадает с порогом развала, и вышеупомянутый спектр трехчастичных систем [1, 2] будет относиться к спектру предпороговых ефимовских резонансов. Подобные резонансы, но перед порогом возбуждения, в трехбозонной системе были рассмотрены в работе [5], где отмечалась эквидистантность в логарифмическом масштабе как положений резонансов, так и их ширин.

В настоящей работе рассматривается случай, когда масса одной из частиц много меньше массы двух других. В этом случае мы сталкиваемся с почти классическим движением тяжелых частиц [1], что делает технически невозможным аккуратное численное решение уравнений Фаддеева для соотношений масс электрона и атома. Поэтому, как и в работе [1], численные расчеты проведены для соотношений масс, не превышающих $1/100$, с целью проверки аналитического выражения, связывающего ширины и положение резонанса, которое можно получить при предельно малых радиусах парных сил. Как будет продемонстрировано ниже, аналитическое выражение удовлетворительно описывает очень сложную массовую зависимость ширин резонансов, что позволяет использовать это выражение для оценки ширин резонансов при реальных соотношениях электрон-атомных масс.

2. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Мы будем рассматривать систему трех бесспиновых частиц с массами m_i , где индекс $i = 1, 2, 3$ нумерует частицы, и парными потенциалами v_i , индекс которых отвечает отсутствующей в парной подсистеме частице. При этом тождественные частицы 2 и 3 с массами $m_2 = m_3 = m$ взаимодействуют через потенциал v_1 и образуют одно связанное состояние с энергией $\varepsilon_1 = -\kappa^2/2m_{23}$, где m_{ij} — приведенная масса частиц с номерами i и j . Частица 1 с массой m_1 взаимодействует с частицами 2 и 3 через потенциалы v_3 и v_2 ($v_2 = v_3 = v$) соответственно, которые порождают парные состояния (реальные или виртуальные) с предельно малой энергией связи ($\kappa_2 = \kappa_3 = \kappa \rightarrow 0$). Потенциалы v_i (между частицами j и k) были выбраны в форме сепарабельных потенциалов Ямагучи, действующих только в S -волне:

$$v_i(p, p') = -\frac{4\pi}{m_{jk}} \frac{\beta_i(\beta_i + \kappa_i)^2}{(\beta_i^2 + p^2)(\beta_i^2 + p'^2)}. \quad (3)$$

Знак волнового числа κ определяет связанное ($\kappa > 0$) или виртуальное состояние пары. Параметр β_i определяет радиус действия сил в паре i . В частности, при $\beta_i \gg \kappa_i$

разложение эффективного радиуса в паре i по импульсу относительного движения p ($p \operatorname{ctg} \delta_i = \kappa_i + r_{\text{eff}} p^2/2 + \dots$) дает $r_{\text{eff}} = 3/\beta_i$, что позволяет использовать условие (2) в форме $\kappa_i \ll \beta_i$. Ниже для сокращения записи мы будем использовать сепарабельный потенциал в виде проекторов: $v_i = |\nu_i\rangle\langle\nu_i|$.

Рассмотрим рассеяние частицы 1 на связанной паре тождественных частиц 2 и 3 (2,3) с энергией относительного движения $E_k = k_0^2/2m_{1,23}$, меньшей энергии перестройки системы: $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Здесь $m_{i,jk}$ — приведенная масса частицы i и пары (j, k) . Импульс \mathbf{k}_i всегда будет импульсом относительного движения частицы i и пары (j, k) , а импульс \mathbf{p}_i будет относиться к движению внутри пары (j, k) . В случаях, когда это не вызовет недоразумений, индексы будут опускаться.

Для записи системы интегральных уравнений Фаддеева (см., например, [6]) нам потребуется выражение для произведения парной t -матрицы в трехчастичном пространстве и свободной функции Грина $G^0(Z) = (Z - h_i^0 - h_{(i)}^0)^{-1}$. Гамильтониан свободного движения трех частиц здесь представлен двумя слагаемыми: гамильтонианом свободного движения h_i^0 частицы i и пары (j, k) и гамильтонианом относительного движения в паре $h_{(i)}^0$. Величина $Z = E_k + \varepsilon_1 + i0$ — полная энергия трехчастичной системы. Для сепарабельных потенциалов это произведение может быть представлено в форме [7]

$$tG^0(Z) = v_i|\varphi_i\rangle g_i^0(Z - \varepsilon_i)\langle\bar{\varphi}_i|,$$

включающей волновую функцию связанного состояния пары $|\varphi_i\rangle$ и функцию $\langle\bar{\varphi}_i(Z)|$, определенную в пространстве трех частиц. Здесь и ниже используются выражения для парных функций Грина $g_i^0(x)$ и $g_{(i)}^0(x)$, отвечающих парным гамильтонианам h_i^0 и $h_{(i)}^0$ соответственно. В этих обозначениях проекция функции $\langle\bar{\varphi}_i|$ на $\langle\mathbf{k}_i|$ имеет простой вид:

$$\langle\bar{\varphi}_i| = R_i\langle\varphi_i|v_i G^0(Z - k_i^2/2m_{i,jk}), \quad (4)$$

$$R_i = -\frac{1}{2m_{jk}} \frac{(\beta_i + a_i)^2(a_i + \kappa_i)}{(2\beta_i + \kappa_i + a_i)\langle\varphi_i|v_i|\varphi_i\rangle}, \quad a_i = \sqrt{-2m_{jk}(Z - k_i^2/2m_{i,jk})}.$$

Отметим, что парная t -матрица, отвечающая сепарабельному потенциалу типа Ямагучи, имеет два полюса. Ближний находится в точке связанного состояния пары: $p_i = \pm i\kappa_i$ (на физическом листе для реального связанного состояния и на нефизическом листе для виртуального). Дальний же полюс на нефизическом листе, $p_i = -i(2\beta_i + \kappa_i)$, отвечает за радиус парных сил. Предел нулевого радиуса достигается устремлением β к бесконечности. В этом пределе остается один полюс, и поэтому, вообще говоря, неважно, какой парный потенциал его породил — локальный или нелокальный. Использование сепарабельного потенциала в настоящей работе связано только с упрощением записи интегральных уравнений Фаддеева. При этом именно t -матрицы остаются конечными в пределе $\beta \rightarrow \infty$.

Определив парные t -матрицы, запишем уравнения Фаддеева для рассеяния частицы 1 на связанной паре тождественных частиц 2 и 3 в форме

$$\begin{aligned} T^{\text{el}} &= V_{12}g_2^0(Z - \varepsilon_2)T^r, \\ T^r &= 2V_{21} + 2V_{21}g_1^0(Z - \varepsilon_1)T^{\text{el}} + V_{23}g_3^0(Z - \varepsilon_3)T^r, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$V_{ij} = R_i^{1/2}\langle\varphi_i|v_i G_0(Z)v_j|\varphi_j\rangle R_j^{1/2},$$

а матрицы перехода T^{el} и T^r связаны с физическими амплитудами упругого и неупругого рассеяний простыми соотношениями:

$$f^{el} = -\frac{m_{1,23}}{2\pi} T^{el}(\mathbf{k}_1^{out}, \mathbf{k}_1^{in}), \quad f^r = -\frac{\sqrt{m_{1,23}m_{2,13}}}{2\pi} T^r(\mathbf{k}_2^{out}, \mathbf{k}_1^{in}),$$

в которых входные и выходные импульсы k^{in} и k^{out} находятся на энергетических поверхностях.

Система комплексных интегральных уравнений (5) может быть преобразована в систему действительных до порога перестройки уравнений (см., например, [8]). Так, простая замена после парциального разложения

$$f^{el}(k, k_0) = -\frac{m_{1,23}}{2\pi} K^{el}(k, k_0) (1 + ik_0 f^{el}(k_0, k_0)), \quad (6)$$

$$f^r(k, k_0) = -\frac{\sqrt{m_{1,23}m_{2,13}}}{2\pi} K^r(k, k_0) (1 + ik_0 f^{el}(k_0, k_0))$$

дает систему уравнений для действительных функций K^{el} и K^r , которая и решалась численно. Для того чтобы различать действительные уравнения, содержащие интегралы в смысле главного значения, введем дополнительное обозначение полной энергии $z = \text{Re } Z$. В таких обозначениях действительные интегральные уравнения для K^{el} и K^r совпадают с уравнениями (5) при замене T^{el} на K^{el} , T^r на K^r и Z на z соответственно:

$$K^{el} = V_{12}g_2^0(z - \varepsilon_2)K^r, \quad (7)$$

$$K^r = 2V_{21} + 2V_{21}g_1^0(z - \varepsilon_1)K^{el} + V_{23}g_3^0(z - \varepsilon_3)K^r.$$

Именно эти уравнения для K^{el} и K^r решались численно. Ниже будет показана схема возникновения предпороговых резонансов исходя из уравнений (7).

3. ПРЕДПОРОГОВЫЕ РЕЗОНАНСЫ

Для того чтобы увидеть, как возникают предпороговые резонансы, преобразуем уравнения (7) к виду

$$K^{el} = V_{12}g_2^0(z - \varepsilon_2)K^r, \quad (8)$$

$$K^r = 2V_{21} + Vg_3^0(z - \varepsilon_3)K^r,$$

где эффективный потенциал закрытого (неупругого) по энергии канала имеет вид

$$V = V_{23} + 2V_{21}g_1^0(z - \varepsilon_1)V_{12}. \quad (9)$$

Система уравнений (8) позволяет описать двухканальный процесс рассеяния частицы 1 на паре (2,3) через одноканальное взаимодействие частицы 2 (или 3) с парой частиц 1 и 3 (или 2). Для этого, используя систему уравнений (8), выразим K^{el} через функцию Грина закрытого (неупругого) канала $g_v(x) = (x - h_2^0 - V)^{-1}$:

$$K^{el} = 2V_{12}g_v(z - \varepsilon_2)V_{21}, \quad (10)$$

спектр которой и определяет особенности упругого канала. Так, резонансы в упругом рассеянии отвечают точкам спектра E_t гамильтониана $h_v = h_2^0 + V$ при $E_t > \varepsilon_1 - \varepsilon_2$. Несмотря на очевидность такого утверждения, мы приводим схему построения S -матрицы в резонансном случае из-за некоторых отличительных особенностей резонансов в рассматриваемой системе. Для этого рассмотрим случай, когда энергия z близка к $\varepsilon_2 + E_t$, и выделим из функции Грина g_v сингулярную часть:

$$g_v(z - \varepsilon_2) = \frac{|\Psi_t\rangle\langle\Psi_t|}{\omega} + g_R,$$

где $\omega = z - \varepsilon_2 - E_t$, Ψ_t — волновая функция, отвечающая собственному значению E_t , а g_R — регулярный остаток функции Грина, который обычно опускается. Тогда, используя выражения (10) и связь физической амплитуды с K^{el} (6), получим выражение для S -матрицы ($S = 1 + 2ik_0 f^{el}(k_0, k_0)$)

$$S = \frac{1 - iB}{1 + iB} \frac{\omega + \frac{1}{2} \frac{\Gamma B}{1 + B^2} - i \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{1 + B^2}}{\omega + \frac{1}{2} \frac{\Gamma B}{1 + B^2} + i \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{1 + B^2}},$$

где ширина

$$\Gamma = 2 \frac{k_0 m_{1,23}}{\pi} |\langle k_0 | V_{12} | \Psi_t \rangle|^2, \quad (11)$$

порождаемая сингулярной частью функции Грина, изменяется из-за присутствия регулярной части:

$$B = \frac{k_0 m_{1,23}}{\pi} \langle k_0 | V_{12} g_R V_{21} | k_0 \rangle.$$

Величина сдвига резонанса от E_t тоже определяется этой частью. Именно величина B определяет фоновое рассеяние вдали от резонанса, когда $S = (1 - iB)/(1 + iB)$. Вводя фоновую фазу рассеяния $\delta_f = -\text{arctg } B$, можно переписать выражение для S -матрицы в виде

$$S = \exp(2i\delta_f) \frac{\omega - i \frac{\Gamma}{4} - \frac{\Gamma}{4} (\sin(2\delta_f) + i \cos(2\delta_f))}{\omega + i \frac{\Gamma}{4} - \frac{\Gamma}{4} (\sin(2\delta_f) - i \cos(2\delta_f))}. \quad (12)$$

Необходимо отметить, что выражение (12) получено без приближений и является просто удобной формой записи S -матрицы. Однако брейт-вигнеровская параметризация — выделение резонансной энергии и ширины резонанса — накладывает условие на ширины. Они должны быть достаточно малы, чтобы можно было рассматривать изолированный резонанс. При этом «истинная» ширина резонанса $\tilde{\Gamma}$ определяется не только величиной Γ , но и фазой фонового рассеяния: $\tilde{\Gamma} = \Gamma \cos^2(\delta_f)$. Именно поэтому выражение для Γ содержит плоские волны, а не волновые функции состояния рассеяния в некотором фоновом потенциале. Ниже будет рассматриваться выражение для величины Γ , которая всегда больше или равна $\tilde{\Gamma}$. Другие особенности представления S -матрицы в форме (12) достаточно очевидны, и их обсуждение выходит за рамки настоящей работы.

4. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ЗАКРЫТОГО КАНАЛА

Нас интересует серия резонансов, отвечающая эффекту Ефимова, т. е. ситуация, когда выполняются условия (2) и спектр гамильтониана h_v сгущается около нуля. В этом случае потенциал V значительно упрощается и для целей исследования предпороговых резонансов достаточно рассмотреть S -волновую часть эффективного потенциала при малых энергиях, или, точнее, в области импульсов $k \gg \sqrt{-2m_{2,13}z}$, где решения уравнения Шредингера слабо зависят от энергии. При таком дополнительном условии ($\beta \rightarrow \infty$, $z \rightarrow 0$) слагаемые эффективного потенциала (9), представляющие собой «обменный» потенциал $V_{ex} \equiv V_{23}$ и два «треугольных» (с внутренним интегрированием) $V_{tr} \equiv V_{21}g_1^0(z - \varepsilon_1)V_{21}$, могут быть записаны в виде

$$V_{ex}^0(k, k') = -\frac{\pi}{2\sqrt{kk'}\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{m_{3,12}m_{12}}} \ln \left(\frac{k^2 + k'^2 + 2\lambda_1 kk'}{k^2 + k'^2 - 2\lambda_1 kk'} \right), \quad (13)$$

$$V_{tr}^0(k, k') = -\frac{1}{\sqrt{kk'}(2\lambda_1)^2} \frac{m_{12}}{m_{23}^2} \text{v.p.} \int_0^\infty \frac{dt}{t-a} L(t, k)L(t, k'), \quad (14)$$

$$L(t, k) = \ln \left(\frac{\gamma t^2 + k^2 + 2\lambda_2 kt}{\gamma t^2 + k^2 - 2\lambda_2 kt} \right), \quad a = \kappa_1 \sqrt{\frac{m_{1,23}}{m_{32}}}, \quad \lambda_i = \sqrt{\frac{m_{ij}m_{ik}}{m_i^2}}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{m_{23}}{m_{12}}}.$$

Верхний индекс 0 в этих выражениях означает, что эффективное взаимодействие берется при $z = 0$. Обменный потенциал V_{ex}^0 отвечает рассеянию частицы 2 (или 3) на связанной паре частиц 1 и 3 (или 2) при нулевой энергии связи в паре и является «классическим» потенциалом, порождающим ефимовские состояния. Решения в поле такого потенциала, исследованные для трехбозонной системы [7], совпадают с решениями в поле локального потенциала типа $-(\mu^2 + 0.25)/2m_{2,13}\rho^2$ (ρ – координата Якоби относительного движения частицы и комплекса) с константой связи μ , удовлетворяющей трансцендентному уравнению. Ниже мы получим такое уравнение для полного потенциала взаимодействия. Заметим, что потенциал V_{ex}^0 ведет себя как $1/k$ и допускает решение в форме k^s . Потенциал V_{tr}^0 имеет более сложный вид и допускает такие решения лишь в области импульсов, где можно пренебречь величиной a в знаменателе подынтегрального выражения (14). Для того чтобы увидеть это, будем искать решения уравнения Шредингера с нулевой энергией в виде

$$\Psi_t = k^{i\mu - 5/2}.$$

Определим величину Π :

$$\Pi(k) = -\frac{2m_{2,13}}{k^{i\mu - 1/2}} \int V^0(k, t)t^{i\mu - 5/2} \frac{d^3t}{(2\pi)^3},$$

и будем писать ее с индексом, соответствующим потенциалу. Смысл величины Π простой — это отношение вкладов потенциальной и кинетической энергий в уравнение Шредингера. Тогда уравнение Шредингера запишется в виде:

$$\Pi_{ex} + 2\Pi_{tr} = 1.$$

Вклад обменного потенциала выражается через интеграл

$$\Pi_{ex} = \frac{1 + \zeta_1^2}{\zeta_1} I_1, \quad I_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} x^{i\mu-1} \ln \left(\frac{1 + 2\lambda_1 x + x^2}{1 - 2\lambda_1 x + x^2} \right) dx,$$

($\zeta_i = \sqrt{m_j m_k / m_i M}$, M — полная масса), который существует при $-1 < \text{Im } \mu < 1$ и берется по вычетам после интегрирования по частям:

$$I_1 = \frac{\text{sh}(\mu \text{arctg } \zeta_1)}{\mu \text{ch} \left(\frac{\pi}{2} \mu \right)}.$$

Вводя функцию Φ соотношением

$$\Phi_i(\mu) = \frac{1 + \zeta_i^2}{\zeta_i} \frac{\text{sh}(\mu \text{arctg } \zeta_i)}{\mu \text{ch} \left(\frac{\pi}{2} \mu \right)},$$

получаем

$$\Pi_{ex} = \Phi_1(\mu).$$

Функция $\Pi_{tr}(k)$ после простых преобразований выражается через определенную выше функцию Φ и новую функцию $\tilde{\Phi}$:

$$\Pi_{tr}(k) = \Phi_2(\mu) \tilde{\Phi},$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{1 + \zeta_2^2}{2\pi\zeta_2} \text{v.p.} \int_0^{\infty} x^{i\mu-1} \frac{kx}{kx - a\gamma} \ln \left(\frac{1 + 2\lambda_2 x + x^2}{1 - 2\lambda_2 x + x^2} \right) dx.$$

Для анализа этого интеграла заметим, что он легко переводится в контурные интегралы вокруг двух логарифмических разрезов, причем контуры интегрирования всегда можно выбрать так, что либо $|x| \geq 1$, либо $|x| \leq 1$. Это позволяет раскладывать знаменатель подынтегрального выражения в ряд либо при больших ($k > a\gamma$), либо при малых импульсах ($k < a\gamma$). В первом случае получаем главный член $\tilde{\Phi} = \Phi_2$, во втором — $\tilde{\Phi} \propto k/\kappa_1$. Поэтому мы можем записать трансцендентные уравнения для μ в двух асимптотических областях. С учетом того, что $\Pi_{ex} + 2\Pi_{tr} = 1$, получаем

$$\Phi_1(\mu) = 1, \quad k \ll \sqrt{\frac{m_{1,23}}{m_{12}}} \kappa_1, \quad (15)$$

$$\Phi_1(\mu) + 2\Phi_2^2(\mu) = 1, \quad k \gg \sqrt{\frac{m_{1,23}}{m_{12}}} \kappa_1. \quad (16)$$

Из-за четности функции Φ по μ волновая функция Ψ_i имеет вид линейной комбинации $k^{\pm i\mu-5/2}$, совпадая с фурье-образом волновой функции в поле локального потенциала

$$V_{ef}(\rho) = -\frac{\mu^2 + 0.25}{2m_{2,13}\rho^2}, \quad (17)$$

когда $|V| \gg |z|$, с разными константами связи при малых и больших ρ . Решения в поле потенциала типа $1/\rho^2$ хорошо известны. В частности, уровни энергии подчиняются соотношению $E_{n-1}/E_n = \eta$, в котором величина η зависит только от μ :

$$\eta = \exp(2\pi/\mu), \quad (18)$$

и либо уходят в минус бесконечность, отражая ситуацию падения на центр, отмеченную еще в работе Томаса [9], либо сгущаются к нулю, составляя эффект Ефимова [4]. В нашем случае глубокие уровни отвечают малым расстояниям и определяются значением величины μ_2 , удовлетворяющей уравнению (16). Мелкие же уровни с $z > \varepsilon_1$ в канале рассеяния порождают резонансы и определяются значениями μ_1 из уравнения (15).

Несложный анализ уравнений (15) и (16) показывает, что μ_2 экспоненциально быстро стремится к μ_1 при $m_1/m_2 \rightarrow 0$, а сама величина μ_1 в этом пределе хорошо описывается разложением

$$\mu_{as} = c\zeta_1 + \frac{c}{(c+1)\zeta_1} + O\left(\frac{1}{\zeta_1^3}\right) \quad (19)$$

($\zeta_1 = \sqrt{m_2 m_3 / m_1 M} \gg 1$), совпадая с пределом, найденным ранее [1]. Используемая выше константа $c = 0.5671\dots$ удовлетворяет уравнению $c = \exp(-c)$. Чтобы избежать выкладок, имеющих второстепенное значение, здесь приводится таблица значений величин μ в зависимости от отношения масс легкой и тяжелых частиц (табл. 1). Быстрая сходимость μ_2 к μ_1 показывает, что второе слагаемое в уравнении (16) становится пренебрежимо малым (отличие решений в шестом знаке при $m_2/m_1 = 100$), позволяя в пределе $m_1/m_2 \ll 1$ отбросить второе слагаемое в потенциале V . Для демонстрации этой малости в последней строке табл. 1 приводится отношение потенциальных энергий $\Pi_{ex}(\mu_1)$ и $\Pi_{tr}(\mu_1)$.

Таблица 1

Зависимость μ_1, μ_2, μ_{as} от масс

m_2/m_1	10	20	30	50	70	100
μ_1	1.379051	1.893909	2.284713	2.906777	3.415826	4.061110
μ_2	1.468174	1.919444	2.293865	2.908434	3.416219	4.061172
μ_{as}	1.430016	1.907906	2.289978	2.908096	3.416437	4.061489
Π_{tr}/Π_{ex}	$1.12 \cdot 10^{-1}$	$2.20 \cdot 10^{-2}$	$6.41 \cdot 10^{-3}$	$9.01 \cdot 10^{-4}$	$1.81 \cdot 10^{-4}$	$2.38 \cdot 10^{-5}$

Таким образом, можно считать, что волновая функция Ψ_t для очень легкой частицы 1 в большой области ($k \gg \sqrt{-2m_{2,13}z}$) импульсов имеет вид линейной комбинации функций $k^{\pm i\mu-5/2}$ с величиной $\mu = \mu_1$. Этой импульсной асимптотики достаточно для вычисления матричных элементов, входящих в определение Γ , поскольку в эти интегралы основной вклад дает область импульсов $\sim \kappa_1$. Трудность нормировки такой функции можно преодолеть простым приемом. Как указывалось выше, наша волновая функция отвечает движению в эффективном потенциале (17). Решения же в поле этого потенциала хорошо известны: $\Psi_t(\rho) \sim K_{i\mu}/\sqrt{\rho}$, т.е. выражаются через модифицированные функции Бесселя. Можно нормировать Ψ_t , получить ее фурье-образ и найти множители перед главными асимптотическими членами $k^{\pm i\mu-5/2}$. Такая схема несколько громоздка, но дает вполне разумный результат, который в пределе легкой массы частицы 1 совпадает с точным результатом. Точный же результат (при нулевых парных

силах) можно получить быстрее. Дело в том, что можно найти решение интегрального уравнения с потенциалом V_{ex} во всей импульсной области, т. е. не полагая $z = 0$, используя преобразование Меллина, как это было сделано в работах [10, 11] при изучении свойств уравнения Скорнякова—Тер-Мартиросяна [12]. Более того, в работе [11] найдена приближенно волновая функция системы трех бозонов с нулевыми парными силами, которая при нулевых энергиях связи в подсистемах становится точной. Уравнение же Липпмана—Швингера с потенциалом V_{ex} во всей импульсной области для функции $\psi = k(k^2 - 2m_{2,13}z)^{3/4}\Psi_t$ после введения безразмерной переменной $t = k/\kappa_t$ ($\kappa_t = \sqrt{-2m_{2,13}z}$) отличается от уравнения Скорнякова—Тер-Мартиросяна для трех бозонов лишь множителем 2 и другим значением массовых констант λ_1 и $\alpha = \sqrt{m_{13}/m_{2,13}}$:

$$\psi(t) = \frac{1}{2\pi\lambda_1\alpha} \int_0^\infty dt' \ln \left(\frac{t^2 + t'^2 + 2\lambda_1 tt' + \alpha^2}{t^2 + t'^2 - 2\lambda_1 tt' + \alpha^2} \right) \frac{1}{\sqrt{t'^2 + 1}} \psi(t'). \quad (20)$$

Поэтому уравнение (20) тоже имеет аналитическое решение, которое можно получить, используя преобразование Меллина. Здесь мы сразу приводим конечный ответ:

$$\psi(t) = A \sin \left(\mu \ln \left(t + \sqrt{1 + t^2} \right) \right),$$

в справедливости которого можно убедиться простой подстановкой ψ в уравнение (20). При этом константа μ удовлетворяет, как и прежде, уравнению (15), а константа A определяется нормировкой. Интегральное уравнение (20) разрешимо при всех энергиях, однако спектр можно фиксировать, накладывая связь на коэффициенты перед $\sin(\mu \ln k)$ и $\cos(\mu \ln k)$ при больших k [10, 11]:

$$\sin(\mu \ln \kappa_t) = b \cos(\mu \ln \kappa_t).$$

Произвольная же константа b однозначно определяет волновое число $\kappa_t^{(n)}$ для уровня с номером n :

$$\kappa_t^{(n)} = \exp \left(\pi n / \mu + \operatorname{arctg}(b) / \mu \right).$$

Полученный таким образом спектр удовлетворяет соотношению (18), демонстрируя как эффект падения на центр при больших положительных n , отмеченный в работе [11], так и эффект Ефимова (логарифмическое сгущение уровней возле $z = 0$) при больших отрицательных n , обнаруженный позже и другим методом [4].

Нормируя волновую функцию Ψ_t по всему импульсному пространству, получаем окончательный ответ для волновой функции закрытого канала:

$$\Psi_t(k) = \frac{2\pi}{\sqrt{\kappa_t^3 (1 - \pi\mu / \operatorname{sh}(\pi\mu))}} \frac{1}{t(1 + t^2)^{3/4}} \sin \left(\mu \ln \left(t + \sqrt{1 + t^2} \right) \right). \quad (21)$$

5. ШИРИНЫ ПРЕДПОРОГОВЫХ РЕЗОНАНСОВ

Как уже отмечалось выше, ширина резонанса $\bar{\Gamma}$ зависит от фазы фонового рассеяния и величины Γ (11), которая определяется через матричные элементы от потенциала

V_{12} , связывающего открытый и закрытый каналы упругого рассеяния. Фоновая фаза зависит от деталей парных сил на малых расстояниях и не может быть рассмотрена (не имеет предела) в пределе нулевых радиусов сил. Величина Γ , служащая верхней границей ширины резонанса, в этом пределе ($\beta \rightarrow \infty$) может быть рассчитана. Заметим, что из равенства

$$E_k + \varepsilon_1 = E_r$$

для малых $|E_r|$ (по сравнению с $|\varepsilon_1|$) можно положить

$$k_0 \rightarrow \kappa_1 \sqrt{m_{1,23}/m_{23}}.$$

Кроме того, из-за простой связи

$$E_r = E_t + \Gamma \sin(2\delta_f)/4$$

(см. (12)) и малых ширин Γ в приведенных ниже выражениях полагается $E_r = E_t$. Тогда, с учетом определения V_{12} и выражения для ширины (11), после тривиальных преобразований можно записать

$$\frac{\Gamma}{|E_t|} = 32\pi \left(\frac{m_{2,13}}{m_{23}} \right)^2 |J|^2, \quad (22)$$

где величина J определяется через интеграл по всему импульсному пространству:

$$J = \frac{\kappa_1}{\kappa_t} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{(k^2 + \kappa_t^2)^{1/4}}{\kappa_1^2 + k^2 - \mathbf{k}_0 \mathbf{k} + k_0^2/4} \Psi_t(k).$$

Используя явный вид волновой функции закрытого канала (21), этот интеграл можно взять аналитически. Поскольку процедура взятия интеграла J достаточно громоздка, здесь будет приведена лишь краткая схема. После тривиального углового интегрирования и приведения к безразмерному виду $t = k/\kappa_t$ необходимо сделать замену переменных

$$t = (x^2 - 1)/2x,$$

которая избавляет выражения от радикалов и переводит интервал интегрирования от $(0, \infty)$ к $(1, \infty)$. Подынтегральное выражение инвариантно относительно преобразования $x \rightarrow 1/x$, что позволяет вернуться к интервалу $(0, \infty)$. После интегрирования по частям можно избавиться от логарифмической функции, а интеграл I типа

$$I = \int_0^\infty x^{i\mu} \frac{Q_1(x)}{Q_2(x)} dx,$$

где Q_1 и Q_2 — полиномы, обеспечивающие сходимость в нуле и на бесконечности, берется стандартным приемом: интеграл по верхнему берегу степенного разреза выражается через контурный интеграл вокруг разреза. Последний же можно замкнуть на бесконечности и выразить через вычеты в нулях полинома Q_2 .

После интегрирования по описанной схеме можно получить выражение для J :

$$J = \frac{1}{2\sqrt{1 - \pi\mu/\text{sh}(\pi\mu)}} \frac{\text{sh}(\mu \arctg(\zeta_2))}{\mu\zeta_2} \frac{\sin\left(\mu \ln\left(2\sqrt{\varepsilon_1/E_t}\right)\right)}{\text{ch}(\pi\mu/2)}. \quad (23)$$

Отметим замечательные особенности выражений (22) и (23). Во-первых, относительная ширина $\Gamma/|E_t|$ не зависит от номера резонанса, так как положения резонансов связаны соотношением (18), которое приводит к тому, что для резонансов с номерами n_i и n_{i+k} величины J различаются лишь множителем $(-1)^k$. Поэтому в логарифмическом масштабе эквидистантны не только положения резонансов, но и их ширины. Во-вторых, относительная ширина резонансов экспоненциально быстро уменьшается с уменьшением массы частицы 1. Чтобы убедиться в этом, запишем предельное ($m_1/m_2 \ll 1$) выражение для относительной ширины. С учетом (19) и того что

$$\left(\frac{\text{sh}(\mu \arctg(\zeta_2))}{\mu\zeta_2}\right)^2 \rightarrow 1.024\dots,$$

этот предел можно представить в форме

$$\frac{\Gamma}{|E_t|} \simeq 32\pi 1.024 \exp\left(-\pi c \sqrt{\frac{m_2}{2m_1}}\right) \sin^2\left(\frac{\mu}{2} \left(\ln 4 \frac{\varepsilon_1}{E_t}\right)\right). \quad (24)$$

Поскольку же наблюдаемая ширина $\tilde{\Gamma}$ всегда меньше Γ , можно сделать оценку сверху для ширины любого предпорогового резонанса:

$$\tilde{\Gamma} < 103.0 |E_r| \exp\left(-1.260 \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}\right), \quad (25)$$

где возвращено обозначение E_r , поскольку различие E_t и E_r экспоненциально мало. Выражение (25) позволяет сделать оценки времен жизни сильно возбужденных отрицательных ионов двухатомных молекул. Уже для протон-электронного соотношения масс и явно завышенного масштаба энергии связи комплекса ($|E_r|$) в 1 эВ время жизни резонанса ($1/\tilde{\Gamma}$) больше 10^6 с и превосходит все возможные релаксационные времена в газах. Интерес же представляют системы с малой энергией сродства электрона с атомом. Как отмечалось во Введении, такими системами могут быть отрицательные ионы молекул щелочных металлов. Подставляя значение отношения масс для лития, получим время 10^{40} с, большее времени жизни Вселенной.

6. ЧИСЛЕННЫЕ РЕШЕНИЯ

Для демонстрации справедливости аналитических выкладок были проведены численные решения системы интегральных уравнений Фаддеева (7), описывающих рассеяние частицы 1 на паре тождественных частиц (2,3). Вычисления проводились по схеме, описанной ранее [5] и позволяющей рассматривать рассеяние максимально близко к порогу реакции. Для наших расчетов нет необходимости приближаться рекордно близко к порогу, так как константа связи μ велика, и мы ограничились областью от нулевой кинетической энергии ($z = \varepsilon_1$) до энергии, отстоящей от порога перестройки на 10^{-8} МэВ ($z - \varepsilon_2 = -10^{-8}$ МэВ). При этом порог перестройки отличался от трехчастичного порога на 10^{-15} МэВ ($\varepsilon_2 = -10^{-15}$ МэВ), а энергия связи в паре (2,3) была $\varepsilon_1 = -10^{-3}$ МэВ.

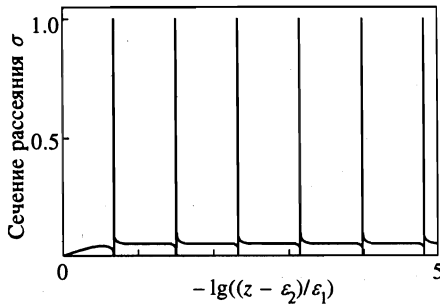


Рис. 1

Рис. 1. Сечение рассеяния для $m_2/m_1 = 65$

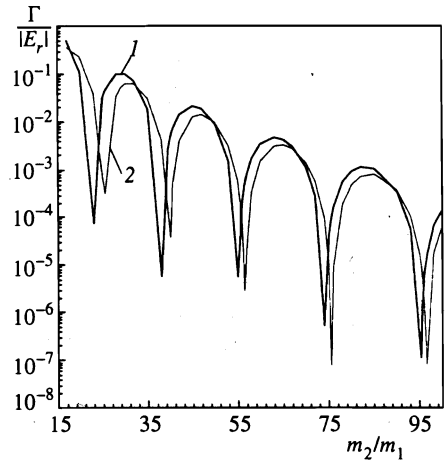


Рис. 2

Рис. 2. Относительные ширины резонансов. 1 — численное решение уравнений Фаддеева, 2 — аналитическая зависимость

Массы частиц 2 и 3 равнялись нуклонной массе. Константа β , определяющая радиусы действия сил, была выбрана одинаковой для всех парных потенциалов и равнялась 0.72 фм^{-1} . Единицы измерения энергии (МэВ) и расстояний (фм) отражают использование потенциалов Ямагучи с параметрами ядерной задачи (массы и радиусы действия) и характерной потенциальной энергией в несколько десятков МэВ. Таким образом, для численного счета выбирались малые, но конечные значения радиусов действия парных сил и энергии связи в парах. Поскольку задача полностью определяется отношением размерных величин, результаты вычислений справедливы и для атомных единиц. Так, условия (2) для пар

$$\kappa_1/\beta_1 \simeq 6.7 \cdot 10^{-3}, \quad \kappa_2/\beta_2 = 10^{-6} \sqrt{m_1/m_2} \kappa_1/\beta_1$$

при атомном масштабе радиусов действия сил в 1 \AA ($r_0 \simeq 3/\beta$) отвечают длине атом-атомного рассеяния ($1/\kappa_1$) примерно в 50 \AA .

На рис. 1 показаны сечения рассеяния, нормированные на унитарный предел в S -волне: $\sigma_{un} = 4\pi/k_0^2$, для соотношений масс $m_2/m_1 = 65$. Поскольку резонансы сгущаются к $z = 0$, энергия отложена в логарифмическом масштабе. На рисунке хорошо видна эквидистантность положений резонансов. К сожалению, даже максимальная ширина в этой области масс частицы 1 (см. рис. 2) остается очень малой, и резонансы выглядят практически прямыми линиями. В табл. 2 указаны положения первых шести резонансов, отношение энергии предыдущего резонанса к энергии с текущим номером, т. е. величина η_{calc} , и относительные ширины резонансов. Для сравнения укажем величины μ_1 и μ_2 , являющиеся решением уравнений (15) и (16) соответственно:

$$\mu_1 = 3.29589\dots, \quad \mu_2 = 3.29654\dots$$

Им отвечают величины η (см. выражение (18)):

$$\eta(\mu_1) = 6.72823\dots, \quad \eta(\mu_2) = 6.72608\dots$$

Из таблицы видно, что уже отношение энергий второго резонанса к третьему лежит в области аналитических значений η с точностью до четвертого десятичного знака. Отметим, что первый резонанс лежит достаточно далеко от порога. Последняя колонка демонстрирует постоянство относительных ширин в зависимости от номера резонанса. Так, уже с третьего резонанса изменения происходят в четвертом десятичном знаке. Таким образом, рис. 1 и табл. 2 хорошо подтверждают логарифмическую эквидистантность как положений резонансов, так и их ширин, проявляющуюся в постоянстве относительных ширин резонансов.

Таблица 2

Параметры первых шести резонансов при $m_2/m_1 = 65$

N	E_r/ε_1	η_{calc}	$\Gamma/ E_r $
1	$2.1236 \cdot 10^{-1}$		$4.413 \cdot 10^{-3}$
2	$3.1480 \cdot 10^{-2}$	6.746	$4.246 \cdot 10^{-3}$
3	$4.6787 \cdot 10^{-3}$	6.728	$4.208 \cdot 10^{-3}$
4	$6.9540 \cdot 10^{-4}$	6.728	$4.202 \cdot 10^{-3}$
5	$1.0338 \cdot 10^{-4}$	6.727	$4.201 \cdot 10^{-3}$
6	$1.5369 \cdot 10^{-5}$	6.726	$4.200 \cdot 10^{-3}$

Для того чтобы продемонстрировать, насколько верно выражения (22) и (23) описывают аналитическую связь ширин резонансов и их положений при небольших отношениях масс m_1/m_2 , на рис. 2 отложены относительные ширины, полученные из численных решений интегральных уравнений (толстая линия) и из выражения (22) при подстановке в него численно найденных значений энергий резонансов (тонкая линия). Видно, что аналитическая зависимость ширин резонансов от масс в целом передает ход кривой, хотя и имеет небольшой фазовый сдвиг. Отметим некоторые особенности зависимости ширин от массы легкой частицы 1. Во-первых, ширина резонанса не является монотонной функцией массы. Во-вторых, максимумы ширин резонансов экспоненциально убывают с уменьшением массы частицы 1, отвечая оценке (24). Так, для приведенной на рисунке области массовых изменений (m_2/m_1), от 15 до 100, ширины резонансов убывают на три десятичных порядка. Сильная немонотонность относительных ширин позволяет увидеть отличие аналитической оценки от результатов численного счета. Если оценивать по острым локальным минимумам, то «наблюдаемый» фазовый сдвиг составляет для первого минимума две массовые единицы и монотонно убывает до 1.25 единицы в области последнего на рисунке минимума ($m_2/m_1 \sim 95$). Таким образом, отличие аналитических и численных оценок уменьшается с уменьшением массы m_1 .

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассматривая задачу оценки времен жизни ефимовских состояний отрицательных ионов двухатомных молекул, мы свели ее к задаче рассеяния легкой частицы (электрона) на связанной паре двух тяжелых частиц (молекулы) при выполнении условия (2).

Такая трехтельная постановка задачи, с одной стороны, позволяет получить аналитические выражения, связывающие ширины и положения резонансов, а с другой — проверить их непосредственным численным решением уравнений Фаддеева. При этом впервые были рассчитаны ефимовские резонансы перед порогом перестройки системы трех частиц.

Вывод, следующий из этого рассмотрения, заключается в утверждении, что времена жизни обсуждаемого в работах [1–3] нового класса молекулярных состояний позволяют считать их связанными состояниями для всех видов физических процессов.

Необходимо подчеркнуть, что предположение о существовании реальных систем, удовлетворяющих условию (2), опирается на известные длины электрон-атомных и атом-атомных рассеяний, достигающих десятков и даже сотен ангстрем. При этом опытные значения эффективных радиусов взаимодействий неизвестны, и лишь размерные соображения (атомные размеры), а также успешный опыт использования потенциалов нулевого радиуса в атомной физике (см., например, монографию [13]) являются обоснованием гипотезы о выполнении условия (2) для реальных молекулярных систем.

Работа выполнена в рамках проекта ISTC K-40.

Литература

1. Ф. М. Пеньков, ЖЭТФ **106**, 1046 (1994).
2. Ф. М. Пеньков, ЖЭТФ **109**, 721 (1996).
3. Ф. М. Пеньков, ЖЭТФ **111**, 1229 (1997).
4. В. Ефимов, ЯФ **12**, 1080 (1970).
5. Ф. М. Пеньков, Н. Ж. Такибаев, ЯФ **57**, 1300 (1994).
6. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, Москва (1985), с. 69.
7. Н. Ж. Такибаев, Ф. М. Пеньков, ЯФ **50**, 373 (1989).
8. В. Б. Беляев, *Лекции по теории малочастичных систем*, Энергоатомиздат, Москва (1986), с. 37.
9. L. H. Thomas, Phys. Rev. **47**, 903 (1935).
10. Г. С. Данилов, ЖЭТФ **40**, 498 (1961).
11. Р. А. Минлос, Л. Д. Фаддеев, ЖЭТФ **41**, 1850 (1961).
12. Г. В. Скорняков, К. А. Тер-Мартirosян, ЖЭТФ **31**, 775 (1956).
13. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, изд.-во Ленинградского университета (1975).