

# КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

## ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.141

### АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ ДВУХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

В. А. Борзилов, В. В. Комаров, А. М. Попова  
(НИИЯФ)

Получено асимптотическое выражение для собственной функции нерелятивистской системы двух бесспиновых частиц во внешнем поле. Для анализа использована волновая функция в координатном представлении, полученная в рамках метода интегральных уравнений многочастичной теории рассеяния.

Предполагается, что оператор энергии имеет вид

$$H = H_0 + V_1 + V_2 + V_{12},$$

$$H_0 = H_{01} + H_{02} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2, \quad (1)$$

где  $V_i$  ( $i=1, 2$ ) — оператор взаимодействия частицы  $i$  с полем;  $V_{12}$  — оператор взаимодействия частиц между собой. Операторы  $V_i$  и  $V_{12}$  вещественны и неположительны.

Как было показано в [1], решение уравнения Шрёдингера

$$H\Psi(r_1, r_2, -E_0) = -E_0\Psi(r_1, r_2, -E_0), \quad (2)$$

где  $r_i$  — радиус-вектор частицы  $i$ , может быть представлено в виде суммы двух функций:

$$\Psi(r_1, r_2, -E_0) = \Psi_{(1)(2)}(r_1, r_2, -E_0) + \Psi_{(12)}(r_1, r_2, -E_0) \quad (3)$$

которые могут быть найдены из системы уравнений

$$\begin{aligned} \Psi_{(1)(2)}(r_1, r_2, -E) &= \int dr'_1 dr'_2 \langle r_1 r_2 | G_{(1)(2)}(-E_0) (V_1 + V_2) | r'_1 r'_2 \rangle \times \\ &\times \Psi_{(12)}(r'_1, r'_2, -E_0), \\ \Psi_{(12)}(r_1, r_2, -E_0) &= \int dr'_1 dr'_2 \langle r_1 r_2 | G_{(12)}(-E_0) V_{12} | r'_1 r'_2 \rangle \times \\ &\times \Psi_{(1)(2)}(r'_1, r'_2, -E_0). \end{aligned} \quad (4)$$

Операторы  $G_{(1)(2)}$  и  $G_{(12)}$  являются операторами Грина для асимптотических гамильтонианов  $H_{(1)(2)}$  и  $H_{(12)}$ , которые соответствуют двум каналам рассеяния:

$$G_{(1)(2)}(-E_0) = [H_{(1)(2)} + E_0]^{-1}, \quad G_{(12)}(-E_0) = [H_{(12)} + E_0]^{-1}, \quad (5)$$

$$H_{(1)(2)} = [H_{01} + V_1] + [H_{02} + V_2] = h_1 + h_2,$$

$$H_{(12)} = [H_{012} + V_{12}] + H_0^{(12)} = h_{12} + h^{(12)}. \quad (6)$$

Здесь  $H_{012}$  — оператор кинетической энергии относительного движения частиц, а  $H_0^{(12)}$  — оператор кинетической энергии движения центра масс частиц.

Исследование асимптотик для ядер операторов  $G_{(1)(2)}$  и  $G_{(12)}$  начнем с определения операторов Грина для независимых подсистем:

$$\begin{aligned} g_i(\varepsilon) &= [h_i - \varepsilon]^{-1}, \quad g_{0i}(\varepsilon) = [H_{0i} - \varepsilon]^{-1}, \quad i = 1, 2, \\ g_{12}(\varepsilon) &= [h_{12} - \varepsilon]^{-1}, \quad g_{012}(\varepsilon) = [H_{012} - \varepsilon]^{-1}, \\ g_0^{(12)}(\varepsilon) &= [H_0^{(12)} - \varepsilon]^{-1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Поскольку операторы  $G_{(1)(2)}$  и  $G_{(12)}$  определяют системы, состоящие из двух независимых подсистем, их можно [1] представить в виде

$$G_{(1)(2)}(-E_0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g_1(\varepsilon) g_2(-E_0 - \varepsilon),$$

$$G_{(12)}(-E_0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g_{12}(\varepsilon) g_0^{(12)}(-E_0 - \varepsilon). \quad (8)$$

Предположим, что каждый из операторов  $h_i$  ( $i=1, 2$ ),  $h_{12}$  является самосопряженным, имеет единственное собственное значение при энергии  $(-E_i)$  и  $(-E_{12})$  соответственно и непрерывный спектр на полуоси  $[0, +\infty]$ . Обозначим через  $P_i$  и  $P_{12}$  проекторы на соответствующие  $(-E_i)$  и  $(-E_{12})$  собственные подпространства, а через  $\widehat{g}_i(\varepsilon)$  и  $\widehat{g}_{12}(\varepsilon)$  — ограниченные, аналитические по  $\varepsilon$  операторы.

В соответствии с теорией самосопряженных операторов  $g_i(\varepsilon)$  и  $g_{12}(\varepsilon)$  имеют следующие спектральные представления [2]:

$$g_i(\varepsilon) = g_{0i}(\varepsilon) + \frac{P_i}{\varepsilon + E_i} + \widehat{g}_i(\varepsilon), \quad i = 1, 2,$$

$$g_{12}(\varepsilon) = g_{012}(\varepsilon) + \frac{P_{12}}{\varepsilon + E_{12}} + \widehat{g}_{12}(\varepsilon). \quad (9)$$

В общем случае, когда операторы  $h_i$  и  $h_{12}$  имеют по несколько собственных значений, второе слагаемое в спектральном разложении оператора необходимо заменить на сумму аналогичных выражений  $P_\alpha^{(i)}/(\varepsilon + E_\alpha^{(i)})$ , соответствующих собственным значениям этих операторов.

Тогда функции Грина (8) могут быть записаны в виде

$$G_{(12)}(-E_0) = G_0(-E_0) - P_{12}g_0^{(12)}(E_{12} - E_0) + \widehat{G}_{(1)(2)}(-E_0),$$

$$G_{(1)(2)}(-E_0) = G_0(-E_0) + \frac{1}{-E_0 + E_1 + E_2} P_1 P_2 - P_1 g_{02}(E_1 - E_0) -$$

$$- g_{01}(E_2 - E_0) P_2 + \widehat{G}_{(1)(2)}(-E_0). \quad (10)$$

Заметим, что имеет место следующее определение проекторов:

$$\langle r_i | P_i | r'_i \rangle = \Psi_i(r_i) \Psi_i^*(r'_i), \quad [i = 1, 2,$$

$$\langle r_{12} | P_{12} | r'_{12} \rangle = \Psi_{12}(r_{12}) \Psi_{12}^*(r'_{12}), \quad r_{12} = r_1 - r_2. \quad (11)$$

Здесь  $\Psi_i(r_i)$  и  $\Psi_{12}(r_{12})$  — волновые функции связанного состояния для систем с операторами  $h_i$  и  $h_{12}$  соответственно, нормируемые на единицу. Асимптотические выражения для  $\Psi_i(r_i)$  и  $\Psi_{12}(r_{12})$  имеют вид

$$\Psi_i(r_i) \sim \frac{1}{|r_i|} \exp\{-\alpha_i |r_i|\}, \quad \alpha_i = \sqrt{\frac{-2E_i m_i}{\hbar^2}},$$

$$\Psi_{12}(r_{12}) \sim \frac{1}{|r_{12}|} \exp\{-\alpha_{12} |r_{12}|\}, \quad \alpha_{12} = \sqrt{\frac{-2E_{12} \mu}{\hbar^2}}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (12)$$

Приведем также асимптотические выражения для ядер известных свободных функций Грина [3, 4]:

$$G_0(r_1, r_2, r'_1, r'_2; -E_0) \sim \frac{\mu}{8\pi^3 \hbar^2} \frac{1}{|X|} \exp\{-\alpha_0 |X|\},$$

$$g_{0i}(r_i, r'_i; \varepsilon) \sim \frac{1}{|r_i - r'_i|} \exp\{-\beta_i(\varepsilon) |r_i - r'_i|\},$$

$$g_0^{(12)}(R_{12}, R'_{12}; \varepsilon) \sim \frac{1}{|R_{12} - R'_{12}|} \exp\{-\beta_{12}(\varepsilon) |R_{12} - R'_{12}|\},$$

$$R_{12} = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}, \quad |X| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}, \quad \alpha_0 = \sqrt{\frac{E_0 \mu}{\hbar^2}},$$

$$\beta_i(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2m_i\varepsilon}{\hbar^2}}, \quad \beta_{12}(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}}. \quad (13)$$

Приведенные выше определения позволяют найти асимптотическое поведение функций

$$\Psi_{(12)}(r_1, r_2, -E_0) \sim C_1 F_0(r_1, r_2) + C_2 F_{(12)}(r_1, r_2),$$

$$\Psi_{(1)(2)}(r_1, r_2, -E_0) \sim C_3 F_0(r_1, r_2) + C_4 F_{(1)(2)}^{(1)}(r_1, r_2) + C_5 F_{(1)(2)}^{(2)}(r_1, r_2), \quad (14)$$

где коэффициенты  $C_i$  зависят от координат на малых расстояниях, а на больших, т. е. в асимптотике, могут быть заменены константами;  $F_0$ ,  $F_{(12)}$ ,  $F_{(1)(2)}^{(1)}$  и  $F_{(1)(2)}^{(2)}$  определяются соотношениями

$$\begin{aligned} F_0(r_1, r_2) &= \frac{1}{|X|} \exp\{-\alpha_0 |X|\}, \\ F_{(12)}(r_1, r_2) &= \frac{1}{|r_{12}|} \exp\{-\alpha_{12} |r_{12}|\} \frac{1}{|R_{12}|} \exp\{-\beta_{12}(E_{12} - E_0) |R_{12}|\}, \\ F_{(1)(2)}^{(1)}(r_1, r_2) &= \frac{1}{|r_1|} \exp\{-\alpha_1 |r_1|\} \frac{1}{|r_2|} \exp\{-\beta_2(E_1 - E_0) |r_2|\}, \\ F_{(1)(2)}^{(2)}(r_1, r_2) &= \frac{1}{|r_1|} \exp\{-\beta_1 |E_2 - E_0| |r_1|\} \frac{1}{|r_2|} \exp\{-\alpha_2 |r_2|\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Проводя анализ убывания асимптотических выражений методом, предложенным в [3], можно показать, что экспоненциальная функция в выражении для  $F_0$  убывает быстрее или так же, как и экспоненциальные функции в выражениях для

$$F_{(12)}, F_{(1)(2)}^{(1)} \text{ и } F_{(1)(2)}^{(2)}.$$

Теперь мы имеем все необходимые сведения для определения асимптотики волновой функции квантовой системы двух частиц во внешнем поле:

$$\begin{aligned} \Psi(r_1, r_2, -E_0) &\sim C_0 F_0(r_1, r_2) + C_2 F_{(12)}(r_1, r_2) + C_4 F_{(1)(2)}^{(1)}(r_1, r_2) + \\ &+ C_5 F_{(1)(2)}^{(2)}(r_1, r_2), \quad r_1 \rightarrow \infty, \quad r_2 \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (16)$$

## ЛИТЕРАТУРА

[1] Комаров В. В., Попова А. М., Шаблов В. Л. // ЭЧАЯ. 1983. 14. С. 329. [2] Фаддеев Л. Д. // Тр. МИАН СССР. 1963. Т. 69. [3] Меркурьев С. П. // Ядерная физика. 1974. 19. С. 447. [4] Ситенко А. Г. Теория рассеяния. Киев, 1975.

Поступила в редакцию  
14.04.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 1

УДК 536.75

## НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫСШИХ ВИРИАЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Б. Сэджавын\*)

(кафедра квантовой статистики)

На основе работ по ускоренной сходимости рядов теории возмущений развит новый метод нахождения высших вириальных коэффициентов для системы твердых сфер, превосходящий по точности их вычисления метод, основанный на решении уравнения Перкуса—Иевики, и метод аппроксимант Поде.

\*) Монголия.