Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Б. Беляев, А. К. Мотовилов, Возмущение собственного значения, погруженного в непрерывный спектр, близлежащим резонансом, *ТМФ*, 1997, том 111, номер 1, 77–93

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf991>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.45.116

26 апреля 2023 г., 04:14:43

В. Б. Беляев*, А. К. Мотовилов*

ВОЗМУЩЕНИЕ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ, ПОГРУЖЕННОГО В НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР, БЛИЗКОЛЕЖАЩИМ РЕЗОНАНСОМ

Рассматриваются квантово-механические системы (в том числе электронные молекулы), гамильтонианы которых допускают, например с помощью метода Фаддеева, отделение слабосвязанного канала. Ширина (т.е. мнимая часть) резонанса, порождаемого точкой дискретного спектра отделенного канала, исследуется в случае, когда основная компонента гамильтониана также порождает резонанс. Показывается, что если вещественные части этих резонансов совпадают, а связь между каналами достаточно мала, то ширина резонанса, отвечающего выделенному (“молекулярному”) каналу, обратно пропорциональна ширине резонанса в основном (“ядерном”) канале. Имея универсальный характер, этот эффект может играть важную роль в увеличении вероятности ядерного синтеза в молекулах, ядерные подсистемы которых обладают узкими предпороговыми резонансами.

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно общепринятой точке зрения свойства электронных молекул определяются исключительно кулоновскими силами, действующими между ядрами и электронами, роль же сильного взаимодействия между ядерными компонентами пренебрежимо мала. Действительно, по отношению к ядерным каналам электронная молекула проявляет себя как очень стабильный объект. Очевидно, тем не менее, что всякий молекулярный уровень, представляя собой точку дискретного спектра чисто кулоновского гамильтониана молекулы, лежит на непрерывном спектре гамильтониана, отвечающего ее ядерной подсистеме. Существование связи между “молекулярным” и “ядерным” каналами, вообще говоря, превращает молекулярные уровни в резонансы (см., например, работы [1–5], а также цитированную там литературу). Разумеется, связь между этими каналами крайне мала из-за наличия протяженного кулоновского барьера между ядрами и короткодействующего характера ядерных сил. Поэтому и ширины таких резонансов, определяющие вероятность синтеза (и/или перестройки) ядерных компонентов молекулы, также оказываются крайне малыми. В настоящей работе мы показываем, однако, что ситуация может оказаться существенно иной в том случае, когда ядерная

*Объединенный институт ядерных исследований

подсистема молекулы сама обладает достаточно узким околотороговым (точнее, предпороговым) резонансом.

Анализируя таблицы наблюдаемых спектров ядер [6], нетрудно привести целый ряд конкретных ядерных систем, образующих околотороговые резонансные состояния. Околотороговыми резонансами обладают, в частности, такие системы, как $pp^{16}\text{O}$ и $p^{17}\text{O}$ [7, 8], состоящие из ядерных компонентов обычной молекулы воды H_2O или ионов гидроксидов OH^- на основе более редкого изотопа ^{17}O . На возможность влияния околотороговых резонансов на свойства молекул явно указывается в недавних работах [9], где проводится оценка интегралов перекрытия между модельными молекулярными и резонансными ядерными волновыми функциями для молекул LiD и H_2O . Имеется также хорошо известный пример [10] мюонного катализа реакции синтеза изотопов водорода d и t посредством образования мезомолекулы $dt\mu$, в котором решающая роль принадлежит именно околотороговому резонансу в системе dt .

Хотя мы имеем в виду прежде всего молекулярные системы (при этом подразумевается, что молекулярная система может включать в себя наряду с электронами или вместо них также и иные легкие по сравнению с нуклонами отрицательно заряженные частицы, такие как мюон), в работе рассматриваются гамильтонианы более общего вида. В сущности, единственное требование, предъявляемое нами к исследуемому физическому объекту, состоит в возможности отделения в его гамильтониане некоторого слабо-связанного (“молекулярного”) канала, дискретный спектр которого (соответствуя “молекулярным” уровням) лежит на непрерывном спектре главного (“ядерного”) канала. Включение связи между каналами приводит к автоматическому превращению дискретного спектра отделенного канала в (“молекулярные”) резонансы.

Для моделей, рассматриваемых в работе, мы доказываем следующее утверждение.

Если в “ядерном” канале присутствует узкий резонанс, вещественная часть которого очень близка к начальному “молекулярному” уровню, то *ширина* (мнимая часть) *результатирующего “молекулярного” резонанса оказывается обратно пропорциональной “ядерной” ширине* (при убывании которой “молекулярная” ширина растет в указанном режиме до тех пор, пока сама не приобретает порядок “ядерной” ширины). Другими словами, чем уже “ядерный” резонанс, тем больше “молекулярная” ширина. Это означает, что при наличии у системы узкого “ядерного” резонанса вблизи “молекулярного” уровня скорость распада соответствующего “молекулярного” состояния по “ядерному” каналу оказывается значительно большей, нежели у аналогичных систем, не обладающих подобными “ядерными” резонансами.

Мы намеренно рассматриваем в работе гамильтонианы достаточно абстрактного вида, так как, с одной стороны, такое рассмотрение раскрывает более ясно механизм влияния ширины “ядерного” резонанса на ширину “молекулярного” и, с другой стороны, наш анализ показывает, что эффект ускорения распада резонансного состояния за счет другого близлежащего резонанса является закономерностью, которая должна иметь место для широкого класса квантово-механических систем. Аналогичное явление может наблюдаться в механике сплошных сред, в оптике, электронике и т.д., т.е. когда описание исследуемого объекта можно свести к модельным двухканальным (матричным) гамильтонианам типа (1) или более общим гамильтонианам вида (18).

В разделе 2 мы рассматриваем именно двухканальную матричную модель (1), позволяющую (благодаря возможности ее явного решения) продемонстрировать описываемый эффект взаимовлияния резонансных ширин наиболее ясно и просто.

Раздел 3 посвящен анализу модели, включающей в себя реалистические субгамильтонианы ядерных подсистем N -атомных молекул с $N \geq 2$. В этом случае отделение “молекулярного” резонансного канала проводится в рамках подхода, аналогичного методу Фаддеева разделения каналов рассеяния в задаче трех частиц [11, 12].

В разделе 4 рассматривается временная эволюция молекулярного состояния в присутствии узкого предпорогового “ядерного” резонанса. Здесь показывается, что на большом временном интервале распад молекулярного состояния через открытые “ядерные” каналы действительно имеет стандартный экспоненциальный характер [4, 13]. Скорость этого распада определяется обратной шириной “ядерного” резонанса (см. формулу (33)).

2. ДВУХКАНАЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТониАН С ЯВНО ОТДЕЛЕННЫМ “МОЛЕКУЛЯРНЫМ” РЕЗОНАНСНЫМ КАНАЛОМ

Введем в рассмотрение двухканальное гильбертово пространство $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, представляющее собой ортогональную сумму некоторого “основного” гильбертова пространства $\mathcal{H}_1$ (канал 1) и одномерного пространства $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}$ (канал 2). Элементы пространства $\mathcal{H}$ представляются как векторы $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$. Компонента u_1 является элементом $\mathcal{H}_1$. Компонента u_2 является комплексным числом, $u_2 \in \mathbb{C}$. Скалярное произведение $\langle \cdot, \cdot \rangle$ в $\mathcal{H}$ естественно определяется через скалярное произведение $\langle \cdot, \cdot \rangle$ в $\mathcal{H}_1$ как $\langle u, v \rangle = \langle u_1, v_1 \rangle + u_2 \bar{v}_2$.

В настоящем разделе мы будем иметь дело с гамильтонианом h , действующим в $\mathcal{H}$ как операторная (2×2) -матрица,

$$h = \begin{pmatrix} h_1 & b \\ \langle \cdot, b \rangle & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где h_1 – самосопряженный оператор (“ядерный гамильтониан”) в $\mathcal{H}_1$, а λ_2 – вещественное число (начальная “энергия молекулы”). Вектор $b \in \mathcal{H}_1$ реализует связь между каналами.

Если бы эта связь отсутствовала (при $b = 0$), то спектр гамильтониана h состоял бы из спектра оператора h_1 и дополнительной точки дискретного спектра λ_2 . Предполагается, что непрерывный спектр $\sigma_c(h_1)$ оператора h_1 не пуст, точка λ_2 лежит на этом спектре и не совпадает ни с одним из его порогов. Хорошо известно (см., например, [14, 15]), что при существовании нетривиальной ($b \neq 0$) связи между каналами в h собственное число λ_2 перемещается, вообще говоря, на нефизический лист (листы) плоскости энергии и обычно превращается в пару сопряженных резонансов. Под резонансами подразумеваются полюсы аналитического продолжения на нефизический лист (листы) энергии ядра резольвенты и/или ее матричных элементов, взятых между подходящими состояниями [5]. Полюсы резольвенты на нефизических листах обычно оказываются также и полюсами аналитического продолжения матрицы рассеяния.

Резольвента $r(z) = (h - z)^{-1}$ гамильтониана h легко вычисляется:

$$r(z) = \begin{pmatrix} r_1(z) + \frac{r_1(z)b\langle \cdot, b \rangle r_1(z)}{D(z)} & -\frac{r_1(z)b}{D(z)} \\ -\frac{\langle \cdot, b \rangle r_1(z)}{D(z)} & \frac{1}{D(z)} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Здесь $r_1(z)$ – резольвента оператора h_1 , $r_1(z) = (h_1 - z)^{-1}$, а функция $D(z)$ задается равенством $D(z) = \lambda_2 - z - \beta(z)$, где $\beta(z) = \langle r_1(z)b, b \rangle$. Из представления (2) следует, что полюсы $r(z)$ на физическом листе суть либо нули функции $D(z)$, либо полюсы резольвенты $r_1(z)$. Последние отвечают дискретному спектру оператора h_1 , который может быть частично унаследован и оператором h . Так обстоит дело, например, с кратными собственными значениями h_1 . В любом случае очевидно, что возмущенному собственному числу λ_2 могут соответствовать только решения уравнения $D(z) = 0$, т.е. уравнения

$$z = \lambda_2 - \beta(z). \quad (3)$$

Ясно, что это уравнение заведомо не имеет корней z с $\text{Im } z \neq 0$ на физическом листе. Действительно, такие решения были бы точками дискретного спектра h , что невозможно, поскольку гамильтониан h является самосопряженным оператором. Таким образом, уравнение (3) может иметь решения лишь на вещественной оси или/и на нефизическом листе (листах) римановой поверхности резольвенты $r_1(z)$.

Напомним сначала коротко случай (см. [14, 15]), когда главный канал, описываемый гамильтонианом h_1 , не имеет резонансов в достаточно широких окрестностях $\mathcal{D}^+$ и $\mathcal{D}^-$ точки λ_2 на нефизическом листе (листах), примыкающих к вещественной оси соответственно сверху и снизу. Последнее означает, что ядро резольвенты $r_1(z)$ продолжается по z в области $\mathcal{D}^\pm$ как голоморфная функция. Мы будем полагать, что элемент $b \in \mathcal{H}_1$ таков, что и квадратичная форма $\beta(z)$ также допускает аналитическое продолжение на $\mathcal{D}^\pm$ и $\inf_{z \in \mathcal{D}^\pm} |\text{Im} \langle r_1(z)\hat{b}, \hat{b} \rangle| > 0$, $\sup_{z \in \mathcal{D}^\pm} |\langle r_1(z)\hat{b}, \hat{b} \rangle| < \infty$, где $\hat{b} = b/\|b\|$. Если норма $\|b\|$ достаточно мала, доказательство разрешимости уравнения (3) в каждой из областей $\mathcal{D}^+$ и $\mathcal{D}^-$ легко проводится с помощью принципа сжимающих отображений. Согласно нашим предположениям λ_2 не является пороговой точкой спектра $\sigma_c(h_1)$. Поэтому при достаточно малых $\|b\|$ уравнение (3) имеет два решения: $z_2^{(+)} \in \mathcal{D}^+$ и $z_2^{(-)} \in \mathcal{D}^-$ (см., например, [14, 15]), первый порядок теории возмущений для которых дает

$$z_2^{(\pm)} \Big|_{\|b\| \rightarrow 0} = \lambda_2 - \langle r_1(\lambda_2 \mp i0)b, b \rangle + o(\|b\|^2). \quad (4)$$

Вещественная $E_R^{(2)}$ и мнимая $\Gamma_R^{(2)}/2$ части резонансов $z_2^{(\pm)}$, $z_2^{(\pm)} = E_R^{(2)} \pm i\frac{\Gamma_R^{(2)}}{2}$, даются формулами

$$\begin{aligned} E_R^{(2)} &= \lambda_2 - \text{Re} \langle r_1(\lambda_2 + i0)b, b \rangle + o(\|b\|^2), \\ \Gamma_R^{(2)} &= 2 \text{Im} \langle r_1(\lambda_2 + i0)b, b \rangle + o(\|b\|^2). \end{aligned} \quad (5)$$

Перейдем теперь к интересующему нас случаю. Именно, предположим, что в канале 1 присутствует (“ядерный”) резонанс, точнее пара сопряженных резонансов $z_1^{(\pm)} = E_R^{(1)} \pm i\frac{\Gamma_R^{(1)}}{2}$, $\Gamma_R^{(1)} > 0$, вещественная часть $E_R^{(1)}$ которых близка к λ_2 . Предположим для простоты, что эти резонансы являются для $r_1(z)$ полюсами лишь первого порядка. Дальнейшее рассмотрение будем вести на примере резонанса $z_1^{(-)}$. Случай сопряженного резонанса $z_1^{(+)}$ может быть рассмотрен совершенно аналогично. Уместно отметить, однако, что распад “молекулярного” состояния, отвечающего исходному уровню λ_2 , описывается в терминах резонансов, находящихся именно в нижней полуплоскости (см. раздел 4). Для сокращения записи знак “−” в обозначении резонанса $z_1^{(-)}$ далее будет опускаться.

Пусть элемент $b \in \mathcal{H}_1$ таков, что функция $\beta(z)$ допускает аналитическое продолжение на некоторую общую окрестность $\mathcal{D}$ точек λ_2 и z_1 (разумеется, за исключением самой точки z_1), принадлежащую нефизическому листу, склейка которого с физическим листом вблизи λ_2 происходит вдоль верхнего берега разреза. Наличие полюса z_1 у резольвенты $r_1(z)$ означает, что функция $\beta(z)$ при $z \in \mathcal{D}$ допускает представление

$$\beta(z) = \frac{a}{z - z_1} + \beta^{\text{reg}}(z) \quad (6)$$

с явно выделенным полюсным членом $a/(z - z_1)$ и остаточным голоморфным слагаемым $\beta^{\text{reg}}(z)$. Для фиксированной “структурной функции” $\hat{b}$ мы имеем $|a| = C_a \|b\|^2$, где величина $C_a > 0$ определяется вычетом резольвенты $r_1(z)$ при $z = z_1$. Последний обычно выражается в терминах соответствующих резонансных волновых функций, так называемых гамовских векторов, отвечающих резонансной энергии z_1 (см. ниже формулу (22)). Мы предполагаем, что резонанс z_1 ведет свое начало от обычного собственного значения гамильтониана h_1 . Это означает, что в принципе возможна предельная процедура относительно некоторого параметра (или нескольких параметров), входящего (входящих) в определение h_1 , при выполнении которой $\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0$ и резонанс z_1 превращается в точку дискретного спектра h_1 с собственным вектором $\psi_1 \in \mathcal{H}_1$, $\|\psi_1\|^2 = 1$. При этом

$$C_a \Big|_{\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0} = C_a^{(0)} + o(1), \quad (7)$$

где $C_a^{(0)} = |\langle \hat{b}, \psi_1 \rangle|^2 \neq 0$. Такая процедура заведомо возможна, например, в случае, когда гамильтониан h_1 сам допускает матричное представление типа (1) и резонанс z_1 порождается отделенным одномерным каналом. Согласно соотношениям (2) и (4) в этом случае $C_a^{(0)} = 1$. Предельный переход (7) будет обсуждаться также в п.3.1.

Регулярную часть $\beta^{\text{reg}}(z)$ мы представляем (аналогично a) в форме $\beta^{\text{reg}}(z) = \|b\|^2 f(z)$, где множитель $f(z)$ зависит только от $\hat{b}$. Предполагаем, что вектор $\hat{b}$ таков, что на области $\mathcal{D}$ функция $f(z)$ ограничена,

$$C_{\mathcal{D}} = \sup_{z \in \mathcal{D}} |f(z)| < \infty, \quad c_{\mathcal{D}} = \inf_{z \in \mathcal{D}} |\text{Im } f(z)| > 0,$$

так что

$$|\beta^{\text{reg}}(z)| \leq C_{\mathcal{D}} \|b\|^2, \quad c_{\mathcal{D}} \|b\|^2 \leq |\text{Im } \beta^{\text{reg}}(z)| \leq C_{\mathcal{D}} \|b\|^2.$$

Подстановка представления (6) для $\beta(z)$ в соотношение (3) позволяет переписать последнее в виде “квадратного” уравнения

$$(z - \lambda_2)(z - z_1) + a + (z - z_1)\beta^{\text{reg}}(z) = 0, \quad (8)$$

“решения” которого имеют вид

$$z = \frac{\lambda_2 + z_1 - \beta^{\text{reg}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}}}{2}\right)^2 - a}. \quad (9)$$

Будем считать, далее, что связь между каналами в гамильтониане (1) настолько слаба, что

$$|\beta^{\text{reg}}(z)|_{z \in \mathcal{D}} \leq C_{\mathcal{D}} \|b\|^2 \ll \Gamma_R^{(1)} \quad \text{и} \quad |a| = C_a \|b\|^2 \ll \left(\Gamma_R^{(1)}\right)^2. \quad (10)$$

Ожидается, что в молекулярных системах имеют место именно такие условия.

При их выполнении существование решений уравнения (3), переписанного в терминах двух уравнений (9), можно доказать снова с помощью принципа сжимающих отображений. При этом каждое из уравнений (9) имеет в области $\mathcal{D}$ только одно решение. Корень (9) в случае знака “−” будет обозначаться через z_{nucl} , а в случае знака “+” — через z_{mol} .

Неравенства (10) означают, что

$$\frac{|a|}{|\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}}(z)|_{z \in \mathcal{D}}^2} \approx \frac{|a|}{\left|\lambda_2 - E_R^{(1)}\right|^2 + \left(\frac{\Gamma_R^{(1)}}{2}\right)^2} \leq \frac{4C_a \|b\|^2}{\left(\Gamma_R^{(1)}\right)^2} \ll 1. \quad (11)$$

Поэтому для выделения главных членов решений уравнений (9) при $\varepsilon \ll 1$, $\varepsilon = -4a/(\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}})^2$, воспользуемся асимптотическим соотношением $\sqrt{1 + \varepsilon} = 1 + \varepsilon/2 + O(\varepsilon^2)$. В результате получим

$$z = \frac{\lambda_2 + z_1 - \beta^{\text{reg}}}{2} \pm \frac{\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}}}{2} \left(1 - \frac{2a}{(\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}})^2} + O(\varepsilon^2)\right). \quad (12)$$

Отсюда видно, что главные члены решений z_{nucl} и z_{mol} даются формулами

$$z_{\text{nucl}} \cong z_1 + \frac{a}{\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}}(z_1)} \cong z_1 + \frac{a}{\lambda_2 - z_1}, \quad (13)$$

$$z_{\text{mol}} \cong \lambda_2 - \beta^{\text{reg}}(\lambda_2 + i0) - \frac{a}{\lambda_2 - z_1 - \beta^{\text{reg}}(\lambda_2 + i0)} \cong \lambda_2 - \frac{a}{\lambda_2 - z_1}. \quad (14)$$

Из второго условия (10) следует, что $\left|\frac{a}{\lambda_2 - z_1}\right| \ll \Gamma_R^{(1)}$. Поэтому резонанс z_{nucl} представляет собой лишь очень слабое возмущение исходного “ядерного” резонанса z_1 .

Резонанс z_{mol} является столь же слабым (по сравнению с $\Gamma_R^{(1)}$) возмущением начальной “молекулярной” энергии λ_2 . Однако при малой “ядерной” ширине $\Gamma_R^{(1)}$ различие

между этим возмущением и аналогичным возмущением (4) в отсутствие “ядерного” резонанса может оказаться очень значительным. В частности, если “молекулярная” энергия λ_2 совпадает с вещественной частью $E_R^{(1)}$ “ядерного” резонанса z_1 , то

$$z_{\text{mol}} = E_R^{(m)} - i \frac{\Gamma_R^{(m)}}{2}, \quad E_R^{(m)} \cong \lambda_2 - 2 \frac{\text{Im } a}{\Gamma_R^{(1)}}, \quad \Gamma_R^{(m)} \cong 4 \frac{|\text{Re } a|}{\Gamma_R^{(1)}}, \quad \text{Re } a < 0. \quad (15)$$

Как видно из (15), *результатирующая ширина “молекулярного” резонанса z_{mol} в присутствии “ядерного” резонанса z_1 оказывается обратно пропорциональной его ширине $\Gamma_R^{(1)}$.*

Сравним теперь ширину (15) с аналогичной “молекулярной” шириной в случае, если бы “ядерный” резонанс вблизи λ_2 отсутствовал. Поскольку наше сравнение заведомо будет иметь лишь качественный характер, ситуацию с отсутствующим ядерным резонансом смоделируем простым отбрасыванием полюсного члена в представлении (6) для функции $\beta(z)$. После такого отбрасывания $\beta(z) \equiv \beta^{\text{reg}}(z)$ и собственное число λ_2 порождает при $\text{Im } z \leq 0$ резонанс (4) с шириной $\Gamma_R^{(2)} \approx 2 \text{Im } \beta^{\text{reg}}(\lambda_2 + i0)$. Последняя удовлетворяет неравенствам $c_{\mathcal{D}} \|b\|^2 \leq \Gamma_R^{(2)}/2 \leq C_{\mathcal{D}} \|b\|^2$. Производя в (15) замены $|\text{Re } a| \sim C_a \|b\|^2 \sim \frac{C_a}{c_{\mathcal{D}}} \Gamma_R^{(2)}$, мы находим отсюда приблизительную оценку $\Gamma_R^{(m)}$ через $\Gamma_R^{(2)}$:

$$\Gamma_R^{(m)} \sim \Gamma_R^{(2)} \cdot \frac{C_a/c_{\mathcal{D}}}{\Gamma_R^{(1)}}. \quad (16)$$

При этом второе неравенство (10), понимаемое как условие на $\|b\|$, в сущности, эквивалентно условию на “обычную молекулярную” ширину $\Gamma_R^{(2)}$ и ширину “ядерного” резонанса $\Gamma_R^{(1)}$,

$$C_a \Gamma_R^{(2)} \ll c_{\mathcal{D}} \left(\Gamma_R^{(1)} \right)^2, \quad (17)$$

которое для конкретных молекул можно считать выполненным практически всегда.

При условии (7) величина отношения $C_a = |a|/\|b\|^2$ отделена от нуля ($C_a \geq C > 0$), когда $\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0$. Поэтому оценки (15) и (16) означают, что “молекулярная” ширина $\Gamma_R^{(m)}$ при наличии узкого ($\Gamma_R^{(1)} \ll C_a/c_{\mathcal{D}}$) “ядерного” резонанса вблизи λ_2 многократно превышает “молекулярную” ширину $\Gamma_R^{(2)}$ в отсутствие такого резонанса. Согласно (16) отношение этих ширин определяется фактором $\frac{C_a/c_{\mathcal{D}}}{\Gamma_R^{(1)}}$.

Обратим, наконец, внимание на случай, когда условия (10) (а значит, и (17)) не выполняются и тем самым связь между каналами в гамильтониане (1) не мала при ее сравнении с “ядерной” шириной $\Gamma_R^{(1)}$. Рассматривая уравнения (9), нетрудно показать, что в этом случае “молекулярная” ширина $\Gamma_R^{(m)}$ сама приобретает порядок “ядерной” ширины $\Gamma_R^{(1)}$. В настоящей работе мы не будем останавливаться на анализе указанного случая, поскольку подобное соотношение между “молекулярными” и “ядерными” ширинами представляется недостижимым в обычных электронных молекулах.

Заключая раздел, отметим, что уравнение, аналогичное (8), и его решения типа (12) рассматривались в §5 статьи [16]. Однако исследуемый в настоящей работе эффект (15)

“уширения” молекулярных уровней в присутствии околороговых ядерных резонансов там не рассматривался.

3. РАССМОТРЕНИЕ РЕАЛЬНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Настоящий раздел посвящен доказательству утверждения, аналогичного (15), в случае, когда физическая система описывается (“безмодельным”) гамильтонианом, допускающим представление в виде суммы трех слагаемых

$$H = h_0 + v_1 + v_2. \quad (18)$$

Предполагается, что “главное” слагаемое h_0 является самосопряженным оператором в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_0$. В то же время “потенциалы” v_1 и v_2 – симметричные операторы в $\mathcal{H}_0$, такие что как гамильтониан H в целом, так и гамильтонианы $h_1 = h_0 + v_1$ и $h_2 = h_0 + v_2$ представляют собой самосопряженные операторы с одной и той же областью определения $\mathbf{D} \subset \mathcal{H}_0$.

Мы рассматриваем оператор H вида (18), в частности, как реалистический гамильтониан для ядерной подсистемы N -атомной молекулы, $N \geq 2$. Гамильтониан h_0 включает в этом случае сумму оператора кинетической энергии и кулоновских потенциалов взаимодействия внутри ядерной подсистемы. Слагаемое v_1 описывает сильное взаимодействие между ядерными компонентами, v_2 – дополнительное эффективное взаимодействие между ними за счет электронов. Под $\mathcal{H}_0$ подразумевается подпространство, отвечающее специфической симметрии молекулы (а следовательно, и ее ядерной подсистемы). Мы будем полагать поэтому, что непрерывные спектры операторов h_0 , h_1 и h_2 заполняют полубесконечные интервалы: $\sigma_c(h_0) = \sigma_c(h_2) = (E_0, +\infty)$ и $\sigma_c(h_1) = (E_1, +\infty)$. При этом нижняя граница (нижний порог) E_1 непрерывного спектра $\sigma_c(h_1)$ оператора h_1 находится ниже, чем такой порог E_0 для операторов h_0 и h_2 : $E_1 < E_0$. Предполагается, что “молекулярный” гамильтониан h_2 имеет изолированное простое собственное число λ_2 ($\lambda_2 < E_0$) с собственной функцией $\varphi_2 \in \mathcal{H}_0$, $h_2\varphi_2 = \lambda_2\varphi_2$, $\|\varphi_2\| = 1$. Будем считать для простоты, что весь дискретный спектр гамильтониана h_2 содержит единственную точку λ_2 . Как и в предыдущем разделе, принимается, что (“чисто ядерный”) канал, описываемый в данном случае гамильтонианом $h_1 = h_0 + v_1$, обладает узким резонансом $z_1 = E_R^{(1)} - i\frac{\Gamma_R^{(1)}}{2}$, $E_R^{(1)} \in \mathbb{R}$, $\Gamma_R^{(1)} > 0$, близким к порогу E_0 , так что $E_R^{(1)} \approx \lambda_2$.

В принципе мы могли бы свести гамильтониан H к двухканальной модели (1), используя стандартную проекционную процедуру. Это можно сделать, введя, скажем, проекторы $P_2 = \varphi_2\langle \cdot, \varphi_2 \rangle$ и $P_1 = I - P_2$. Тогда H может быть задан как операторная матрица $H' = \{P_i H P_j\}$, $i, j = 1, 2$, отвечающая разложению $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, где $\mathcal{H}_j = P_j \mathcal{H}_0$. Оператор H' (а тем самым и исходный гамильтониан H) унитарно-эквивалентен в точности оператору (1), где в качестве λ_2 выступает матричный элемент $\langle H\varphi_2, \varphi_2 \rangle$, а в качестве b – функция $P_1 H \varphi_2$. При этом компонента 11 матрицы (1) остается той же $(P_1 H P_1)$, что и у оператора H' . К сожалению, описанное отделение “молекулярного” резонансного канала является приближенным, поскольку резольвента оператора $P_1 H P_1$ сохраняет полюс, хотя и с “малым” вычетом, в “молекулярном” резонансе, отвечающем полному

гамильтониану H . Учет этого обстоятельства при анализе соответствующих уравнений типа (3) требует специального отдельного рассмотрения. Поэтому для проведения полного (и реализуемого достаточно просто) разделения в H “ядерного” и “молекулярного” каналов мы используем другой естественный подход, аналогичный методу Фаддеева в задаче трех тел [11, 12].

3.1. Отделение “молекулярного” резонансного канала по методу Фаддеева. Исследование спектральных свойств гамильтонианов, допускающих подобно H представление в виде суммы некоторого основного оператора (обычно оператора кинетической энергии) и нескольких “возмущающих” его слагаемых достаточно произвольной природы (в случае задачи трех тел такую роль обычно играют парные потенциалы), может быть сведено к изучению матричного оператора Фаддеева (ассоциированного с соответствующими уравнениями Фаддеева [11, 12]), рассматриваемого на его “физическом” инвариантном подпространстве (см., например, статью [17] и цитируемую в ней литературу).

Оператор Фаддеева, отвечающий сумме (18), имеет вид

$$H_F = \begin{pmatrix} h_0 + v_1 & v_1 \\ v_2 & h_0 + v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 & v_1 \\ v_2 & h_2 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

При этом он рассматривается как оператор в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_0$.

Следует отметить, что оператор Фаддеева (19) представляет собой специальный случай (компоненты h_1 и h_2 зависят от v_1 и v_2) операторной (2×2) -матрицы. Некоторые аспекты спектральной теории для (2×2) -матричных операторов общего вида можно найти, например, в статьях [18, 19].

В рассматриваемом специальном случае $h_1 = h_0 + v_1$ и $h_2 = h_0 + v_2$. Поэтому нетрудно проверить, что

$$(H_F - z)^{-1} = (h_0 - z)^{-1} \mathbf{I} - (h_0 - z)^{-1} \begin{pmatrix} v_1 & v_1 \\ v_2 & v_2 \end{pmatrix} (H - z)^{-1}, \quad (20)$$

где $\mathbf{I}$ — тождественный оператор в $\mathcal{H}$. Равенство (20) позволяет заключить, что хотя оператор H_F и не является симметричным, его спектр чисто вещественный. Более того, можно показать (см. [17]), что спектр H_F состоит из “физического” спектра H и “нефизического” (spurious) спектра h_0 . Из тождества (20) вытекает также, что если аналитическое продолжение резольвенты $(H - z)^{-1}$ имеет полюс (резонанс) при некотором значении энергии, то и продолжение $(H_F - z)^{-1}$ обладает при этой энергии полюсом. Верно также и обратное утверждение, если соответствующим полюсом не обладает аналитическое продолжение резольвенты $(h_0 - z)^{-1}$.

Обозначим через Q_2 проектор на подпространство в $\mathcal{H}_2$, ортогональное к “молекулярной” волновой функции φ_2 , $Q_2 = I - \varphi_2 \langle \cdot, \varphi_2 \rangle$. Разделение вкладов в оператор h_2 от собственного числа λ_2 и остального спектра позволяет представить гамильтониан (19) в очень близком к (1) виде. А именно, мы переписываем этот гамильтониан в виде матричного оператора

$$H'_F = \begin{pmatrix} \tilde{H}_F & \mathbf{b}_{12} \\ \langle \cdot, \mathbf{b}_{21} \rangle & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

рассматриваемого в гильбертовом пространстве $\tilde{\mathcal{H}} \oplus \mathbb{C}$, $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_1 \oplus Q_2\mathcal{H}_2$. Под $\tilde{H}_F$ мы понимаем оператор в $\tilde{\mathcal{H}}$, определяемый как

$$\tilde{H}_F = \begin{pmatrix} h_1 & v_1 Q_2 \\ Q_2 v_2 & \tilde{h}_2 \end{pmatrix},$$

где $\tilde{h}_2$ — часть гамильтониана h_2 в $Q_2\mathcal{H}_2$. Векторы $\mathbf{b}_{12}$ и $\mathbf{b}_{21}$ из пространства $\tilde{\mathcal{H}}$, задающие связь между каналами в H'_F , имеют вид

$$\mathbf{b}_{12} = \begin{pmatrix} b_{12} \\ 0 \end{pmatrix},$$

где $b_{12} = v_1 \varphi_2$, $b_{12} \in \mathcal{H}_1$, и

$$\mathbf{b}_{21} = \begin{pmatrix} b_{21} \\ 0 \end{pmatrix},$$

где $b_{21} = v_2 \varphi_2$, $b_{21} \in \mathcal{H}_1$.

Резольвента $(H'_F - z)^{-1}$ редуцированного оператора Фаддеева H'_F представляется в виде, совершенно аналогичном (2). При этом в качестве знаменателя $D(z)$, определяющего сингулярности $(H'_F - z)^{-1}$, выступает функция $D(z) = \lambda_2 - z - \tilde{\beta}(z)$. Здесь $\tilde{\beta}(z) = \langle \tilde{R}_F(z) \mathbf{b}_{12}, \mathbf{b}_{21} \rangle \equiv \langle g_1(z) b_{12}, b_{21} \rangle$, где $g_1(z)$ — обобщенная резольвента оператора $\tilde{H}_F$, $g_1(z) = (h_1 - z - v_1 Q_2 \tilde{r}_2(z) Q_2 v_2)^{-1}$, где, в свою очередь, $\tilde{r}_2(z) = (\tilde{h}_2 - z)^{-1}$.

Так как оператор H'_F унитарно-эквивалентен оператору Фаддеева H_F , сингулярности резольвенты $(H'_F - z)^{-1}$ на физическом листе совпадают с соответствующими сингулярностями резольвенты $(H_F - z)^{-1}$ и, следовательно, они сосредоточены на спектре операторов h_0 и H , т.е. лишь на вещественной оси. При этом возмущение молекулярного собственного числа λ_2 за счет “ядерного” канала может быть найдено в результате решения уравнения

$$z = \lambda_2 - \tilde{\beta}(z). \quad (21)$$

Поскольку корни этого уравнения автоматически оказываются полюсами резольвенты оператора Фаддеева $(H_F - z)^{-1}$, на физическом листе они могут быть только вещественными. Резонансы, порождаемые молекулярным уровнем λ_2 , следует искать среди корней уравнения (21) на нефизических листах.

Напомним сначала, что точка λ_2 находится ниже порога E_0 . Поэтому мы имеем дело с аналитическим продолжением резольвенты $(H'_F - z)^{-1}$, а следовательно, и формы $\tilde{\beta}(z)$ на нефизический лист, склейка которого с физическим листом в окрестности точки λ_2 производится ниже порога E_0 . Энергия E_0 является в то же время нижней границей непрерывного спектра оператора h_2 и, следовательно, $\tilde{h}_2$. Это означает, что резольвента $\tilde{r}_2(z)$, присутствующая в выражении для $g_1(z)$, остается в процессе продолжения на физическом листе. Разумеется, область $\mathcal{D}$ на нефизическом листе, куда осуществляется это продолжение, должна выбираться достаточно “малой”, с диаметром порядка $\Gamma_R^{(1)}$. Кроме того, она должна быть отделена от луча $[E_0, +\infty)$.

Предположим, что аналитическое продолжение (ядра) резольвенты $r_1(z)$ допускает в окрестности резонансного полюса z_1 представление с явно факторизованным вычетом:

$$r_1(z) = \frac{A\varphi_1^{\text{res}}\langle \cdot, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle}{z_1 - z} + \tilde{r}_1(z). \quad (22)$$

Здесь через φ_1^{res} и $\tilde{\varphi}_1^{\text{res}}$ обозначены (обобщенные) собственные функции (“гамовские состояния”) гамильтониана h_1 , представляющие собой специфические резонансные решения уравнения Шредингера $h_1\psi_1 = z\psi_1$ соответственно при $z = z_1$ и $z = \bar{z}_1$. В координатном представлении асимптотика функций φ_1^{res} и $\tilde{\varphi}_1^{\text{res}}$ на больших расстояниях содержит только расходящиеся сферические волны. Комплексное число A представляет собой “нормировочную” константу. Член $\tilde{r}_1(z)$ описывает голоморфное в $\mathcal{D}$ слагаемое r_1 . Подчеркнем, что как ядро резольвенты $r_1(z)$ в целом, так и слагаемые (22) следует понимать на нефизическом листе в смысле обобщенных функций, например так, как это описано в [20]. Здесь мы имеем в виду, в частности, то обстоятельство, что вместо “ $\cdot$ ” в произведениях $\langle \cdot, \varphi_1^{\text{res}} \rangle$ и $\langle \cdot, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$ могут быть подставлены лишь достаточно “хорошие” элементы, образующие плотное подмножество $\mathcal{H}_1^{(0)}$ в $\mathcal{H}_1$. Например, в координатном представлении такими элементами являются основные функции, убывающие на больших расстояниях не медленнее чем экспоненциально. Их убывание должно быть более быстрым, нежели рост φ_1^{res} и $\tilde{\varphi}_1^{\text{res}}$.

Для двухчастичной функции Грина представление (22) обосновывается, например, в рамках формализма функций Йоста [21]. Возможность такого представления в задаче трех частиц следует из результатов [20], по крайней мере, в случае парных взаимодействий, экспоненциально убывающих в координатном представлении. Поэтому представлением (22) заведомо можно пользоваться в случае ядерных подсистем N -атомных молекул с $N = 2, 3$ (правда, полагая при этом, что кулоновским взаимодействием ядерных компонентов в гамильтониане h_1 можно пренебречь хотя бы на молекулярных расстояниях). При $N \geq 4$ представление (22) рассматривается как очень правдоподобная гипотеза.

Как и в разделе 2, мы будем считать, что в принципе возможна некоторая предельная процедура, при проведении которой $\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0$ и резонанс z_1 превращается в обычное собственное значение гамильтониана h_1 , а обе резонансные волновые функции φ_1^{res} и $\tilde{\varphi}_1^{\text{res}}$ сходятся (в слабом смысле) к одной и той же “нормальной” собственной функции φ_1 , т.е. для любого $f \in \mathcal{H}_1^{(0)}$

$$\langle \varphi_1^{\text{res}}, f \rangle \longrightarrow \langle \varphi_1, f \rangle, \quad \langle \tilde{\varphi}_1^{\text{res}}, f \rangle \longrightarrow \langle \varphi_1, f \rangle, \quad A \longrightarrow 1/\|\varphi_1\|^2 \quad (23)$$

и $\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0$.

Ясно, что анализ уравнения (21) в случае “малых” векторов b_{12} и/или b_{21} может быть проведен по тому же пути, что и исследование уравнения (3) в разделе 2. В нашем распоряжении имеется естественный кандидат на роль полюса функции $\tilde{\beta}(z)$ в окрестности уровня λ_2 – исходный “чисто ядерный” резонанс z_1 , который, однако, сдвигается благодаря присутствию в $\tilde{H}_F$ дополнительного канала с $\tilde{h}_2$. Мы укажем сейчас достаточные

условия малости упомянутого сдвига по сравнению с “ядерной” шириной $\Gamma_R^{(1)}$. Следует отметить, что наличие этого свойства у конкретных молекулярных систем исходя из физических соображений не вызывает никаких сомнений.

Предположим, что сильное v_1 и молекулярное v_2 взаимодействия таковы, что произведение $w_{12}(z) \equiv v_1 Q_2 \tilde{r}_2(z) Q_2 v_2$ оказывается равномерно ограниченной операторно-значной функцией $z \in \mathcal{D}$, т.е. $\|w_{12}\|_{\mathcal{D}} = \sup_{z \in \mathcal{D}} \|v_1 Q_2 \tilde{r}_2(z) Q_2 v_2\| < +\infty$. Пусть в то же время ширина $\Gamma_R^{(1)}$ удовлетворяет условию $\Gamma_R^{(1)} \ll E_R^{(1)} - E'_1$, где E'_1 — ближайший (снизу) к $E_R^{(1)}$ и, может быть, отличающийся от E_1 порог непрерывного спектра оператора h_1 . Тогда можно считать, что ядро нормализованного произведения $\hat{w}_{12}(z) = \frac{w_{12}(z)}{\|w_{12}\|}$ убывает в координатном представлении столь быстро, что $\hat{w}_{12}(z) \varphi_1^{\text{res}} \in \mathcal{H}_1^{(0)}$ и $\hat{w}_{12}^*(z) \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \in \mathcal{H}_1^{(0)}$. Более того, можно считать, что при $z \in \mathcal{D}$ имеют смысл как матричный элемент $\langle \hat{w}_{12}(z) \varphi_1^{\text{res}}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$, так и перекрестные произведения $\langle \hat{w}_{12}(z) \varphi_1^{\text{res}}, \tilde{r}_1(z) \cdot \rangle$, $\langle \hat{w}_{12}(z) \tilde{r}_1(z) \cdot, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$ и $\langle \hat{w}_{12}(z) \tilde{r}_1(z) \cdot, \tilde{r}_1(z) \cdot \rangle$, куда вместо “ $\cdot$ ” следует подставлять элементы из плотного множества $\mathcal{H}_1^{(0)}$, о котором говорилось выше. Мы будем предполагать далее, что норма $\|w_{12}\|_{\mathcal{D}}$ столь мала, что при фиксированном $\hat{w}_{12}(z)$ выполняется неравенство

$$\|w_{12}\|_{\mathcal{D}} \cdot \sup_{z \in \mathcal{D}} |A \langle \hat{w}_{12}(z) \varphi_1^{\text{res}}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle| \ll \Gamma_R^{(1)}.$$

В рамках перечисленных предположений можно показать (при $\|w_{12}\|_{\mathcal{D}} \rightarrow 0$), что для результирующего резонанса $\tilde{z}_1$, дающего полюс $g_1(z)$, справедливо представление $\tilde{z}_1 = z_1 + A \langle w_{12}(z_1) \varphi_1^{\text{res}}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle + O(\|w_{12}\|_{\mathcal{D}}^2)$. Поэтому возмущение z_1 за счет $\hat{h}_2$ оказывается действительно малым: $|\tilde{z}_1 - z_1| \ll \Gamma_R^{(1)}$.

3.2. Влияние “ядерной” ширины на “молекулярную”. Вернемся к уравнению (21), сделав дополнительное предположение о том, что ядерный v_1 и молекулярный v_2 потенциалы, а также молекулярная волновая функция φ_2 таковы, что произведения $\langle b_{12}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$ и $\langle \varphi_1^{\text{res}}, b_{21} \rangle$ имеют смысл (т.е. обе функции b_{12} и b_{21} являются элементами плотного множества $\mathcal{H}_1^{(0)}$, о котором говорилось в п. 3.1). Одновременно предполагаем, что имеют смысл также и произведения $\langle w_{12}(z) \tilde{r}_1'(z) b_{12}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$ и $\langle \tilde{r}_1'(z) w_{12}(z) \varphi_1^{\text{res}}, b_{21} \rangle$, $z \in \mathcal{D}$. В этом случае, очевидно, мы можем представить функцию $\tilde{\beta}(z)$ при $z \in \mathcal{D}$ в виде $\tilde{\beta}(z) = \frac{\tilde{a}}{z - \tilde{z}_1} + \tilde{\beta}^{\text{reg}}(z)$, совершенно аналогичном (3). Под $\tilde{a}$ понимаем вычет этой функции в полюсе $z = \tilde{z}_1$. Обозначение $\tilde{\beta}^{\text{reg}}(z)$ используем для голоморфного слагаемого. Таким образом, уравнение (21) может быть переписано как пара уравнений типа (9).

Будем предполагать, далее, что по крайней мере функция $b_{12} = v_1 \varphi_2$ столь мала (из-за протяженного межъядерного кулоновского барьера, подавляющего молекулярную волновую функцию на ядерных расстояниях), что $|\tilde{\beta}^{\text{reg}}(z)| \approx |\langle \tilde{r}_1(z) b_{12}, b_{21} \rangle| \leq C_{\mathcal{D}} \cdot \|b_{12}\| \cdot \|b_{21}\| \ll \Gamma_R^{(1)}$ и, кроме того,

$$|\tilde{a}| \approx |a| = C_a \cdot \|b_{12}\| \cdot \|b_{21}\| \ll \left(\Gamma_R^{(1)} \right)^2, \quad (24)$$

где $C_{\mathcal{D}} = \sup_{z \in \mathcal{D}} |\langle \tilde{r}_1(z) \hat{b}_{12}, \hat{b}_{21} \rangle|$, $C_a = |A| \cdot |\langle \hat{b}_{12}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle \langle \varphi_1^{\text{res}}, \hat{b}_{21} \rangle|$.

Повторяя почти буквально анализ уравнений (9) (см. раздел 2), мы установим, что уравнение (21) имеет только два решения в $\mathcal{D}$ – резонансы z_{nucl} и z_{mol} . Главные члены этих резонансов даются формулами (13) и (14). Если молекулярная энергия λ_2 практически совпадает с вещественной частью $E_R^{(1)}$ ядерного резонанса z_1 : $|E_R^{(1)} - \lambda_2| \ll \Gamma_R^{(1)}$, то находим

$$z_{\text{nucl}} \cong z_1 - i \frac{2a}{\Gamma_R^{(1)}}, \quad z_{\text{mol}} \cong \lambda_2 + i \frac{2a}{\Gamma_R^{(1)}}. \quad (25)$$

Согласно (24) $|a|/\Gamma_R^{(1)} \ll \Gamma_R^{(1)}$. Поэтому ясно, что полюс z_{nucl} заведомо принадлежит рассматриваемому нефизическому листу. Аналогичное утверждение для “молекулярного” резонанса z_{mol} следует из утверждения о том (см. п.3.1), что уравнение (21) не может иметь решений с $\text{Im } z > 0$ на физическом листе. Однако по крайней мере для достаточно малых $\Gamma_R^{(1)}$ можно провести непосредственную проверку выполнения неравенства $\text{Re } a < 0$, гарантирующего нахождение резонанса z_{mol} в области $\text{Im } z < 0$. В самом деле, мы замечаем, что

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1^{\text{res}}, v_2 \varphi_2 \rangle &= -\langle \varphi_1^{\text{res}}, (h_0 - \lambda_2) \varphi_2 \rangle = \\ &= -\langle (h_0 - z_1) \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle + (\lambda_2 - z_1) \langle \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle = \\ &= \langle v_1 \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle + (\lambda_2 - z_1) \langle v_1 \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Поэтому

$$a = -A \langle v_1 \varphi_2, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle \langle \varphi_1^{\text{res}}, v_1 \varphi_2 \rangle + A(z_1 - \lambda_2) \langle \varphi_2, v_1 \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle \langle \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle.$$

Согласно одному из наших предположений возможна предельная процедура (23). Последнее означает, что

$$a \Big|_{\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0} = -\frac{|\langle \varphi_1, v_1 \varphi_2 \rangle|^2}{\|\varphi_1\|^2} + o(1) + i \frac{\Gamma_R^{(1)}}{2} \left(\frac{\langle v_1 \varphi_2, \varphi_1 \rangle \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle}{\|\varphi_1\|^2} + o(1) \right). \quad (26)$$

Так что $\text{Re } a = -\frac{|\langle \varphi_1, v_1 \varphi_2 \rangle|^2}{\|\varphi_1\|^2} + o(1)$ действительно отрицательна, по крайней мере для достаточно малых значений $\Gamma_R^{(1)}$. (Конечно, мы исключаем здесь возможность случайного обращения в нуль скалярного произведения $\langle \varphi_1, v_1 \varphi_2 \rangle$.)

Итак, согласно (25) ширина $\Gamma_R^{(m)}$ резонанса z_{mol} зависит от $\Gamma_R^{(1)}$ при $\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0$ в точности, как в (15): $\Gamma_R^{(m)} \cong 4 \frac{|\text{Re } a|}{\Gamma_R^{(1)}}$.

Завершая обсуждение уравнения (21), сравним поведение $\Gamma_R^{(m)}$ в присутствии околорогового “ядерного” резонанса z_1 с противоположным случаем, когда такой резонанс отсутствует. Как и в разделе 2, мы смоделируем этот случай, отбрасывая полюсный член в разложении функции $\tilde{\beta}(z)$. После такого отбрасывания функция $\tilde{\beta}(z)$ ($\tilde{\beta}(z) \equiv \hat{\beta}^{\text{reg}}(z)$) голоморфна на $\mathcal{D}$ и уравнение (21) имеет в $\mathcal{D}$ лишь одно решение $z_R^{(2)}$, главные члены которого имеют вид

$$z_R^{(2)} \cong \lambda_2 - \langle \tilde{r}_1(\lambda_2 + i0) b_{12}, b_{21} \rangle = \lambda_2 - \langle \tilde{r}_1(\lambda_2 + i0) v_1 \varphi_2, v_2 \varphi_2 \rangle.$$

Так как $v_2\varphi_2 = -(h_2 - \lambda_2)\varphi_2$, находим

$$z_R^{(2)} \cong \lambda_2 + \langle v_1\varphi_2, \varphi_2 \rangle - \langle \tilde{r}_1(\lambda_2 + i0)v_1\varphi_2, v_1\varphi_2 \rangle.$$

Поэтому ширина $\Gamma_R^{(2)}$ резонанса $z_R^{(2)}$ описывается выражением

$$\Gamma_R^{(2)} \cong 2 \operatorname{Im} \langle \tilde{r}_1(\lambda_2 + i0)v_1\varphi_2, v_1\varphi_2 \rangle.$$

Это означает, что для оценки роли “ядерного” резонанса z_1 следует проводить сравнение “молекулярной” ширины $\Gamma_R^{(m)}$, наблюдаемой при его наличии, с величиной

$$|\operatorname{Im} \tilde{\beta}^{\operatorname{reg}}(\lambda_2 + i0)| \approx |\operatorname{Im} \langle \tilde{r}_1(\lambda_2 + i0)v_1\varphi_2, v_1\varphi_2 \rangle| \geq c'_D \|b_{12}\|^2,$$

где $c'_D = \inf_{z \in \mathcal{D}} |\langle \tilde{r}_1(z)\hat{b}_{12}, \hat{b}_{12} \rangle|$. В результате приходим к оценке типа (16):

$$\Gamma_R^{(m)} \sim \Gamma_R^{(2)} \cdot \frac{C'_a/c'_D}{\Gamma_R^{(1)}}, \quad (27)$$

где

$$C'_a = \frac{1}{\|b_{12}\|^2} |A \langle v_1\varphi_2, \tilde{\varphi}_1^{\operatorname{res}} \rangle \langle \varphi_1^{\operatorname{res}}, v_1\varphi_2 \rangle| \underset{\Gamma_R^{(1)} \rightarrow 0}{\cong} \frac{|\langle \hat{b}_{12}, \varphi_1 \rangle|^2}{\|\varphi_1\|^2}.$$

Вновь, как и в разделе 2, мы обнаруживаем, что если “ядерный” резонанс узкий ($\Gamma_R^{(1)} \ll C'_a/c'_D$), то по сравнению со случаем, когда такой резонанс отсутствует, имеет место значительное увеличение “молекулярной” ширины, определяемое фактором $(C'_a/c'_D)/\Gamma_R^{(1)}$.

В заключение раздела отметим, что формулы (25) и (26) могут быть использованы для практической оценки ширин $\Gamma_R^{(m)}$ в конкретных молекулах. Важная роль здесь принадлежит значениям $\varphi(0)$ (ср. с известной формулой Джексона [22]) соответствующих “молекулярных” функций φ_2 на малых (ядерных) расстояниях – в тех областях конфигурационного пространства, где сосредоточены ядерные взаимодействия v_1 . Для проведения таких оценок необходимы численные расчеты как упомянутых значений $\varphi(0)$, так и расчеты положения ядерных резонансов и отвечающих им резонансных волновых функций.

4. ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЙ РАСПАД МОЛЕКУЛЯРНОГО СОСТОЯНИЯ

В разделе 3 мы приняли, что ядерная подсистема молекулы описывается эффективным гамильтонианом (18). Предположим теперь, что ее начальное состояние задается чисто “молекулярной” волновой функцией φ_2 , $(h_2 - \lambda_2)\varphi_2 = 0$, $\|\varphi_2\| = 1$. Тогда последующая эволюция этой подсистемы описывается решением $\Psi(t)$ задачи Коши

$$i \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi, \quad \Psi|_{t=0} = \varphi_2.$$

Вероятность $P_{\text{mol}}(t)$ того, что в момент времени t ядерная подсистема все ещё остается в молекулярном состоянии φ_2 , определяется равенством $P_{\text{mol}}(t) = |\langle \Psi(t), \varphi_2 \rangle|^2$. Поскольку $\lambda_2 < E_0$ и тем самым канал непрерывного спектра “молекулярного” гамильтониана h_2 закрыт, разность $1 - P_{\text{mol}}(t)$ определяет вероятность распада состояния φ_2 по открытым каналам (ветвям) непрерывного спектра ядерного гамильтониана h_1 . Последние отвечают всем возможным вариантам синтеза и/или перестройки ядерных компонентов рассматриваемой молекулы при энергии $E < E_0$.

Нетрудно проверить, что $\Psi(t) = U_1^{(1)}(t) + U_1^{(2)}(t) + \varphi_2 \cdot u_2(t)$, где $U_1^{(1)} \in \mathcal{H}_1$, $U_1^{(2)} \in Q_2 \mathcal{H}_2$, $u_2 \in \mathbb{C}$ – компоненты решения $U = \begin{pmatrix} U_1^{(1)} \\ U_1^{(2)} \\ u_2 \end{pmatrix}$, $U \in \tilde{\mathcal{H}}$, эволюционной задачи

$$\begin{aligned} i \frac{dU}{dt} &= H'_F U, \\ U_1^{(1)} \Big|_{t=0} &= U_1^{(2)} \Big|_{t=0} = 0, \quad u_2 \Big|_{t=0} = 1, \end{aligned} \quad (28)$$

отвечающей оператору Фаддеева H'_F . Поэтому для оценки скалярного произведения $\langle \Psi(t), \varphi_2 \rangle = \langle U_1^{(1)}(t), \varphi_2 \rangle + u_2(t)$, определяющего вероятность $P_{\text{mol}}(t)$, мы воспользуемся стандартным интегральным представлением функции оператора через его резольвенту – в данном случае оператора эволюции для задачи (28) через резольвенту $(H'_F - z)^{-1}$:

$$\exp \{-i H'_F t\} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} dz e^{-izt} (H'_F - z)^{-1}. \quad (29)$$

Интегрирование в (29) ведется по находящемуся на физическом листе контуру γ , охватывающему в отрицательном направлении спектр оператора Фаддеева H'_F . Напомним, что последний является вещественным и представляет собой объединение спектров гамильтонианов h_0 и H . С учетом (29) находим

$$\langle \Psi(t), \varphi_2 \rangle = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} dz e^{-izt} \frac{1 - \langle g_1(z) b_{12}, \varphi_2 \rangle}{\lambda_2 - z - \langle g_1(z) b_{12}, b_{21} \rangle}. \quad (30)$$

На физическом листе норма обобщенной резольвенты $g_1(z)$ допускает оценку $\|g_1(z)\| \leq \text{dist}^{-1}(z, \sigma(\tilde{H}_F))$, где $\sigma(\tilde{H}_F)$ – спектр оператора $\tilde{H}_F$. Следовательно, при $t = 0$ подынтегральная функция в (30) ведет себя при $|\text{Im } z| \rightarrow \infty$ как z^{-1} . Поэтому легко проверить, что $\langle \Psi(0), \varphi_2 \rangle = 1$.

При условиях раздела 3 справедливо следующее

УТВЕРЖДЕНИЕ. *Поведение интеграла (30) при $t > 0$ описывается формулой*

$$\langle \Psi(t), \varphi_2 \rangle = \exp\{-iz_{\text{mol}}t\} + \varepsilon(t), \quad (31)$$

где слагаемое $\varepsilon(t) = O(\|b_{12}\|)$ является малым, $|\varepsilon(t)| \ll 1$ при всех $t > 0$. Если “ядерный” резонанс z_1 является настолько узким, что $\Gamma_R^{(1)} \ll E_0 - \lambda_2$, то имеет

место более детальное представление

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t), \varphi_2 \rangle = & \exp\{-iz_{\text{mol}}t\} \left[1 - \frac{4a}{\left(\Gamma_R^{(1)}\right)^2} + i \frac{2a_0}{\Gamma_R^{(1)}} + O(\|b_{12}\|) \right] + \\ & + \exp\{-iz_{\text{nuc}}t\} \left[\frac{4a}{\left(\Gamma_R^{(1)}\right)^2} - i \frac{2a_0}{\Gamma_R^{(1)}} + O(\|b_{12}\|) \right] + \tilde{\varepsilon}(t), \end{aligned} \quad (32)$$

где $a_0 \equiv A \langle \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle \langle b_{12}, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle = A \langle \varphi_1^{\text{res}}, \varphi_2 \rangle \langle v_1 \varphi_2, \tilde{\varphi}_1^{\text{res}} \rangle$. Как и в (31), фоновый член $\tilde{\varepsilon}(t) = O(\|b_{12}\|)$ является малым, $|\tilde{\varepsilon}(t)| \ll 1$ при всех $t > 0$.

Доказательство формулы (31) проводится путем оценки вклада в интеграл (30) только от резонансного полюса z_{mol} . В формулу (32) входит также и вклад полюса z_{nuc} , поскольку при выполнении условия $\Gamma_R^{(1)} \ll E_0 - \lambda_2$ выясняется, что по сравнению с ним фоновые слагаемые имеют больший порядок малости. Оценка вкладов от z_{mol} и z_{nuc} производится в результате деформации фрагментов контура γ , расположенных в окрестности молекулярной энергии λ_2 . Часть γ , находившаяся первоначально на верхнем берегу разреза, втягивается в область $\mathcal{D}$ на соседнем нефизическом листе (см. раздел 3). При этом явно выделяются вычеты подынтегральной функции (30) в z_{mol} и z_{nuc} . Аналогичная деформация части γ , находившейся на нижнем берегу, проводится в область $\text{Im } z < 0$ на физическом листе с тем, чтобы показать, что при $t > 0$ сопряженные резонансы $\bar{z}_{\text{mol}}$ и $\bar{z}_{\text{nuc}}$ вносят в интеграл (30) лишь очень малый вклад, учитываемый в фоновых слагаемых $\varepsilon(t)$ и $\tilde{\varepsilon}(t)$. Наряду с этим слагаемые $\varepsilon(t)$ и $\tilde{\varepsilon}(t)$ включают в себя вклад от дискретного спектра (с точностью до осциллирующих при изменении t сомножителей величина этого вклада остается практически неизменной, см. формулу (30)), а также (убывающий при $t \rightarrow \infty$ неэкспоненциально) вклад от еще неучтенного непрерывного спектра оператора H .

Формулы (31) и (32) показывают, что на большом временном интервале $0 \leq t < T$, $T \sim \frac{2}{\Gamma_R^{(m)}} |\ln \max |\varepsilon(t)||$, распад “молекулярного” состояния φ_2 при наличии узкого предпорогового “ядерного” резонанса действительно имеет экспоненциальный характер. Скорость этого распада определяется главным образом шириной $\Gamma_R^{(m)}$ “молекулярного” резонанса z_{mol} , т.е. конкретной величиной отношения $|\text{Re } a|/\Gamma_R^{(1)}$:

$$P_{\text{mol}}(t) \cong \exp\{-\Gamma_R^{(m)}t\} \cong \exp\left\{-\frac{4|\text{Re } a|}{\Gamma_R^{(1)}}t\right\}. \quad (33)$$

Авторы признательны А. М. Балдину за интерес к этой работе и поддержку.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научного отдела НАТО, проект № 930102, и Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 96-01-01292, № 96-01-01716 и № 96-02-17021.

Список литературы

- [1] *S. Albeverio.* Ann. Phys. 1972. V. 71. P. 167–276.
- [2] *J. S. Howland.* J. Math. Anal. Appl. 1975. V. 50. P. 415–437.
- [3] *J. Rauch.* J. Funct. Anal. 1980. V. 35. P. 304–315.
- [4] *W. Hunziker.* Commun. Math. Phys. 1990. V. 132. P. 177–188.
- [5] *М. Пуд, Б. Саймон.* Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [6] Evaluated Nuclear Structure Data Files (ENSDF). National Nuclear Data Center (NNDC) at Brookhaven National Laboratory (<http://www.tunl.duke.edu/NuclData>).
- [7] *F. Ajzenberg-Selove.* Nucl. Phys. A. 1983. V. 392. P. 1–216.
- [8] *D. R. Tilley, H. R. Weller, C. M. Cheves, R. M. Chasteler.* Nucl. Phys. A. 1995. V. 595. P. 1–170.
- [9] *V. B. Belyaev, A. K. Motovilov, W. Sandhas.* J. Phys. G. 1996. V. 22. P. 1111–1113 (LANL E-print nucl-th/9508017); JINR Rapid Communications. 1995. № 6 [74]–95. P. 5–8 (LANL E-print nucl-th/9601021).
- [10] *W. H. Breunlich, P. Kammel, J. S. Cohen, M. Leon.* Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 1989. V. 39. P. 311–356.
- [11] *Л. Д. Фаддеев.* Тр. МИАН СССР. 1963. Т. 69. С. 1–125.
- [12] *С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
- [13] *А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
- [14] *Ю. А. Куперин, К. А. Макаров, С. П. Меркурьев, А. К. Мотовилов.* ЯФ. 1988. Т. 48. С. 358–370.
- [15] *A. K. Motovilov.* J. Math. Phys. 1991. V. 32. P. 3509–3518.
- [16] *Л. Н. Богданова, В. Е. Маркушин, В. С. Мележик.* ЖЭТФ. 1981. Т. 81. С. 829–841.
- [17] *С. Л. Яковлев.* ТМФ. 1995. Т. 102. С. 323–336.
- [18] *F. V. Atkinson, H. Langer, R. Mennicken, A. A. Shkalikov.* Math. Nachr. 1994. Bd 167. S. 5–20.
- [19] *А. А. Шкаликов.* Матем. заметки. 1995. Т. 58. С. 945–948.
- [20] *A. K. MOTOVILOV.* ТМФ. 1996. Т. 107. С. 450–477 (LANL E-print nucl-th/9505028); Т. 107. С. 478–500 (LANL E-print nucl-th/9505029).
- [21] *В. де Альфаро, Т. Редже.* Потенциальное рассеяние. М.: Мир, 1986.
- [22] *J. D. Jackson.* Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 330–339.

Поступила в редакцию 17.VII.1996 г.

V. B. Belyaev, A. K. Motovilov

**PERTURBATION OF EMBEDDED
EIGENVALUE BY A NEARLY RESONANCE**

The case of quantum-mechanical system (including electronic molecules) is considered where the Hamiltonian admits a separation, in particular by the Faddeev method, of a weakly coupled channel. Width (i.e. the imaginary part) of the resonance generated by a discrete spectrum eigenvalue of the separated channel is studied in the case where the main part of the Hamiltonian gives rise to another resonance. It is shown that if real parts of these resonances coincide and while a coupling between the separated and main channels is sufficiently small then the width of the resonance generated by the separated (molecular) channel is inversely proportional to the width of the main (nuclear) channel resonance. This phenomenon being a kind of a universal law may play an important role in increasing the nuclear fusion probability in electronic molecules whose nuclear constituents have narrow pre-threshold resonances.