ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р - 2825

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б.Н. Захарьев

О МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИЙ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ

1966

Б.Н. Захарьев

О МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИЙ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ

1. Введение

Квантовая проблема N тел состоит в решении уравнения Шредингера

$$[\sum_{i=1}^{N} T_i + \sum_{i>j}^{N} V_{ij}]\Psi(r_1 \ldots r_N) = E\Psi(r_1 \ldots r_N) \quad (1)$$

с соответствующими граничными условиями. Это уравнение в частных производных и непосредственное его решение вызывает известные трудности.

Широко распространены методы разложения функций всей системы Ψ по полному набору известных вспомогательных функций. Быстрая сходимость указанного разложения может служить основанием для отбрасывания его бесконечного "хвоста". При этом задача сводится к определению коэффициентов главной части такого разложения, что значительно проще, чем решение (1).

Примером такого подхода является метод смешивания конфигураций в модели ядерных оболочек, когда Ψ представляется в виде комбинации одночастичных состояний ϕ-решений уравнения Шредингера для движения одной частицы в некоторой потенциальной яме:

$$\Psi(r_1 \ldots r_N) = \sum_{ij\ldots\ell}^{n} a_{ij\ldots\ell}\Phi_i(r_1)\phi_j(r_2)\ldots\phi_\ell(r_N) \quad . \quad (2)$$

Для коэффициентов $a_{ij\ldots\ell}$ с помощью стандартной процедуры из (1) и (2) получается система алгебраических уравнений с известными коэффициентами, решение которой не представляет принципиальной трудности[x)]. Сходимость разложений типа (2) исследовалась Михлиным[/4/].

Другим примером является метод Фешбаха[/3/], применимый к задачам рассеяния отдельных частиц сложными системами. Фешбах разлагает Ψ по полному набору состояний $\Phi_n(r_1 \ldots r_A)$ сложной системы A тел:

---

x) Обобщение метода смешивания конфигураций для задач рассеяния дано в лекциях Блоха.

$$\Psi(r r_1 \dots r_A) = \sum_n \phi_n(r)\Phi_n(r_1 \dots r_A) \quad . \qquad (3)$$

Если у сложной системы имеется непрерывный спектр, то в правой части (3) появится, кроме суммы по дискретному спектру, интеграл по состояниям непрерывного спектра.

Коэффициенты ϕ_n разложения (3) являются функциями координат налетающей частицы (в отличие от (2), где a – константа) и определяются из системы дифференциальных или интегродифференциальных уравнений, если система A тел обладает непрерывным спектром[x)].

Интересная модификация метода Фешбаха была предложена Ротенбергом[/1/], использовавшим в качестве базисных функций полный набор собственных функций S_n задачи Штурма-Лиувилля[/2/]. Эти функции не имеют такой наглядной физической интерпретации, как базисные функции в методе Фешбаха. Однако в ряде задач (упругое рассеяние, задачи о связанном состоянии) они обладают определенными преимуществами. Например, отсутствие непрерывного спектра в разложении по S_n очень удобно с точки зрения упрощения расчетов, да к тому же разложение по S_n обеспечивает, по-видимому, более быструю сходимость разложений.

Работа Ротенберга естественно наводит на мысль об использовании функций Штурма-Лиувилля в соответствующей модификации метода смешивания конфигураций. Аналогично может быть модифицирован метод Борна-Оппенгеймера. Выводу соответствующих уравнений посвящены разделы 4 и 5 данной работы.

Следует отметить, что вычисление функций Штурма-Лиувилля не сложнее, чем базисных функций возбужденных состояний в методах смешивания конфигураций, Фешбаха и Борна-Оппенгеймера.

Новые методы не применимы к задачам рассеяния с двумя и более открытыми каналами, т.е. их область применения ограничена лишь малыми энергиями, но во многих других случаях позволяют увеличить точность по сравнению со старыми методами без усложнения расчетов.

Необходимые свойства функций Штурма-Лиувилля описаны в разделе 2. В разделе 3 приводятся основные уравнения метода Ротенберга, модификации которого посвящена оригинальная часть данной работы.

---

x) Исследованию корректности этого метода посвящены работы[/5/].

2. Основные свойства собственных функций S –задачи Штурма-Лиувилля[x)]

Рассмотрим уравнение

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell_1(\ell_1+1)}{2\mu\rho^2} + a_{n\ell_1} V(\rho)\right] S_{n\ell_1}(\rho) = E_0 S_{n\ell_1}(\rho) \quad . \qquad (4)$$

Пусть $a_{10} = 1$, а E_0 – энергия связи основного состояния для уравнения Шредингера (4) при $n=1; \ell_1 = 0$ (предполагается, что в потенциале $V(\rho)$ имеется по крайней мере один уровень). Функция этого основного состояния является первой собственной функцией задачи Штурма-Лиувилля. С ростом a (при фиксированном ℓ_1) потенциальная яма в (4) углубляется, а уровни в ней опускаются. Если мы подберем такое $a_{n\ell}$, что n-ый уровень (при определенном ℓ_1) совпадает с E_0, то соответствующая волновая функция будет собственной функцией $S_{n\ell_1}$ задачи Штурма-Лиувилля.

Функции $S_{n\ell_1}$ с различными квантовыми числами ортогональны между собой с весом $V(\rho)$ и могут быть нормированы следующим образом:

$$\int S_{n\ell_1}(\rho) V(\rho) S_{n'\ell_1}(\rho)\, d\rho = -\delta_{nn'} \quad . \qquad (5)$$

Функции $S_{n\ell_1}$ образуют полный набор, по которому может быть разложена любая функция $\Psi(\rho)$ с непрерывной производной и удовлетворяющая краевым условиям данной задачи. При этом соответствующий ряд будет сходиться абсолютно и равномерно к $\Psi(\rho)$.

3. Метод Ротенберга[/1/]

Волновая функция $\Psi(\vec{R};\vec{\rho})$ двух связанных частиц (1 и 2), взаимодействующих с третьей (см. рис. 1), в системе центра масс трех частиц удовлетворяет уравнению:

$$\left[-\frac{1}{2M}\nabla^2_{\vec{R}} - \frac{1}{2\mu}\nabla^2_{\vec{\rho}} + V_{12}(\rho) + V_{13}(\bar{R},\bar{\rho}) + V_{23}(\vec{R},\vec{\rho})\right]\Psi(\vec{R},\vec{\rho}) = E\Psi(\vec{R},\vec{\rho}) \quad . \qquad (6)$$

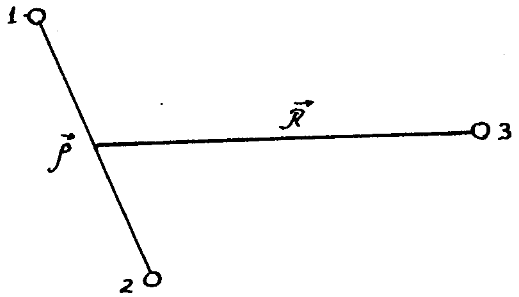
Пусть полная энергия системы E недостаточна для того, чтобы сложная частица (1 и 2) могла уйти на бесконечность в возбужденном состоянии. $\Psi(\vec{R};\vec{\rho}) \to 0$ при $\rho \to \infty$.

Разложим $\Psi(\bar{R},\bar{\rho})$ в ряд по функциям $S_{n\ell_1}$:

$$\Psi(\vec{R};\vec{\rho}) = \sum \phi^{n\ell_1'}_{\ell_2'}(R)\, Y_{\ell_1' m_1'}\left(\frac{\vec{\rho}}{\rho}\right) Y_{\ell_2' m_2}\left(\frac{\vec{R}}{R}\right) \frac{1}{\rho R} \cdot S_{n\ell_1'}(\rho) \quad . \qquad (7)$$

---

x) Мы рассмотрим только представляющий для нас интерес частный случай задачи Штурма-Лиувилля[/2/].



Р и с. 1.

Здесь ℓ_1' – момент относительного движения частиц 1 и 2, ℓ_2' – момент частицы 3 относительно центра масс частиц 1 и 2 .

Подставляя (7) в (6), прибавляя и вычитая в (6) в квадратных скобках aV_{12} , умножая (6) на $V_{12}(\rho) Y^*_{\ell_1 m_1}(\frac{\vec{\rho}}{\rho}) Y^*_{\ell_2 m_2}(\frac{\vec{R}}{R}) S_{k\ell_1}$ и интегрируя по ρ и углам векторов $\vec{R}$ и $\vec{\rho}$, получаем систему уравнений для функций $\phi^{n\ell_1}_{\ell_2}$:

$$\left[-\frac{1}{2M}\frac{d^2}{dR^2}+\frac{\ell_2(\ell_2+1)}{2MR^2}-(E-E_0)\right]\phi^{k\ell_1}_{\ell_2}(R)+\sum_{K'}\phi^{k'\ell_1}_{\ell_2}\int S_{k l_1}(\rho)V^2(\rho)[(a_{k'\ell_1}-1)\; S_{k'\ell_1}(\rho)\,d\rho-$$

$$-\sum_{n'\ell_1'\ell_2'}\phi^{n'\ell_1'}_{\ell_2'}\int S_{k\ell_1} Y^*_{\ell_1 m_1}(\frac{\vec{\rho}}{\rho}) Y^*_{\ell_2 m_2}(\frac{\vec{R}}{R}) V_{12}(\rho)[V_{13}+V_{23}]\cdot S_{n'\ell_1'} Y_{\ell_1' m_1'}(\frac{\vec{\rho}}{\rho}) Y_{\ell_2' m_2'}(\frac{\vec{R}}{R})\,d\rho\, d\Omega_\rho\, d\Omega_R=0. \quad (8)$$

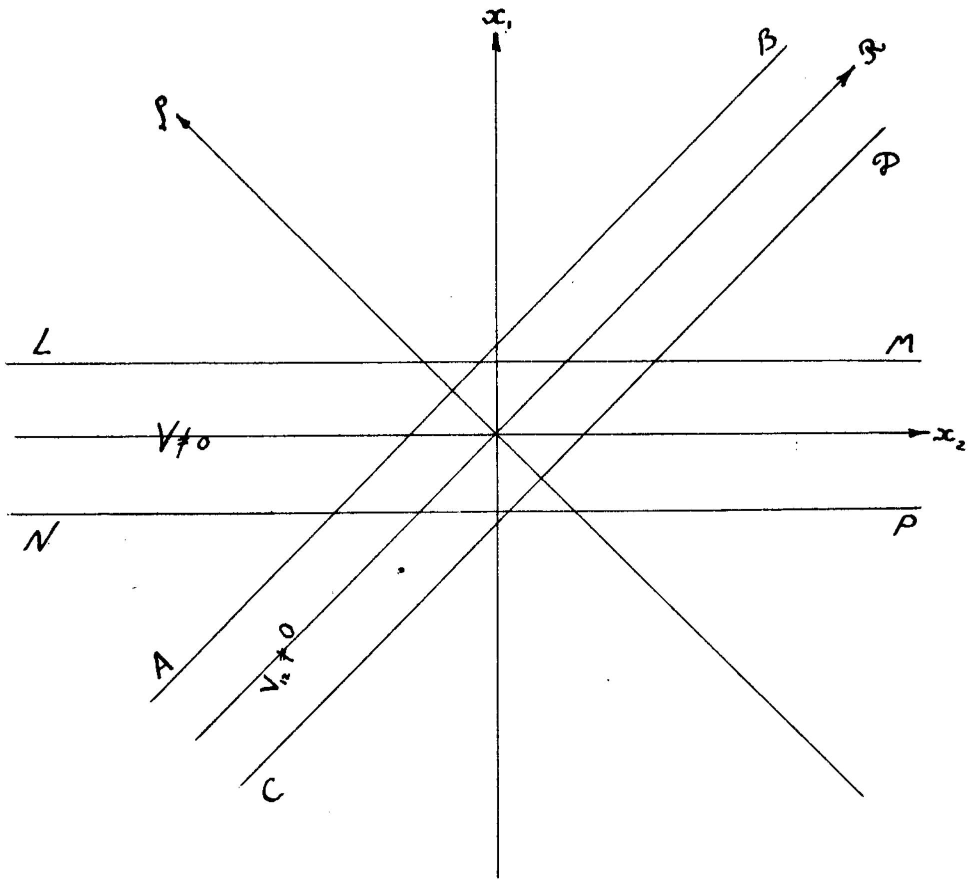
Функции ϕ должны обращаться в нуль в начале координат, ϕ^{10}_L при больших R пропорциональна $\sin(kR+\delta_L)$, а остальные стремятся к нулю при $R\to\infty$,

Удобство разложения по функциям $S_{n\ell}$ состоит в том, что они представляют собой дискретный ряд функций для любого потенциала и, следовательно, не возникает трудностей, связанных с учетом непрерывного спектра. Это особенно важно, когда в потенциале имеется лишь одно связанное состояние.

По-видимому, разложение по функциям S сходится быстрее, чем по собственным функциям относительного движения частиц 1 и 2[1].

Преимущества метода Ротенберга по сравнению с методом Фешбаха наглядно проявляются на простом примере одномерного движения двух связанных частиц 1 и 2 во внешнем поле. Пусть имеется лишь один дискретный уровень в потенциале V_{12} , который мы выберем в виде прямоугольной ямы с шириной ρ_0 . В качестве внешнего поля, которое будем для простоты считать действующим только на частицу 1, возьмем прямоугольный барьер V_1 с шириной „b" .

В плоскости $x_1 x_2$ ($x_1; x_2$ – координаты частиц 1 и 2) картина расположения областей действия потенциалов имеет вид, представленный на рис. 2.



Р и с. 2.

На рис. 2 нанесены оси $\rho = x_1 - x_2$; $R = \frac{x_1+x_2}{2}$. Потенциал V_{12} отличен от нуля в полосе между линиями AB и CD , а потенциал V_1 – в полосе между LM и NP . Если кинетическая энергия движения центра масс пары (1, 2) меньше энергии связи (1,2), то частицы (1, 2) не смогут расходиться далеко друг от друга и функция $\Psi(R,\rho)$ будет экспоненциально затухать с ростом $|\rho|$ вне полосы, ограниченной AB и CD . Таким образом, область, где $\Psi(R,\rho)$ существенно отлична от нуля, лежит вдоль этой полосы. При $R\to\pm\infty$ зависимость Ψ от ρ точно пропорциональна волновой функции основного состояния относительного движения двух частиц, 1 и 2, в поле V_{12}. В области вблизи пересечения полос ABCD и LMNP относительное движение частиц 1 и 2 возмущается внешним полем V_1 , и зависимость $\Psi(R,\rho)$ от ρ при фиксированном R будет некоторой сложной функцией, о которой мы знаем совершенно определенно только то, что она экспоненциально затухает вне области $|\rho|<\rho_0$. Условно мы изобразим эту зависимость на рис. 3а.

Разложению (7) $\Psi(R,\rho)$ по $S_{n\ell}$ соответствует представление кривой 3а в виде суперпозиции гармоник (3б). В методе же Фешбаха кривая (3а) описывается суперпозицией функции связанного состояния и функций непрерывного спектра относительного движения частиц 1 и 2 (одна из функций изображена на рис.3в). Ясно, что 3а можно получить с помощью небольшого числа функций S , затухающих,как и Ψ , при больших $|\rho|$. В случае же разложения Ψ по методу Фешбаха необходимо добиться, чтобы функции непрерывного спектра, интерферируя между собой, дали затухание с ростом $|\rho|$, кроме того, правильно описали поведение Ψ при малых $|\rho|$. Это более сложная задача.

4. Модификация метода смешивания конфигураций

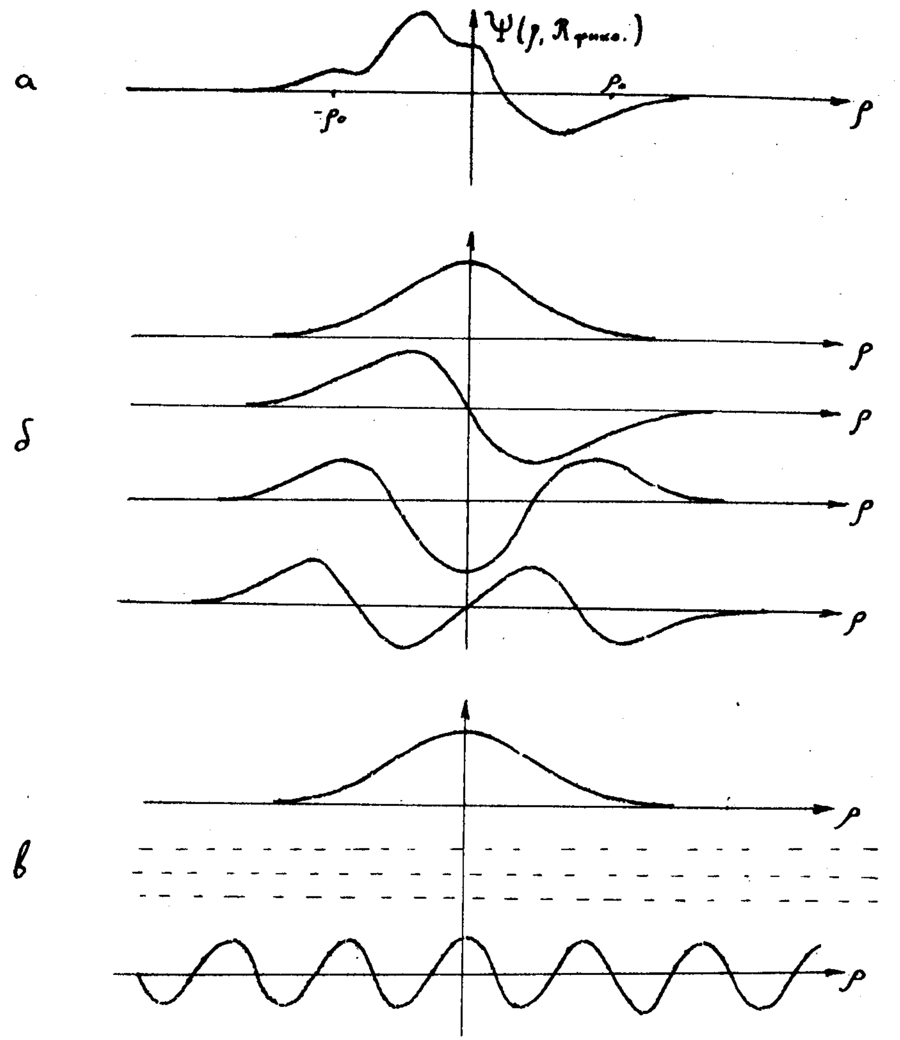
Использование функций Штурма-Лиувилля может представлять интерес в задаче о связанном состоянии системы многих тел, когда самосогласованное поле таково, что в нем мало дискретных уровней, и в методе смешивания конфигураций нужно учитывать непрерывный спектр.

Рассмотрим , к примеру, задачу об одномерном движении двух тел во внешем поле. Сказанное ниже нетрудно обобщить на случай большого числа частиц и измерений.

Функция системы $\Psi(x_1;x_2)$ определяется уравнением:

$$\left[-\frac{1}{2\mu_1}\frac{d^2}{dx_1^2}-\frac{1}{2\mu_2}\frac{d^2}{dx_2^2}+V_1(x_1)+V_2(x_2)+V_{12}(x_1-x_2)\right]\Psi = E\Psi \qquad (9)$$

с граничным условием: $\Psi\to 0$ при $x_1;x_2\to\infty$.



Р и с . 3.

Разложим $\Psi(x_1;x_2)$ по функциям Штурма-Лиувилля S_n :

$$\Psi(x_1;x_2)=\sum_{ij} C_{ij}\, S_i(x_1)S_j(x_2)\ , \qquad (10)$$

где, например, функции $S_i(x_1)$ удовлетворяют уравнениям:

$$\left[-\frac{1}{2\mu_1}\frac{d^2}{dx_1^2}+\alpha_i V_r(x_1)\right] S_i(x_1)=\epsilon_0^i S_i(x_1) \quad . \tag{11}$$

Подставим (10) в (9), прибавим и вычтем в квадратных скобках в (9) $\alpha_i V_1+\alpha_j V_2$, умножим затем обе части уравнения на $S_m(x_1)S_n(x_2)V_1V_2$ и проинтегрируем по x_1 и x_2 :

$$C_{mn}(E-\epsilon_0^1-\epsilon_0^2)+\sum_i C_{in}(1-\alpha_i)\int S_m(x_1)V_1^2 S_i(x_1)\,dx_1+\sum_j C_{mj}(1-\alpha_j)\int S_n(x_2)V_2^2 S_j(x_2)\,dx_2-$$

$$-\sum_{ij} C_{ij}\int S_m S_n V_{12} V_1 V_2 S_i S_j\, dx_1 dx_2=0 \quad . \tag{12}$$

Условие разрешимости системы (12) относительно коэффициентов C_{mn} определяет собственные значения задачи (9), а подставляя C_{ij} из (12) в (10), получим искомую волновую функцию.

При модификации метода Блоха–Жилле может быть полезно разложение Ψ одновременно по обычным волновым функциям ϕ_i и по S_j :

$$\Psi(x_1;x_2)=\sum_{ij} C_{ij}\, S_i(x_1)\phi_j(x_2) \tag{13}$$

или его симметризованный по частицам 1 и 2 аналог.

5. Модификация метода Борна–Оппенгеймера

(Разложение $\Psi(R,\rho)$ по функциям S, зависящим от R как от параметра)

Рассмотрим случай одномерного движения трех тел. В системе центра масс уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left[-\frac{1}{2M}\frac{d^2}{dR^2}-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{d\rho^2}+V_{12}(\rho)+V_{13}(\rho,R)+V_{23}(\rho,R)\right]\Psi=E\Psi \quad , \tag{14}$$

где ρ – расстояние между частицами 1 и 2, R – расстояние от частицы 3 до центра масс частиц 1 и 2. При каждом фиксированном значении R разложим $\Psi(R,\rho)$ по функциям Штурма–Лиувилля $S_n(\rho,R)$, соответствующим уравнению:

$$\left\{-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{d\rho^2}+\alpha_n[V_{12}(\rho)+V_{13}(\rho,R)+V_{23}(\rho,R)]\right\} S_n(\rho,R)=E_0 S_n(\rho,R) \quad . \tag{15}$$

$$\Psi(R,\rho)=\sum_n \phi_n(R)S_n(\rho,R) \quad . \tag{16}$$

Поскольку в (15) входят все три потенциала, а не только $V_{12}(\rho)$, как в (4), можно надеяться, что разложение по $S_n(\rho,R)$ будет сходиться быстрее, чем по $S_n(\rho)$.

Подставим (16) в (14), затем прибавим и вычтем в квадратных скобках в (14) $\alpha_n[V_{12}+V_{13}+V_{23}]$. Полученное уравнение умножим на $S_m(\rho,R)[V_{12}+V_{13}+V_{23}]$ и проинтегрируем по ρ . В результате получим

$$-\frac{1}{2M}\frac{d^2}{dR^2}\phi_m(R)+\sum_n(1-\alpha_n)O_{mn}(R)\phi_n(R)-\frac{1}{2M}\sum_n K_{mn}(R)\phi_n(R)-$$

$$-\frac{1}{2M}\sum_n Q_{mn}(R)\frac{d}{dR}\phi_n(R)=(E_0-E)\phi_m \quad , \tag{17}$$

где

$$O_{mn}(R)=\int S_m(\rho,R)[V_{12}(\rho)+V_{13}(\rho,R)+V_{23}(\rho,R)]S_n(\rho,R)\,d\rho \quad , \tag{18}$$

$$K_{mn}(R)=\int S_m(\rho,R)[V_{12}(\rho)+V_{13}(\rho,R)+V_{23}(\rho,R)]\frac{d^2}{dR^2}S_n(\rho,R)\,d\rho \; , \tag{19}$$

$$Q_{mn}(R)=\int S_m(\rho,R)[V_{12}(\rho)+V_{13}(\rho,R)+V_{23}(\rho,R)]S_n(\rho,R)\,d\rho\,\frac{d}{dR}S_n(\rho,R)\,d\rho \, . \tag{20}$$

Аналогично тому, как разложение (7) и система (8) соответствуют разложению и системе уравнений в методе Фешбаха, так разложение (16) и система (17) соответствуют методу Борна–Оппенгеймера. Основное отличие заключается в появлении нового члена с O_{mn} в (17) и в том, что коэффициенты K_{mn} и Q_{mn} содержат под интегралом дополнительный множитель $V_{12}+V_{13}+V_{23}$.

В трехмерном случае предлагаемый метод может быть практически полезен только при определенной форме потенциалов взаимодействия между частицами, допускающей разделение переменных, во вспомогательной задаче вычисления базисных функций. К таким потенциалам относится, в частности, кулоновский /6/.

Представляет определенный интерес обобщение задачи Штурма–Лиувилля на случай системы связанных дифференциальных уравнений второго порядка.

Выражаю благодарность В.Б. Беляеву, Л.Г. Заставенко, Ойдовын Лхагве и С.А. Дроздову за терпение, проявленное ими при обсуждении вопросов, связанных с данной работой.

Литература

1. M.Rotenberg . Применение функций Штурма к шредингеровской задаче трех тел. Ann. of Phys., 19, 262 (1962) .
2. Р. Курант, Д. Гильберт. Методы математической физики, том 1, стр. 250. Гостехиздат, М., 1951.
3. H.Festbach . Единая теория ядерных реакций. Ann. of Phys., 5,357 (1958); 19,287 (1962).
4. С.Г. Михлин. Прямые методы в математической физике, А5, Гостехиздат, М, 1950.
5. И. Амирханов, Л.Г. Заставенко, Б.Н. Захарьев. К вопросу о корректности метода единой теории ядерных реакций. Препринт ОИЯИ, Р-2310, Дубна, 1965;
   Б.Н. Захарьев, Р.К. Калинускас. О связанном состоянии трех частиц. Ann. der Phys., 16,305 (1965);
   Б.Н. Захарьев, С.Н. Соколов. О виртуальных возбуждениях сложных частиц. Ann. der Phys., 15,183 (1965).
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика, стр. 331. Физматгиз, М, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 июля 1966 года.