



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

00-146

P11-2000-146

В.И.Кочкин

О ПОСТРОЕНИИ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОГО БАЗИСА
В ПРОБЛЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

2000

Уравнение Шредингера для трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона, в координатах Якоби \bar{x}_i, \bar{y}_i ($i = 1, 2, 3$) имеет вид [4, 5, 6]:

$$(-\Delta\bar{x}_i - \Delta\bar{y}_i + \sum_{n=1}^3 \frac{q_n}{|\bar{x}_n|} - E)\psi = 0, \quad (1)$$

где

$$\bar{x}_i = \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_1(m_j + m_k)}} (\bar{r}_k - \bar{r}_j),$$

$$\bar{y}_i = \sqrt{\frac{m_i(m_j + m_k)}{m_1(m_1 + m_2 + m_3)}} \left(\bar{r}_i - \frac{m_j \bar{r}_j + m_k \bar{r}_k}{(m_j + m_k)} \right), \quad i, j, k = 1, 2, 3,$$

$$q_i = 2Z_j Z_k \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_1(m_j + m_k)}},$$

m_i, Z_i, \bar{r}_i — соответственно массы, заряды и радиусы-векторы каждой из i частиц, $i = 1, 2, 3$.

В гиперсферических координатах ρ, α_i, θ_i при $|\bar{x}_i| = \rho \cos(\alpha_i/2); |\bar{y}_i| = \rho \sin(\alpha_i/2); \cos(\theta_i) = (\bar{x}_i \bar{y}_i) / |\bar{x}_i| |\bar{y}_i|$ уравнение (1) принимает вид:

$$\left[-\frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{4}{\rho^2} \square + \frac{1}{\rho} \sum_{n=1}^3 \frac{q_n}{\cos(\alpha_n/2)} + \frac{2L(L+1)}{\rho^2 \cos^2(\alpha_1/2)} - E \right] \psi_L = 0 \quad (2)$$

Здесь

$$\square = \frac{1}{\sin^2 \alpha} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sin^2 \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right].$$

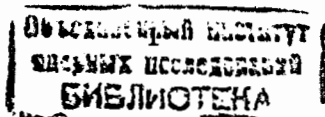
Разделяя в уравнении (2) радиальную и угловую части [1] и рассматривая ρ как параметр, приходим к уравнению:

$$\left(\square - \frac{\rho}{4} \sum_{m=1}^3 \frac{q_m}{\cos(\alpha_m/2)} - \frac{L(L+1)}{2 \cos^2(\alpha_1/2)} + \lambda_n(\rho) \right) \varphi_n(\rho, \Omega) = 0 \quad (3)$$

$\rho = const, 0 < \rho < \infty, 0 \leq \alpha_i, \theta_i \leq \pi$.

Уравнение (3) при граничных условиях $\varphi_n(0) = \varphi_n(\infty) = 0, n = 1, 2, \dots, N$ является основным уравнением для определения базиса гиперсферических поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$ и решается численно на ЭВМ вариационным методом с помощью анзаца, имеющего вид [2]:

$$\varphi_n(\rho, \alpha, \theta) = \sum_{k=1}^N C_k^{(n)}(\rho) \chi_k(\rho, \alpha, \theta), \quad (4)$$



ρ — параметр, $n = 1, 2, \dots, N$; здесь $C_k^{(n)}$ — неизвестные числовые коэффициенты, а $\chi_k(\rho, \alpha, \theta)$ — заданные пробные функции, обеспечивающие асимптотическое поведение решения $\Psi_L(\rho, \Omega)$ в уравнении (2) как при $\rho \rightarrow 0$, так и при $\rho \rightarrow \infty$. Пробные функции χ_k для малых, средних и больших значений ρ имеют вид [3]:

$$\begin{cases} \chi_k = \Phi_{n_k l_k}^{(3)}(\alpha_3) P_{l_k}(\cos \theta_3), 1 \leq k \leq N_1, 0 < \rho \leq 5 \\ \chi_k = \Phi_{n_k l_k}^{(2)}(\alpha_2) P_{l_k}(\cos \theta_2), N_1 < k \leq N_1 + N_2, 5 < \rho \leq 15 \\ \chi_k = \sin^{l_k} \alpha_3 C_{n_k - l_k - 1}^{l_k + 1}(\cos \alpha_3) P_{l_k}(\cos \theta_3), N_1 + N_2 < k \leq N, 15 < \rho \end{cases} \quad (5)$$

$$\Phi_{nl}^{(m)}(\alpha) = \Phi_{nl} \left(\frac{q_m}{n} \rho \cos \frac{\alpha}{2} \right), \quad \Phi_{nl}(t) = e^{-t/2} t^l L_{n-l-1}^{2l+1}(t), \quad (6)$$

$P_l(x)$, $L_m^k(t)$, $C_n^m(x)$ — многочлены Лагранжа, Лагерра, Гегенбауэра. После определения гиперсферического базиса поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$ общее решение уравнения (2) представляется в виде:

$$\Psi_L(\rho, \Omega) = \rho^{-5/2} \sum_{n=1}^N U_n(\rho) \varphi_n(\rho, \Omega), \quad (7)$$

где снова $U_n(\rho)$ есть неизвестные радиальные функции.

Из уравнения (2) для неизвестных функций $U_n(\rho)$ после определения $\varphi_n(\rho, \Omega)$ получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_n(\rho) + E \right] U_n(\rho) + \sum_{k=1}^n \left[Q_{nk} k \frac{d}{d\rho} + \frac{d}{d\rho} Q_{nk} - P_{nk} \right] U_k(\rho) = 0, \quad (8)$$

$$n = 1, 2, \dots, N; \varepsilon_n(\rho) = 4/\rho^2 \lambda_n(\rho); Q_{nk}(\rho) = \langle \varphi_n | \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi_k \rangle, P_{nk} = \langle \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi_n | \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi_k \rangle.$$

Далее речь идет только о решении уравнения (3).

Итак, решая уравнение (3) для поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$, после подстановки (4) по методу Галеркина получаем систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных числовых коэффициентов $C_k^{(n)}$ в виде [8]:

$$\sum_{k=1}^N (D_{nk} - \frac{\rho}{4} \sum_{m=1}^3 q_m U_{nk}^m - W_{nk} + \lambda_n S_{nk}) C_k^{(n)} = 0, n = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

$$S_{nk} = \langle \chi_n | \chi_k \rangle; \quad D_{nk} = \langle \chi_n | \square | \chi_k \rangle$$

$$U_{nk}^{(m)} = \langle \chi_n | U^{(m)} | \chi_k \rangle; \quad W_{nk} = \left\langle \chi_n \left| \frac{1}{\cos_2(\alpha_1/2)} \right| \chi_k \right\rangle.$$

В матричном виде уравнение (9) будет

$$(D - U - W + \lambda \bar{S}) \bar{c} = 0, \quad (10)$$

где $D = (D_{nk})$; $U = \sum_{m=1}^3 U_{nk}^{(m)}$; $W = (W_{nk})$; $\bar{S} = (S_{nk})$.

Обозначая $A = D - U - W$, $\hat{S} = -S$ получим

$$A \bar{c} = \lambda S \bar{c}. \quad (11)$$

Матричное уравнение (11) есть обобщенная алгебраическая задача на собственные значения. Величины Q_{nk} , P_{nk} в системе уравнений (8) в данной задаче эффективно и удобно вычисляются по соотношениям

$$Q_{nk} = -\frac{1}{4} (\lambda_k - \lambda_n)^{-1} V_{nk}; \quad P_{nk} = -Q_{nk}^2;$$

$$V_{nk} = \langle \varphi_n | \sum_{m=1}^3 \frac{q_m}{\cos(\alpha_m/2)} | \varphi_k \rangle.$$

Работа с программой вычисления гиперсферического базиса показала, что, во-первых, при увеличении размерности матрицы системы и, во-вторых, при больших значениях параметра ρ происходит потеря точности, что затрудняло численную проверку сходимости вариационного метода.

Было найдено, что трудности возникают при вычислении двойных интегралов, например, вида

$$S_{ki} = \int_0^\pi d\alpha_3 \sin^2 \alpha_3 \Phi_{n_i l_i}^{(3)}(\alpha_3) \int_{-1}^1 dz_3 \Phi_{n_k l_k}^{(2)}(\alpha_2) P_{l_i}(z_3) P_{l_k}(z_2),$$

$$2 \cos^2(\alpha_2/2) = 1 + \cos \alpha_3 \cos \omega_1 + z_3 \sin \alpha_3 \sin \omega_1, \quad (12)$$

$$z_2 = \frac{z_3 \sin \alpha_3 \cos \omega_1 - \cos \alpha_3 \sin \omega_1}{\sqrt{1 - (\cos \alpha_3 \sin \omega_1 + z_3 \sin \alpha_3 \sin \omega_1)^2}};$$

здесь ω_i — фиксированные константы; α_i , z_i — переменные интегрирования.

На отрезке внешнего интегрирования $[0, \pi]$ были определены и выделены участки, в которых происходит потеря точности при вычислении всего подынтегрального выражения в (12) и подобных случаях.

Расширение используемого гиперсферического базиса и увеличение области значений параметра ρ в сторону его больших значений позволило рассчитать сечения упругого и неупругого рассеяния в системах ${}^3,4\text{Hed}\mu$ вблизи порога $d\mu$ [7].

Иллюстрация сходимости метода расчета приведена в таблице 1.

Таблица 1

Система ${}^4\text{Hed}\mu$, $\rho = 15.0$, $L = 0$.

N_1	N_2	N_3	$\varepsilon_2 (\varepsilon_n = 4/\rho^2 \lambda_n)$
3	3	105	-1.0309243
3	3	210	-1.0315926
3	3	276	-1.0316257
3	3	300	-1.0316326

Список литературы

- [1] J.H.Masek. J.Phys. B1, 831 (1968).
- [2] В.Б. Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. Сообщения ОИЯИ, P4-92-297, Дубна, 1992.
- [3] В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. Сообщения ОИЯИ, P4-93-460, Дубна, 1993.
- [4] V.V.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Phys. Rev., A52, 1765 (1995).
- [5] V.V.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Hyperfine Interactions 101/102 (1996) 359-363.
- [6] V.V.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Z.fur Phys. D, 41, 239-244 (1997).
- [7] O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin and E.A.Kalganova. Resonances anf near-threshold scattering in ${}^3,4\text{Hed}\mu$. Hyperfine Interactions 118 (1999) 235-237.
- [8] В.И.Кочкин. Программа на языке ФОРТРАН... Сообщение ОИЯИ, P11-96-130, Дубна, 1996.

Рукопись поступила в издательский отдел

21 июня 2000 года.