объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-85-645

С.И.Виницкий, В.М.Дубовик

ТОРОИДАЛЬНЫЕ КООРДИНАТЫ ДЛЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

Направлено на Всесоюзную конференцию
по теории систем нескольких частиц
с сильным взаимодействием
(Киев, 17-19 сентября 1985 г.)
и в "Journal of Physics"

1985

В задаче трех тел используются различные системы координат, например, гиперсферические[1], периметрические[2], сфероидальные[3]. Интересно установить взаимосвязи между ними и понять преимущество выбора той или иной системы координат при решении задачи трех тел.

В работе[4] были введены естественные переменные, которые позволяют установить соответствие между различными системами координат. В данной работе рассмотрена параметризация естественных переменных[4] в тороидальных координатах и показано, как последние связаны с цилиндрическими координатами на трехмерной сфере.

Рассмотрим систему трех частиц a, b и c с массами M_a, M_b и M_c $(M_a = M_b)$ и ограничимся случаем полного момента системы $J = 0$. В системе центра масс введем якобиевские переменные: радиус-вектор $\vec{R}$, соединяющий частицы a и b ("ядра"), и радиус-вектор $\vec{r}$, соединяющий центр масс ядер и частицу c. В этом случае гамильтониан имеет вид $(e = \hbar = M_c = 1)$:

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{2M}\Delta_{\vec{R}} + V , \qquad (1)$$

где

$$m^{-1} = 1 + (M_a + M_b)^{-1},$$
$$M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1},$$

$V = V_{ac} + V_{ab} + V_{bc}$, V_{ij} – потенциальная энергия взаимодействия i-ой и j-ой частиц.

Далее, следуя работе[4], введем естественные переменные $\{\vec{r}',$

$$\vec{r}' = 2\vec{r}/R , \quad \mathcal{R} = \sqrt{\rho}\, R , \quad \rho = 1 + \frac{m}{4M} r'^2 , \quad d\tau = \frac{4\pi}{\rho^3} d\vec{r}' \mathcal{R}^5 d\mathcal{R} \qquad (2)$$

Тогда гамильтониан (1) примет вид (при $J = 0$):

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2M}\frac{1}{\mathcal{R}^5}\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}}\mathcal{R}^5\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} - \frac{1}{2m}\frac{4\rho^2}{\mathcal{R}^2}\Delta_{\vec{r}'} + \frac{1}{M}\frac{\rho}{\mathcal{R}^2}(\vec{r}'\cdot\nabla_{\vec{r}'}) + V . \qquad (3)$$

Перейдем к описанию в терминах гиперрадиуса системы трех час тиц $\mathcal{R}_G = \sqrt{M}\,\mathcal{R}$ и переменной $\vec{r}' = \sqrt{\frac{m}{4M}}\,\vec{r}'$:

$$\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\mathcal{R}_G^5}\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}_G}\mathcal{R}_G^5\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}_G} + \frac{4}{\mathcal{R}_G^2}\Box^*\right] + V\right\}\Psi = E\Psi , \qquad (4)$$

где $\Box^* = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\rho^2\Delta_{\vec{r}'} - \rho(\vec{r}'\cdot\nabla_{\vec{r}'})\right]$ – угловая часть оператора Лапласа в четырехмерном пространстве $\{x', y', z', \mathcal{R}\}$. Отметим, что оператор $\Box^*$ по форме совпадает с оператором уравнения Хиллерааса для атома водорода в четырехмерном импульсном пространстве[5]. Параметризация оператора $\Box^*$ в сферических и сфероидальных координатах рассмотрена в работах[4, 6]. В тороидальных координатах[7] (расстояние между фокусами $R = 2d$ в системе координат $\{x', y', z'\}$ равно 2)

$$x' = \xi\cos\varphi , \quad y' = \xi\sin\varphi , \quad \xi = \frac{\operatorname{sh}\mu}{\operatorname{ch}\mu - \cos\eta} , \quad z' = \frac{\sin\eta}{\operatorname{ch}\mu - \cos\eta} . \qquad (5)$$

этот оператор имеет вид:

$$\Box^* = \operatorname{ch}^2\mu\left[\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + \frac{1}{\operatorname{th}\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}\operatorname{th}\mu\frac{\partial}{\partial\mu} + \frac{1}{\operatorname{sh}^2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] . \qquad (6)$$

Представим собственные функции оператора

$$\Box^*\Phi = -\lambda\Phi \qquad (7)$$

в виде произведения функций[8]

$$\Phi(\eta, \mu, \varphi) = F(\eta)\, G(\mu)\, e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi} . \qquad (8)$$

Тогда уравнение (7) можно записать следующим образом :

$$\frac{1}{F}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}F + \frac{1}{G}\frac{1}{\operatorname{th}\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}\operatorname{th}\mu\frac{\partial}{\partial\mu}G - \frac{m^2}{\operatorname{sh}^2\mu} = -\frac{\lambda}{\operatorname{ch}^2\mu} . \qquad (9)$$

Отсюда следует, что $F(\eta) = e^{ik\eta}/\sqrt{2\pi}$, а $G(\mu)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{1}{\operatorname{th}\mu}\frac{d}{d\mu}\operatorname{th}\mu\frac{d}{d\mu}G - k^2 G - \frac{m^2}{\operatorname{sh}^2\mu}G = -\frac{\lambda}{\operatorname{ch}^2\mu}G , \qquad (10)$$

где $G(\mu)$ зависит от квантового числа ℓ , а также от k и от

m . После замены переменной $u = sech^2\mu$ уравнение (10) примет вид $(u \in [0,1])$:

$$\frac{d}{du}(1-u)u\frac{d}{du}G + \frac{k^2 G}{4u} - \frac{mG}{4(1-u)} = -\frac{\lambda G}{4}. \qquad (11)$$

Положив $G_{klm} = u^{k/2}(1-u)^{m/2} g(u)$, приходим к уравнению для гипергеометрической функции

$$(u^2-u)g'' + [(1+p)u - q]g' - \ell(p+\ell)g = 0, \qquad (12)$$

где $p = 1+k+m$, $q = 1+k$, $k = 0,1,2,\ldots$ и $\ell(p+\ell) = = 1/4[\lambda - (k+m)(k+m+2)]$. Т.о. решением уравнения (12) при целом ℓ являются полиномы Якоби[7], а собственные значения уравнения (7) определяются соотношением

$$\lambda = 4\ell(1+k+\ell+m) + (k+m)(k+m+\ell). \qquad (13)$$

Окончательно, выражение для функции Φ имеет вид:

$$\Phi_{klm}(\eta,\mu,\varphi) = const\, J_\ell(1+k+m, 1+k, sech^2\mu) \cdot th^m\mu \cdot sech^k\eta\; e^{ik\eta}e^{im\varphi}. \qquad (14)$$

Отметим, что переменные четырехмерного уравнения (7) разделяются в тороидальной системе координат в отличие от уравнения Гельмгольца в трехмерном пространстве.

Введение переменной $u = \cos^2\vartheta$ соответствует переходу к цилиндрическим координатам на трехмерной сфере[9]:

$$x' = \xi\cos\varphi,\quad y' = \xi\sin\varphi,\quad \xi = \frac{\sin\vartheta}{1-\cos\vartheta\cos\eta},\quad z' = \frac{\cos\vartheta\sin\eta}{1-\cos\vartheta\cos\eta}. \qquad (15)$$

В этом случае начало системы координат $\{x', y', z'\}$ можно оставить в центре масс ядер и при $M_\alpha \neq M_\beta$, что приведет к переопределению угла η , а в уравнении (4) переменные по-прежнему, будут разделяться. Выражение для оператора $\Box^*$ в координатах $\{\vartheta,\eta,\varphi\}$ приобретает стандартный вид[10]:

$$\Box^* = \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + cosec^2\vartheta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + sec^2\vartheta\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + (ctg\,\vartheta - tg\,\vartheta)\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \qquad (6')$$

причем собственные функции (14) этого оператора совпадают по форме с волновыми функциями атома водорода в трехмерном импульсном пространстве[11]. Как показано в работе[8], эти функции соответствуют симметрии, возникающей при наложении на атом водорода не только электрического, но и магнитного поля, направленного по оси z , т.е. выражаются в виде линейной комбинации сферических волновых функций.

Таким образом, введение тороидальных координат в задаче трех тел сводится к использованию цилиндрической системы координат на трехмерной сфере с гиперрадиусом R_G, т.е. системы, отличной от гиперсферической. Развитие этого подхода может оказаться полезным, поскольку в расчетах, которые выполнялись в гиперсферических координатах, наблюдалась медленная сходимость при разложении полной волновой функции задачи трех тел по гиперсферическим функциям[12]. Как показано в работах[13], это связано с тем, что эффективные термы $E(R_G)$ задачи двух центров

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{4}{R_G^2}\Box^* + V\right)\Phi(\vec{z}; R_G) = E(R_G)\Phi(\vec{z}; R_G) \qquad (16)$$

в гиперсферических координатах вычисляются хорошо лишь в окрестности $R_G \leq 1$, т.е. вблизи равновесного положения ядер, где $V(R_G)$ принимает минимальное значение. Эти факты, установленные в работах[13] путем численного эксперимента, объясняются тем, что система гиперсферических координат по-существу одноцентровая, в то время как сфероидальная и тороидальная системы координат – двухцентровые и являются более естественными при описании динамики трехчастичной системы. Можно надеяться, что предложенный подход найдет применение при расчете тороидальных характеристик элементарных частиц в составных моделях, например, при решении уравнений Фаддеева для трехкварковых систем[14].

Литература

I. Фок В.А. Изв. АН СССР, сер. физ. 1954, т. 18, с. 161;
MacekJ.H. J. Phys. B., 1968. v.I, p. 83;
Fano U. Phys. Today 1976, v. 29, p. 32.

2. Pekeris C.L. Phys. Rev., 1958,v.112, p.1649; 1959, v. 115, p.1216;
Frankowski K., Pekeris C.L. Phys. Rev., 1966, v. 146, p. 46.
Демков Ю.Н., Филинский А.В. Тезисы конференции по квантовой химии, Днепропетровск, 1983, с. 12.

3. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., "Наука", 1976. Виницкий С.И., Пономарёв Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т. 13, с. 1366.

4. Виницкий С.И., Соловьев Е.А. Препринт ОИЯИ, Р4-85-239, Дубна, 1985.

5. Hylleraas E. Z.Phys., 1932, v. 74, p. 216.

6. Виницкий С.И., Касчиев М.С. Сообщение ОИЯИ, Е4-85-467, Дубна, 1985.

7. Margenau H., Murphy G.M. The Mathematics of Physics and Chemistry D.Van Nostrand, Princeton, N.J. 1956, 2-nd ed., vol.I, pp. 187-191.

8. Klein J.J. Am.J. Phys. , 1966, v. 34, p. 1039.

9. Kalnins E.G., Miller Jr., Winternitz P. AIAM, J. Appl. Math., v. 30, p. 630.

10. Englefield M.J. Group Theory and The Coulomb Problem. Wiley-Interscience, N.J., 1972, pp. 65-67, 113.

11. Bander M., Itzykson Rev. Mod. Phys., 1966, v. 38, p. 330.

12. Whitten R.C., Sims J.S. Phys. Rev., A., 1974, v. 9, 1586.

13. Green C.H. Phys. Rev. A., 1982, v. 26, p. 2974.

14. Kuperin Yu.A., Kvitsinsky A.A., Merkuriev S.P., Novozhilov V.Yu. Preprint, ITP-85-38E, Kiev, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 августа 1985 года.

Виницкий С.В., Дубовик В.М.

Р2-85-645

Тороидальные координаты для задачи трех тел

Рассмотрена задача трех тел в тороидальных координатах. Показано, что в случае нулевого полного момента переменные в операторе кинетической энергии разделяются, если расстояние между двумя частицами, помещенными в фокусы тороидальной системы координат, выразить через гиперрадиус системы трех частиц. Возможна эквивалентная трактовка исходной задачи в четырехмерном пространстве в цилиндрической системе координат.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой.

Vinitsky S.V., Dubovik V.M.

P2-85-645

Three-Body Problem in Toroidal Coordinates

In the toroidal coordinates the three-body problem is considered. It is shown that when the total moment is equal to zero, the variables in the kinetic-energy operator are separated provided the distance between two particles placed in the foci of the toroidal coordinates is expressed through the hyperradius of the three-particle system. An equivalent treatment of the original problem is also possible in the four-dimensional space in the cylindric system of coordinates.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985