ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 3154

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б. Ахмадхаджаев, В.Б. Беляев

О СХОДИМОСТИ 2-ЧАСТИЧНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ

1967.

Ахмадходжаев Б., Беляев В.Б. P4-3154

Исследование двухчастичных разложений в задаче трех тел

Исследуется на точно решаемом примере задачи трех тел сходимость двухчастичных разложений.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1967.

Akhmadkhodshaev B., Belyaev V.B. P4-3154

Investigation of Two-Particle Disintegration in Three-Body Problem

The convergence of two-particle disintegrations is investigated by the example of a precise solution of the three-body problem.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1967.

P4 - 3154

Б. Ахмадхаджаев, В.Б. Беляев

О СХОДИМОСТИ 2-ЧАСТИЧНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ

Сходимость разложений волновой функции Ψ, описывающей составную квантово-механическую систему по полному набору волновых функций подсистем ϕ_k типа $\psi(x_1 \ldots x_N)=\Sigma C_k(x_1)\phi_k(x_1 \ldots x_{N-1})$ (1) представляет один из наиболее сложных и трудно исследуемых разделов квантовой механики многих тел. Обычно сходимость таких разложений связывают с наличием различного рода малых параметров в системе (типа малости энергии взаимодействия или отношения масс частиц). Однако даже при отсутствии таких "очевидных" параметров малости ряды типа (1) могут обладать достаточно быстрой сходимостью. Ниже мы проиллюстрируем это утверждение на точно решаемом примере движения двух частиц во внешнем поле, когда все потенциалы – осцилляторы. В огромном большинстве практических задач (связанных, например, с проблемой трех тел) в качестве критерия правильности приближения в решении уравнения Шредингера используют сравнение расчета с экспериментом (эксперимент является "точным" решением задачи!). Однако, если мы имеем дело с сильновзаимодействующими частицами, где сам характер взаимодействия является достаточно сложным, сделать однозначную оценку правильности метода по экспериментальным данным (с ошибками) оказывается весьма трудно. Поэтому рассмотрение точно решаемых задач представляет интересную возможность однозначного анализа сходимости разложений вида (1).

Рассматриваемый гамильтониан имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2M_1}\frac{\partial}{\partial x^2} - \frac{1}{2M_2}\frac{\partial}{\partial y^2} + V_{12}y^2 + V_{13}\left(x+\frac{y}{2}\right)^2 + V_{23}\left(x-\frac{y}{2}\right)^2, \quad (1')$$

где y –координата относительного движения частиц 1 и 2, а $M_1 = 2M_2 = 2m$, m –масса частиц (1 или 2).

Решение этого гамильтониана $\psi(x,y)$ будем искать в виде разложения по собственным функциям $\Phi_m(y)$ двухчастичной задачи:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2M_2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_{12}\, y^2 ,$$

т.е. будем рассматривать разложения фешбаховского типа:

$$\psi(x,y) = \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(x)\Phi_m(y) . \qquad (2)$$

Сходимость такого разложения была бы очевидной при наличии малого параметра $\xi = \frac{\omega_1}{\omega_0} \ll 1$, где ω_1 –частота внешнего поля, а ω_0 –частота относительного движения. Ниже будет видно, что это разложение сходится даже при условии $\omega_1 \approx \omega_0$.

Для функций $\phi_m(x)$ получаем, как обычно, систему зацепляющихся обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{1}{4m}\phi_n''(x) = \frac{\omega_0\xi^2}{8}\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\phi_{n+2} + [(n+\frac{1}{2})\frac{\sigma\omega_1}{2} - E' + m\omega_1^2\, x^2]\phi_n(x) + \qquad (3)$$

$$+ \frac{\omega_0\xi^2}{8}\sqrt{n(n-1)}\,\phi_{n-2}(x) .$$

Здесь

$$\sigma = \frac{1}{\xi} + \frac{\xi}{2} ,$$

$$E' = E - \epsilon_n ,$$

$$\epsilon_n = \frac{\omega_0}{2}(n + \frac{1}{2}) .$$

Обычно такие системы решаются численно, однако систему (3) можно исследовать аналитически следующим образом: отличие приближенного решения (т.е. в разложении (2) берется конечное число членов) от точного будем характеризовать интегралом перекрытия I_p между точным решением $\psi(x,y)$ и приближенным, которое обозначим через $\psi(x,y,p)$, где p – число оставленных членов в разложении (2). Таким образом, для I_p имеем

$$I_p = \int\psi(x,y)\psi(x,y,p)\,dx\,dy = \sum_{m=0}^{p}\int\psi_k(y)\Phi_m(y)\,dy\int\psi_\ell(x)\phi_m(x)\,dx = \qquad (4)$$

$$= \sum_{m=0}^{p} A_{km}\int\psi_\ell(x)\phi_m(x)\,dx ,$$

индексы k и ℓ соответствуют (k, ℓ)–му собственному состоянию точной задачи.

Далее замечаем, что систему дифференциальных уравнений для функций $\phi_n(k)$ можно легко превратить в систему однородных алгебраических уравнений для интегралов перекрытия по переменной x:

$$[E' - (m + \frac{1}{2})\frac{\sigma\omega_1}{2}]\int\psi_\ell(x)\phi_m(x)\,dx = \frac{\omega_0\xi^2}{8}[\sqrt{m(m-1)}\int\psi_\ell(x)\phi_{m-2}(x)\,dx +$$

$$\sqrt{(m+2)(m+1)}\int\psi_\ell(x)\phi_{m+2}(x)\,dx. \qquad (5)$$

Приближенные собственные значения найдем из условия разрешимости системы (5). Разложение (2) будем для простоты применять к функции ψ_{00} основного состояния точной задачи. Ряд (4) в этом случае примет вид:

$$I_p = \sum_{m=0}^{p} A_{0m} I_{0m} \qquad (6)$$

A_{0m} -интеграл перекрытия по переменной относительного движения y легко вычисляется:

$$A_{0m} \approx \left(\frac{\sqrt{1+\xi^2}-1}{\sqrt{1+\xi^2}+1}\right)^{m/2} \text{ для четных } m \quad \text{и} \quad A_{0m} \approx \left(\frac{\sqrt{1+\xi^2}-1}{\sqrt{1+\xi^2}+1}\right)^{\frac{m-1}{2}} \text{ для нечетных } m$$

Очевидно, что даже для случая равных частот ($\xi = 1$) отношение в скобках достаточно мало. Происхождение этой малости ясно: с ростом m растет число нулей в функции $\Phi_m(y)$ и интеграл A_{0m} быстро спадает с ростом m.

Интеграл I_{0m} при больших m, как это следует из (5), ведет себя как $\frac{1}{m}$. Действительно, представляя I_{0m} в виде

$$I_{0m} = \frac{\Delta_{m-1}}{\Delta_m}$$

и замечая, что определитель $\Delta m \to m!$ при $m \gg 1$, для I_{0m} получаем оценку

$$I_{0m} = \frac{\mathrm{const}(E)}{m}.$$

Таким образом, ряд (6) быстро сходится, причем основная часть интеграла перекрытия содержится уже в нулевом члене этого ряда. Численный расчет ($\xi = 1$) для I_p($p = 2$) дает $I_2 \approx 0{,}99$. Низшее собственное значение в этом приближении оказывается равным $E' = 0{,}3544\,\omega$, в то время как точное значение $E' = 0{,}3535\,\omega$. Заметим, что интегралы I_{nm}, являющиеся решениями системы (5), одновременно являются коэффициентами в разложении волновой функции по одночастичным конфигурациям

$$\psi(x_1 x_2) = \sum_{mn} C_{mn} \Phi_m(x_1)\Phi_n(x_2) \tag{7}$$

и их быстрое убывание с индексом обеспечивает также быструю сходимость разложения (7).

Наконец, рассмотрим сходимость разложения точной функции по полному набору Φ_k состояний одной из частиц во внешнем поле. Опять будем рассматривать наиболее интересный случай равенства всех энергий взаимодействия. Итак, имеем:

$$\psi(x_1 x_2) = \sum_{k=0}^{\infty} \chi_k(x_1)\Phi_k(x_2). \tag{8}$$

Уравнение для $\psi(x,y)$ перепишем в переменных x_1 и x_2:

$$\left[-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + m\alpha_0\omega_0^2(x_1-x_2)^2 + m\alpha_1\omega_1^2(x_1^2+x_2^2)\right]\psi(x_1x_2) = E\psi(x_1x_2),$$

В этом случае функции $\chi_k(x_1)$ будем искать, вычисляя непосредственно интеграл $\int\psi(x_1x_2)\Phi_k(x_2)dx_2$. Имеем

$$\chi_k(x_1) = \left(\frac{4a_0^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{3}{4}(a_1^2+a_0^2)x_1} \sum_{\gamma_1\gamma_2}(-1)^{\gamma_1} \frac{\left(\frac{a_1x_1}{2}\right)^{\gamma_1}\left(\frac{a_0x_1}{2}\right)^{\gamma_2}}{\gamma_1!\,\gamma_2!} C^k_{\gamma_1\gamma_2}(\beta) \tag{9}$$

$$C^k_{\gamma_1\gamma_2}(\beta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int e^{-\frac{1}{4}(3+a^2)x^2} H_{\gamma_1}(x)H_{\gamma_2}(ax)H_k(x)\,dx, \tag{10}$$

где

$$a_0^2 = \frac{4m\omega_0}{4}\sqrt{4\alpha_0+2\alpha_1\xi^2}, \quad a_1^2 = \frac{m\omega_1}{4}\sqrt{2\alpha_1},$$

$$a^2 = \frac{a_0^2}{a_1^2} = \sqrt{1+2\frac{\alpha_0\omega_0^2}{\alpha_1\omega_1^2}},$$

$H_\gamma(x)$ –полином Эрмита.

В случае равенства энергий взаимодействия $\alpha_1\omega_1^2 = \alpha_0\omega_0^2$ имеем

$$a^2 = \left(\frac{a_0}{a_1}\right)^2 = 1 + 4\beta = \sqrt{3}, \qquad \beta \ll 1.$$

Так как интеграл $C^{k}_{\gamma_1\gamma_2}(\beta)$ регулярен при $\beta \to 0$, то, подставляя $C^{k}_{\gamma_1\gamma_2}(0)$ в (10), для X_k получаем оценку

$$X_k \approx (2\beta)^k .$$

Таким образом, ряд (8) также быстро сходится при равенстве потенциальных энергий. Очевидно, что в случае $\xi \gg 1$, т.е. когда частота внешнего поля много больше частоты относительного движения, разложение (8) сходится значительно быстрее.

В заключение авторы выражают благодарность Б.Н. Захарьеву за интерес к работе и полезные дискуссии.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 февраля 1967 г.