объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-85-239

С.И.Виницкий, Е.А.Соловьев*

ЕСТЕСТВЕННЫЕ КООРДИНАТЫ ДЛЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

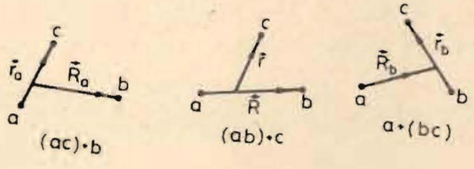
Направлено в "Journal of Physics B (Lett.)"

* Институт физики Ленинградского государственного университета

1985

Адиабатическое представление в задаче трех тел успешно применяется на протяжении многих лет как для расчета сечений процессов столкновения мезоатомов с ядрами изотопов водорода [1-4], так и в атомной и молекулярной физике [5]. Однако в этом подходе даже в случае небольшого числа открытых каналов необходимо использовать много базисных адиабатических функций для корректной постановки физических граничных условий [6], что усложняет решение задачи рассеяния и требует разработки специальных алгоритмов [4,7]. В связи с этим предлагался ряд рецептов построения адиабатического базиса, максимально согласованного с физическими граничными условиями при бесконечном разведении ядер. Первые модификации такого рода опирались на традиционный базис задачи двух кулоновских центров [1,5,8]. В недавних работах [9] предложен другой подход, заключавшийся в специальной перегруппировке полного гамильтониана на быструю и медленную подсистемы.

Граничные условия в задаче трех тел формируются естественным образом в координатах Якоби, выбор которых зависит от того, какая пара частиц остается в связанном состоянии при удалении третьей частицы. В данной работе для системы трех частиц a, b и c с массами M_a, M_b и M_c вводятся координаты, которые мы называем естественными, так как в асимптотических областях конфигурационного пространства, соответствующих каналам реакций $(ac)+b$, $a+(bc)$ и $(ab)+c$, они переходят в правильные координаты Якоби этих каналов /см. рисунок/. В новых координатах волновые функции адиабатического базиса согласованы с физическими граничными условиями. Для простоты мы ограничимся рассмотрением случая нулевого полного момента системы $J = 0$, однако полученные ниже результаты справедливы и в общем случае. В дальнейшем будем считать частицу c легкой /электрон, мезон/, а частицы a и b тяжелыми /ядра изотопов водорода/, т.е. $M_{a,b} > M_c$, и положим $M_c = 1$.



Координаты Якоби для системы трех частиц.

Обычно для задачи трех тел в адиабатическом представлении в качестве независимых переменных используется радиус-вектор R, соединяющий ядра a и b и радиус-вектор

$$\vec r' = \vec r / R \,, \qquad /1/$$

где r - радиус-вектор легкой частицы c, отсчитанный от центра масс тяжелых частиц a и b. При этом компоненты $\vec{r}'$ берутся в системе координат с осью z', направленной вдоль межъядерной оси. Отметим, что начало вектора $\vec{r}'$ в этой системе отсчета можно выбирать также либо в геометрическом центре ядра, либо в одной из точек a или b, поскольку все эти точки лежат на оси z' и, благодаря масштабному преобразованию /1/, их положение на ней фиксировано. Такая свобода выбора будет использована ниже при анализе граничных условий.

В координатах $\vec{R}$, $\vec{r}'$ уравнение Шредингера системы трех частиц после отделения движения центра масс при $J=0$ имеет вид[2] ($\hbar=1$):

$$[-\frac{1}{2M}\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}R^2\frac{\partial}{\partial R}+\frac{1}{MR^2}(\vec{r}'\cdot\nabla_{\vec{r}'})(1+R\frac{\partial}{\partial R})-\frac{1}{2m}\frac{\rho}{R^2}\Delta_{\vec{r}'}+V]\Psi=E\Psi, \qquad /2/$$

где

$$M^{-1}=M_a^{-1}+M_b^{-1},\quad m^{-1}=1+(M_a+M_b)^{-1},\quad \rho=1+mr'^2/M,\quad V=V_{ac}+V_{bc}+V_{ab},-$$

V_{ij} - потенциальная энергия взаимодействия i-й и j-й частиц. Уравнение /2/ содержит перекрестную производную по $\vec{r}'$ и R, которая дает постоянную составляющую при $R\to\infty$ в недиагональных матричных элементах полного гамильтониана в традиционном адиабатическом базисе[2]. Это приводит к запутыванию большого числа базисных функций даже в асимптотических областях и к искусственному расширению области интегрирования по R.

Введем вместо R новую переменную

$$\mathfrak{R}=\sqrt{\rho}\,R \qquad /3/$$

и представим волновую функцию виде

$$\Psi=\mathfrak{R}^{-3/2}\sqrt{\rho}\,\chi. \qquad /4/$$

Нормировка Ψ на единицу в исходных координатах $\vec{R}$, $\vec{r}$ автоматически приводит к такой же нормировке функции χ в новых координатах $\mathfrak{R}$, $\vec{r}'$ с элементом объема $d\tau=4\pi\mathfrak{R}^2d\mathfrak{R}\rho^{-2}d\vec{r}'$.

В результате преобразования /3/, /4/ из /2/ получается уравнение Шредингера

$$H\chi=E\chi,\quad H=-\frac{1}{2M}\frac{1}{\mathfrak{R}^2}\frac{\partial}{\partial\mathfrak{R}}\mathfrak{R}^2\frac{\partial}{\partial\mathfrak{R}}-\frac{1}{2m}\frac{\rho^2}{\mathfrak{R}^2}\Delta_{\vec{r}'}+\frac{3}{8M\mathfrak{R}^2}+V, \qquad /5/$$

которое, с одной стороны, не содержит перекрестной производной, а с другой - в нем сохраняются все специфические черты исходного уравнения /2/, делающие адиабатическое разделение переменных в выбранных координатах $\mathfrak{R}$, $\vec{r}'$ естественным. В отличие от

стандартного подхода движение медленной подсистемы здесь описывается новой переменной $\mathfrak{R}$, и изменяется гамильтониан быстрой подсистемы, который в этом случае имеет вид:

$$h=-\frac{1}{2m}\frac{\rho^2}{\mathfrak{R}^2}\Delta_{\vec{r}'}+V. \qquad /6/$$

Очевидно, что благодаря отсутствию в /5/ перекрестной производной в новом адиабатическом базисе f_k / k - совокупность квантовых чисел/

$$hf_k(\vec{r}';\mathfrak{R})=E_k(\mathfrak{R})f_k(\vec{r}';\mathfrak{R}), \qquad /7/$$

не возникает обсуждавшаяся выше проблема запутывания большого числа базисных функций f_k в асимптотических областях.

Остановимся теперь на предельных свойствах координат $\mathfrak{R}$, $\vec{r}'$ в асимптотических областях конфигурационного пространства, соответствующих различным каналам реакции. Рассмотрим в качестве примера случай, когда ядро b удаляется на бесконечность, а частицы a и c остаются в связанном состоянии, т.е. канал (ac)+b. Очевидно, что для канала a+(bc) нужно только поменять местами индексы a и b в приведенном ниже рассмотрении. В этом пределе в уравнении /7/ для быстрой подсистемы нужно взять вектор $\vec{r}'$, отсчитанный от положения частицы a, и разбить коэффициент $m^{-1}\rho^2/\mathfrak{R}^2$ перед оператором Лапласа на два сомножителя. Первый сомножитель $\rho/\mathfrak{R}^2=R^{-2}$, объединенный с переменной $\vec{r}'$ в операторе Лапласа, возвращает нас к исходному масштабу длины /см. /1//, в результате чего возникает якобиевский радиус-вектор $\vec{r}_a$, связывающий частицы a и c, а оставшийся множитель ρ вместе с m дает правильную приведенную массу m_a атомного комплекса (ac):

$$m\rho^{-1}\xrightarrow[Rr_a^{-1}\to\infty]{}(1+M_a^{-1})^{-1}=m_a.$$

Переменная $\mathfrak{R}$ в этом пределе переходит с точностью до коэффициента $\alpha=(m/m_a)^{1/2}$ в модуль якобиевского радиус-вектора R_a, соединяющего центр масс атомного комплекса (ac) с частицей b:

$$\mathfrak{R}\xrightarrow[Rr_a^{-1}\to\infty]{}\alpha|R-(1+M)^{-1}r_a|=\alpha R_a. \qquad /8/$$

Переходя согласно /8/ от $\mathfrak{R}$ к якобиевской переменной R_a, мы получаем правильную приведенную массу $\mu_a=\bar{M}\alpha=M_b(1+M_a)/(1+M_a+M_b)$ перед второй производной по R_a. Нетрудно убедиться, что при конечных значениях R и $r\to\infty$ координаты $\mathfrak{R}$, $\vec{r}'$ переходят в координаты Якоби канала (ab)+c. Возникновение в асимптотческих областях правильных якобиевских координат в каждом канале подчеркивает естественность преобразования /3/, /4/.

Гамильтониан H /5/ по форме совпадает с гамильтонианом, полученным в другом подходе в работах [9] /небольшое отличие связано с различным выбором нормировки волновых функций/. Однако в этих работах автор ошибочно отождествляет переменную $\mathcal{R}$ с переменной R, поэтому правильная интерпретация получающихся уравнений в терминах [9] невозможна.

Использованный в данной работе подход является квантовым аналогом метода нестационарного масштаба длины/МНМД/,разработанного для случая, когда движение тяжелых частиц учитывается классически . В [10] этим методом была подробно исследована точно решаемая модель о частице в поле двух равномерно движущихся δ -потенциалов, а в [11] с его помощью была получена простая связь между нестационарными решениями свободной частицы и осциллятора. Чтобы лучше проследить аналогию между квантовым и классическим случаями, коротко приведем основные моменты МНМД, следуя работам [10,11].

При классическом учете движения тяжелых частиц, для легкой частицы получается нестационарное уравнение Шредингера в системе центра масс тяжелых частиц $(m=\hbar=1)$

$$[-\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}}+V_{ac}(|\vec{r}+\gamma_a\vec{R}|)+V_{bc}(|\vec{r}+\gamma_b\vec{R}|)]\psi=i\frac{\partial\psi}{\partial t}, \qquad /9/$$

где

$$\gamma_a=M_b/(M_a+M_b), \quad \gamma_b=-M_a/(M_a+M_b),$$

$R(t)$ - расстояние между тяжелыми частицами a и b, которое считается заданной функцией времени. В соответствии с рассматриваемым в данной работе случаем $J=0$ будем считать, что тяжелые частицы движутся по прямой, совпадающей, для определенности, с осью Z. Перейдем к новой переменной

$$\vec{r}\,'=\vec{r}/R(t). \qquad /10/$$

При этом уравнение Шредингера /9/ принимает вид

$$\{-\frac{1}{2}R^{-2}\Delta_{\vec{r}\,'}+V_{ac}(R|\vec{r}\,'+\gamma\ \vec{k}|)+V_{bc}(R|\vec{r}\,'+\gamma\ \vec{k}|)+iR^{-1}\dot{R}(\vec{r}\,'\cdot\nabla_{\vec{r}\,'})\}\psi=i\frac{\partial\psi}{\partial t}, \qquad /11/$$

где $\vec{k}$ - орт оси Z, а точкой $\dot{R}$ обозначена производная по времени. Замена переменных /10/ аналогична замене /1/, и в уравнении /11/, так же как и в /2/, появляется произведение относительного импульса тяжелых частиц и импульса легкой частицы, связанное с тем, что неподвижные прежде точки в новых координатах движутся. Как и при преобразовании Галилея [5], для устранения этого произведения следует явно выделить в волновой функции обобщенный трансляционный фактор, учитывающий изменение кинематики при переходе к переменной $\vec{r}\,'$:

$$\psi=R^{-3/2}\exp\{i\frac{r^2\dot{R}(t)}{2R(t)}\}\chi(\vec{r}\,',t)=R^{-3/2}\exp\{i\frac{1}{2}r'^2R(t)\dot{R}(t)\}\chi(\vec{r}\,',t). \qquad /12/$$

Множитель $R^{-3/2}$ в /12/ обеспечивает, как и в /4/, сохранение нормировки для волновой функции χ в новых координатах $\vec{r}\,'$. Подставляя /12/ в /11/, получаем для функции $\chi(\vec{r}\,',t)$ следующее уравнение:

$$h_{cl}\chi=i\frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad h_{cl}=-\frac{1}{2}R^{-2}\Delta_{\vec{r}\,'}+V_{ac}(R|\vec{r}\,'+\gamma_a\vec{k}|)+V_{bc}(R|\vec{r}\,'+\gamma_b\vec{k}|)+\frac{1}{2}R\ddot{R}r'^2. \qquad /13/$$

Переход от волновой функции ψ к функции χ /12/ аналогичен введению переменной $\mathcal{R}$ вместо R в случае квантовомеханического движения тяжелых частиц. В обоих случаях происходит частичное выделение движения легкой частицы из гамильтониана быстрой подсистемы, приводящее к устранению произведения импульсов. Отметим, что при $\ddot{R}>0$ гамильтониан h_{cl} имеет только дискретный спектр, так же, как и гамильтониан /6/, квантование которого, как будет показано ниже, сводится к задаче квантования на четырехмерной сфере.

При использовании адиабатического базиса для решения уравнения /9/ также возникают трудности из-за несогласованности предельного поведения адиабатических волновых функций при $R\to\infty$ с точными граничными условиями [5,12]. В данном случае это связано с тем, что в адиабатических волновых функциях отсутствует галилеевский трансляционный фактор, учитывающий движение потенциального центра. Преобразования /10/, /12/ устраняют этот недостаток. В модифицированном уравнении Шредингера /13/ центры неподвижны, поэтому для него в адиабатическом базисе получаются точные граничные условия. При переходе к исходной волновой функции правильный трансляционный фактор получается из экспоненциального множителя в /12/. Вблизи i-го центра $i=a,b$ при $R\to\infty$ имеем

$$\exp\{i\frac{r^2\dot{R}}{2R}\}\xrightarrow[R|\vec{r}+\gamma_i\vec{R}|^{-1}\to\infty]{}\exp\{i(\vec{v}_i\vec{r}-\frac{1}{2}v_i^2t)\}, \qquad /14/$$

где $\vec{v}_i=-\gamma_i\dot{R}\vec{k}$ - скорость i-го центра. При выводе /14/ использовалось, что v_i при $R\to\infty$ стремится к постоянному значению, и в этой области $|\gamma_i|R\approx v_i t$.

В заключение отметим связь введенных выше координат $\mathcal{R},\vec{r}\,'$ с другими координатами, используемыми в задаче трех тел. Введенная нами координата медленной подсистемы $\mathcal{R}$ связана соотношением $\sqrt{M}\mathcal{R}=\mathcal{R}_G$ с гиперрадиусом $\mathcal{R}_G$, который вводится в тех вариантах задачи трех тел, когда ее переводят на сферу в четырехмерном пространстве [13]. Для того, чтобы полностью перейти к гиперсферическим координатам, следует ввести угловые переменные α, θ, ϕ:

$$\mathrm{ctg}\,\alpha/2 = \sqrt{m/M}\,r', \quad \cos\theta = z'/r', \quad \phi = \mathrm{arctg}\,y'/x',$$

и вернуться к исходной волновой функции Ψ. В этом случае уравнение Шредингера приобретает вид [14]

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

где

$$\Box^* = \frac{1}{\sin^2\alpha}[\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] -$$

угловая часть оператора Лапласа в четырехмерном пространстве, в сферических координатах. Таким образом, для формирования адиабатического представления задачи трех тех можно использовать широкий набор координат на четырехмерной сфере /сферические, тороидальные, эллипсо-цилиндрические, обобщенные эллиптические [15]/, допускающих разделение переменных в операторе кинетической энергии быстрой подсистемы, который совпадает с угловой частью четырехмерного лапласиана. В таких переменных волновые функции адиабатического базиса являются функциями угловых координат на четырехмерной сфере. Для систем типа e^+H, e^-H адиабатический базис обычно формируют в гиперсферических координатах [16,17]. Однако для систем с $M_{a,b} > M_c$, таких, как мезомолекулы $dd\mu$, $dt\mu$ или молекулярный ион HD^+, естественно использовать сфероидальные координаты ξ, η, ϕ, связанные с $r' = \{x', y', z'\}$ соотношениями [1]:

$$x' = \frac{1}{2}[(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2}\cos\phi, \quad y' = \frac{1}{2}[(\xi^2-1)(1-\eta^2)]^{1/2}\sin\phi,$$

$$z' = \frac{1}{2}[\xi\eta - (M_b - M_a)/(M_b + M_a)].$$

Выбор координат ξ, η, ϕ является в данном случае предпочтительным, так как, благодаря малости параметра m/M гамильтониан h слабо отличается от гамильтониана задачи двух кулоновских центров и поэтому узловые поверхности адиабатических волновых функций f_k близки к координатным поверхностям $\xi = \mathrm{const}$, $\eta = \mathrm{const}$, $\phi = \mathrm{const}$.

В задаче трех тел существует хорошо известная проблема логарифмической особенности в точке тройного соударения [14]. Эти особенности целиком связаны с движением по гиперрадиусу $\mathcal{R}_G$, поэтому при адиабатическом разделении переменных в уравнении /5/ они не затрагивают сам адиабатический базис, а будут автоматически воспроизводиться волновой функцией медленной подсистемы, зависящей от координаты $\mathcal{R}$.

Авторы глубоко благодарны А.В.Матвеенко и Л.И.Пономареву за стимулирующие обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bates D.R., Reid H.G. Advances in Atomic and Molecular Physics. Academic Press, New York, 1968, vol.4, p.13-35; Комаров И.В., Славянов С.Ю., Пономарев Л.И. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, с.576; ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.1336.
3. Ponomarev L.I. Atom Kernenergie, 1983, 43, p.175.
4. Мележик В.С., Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1983, т.85, с.434.
5. Delos J.B. Rev.Mod.Phys., 1981, 53, p.287.
6. Ponomarev L.I., Somov L.N., Vukajlovic F.R. J.Phys.B, 1981, vol.14, p.591; Виницкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЯФ, 1982, т.36, с.465.
7. Melezhik V.S. et al. J.Comp.Phys., 1984, vol.54, p.221; Мележик В.С. ОИЯИ, Р4-84-643, Дубна, 1984.
8. Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., Vukajlovic F.R. J.Phys.B., 1980, vol.13, p.847.
9. Matveenko A.V. Phys.Lett.B, 1983, vol.129, p.11; Матвеенко А.В. Письма в ЖЭТФ, 1984, 11, с.493.
10. Соловьев Е.А. ТМФ, 1976, 28, с.240.
11. Соловьев Е.А. ЯФ, 1982, 35, с.242.
12. Bates D., McCarroll R. Proc.R.Soc.London, 1958, A245, p.175.
13. Demiralp M., Suhubi E. J.Math.Phys., 1977, vol.18, p.777.
14. Фок В.А. Изв.АН СССР, сер.физ., 1954, т.18, с.161.
15. Kalnins E.G. et al. SIAM, J.Appl.Math., 1976, vol.30, p.630; Klein J.J. Am.J.Phys., 1966, vol.34, p.1039.
16. Macek J.H. J.Phys.B, 1968, vol.1, p.831.
17. Fano U. Phys.Today, 1976, vol.29, p.32; Pelikan E., Klar H. Z.Phys.A 1983, vol.310, p.153.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1985 года.