сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P4-87-8

С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА СИСТЕМЫ ТРЕХ ЧАСТИЦ В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

1987

1. ВВЕДЕНИЕ

Трехчастичные квантовомеханические системы представляют большой интерес при описании различных физических процессов. Система трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона, является хорошей моделью как для мезомолекул изотопов водорода [1], так и для гелиевоподобных систем [2].

Гамильтониан трехчастичной системы задан в шестимерном пространстве R^6. Для выполнения реальных расчетов необходима редукция гамильтониана в пространство меньшей размерности на основе применения точных интегралов движения. Известно, что для описания гелиевоподобных систем удобно использовать гиперсферические координаты [3,2]. Этот же подход для мезомолекул в рамках адиабатического разделения переменных был применен для редукции гамильтониана в недавней работе [4].

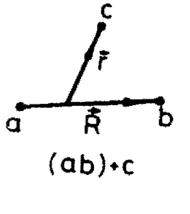
Цель настоящей работы - приведение исходного уравнения Шредингера в гиперсферических координатах к спектральной задаче для системы $J+1$ дифференциальных уравнений в трехмерном пространстве. Данная постановка возникла благодаря разработке нового эффективного численного метода итерации альтернирующих подпространств /МИАП/ [5], предназначенного для решения трехмерных спектральных задач.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц a, b и c с зарядами eZ_a, eZ_b и $-eZ_c$ и массами $M_a \geq M_b > M_c$. Будем называть частицы a и b ядрами, а частицу c - мюоном. Уравнение Шредингера в якобиевских координатах R, r /см.рис.1/ имеет стандартный вид

$$H\Psi = E\Psi,\ H = T + \tilde{V},\ T = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}}, \qquad /1/$$

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



Векторы R и r удобно задавать сферическими компонентами $\vec{R} = \{R\Theta\Phi\}$ и $\vec{r} = \{r\nu\phi\}$ /см. рис.2/, поскольку выражение для потенциальной энергии

Рис.1. Координаты Якоби системы трех частиц a, b, c.

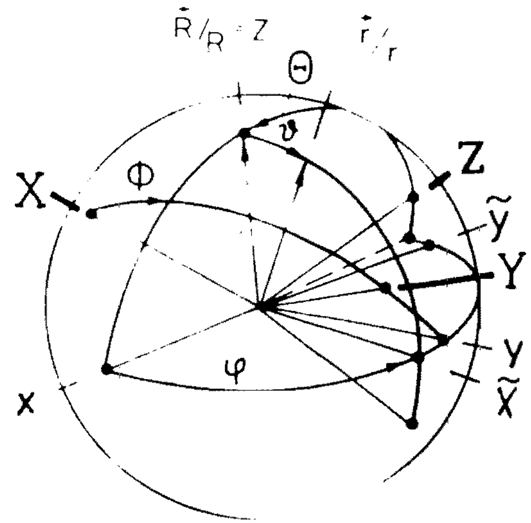


Рис.2. Вращающаяся система координат xyz задана на сферических ортах вектора $\vec R = \{R\Theta\Phi\}$: $e_x = e_\Theta$, $e_y = e_\Phi$, $e_z = e_R$. Вектор $\vec r = \{r\nu\phi\}$ задан во вращающейся системе координат xyz; угол ϕ – поворот вокруг оси z, отсчитывается от оси x; угол ν – поворот вокруг оси $\tilde y$, отсчитывается от оси z, ось $\tilde y$ – перпендикулярна плоскости трех частиц $z\tilde x$,

$$\tilde V = -\frac{e^2 Z_a Z_c}{|\vec r + \gamma_a \vec R|} - \frac{e^2 Z_b Z_c}{|\vec r + \gamma_b \vec R|} + \frac{e^2 Z_a Z_b}{R},$$

$$\gamma_a = M_b/(M_a + M_b), \quad \gamma_b = -M_a/(M_a + M_b) \qquad /2/$$

зависит лишь от модулей векторов R и r и угла ν между ними и не зависит от ориентации треугольника частиц abc в пространстве. Тогда оператор кинетической энергии T преобразуется к виду [6]

$$\hbar^{-2}T = -\frac{1}{2M}\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}R^2\frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{\mathfrak{L}}^2}{2mr^2} + \frac{(\vec J - \vec{\mathfrak{L}})^2}{2MR^2}. \qquad /3/$$

Здесь $\vec J$ – полный орбитальный момент, $\vec{\mathfrak{L}}$ – орбитальный момент мюона. Переход к гиперсферическим координатам осуществляется с помощью замены [3,4]

$$R = \mathcal{R}\sin\alpha/2, \qquad r = \sqrt{\frac{M}{m}}\,\mathcal{R}\cos\alpha/2, \qquad /4/$$

в результате которой гамильтониан приобретает вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\mathcal{R}^5}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}\mathcal{R}^5\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\mathcal{R}^2}\Delta_5 + \frac{e^2}{\mathcal{R}}V(\alpha,\nu). \qquad /5/$$

Здесь Δ_5 – угловая часть оператора Лапласа на сфере S^5:

$$\Delta_5 = \frac{4}{\sin^2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} - \vec{\mathfrak{L}}^2\right) - \frac{\vec J^2 - 2\vec{\mathfrak{L}}\vec J}{\sin^2\alpha/2}. \qquad /6/$$

Потенциальная энергия $\tilde V = e^2\mathcal{R}^{-1}V(\alpha,\nu)$:

$$V = (\sin\alpha/2)^{-1}\Big[-Z_a Z_c\Big\{\frac{M}{m}\operatorname{ctg}^2\alpha/2 + 2\gamma_a\sqrt{\frac{M}{m}}\operatorname{ctg}\alpha/2\cos\nu + \gamma_a^2\Big\}^{1/2} - $$
$$- Z_b Z_c\Big\{\frac{M}{m}\operatorname{ctg}^2\alpha/2 + 2\gamma_b\sqrt{\frac{M}{m}}\operatorname{ctg}\alpha/2\cos\nu + \gamma_b^2\Big\}^{1/2} + Z_a Z_b\Big] \qquad /7/$$

обращается в бесконечность в точке тройного соударения $\mathcal{R} = 0$ и в точках парных соударений частиц

$$(ac):\ \nu = \pi, \quad \operatorname{ctg}\alpha/2 = \gamma_a\sqrt{\frac{m}{M}};$$
$$(bc):\ \nu = 0, \quad \operatorname{ctg}\alpha/2 = |\gamma_b|\sqrt{\frac{m}{M}}; \qquad /8/$$
$$(ab):\ \nu = [0,\pi],\ \alpha = 0.$$

Волновая функция Ψ определена в области $\Omega \times \Omega_{\phi\Theta\Phi}$,

$$\Omega = \{0 \le \mathcal{R} < \infty,\ 0 \le \alpha \le \pi,\ 0 \le \nu \le \pi\},$$
$$\Omega_{\phi\Theta\Phi} = \{0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \Theta \le \pi,\ 0 \le \Phi \le 2\pi\}, \qquad /9/$$

и для связанных состояний системы трех частиц /мезомолекулы/ нормирована условием

$$\int \tau\, d\alpha\, d\nu\, d\mathcal{R}\sin\Theta\, d\Theta\, d\Phi\, |\Psi|^2 = 1, \qquad /10/$$

где

$$\tau = \frac{1}{8}\left(\frac{M}{m}\right)^{3/2}\mathcal{R}^5\sin^2\alpha\sin\nu.$$

Подстановка Борна-Опенгеймера [7]

$$\mathcal{R}_\mu = \left(\frac{m}{M}\right)^{-1/4}\mathcal{R} \qquad /11/$$

позволяет упростить элемент объема

$$\tau_\mu = \frac{1}{8}\mathcal{R}_\mu^5\sin^2\alpha\sin\nu, \qquad /12/$$

ввести трехчастичную массу

$$\mu = \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4}\mathrm{M}, \quad \mathrm{M} = \sqrt{mM}, \qquad /13/$$

перенормировать заряды частиц

$$e_\mu^2 = \left(\frac{m}{M}\right)^{-1/4}e^2 \qquad /14/$$

и перейти к гамильтониану

$$H_\mu = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\mathcal{R}_\mu^5}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}_\mu}\mathcal{R}_\mu^5\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}_\mu} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\mathcal{R}_\mu^2}\Delta_5 + \frac{e_\mu^2}{\mathcal{R}_\mu}V(\alpha,\nu). \qquad /15/$$

Последний описывает систему трех частиц без дополнительных ограничений на их массы*. В единицах $e_\mu = \hbar = \mu = 1$ уравнение /1/ с гамильтонианом /15/ приобретает вид

$$\{-\frac{1}{2}\frac{1}{\mathcal{R}_\mu^5}\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}_\mu}\mathcal{R}_\mu^5\frac{\partial}{\partial \mathcal{R}_\mu} - \frac{1}{2\mathcal{R}_\mu^2}\Delta_5 + \frac{1}{\mathcal{R}_\mu}V(\alpha,\nu) - E_\mu\}\Psi_\mu = 0. \qquad /16/$$

Полная энергия мезомолекулы E связана со спектральным параметром E_μ соотношением

$$E = E_\mu \frac{e_\mu^2}{a_\mu} = E_\mu \frac{\mu e_\mu^4}{h^2} = E_\mu \frac{Me^4}{h^2} = E_\mu M 2Ry,$$

единица длины равна:

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{\mu e_\mu^2} = (\frac{m}{M})^{1/4}\frac{\hbar^2}{\sqrt{mM}\, e^2} = (\frac{m}{M})^{1/4}\frac{1}{\sqrt{mM}}\, a_e .$$

Здесь $Ry = \frac{1}{2}\frac{m_e e^4}{h^2} = 13{,}605804$ эВ, массы частиц заданы в единицах массы электрона m_e, например:

$M_\mu = 206{,}769$; $M_p = 1836{,}152$; $M_d = 3670{,}481$; $M_t = 5496{,}918$;

$$a_e = \frac{\hbar^2}{m_e e^4} = 5{,}2917\cdot 10^{-9} \text{ см}.$$

Тогда основная физическая характеристика мезомолекулы - энергия связи - $\epsilon_{J v}$ /эВ/ равна

$$\epsilon_{Jv} = [E_\mu M - E_{na}]\, 2Ry, \qquad /17/$$

где $E_{na} = -\frac{Z_a^2}{2n^2} m_a$ - энергия мезоатома (ac) с приведенной массой мюона $m_a = M_a M_c/(M_a + M_c)$. Далее индекс μ в уравнении /16/ будем опускать.

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПОЛНОГО МОМЕНТА

Упростим уравнение /16/ с помощью точных интегралов движения полного момента J^2, его третьей проекции на ось Z неподвижной системы координат XYZ и полной четности P_{tot} по отношению к инверсии всех координат. Парциальный анализ в представлении полного момента J позволяет отделить три угловые переменные $\Phi\Theta\phi$, определяющие ориентацию треугольника частиц abc в неподвижной системе координат XYZ:

$$\Psi(\mathcal{R}\alpha\nu\phi\Theta\Phi) = \sum_{m=(1-\sigma)/2}^{J} \mathfrak{D}^{J\lambda}_{mm_J}(\Phi\Theta\phi)\, F_m^{J\sigma}(\alpha\nu\mathcal{R}). \qquad /18/$$

Здесь $\mathfrak{D}^{J\lambda}_{mm_J}$ - симметризованные D-функции [6], m, m_J - собственные значения J_z, J_Z на вращающуюся z и неподвижную Z оси, $\lambda = \sigma(-1)^J$ и $\sigma = \pm 1$ собственные значения операторов P_{tot} и P_{yz} - отражения в плоскости yz вращающейся системы координат xyz: $\phi \to \pi - \phi$. Подстановка разложения /18/ в уравнение /16/ и усреднение по $\mathfrak{D}^{J\lambda}_{mm_J}$ позволяют свести его к системе $J+1$ уравнения для функций $\{F_m^{J\sigma}(\alpha\nu\mathcal{R})\}_{m=0,J}$ при $\sigma = +1$ и J-уравнений для $\{F_m^{J\sigma}(\alpha\nu\mathcal{R})\}_{m=1,J}$ при $\sigma = -1$ в области Ω /9/. /Здесь и далее знак σ иногда будем выписывать явно/:

$$H_{mm-1}F^{J\sigma}_{m-1} + (H_{mm} - E)F^{J\sigma}_m + H_{mm+1}F^{J\sigma}_{m+1} = 0, \qquad /19/$$

где

$$H_{mm} = T + V_{mm},$$

$$T = -\frac{1}{2}\frac{1}{\mathcal{R}^5}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}\mathcal{R}^5\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} - \frac{1}{2\mathcal{R}^2}\frac{4}{\sin^2\alpha}(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\sin\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}\sin\nu\frac{\partial}{\partial\nu}), \qquad /19a/$$

$$V_{mm} = \mathcal{R}^{-1}V + \frac{4m^2}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha\sin^2\nu} + \frac{J(J+1) - 2m^2}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2},$$

$$H_{mm\pm 1} = T_{mm\pm 1} + V_{mm\pm 1},$$

$$T_{mm\pm 1} = \pm\frac{\gamma^{J\sigma}_{mm\pm 1}}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}\frac{\partial}{\partial\nu}, \quad V_{mm\pm 1} = \frac{\gamma^{J\sigma}_{mm\pm 1}}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}(m\pm 1)\operatorname{ctg}\nu, \qquad /19б/$$

$$\gamma^{J\sigma}_{mm+1} = -\{1 + (\sqrt{2} - 1)\delta_{m0}\}\{(J+m+1)(J-m)\}^{1/2},$$

$$\gamma^{J\sigma}_{mm-1} = -\{1 + (\sqrt{2} - 1)\delta_{m1}\}\{(J-m+1)(J+m)\}^{1/2}.$$

Кулоновская потенциальная энергия V определеяется выражением /7/. При $\sigma = -1$: $\mathfrak{D}^{J\lambda}_{0m_J} \equiv 0$, поэтому $F_0^{J-} \equiv 0$ и $\gamma^{J-}_{01} = \gamma^{J-}_{10} = 0$, т.е. в этом случае уравнение с индексом $m = 0$ отсутствует. Реше-

---

*Для системы трех частиц в классической механике подобный гамильтониан рассматривался в недавней работе [8].

ния для связанных состояний ($\epsilon_{Jv} < 0$) нормированы условием:

$$\sum_{m=(1-\sigma)/2}^{J} \int r\,d\alpha\, d\nu\, d\mathcal{R}\,(F_m^{J\sigma}(\alpha\,\nu\,\mathcal{R}))^2 = 1\,. \qquad /10'/$$

Очевидно, что система уравнений /19/ в области Ω эквивалентна исходному уравнению Шредингера /16/ в области $\Omega \times \Omega_{\phi\Theta\Phi}$.

Для тождественных ядер a и b /или электронов, если рассматривается атом гелия/ с гамильтонианом коммутирует оператор инверсии координат мюона P_μ $(\alpha \to \alpha,\ \nu \to \pi - \nu,\ \phi \to \pi + \phi)$, и волновая функция Ψ характеризуется собственными значениями этого оператора. Значения $p \equiv g = +1$ соответствует четным, $p \equiv u = -1$ нечетным состояниям. Операторы P_{tot} и P_μ связаны с оператором инверсии координат ядер P_n $(\alpha \to \alpha,\ \nu \to \pi - \nu,\ \phi \to -\phi,\ \Theta \to \pi - \Theta,\ \Phi \to \pi + \Phi)$ соотношением $P_{tot} = P_\mu P_n$, поэтому его собственные значения равны $p_n = \lambda p$. Значения $p_n \equiv s = +1$ соответствуют симметричным, а $p_n \equiv as = -1$ - антисимметричным состояниям. Согласно принципу Паули $p_n = (-1)^J$, где I - суммарный спин ядер. Тогда имеется ограничение на возможные комбинации квантовых чисел $\lambda = \sigma(-1)^J$ и $p \equiv (g, u) = \pm 1$ при фиксированном $I: (-1)^{J+J} = \sigma p$. Отсюда следует, что четность p вращательного состояния $|Jm_J\lambda p>$ однозначно связана с четностью суммарного спина ядер I /электронов для атома гелия/. Это позволяет сузить область Ω по переменной ν, на которой определена Ψ_p:

$$\Omega \to \Omega_p = \{0 \le \alpha \le \pi,\ 0 \le \nu \le \pi/2,\ 0 \le \mathcal{R} < \infty\}\,. \qquad /9'/$$

Операторы T, $T_{mm\pm1}$, V_{mm}, $V_{mm\pm1}$ можно записать в более удобной форме, используя обозначения:

$$x_1 = \alpha, \quad x_2 = \nu, \quad x_3 = \mathcal{R}, \qquad /20/$$

$$T = -\frac{1}{r}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}a_i(x)\frac{\partial}{\partial x_i}, \quad r = \frac{1}{8}x_3^5\sin^2 x_1 \sin x_2,$$

$$a_1(x) = \frac{1}{4}x_3^3\sin^2 x_1 \sin x_2, \qquad a_2(x) = \frac{1}{4}x_3^3 \sin x_2, \qquad /20a/$$

$$a_3(x) = \frac{1}{16}x_3^5\sin^2 x_1 \sin x_2,$$

$$T_{mm\pm1} = \pm\frac{\gamma_{mm\pm1}^{J\sigma}}{2r}\,b\frac{\partial}{\partial x_2}, \quad b = \frac{1}{4}x_3^3\cos^2 x_1/2\sin x_2\,. \qquad /20б/$$

Выражения для V_{mm} и $V_{mm\pm1}$ и V оставляем без изменений, ограничиваясь переобозначением /20/.

4. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА И ВАРИАЦИОННЫЙ ФУНКЦИОНАЛ

Мы интересуемся связанными состояниями мезомолекул с полным моментом J = 1 и полной четностью $\lambda = +(-1)^J = -1$. Поэтому рассмотрим решения $F = \{F_o, F_1\}$ системы уравнений /19/, ограниченные в области Ω. /Здесь и далее индекс J опускаем/. В этом случае удобно переписать систему уравнений /19/, используя обозначения /20/:

$$LF = EF. \qquad /21/$$

Здесь оператор L задан в матричном виде

$$L = \begin{pmatrix} T & T_{o1} \\ T_{o1}^* & T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_o & V_1 \\ V_1 & V_2 \end{pmatrix}.$$

$$T_{o1} = -\frac{1}{r}b\frac{\partial}{\partial x_2}, \qquad T_{o1}^* = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x_2}b,$$

$$V_o \equiv V_{oo} = x_3^{-1}V + \frac{1}{x_3^2\sin^2 x_1/2}, \qquad /21a/$$

$$V_1 \equiv V_{o1} = -\frac{1}{x_3^2\sin^2 x_1/2}\operatorname{ctg} x_2,$$

$$V_2 \equiv V_{11} = x_3^{-1}V + \frac{2}{x_3^2\sin^2 x_1\sin^2 x_2}.$$

Выражения T, r, b и V определены соотношениями /20/ и /7/.

Граничные условия для $\{F_o, F_1\}$ следуют из условия ограниченности решений /21/ на границе $\partial\Omega$: $\{x_3 = 0\}$, $\{x_1 = 0\}$ и $\{x_2 = \pi\}$, $\{x_2 = 0\}$ и $\{x_2 = \pi\}$ области Ω, определенной в /9/. Принимая во внимание, что коэффициенты a_i оператора T /20/ обращаются в ноль на $\partial\Omega$, для корректной постановки граничных условий необходимо исследовать поведение функций $rV_i = 0,1,2$ /21a/ вблизи границы $\partial\Omega$ /9, 10/. Ввиду того, что $\lim_{x_3\to o}|rV_i| < \infty$, i = 0,1,2, требование ограниченности F_o и F_1 при $x_3 = 0$ сводится к граничным условиям:

$$\lim_{x_3\to o} x_3^5\frac{\partial F_i}{\partial x_3} = 0, \quad i = 0, 1. \qquad /22/$$

Из соотношений $\lim_{x_1\to o,\pi}|rV_i| < \infty$, i = 0,1,2 имеем:

$$\lim_{x_1\to o,\pi}\sin^2 x_1\frac{\partial F_i}{\partial x_1} = 0, \quad i = 0,1. \qquad /23/$$

Из соотношений $\lim\limits_{x_2 \to 0,\pi} |r V_i| < \infty$, $i = 0,1$ и $\lim\limits_{x_2 \to 0,\pi} |r V_2| = \infty$ следует:

$$\lim_{x_2 \to 0,\pi} \sin x_2 \frac{\partial F_0}{\partial x_2} = 0 \qquad F_1(x_1, 0, x_3) = F_1(x_1, \pi, x_3) = 0. \quad /24/$$

Зададим область определения $\mathfrak{D}(L)$ оператора L следующими условиями:

Функции $u = \{u_0, u_1\} \in \mathfrak{D}(L)$, если:

1. $u_i \in W_2^2(\Omega)$, $i = 0,1$.
2. $Lu \in L_2(\Omega)$.
3. Функции u_0 и u_1 удовлетворяют граничным условиям /22/-/24/.
4. Для любых двух функций $u = \{u_0, u_1\}$ и $v = \{v_0, v_1\}$ справедливы соотношения

$$\lim_{x_3 \to \infty} a_{33} W^k_{x_3} = 0, \quad k = 0,1,$$

где

$$W^k_{x_3} = u_k \frac{\partial v_k}{\partial x_3} - v_k \frac{\partial u_k}{\partial x_3}, \quad k = 0,1. \quad /25/$$

Здесь $W_2^2(\Omega)$ - гильбертово пространство функций, вторые производные которых принадлежат пространству $L_2(\Omega)$; $L_2(\Omega)$ - гильбертово пространство с весом r, т.е. если $u \in L_2(\Omega)$,то $\int_\Omega r(u_0^2 + u_1^2) dx_1 dx_2 dx_3 < \infty$. Скалярное произведение функций $u,v \in L_2(\Omega)$ определяется выражением

$$(u, v) = \int_\Omega r(u_0 v_0 + u_1 v_1) dx_1 dx_2 dx_3 .$$

Условие /25/ обеспечивает достаточно быстрое убывание функций $u \in \mathfrak{D}(L)$ на бесконечности. Нетрудно убедиться, что оператор является самосопряженным, т.е. $L = L^*$ и $\mathfrak{D}(L) = \mathfrak{D}(L^*)$. Это позволяет утверждать, что спектр оператора L вещественный.

Сформулируем вариационную постановку спектральной задачи /21/÷÷/25/. Рассмотрим билинейную форму $a(u,v) = (Lu, v)$ для $u, v \in \mathfrak{D}(L)$. Самосопряженность оператора L означает, что $a(u,v) = a(v,u)$. Тогда, используя условия /22/-/25/, получаем:

$$a(u,v) = \int_\Omega \Big\{ \sum_{k=0}^{1} \sum_{i=1}^{3} a_i \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - b\Big(u_0 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + v_0 \frac{\partial u_1}{\partial x_2}\Big) + r[V_0 u_0 v_0 + V_1(u_0 v_1 + v_0 u_1) + V_2 u_1 v_1]\Big\} dx_1 dx_2 dx_3 . \quad /26/$$

Вариационный функционал спектральной задачи /21/-/25/ имеет вид

$$R(v) = a(v, v)/(v, v). \quad /27/$$

Стационарные точки F этого функционала являются волновыми функциями задачи /21/-/25/, а значение спектрального параметра E_μ вычисляется по формуле $E_\mu = R(F)$. Соответственно, энергия связи $-\epsilon_{Jv}$ /эВ/ мезомолекулы с $J = 1$ определяется согласно /17/, где v - номер собственного значения.

Для тождественных ядер область определения Ω определена в /9'/, при этом условии /24/ в точке $x_2 = \pi$ заменяются следующими:

$$\frac{\partial F_0}{\partial x_2}\Big|_{x_2 = \pi/2} = 0 \quad и \quad F_1\Big|_{x_2 = \pi/2} = 0 . \quad /24'/$$

В случае $J = 0$ система уравнений /21/ упрощается

$$(T + V)F_0 = EF_0 . \quad /28/$$

Область определения оператора в левой части /28/ задается теми же условиями, что и $\mathfrak{D}(L)$, если под $F \in \mathfrak{D}(L)$ понимать $F = \{F_0, 0\}$. Тогда вариационный функционал такой задачи получается из /27/ заменой потенциала V_0 на V, последний определен соотношениями /7/.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная постановка позволяет реализовать численное решение спектральной задачи для трех частиц с помощью МИАП, исключив погрешности, обусловленные редукцией исходного гамильтониана к бесконечной системе дифференциальных уравнений, возникающей в адиабатическом подходе. Эти погрешности, как правило, трудно оценить аналитически. Поэтому они могут быть проанализированы на основе экстраполяционных формул с применением расчетов /1/ на расширяющейся последовательности базисных функций.

Предложенная постановка позволяет на основе полученного вариационного функционала /27/ разработать эффективные разностные схемы, аппроксимирующие исходную спектральную задачу с априорной теоретической оценкой точности /11/.

Авторы благодарят В.А.Мещерякова за поддержку и проявленный интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. - ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.556.
2. Fano U., Rau R.T. Atomic collisions and spectra. Wiley. New York, 1986.

3. Фок В.А. - Изв.Акад.наук СССР, сер.физ., 1954, т.18, с.161.
4. Soloviev E.A., Vinitsky S.I. - J.Phys.B., 1985, v.18, p.L557.
5. Гусев В.В., Касчиев М.С. Препринт ОИЯИ, Р11-85-758, Р11-85-965, 1985, Дубна.
6. Виницкий С.И., Пономарев Л.М. - ЯФ, 1974, т.20, с.576.
7. Born M., Oppenheimer R. - Ann.d.Phys., 1927, Bd. 84, 457.
8. Fiziev P.P., Fizieva Ts.Ya. Preprint JINR, E2-86-119, 1986, Dubna.
9. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1982.
10. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики, т.1, М.: изд. ГИТТЛ, 1951.
11. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Наука, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 января 1987 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Виницкий С.И., Касчиев М.С., Пузынин И.В. Р4-87-8

Уравнение Шредингера системы трех частиц в гиперсферических координатах

Сформулирована спектральная задача для квантовомеханической системы трех частиц с кулоновским взаимодействием. Задача включает систему J + 1 дифференциальных уравнений в трехмерном пространстве и граничные условия, соответствующие условию ограниченности волновой функции во всем пространстве. Построен вариационный функционал для данной задачи в гиперсферических координатах. Такая постановка ориентирована на создание эффективных вариационно-разностных схем расчета характеристик трехчастичных систем.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Vinitsky S.I., Kaschiev M.S., Puzynin I.V. Р4-87-8

The Schroedinger Equation for Three-body Problem in Hyperspherical Coordinates

The spectral problem is formulated for a quantum-mechanical system of three Coulomb particles with a total angular momentum J. The problem included a system of (J+1) differential equations in a three-dimensional space and boundary conditions corresponding to the constraint on the wave function being finite throughout the whole space. For the problem, a variational functional of the Rayleigh-Ritz type is constructed in hyperspherical coordinates. This formulation is aimed at creating effective variation-difference schemes for calculating physical characteristics of three-particle systems.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987