объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-88-910

В.И.Коробов

АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ СИММЕТРИИ БРЕЙТА – ХИЛЛЕРААСА

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1988

Введение

Исследованию особенностей волновой функции системы нескольких частиц посвящен ряд работ[I,2], в которых рассматривается поведение решения во всем конфигурационном пространстве переменных. Этого анализа достаточно при использовании решений, инвариантных относительно трехмерных вращений. Обобщение задачи на случай $J \geq 1$ (J – квантовое число углового момента) приводит к необходимости разложения волновой функции в сумму по компонентам решения, описываемым внутренними переменными задачи, независимыми от трехмерных вращений. В связи с этим представляет особый интерес изучение особенностей поведения компонент разложения. В работе проводится анализ поведения компонент волновой функции уравнения Шредингера системы трех частиц в окрестности особенностей пространства внутренних переменных задачи, возникающих при редукции исходного уравнения Шредингера к трехмерному с использованием симметрии трехмерных вращений.

В работах[3,4] был предложен метод учета симметрии, сводящийся к представлению волновой функции с квантовыми числами полного углового момента J и его проекции на ось OZ, равной M, в виде суммы

$$\Psi^J_M(S) = \sum_{m=-J}^{J} D^{J*}_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)\, F^J_m(S_{in}), \qquad (I)$$

где S – полный набор переменных трех частиц, S_{in} – внутренние переменные трех частиц, α, β, γ – углы Эйлера подвижного репера, связанного с системой трех частиц. Положение подвижного репера определяется следующим образом: ось OZ' репера направлена вдоль первой пары частиц; ось OX' лежит в плоскости трех частиц в направлении третьей частицы; ось OY' перпендикулярна плоскости трех частиц и направлена таким образом, чтобы ориентация подвижного и неподвижного репера совпадала. Этот способ учета симметрии будет ниже называться симметрией Брейта-Хиллерааса. Вывод уравнений для компонент представления (I) в сфероидальных и гиперсферических координатах имеется в работах[5,6].

В работе широко используются функции, определенные на сфере или группе трехмерных вращений, а также соотношения, возникающие между ними. В дальнейшем мы придерживаемся определений и обозначений, приня-

тых в работе[7]. Некоторые необходимые сведения приводятся в Приложении I.

В заключение – краткое содержание работы.

В § I выводится уравнение Шредингера в представлении полного момента в декартовой системе координат для внутренних переменных. Эта форма уравнений удобна для дальнейшего анализа уравнения Шредингера трех частиц.

Параграфы 2 и 3 посвящены асимптотике поведения компонент волновой функции разложения (I) соответственно при $R \to 0$, где R – расстояние между двумя частицами, расположенными на оси подвижного репера OZ' (условие Като), и при $X \to 0$, где X – декартова координата третьей частицы в координатах подвижного репера, осевое вырождение. Обе точки являются особыми точками системы трех частиц, так как в первом случае не определено направление оси OZ', а во втором – направление оси OX'. Легко видеть, что других особых точек у системы трех частиц в симметрии Брейта-Хиллерааса нет.

В § 4 выводятся уравнения Шредингера системы трех частиц в сфероидальных координатах с учетом разложения волновой функции на четную и нечетную составляющие относительно перестановки частиц, расположенных на оси OZ' подвижного репера.

§ I. Уравнение Шредингера в представлении полного момента

Рассмотрим систему трех частиц I,2 и 3, с массами m_1, m_2, m_3 и зарядами z_1, z_2, z_3 соответственно. Уравнение Шредингера для этой системы в координатах Якоби имеет вид

$$H\Psi = E\Psi, \qquad (2а)$$

где гамильтониан

$$H = -\frac{1}{2\mu_{12}}\Delta_{\bar R} - \frac{1}{2\mu_3}\Delta_{\bar r} + V(r_{12}, r_{23}, r_{13}); \qquad (2б)$$

а $\bar R = \bar r_2 - \bar r_1$, $\bar r = (\bar r_3 - \bar r_1) - \frac{m_2}{m_1+m_2}\bar R$; r_{12}, r_{23}, r_{13} – расстояния между соответствующими частицами;

$$\mu_{12}^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}, \quad \mu_3^{-1} = (m_1+m_2)^{-1} + m_3^{-1};$$

$$V(r_{12}, r_{23}, r_{13}) = \frac{z_1 z_2}{r_{12}} + \frac{z_2 z_3}{r_{23}} + \frac{z_1 z_3}{r_{13}}.$$

Свяжем с системой трех частиц подвижной репер следующим образом: ось OZ' направим вдоль вектора $\bar R$; ось OX' расположим так в плоскости трех частиц, чтобы третья частица лежала в верхней полуплоскости $OX'Z'$ (координата $X'>0$); а ось OY' направим перпендикулярно плоскости трех частиц так, чтобы сохранить ориентацию неподвижного репера. Зафиксируем начало координат подвижного репера в точке центра масс частиц I и 2, в качестве внутренних переменных системы используем переменные: R – расстояние между частицами I и 2 и две ненулевые декартовы координаты подвижного репера x и z . Отметим, что использование любой другой точки на оси вектора $\bar{R}$ в качестве начальной точки подвижного репера, скажем, точки первой частицы или середины отрезка между частицами I и 2, не меняет ориентации подвижного репера, и переход к новой системе координат может быть выполнен после отделения углов Эйлера элементарной заменой внутренних переменных.

В качестве промежуточного репера будет использован репер сферических координат, основанный на векторе $\bar{R}$ (см.Приложение I). Углы Эйлера подвижного репера и репера сферических координат равны соответственно α, β, γ и $\alpha, \beta, 0$. О том, как определяются углы Эйлера из положения подвижного репера, подробно написано в Приложении I.

С уравнением Шредингера (2) связан вариационный функционал

$$\Phi(\Psi) = (\Psi, H\Psi) = \int \left\{ \frac{1}{2\mu_{12}} |\bar{\nabla}_R \Psi|^2 + \frac{1}{2\mu_3} |\bar{\nabla}_r \Psi|^2 + V(r_{12}, r_{23}, r_{13}) \right\} d\bar{R}\, d\bar{r}, \quad (3)$$

стационарные точки которого являются собственными значениями оператора Гамильтона . Это представление удобно тем, что при замене координат используются только первые производные, а символ вариационного функционала $H(p,q)$, где $p_i = \frac{\partial \Psi}{\partial q_i}$ – обобщенные импульсы и q_i – обобщенные пространственные переменные, ведет себя как символ классического гамильтониана, так как и тот, и другой определены на кокасательном расслоении многообразия пространственных переменных.

Отметим, что потенциальная энергия зависит лишь от внутренних переменных и, следовательно, после отделения внешних углов входит только в диагональную часть оператора.

Прежде чем перейти к дальнейшему изложению, сделаем несколько замечаний относительно обозначений. Под скалярным произведением двух векторов подразумевается скалярное произведение в C^3 : $(\bar{a}, \bar{b}) = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + a_3^* b_3$, звездочкой обозначено комплексное сопряжение. Выражение $\bar{a}^2$ означает $(\bar{a}, \bar{a}) = |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2$.

Сделаем замену переменных: $\bar{R} \to (R, \alpha, \beta)$, $\bar{r} \to \bar{r}_0$, где r_0 – координаты третьей частицы, связанные с репером сферических координат, тогда

$$(\Psi, T\Psi) = \int \left\{ \frac{1}{2\mu_{12}} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial R} \right|^2 + \frac{(\bar{L}\Psi)^2}{2\mu_{12} R^2} + \frac{1}{2\mu_3} (\bar{\nabla}_{r_0} \Psi) \right\} R^2 \sin\beta\, dR\, d\alpha\, d\beta\, d\bar{r}_0 ,$$

$\bar{L}$ – оператор орбитального момента пары частиц I и 2, T – оператор кинетической энергии. Оператор $\bar{L}$ можно предотавить в виде $\bar{L} = \bar{J} - \bar{\ell}$, где $\bar{J}$ – оператор полного момента, а $\bar{\ell}$ – оператор орбитального момента третьей частицы относительно центра масс первых

двух частиц. Используя покомпонентную коммутативность $\bar{J}$ и $\bar{\ell}$ ($[J_i, \ell_i] = 0$, $i = x, y, z$), получаем

$$(\Psi, T\Psi) = \int \left\{ \frac{1}{2\mu_{12}} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial R} \right|^2 + \frac{(\bar{J}\Psi)^2 + (\bar{\ell}\Psi)^2}{2\mu_{12} R^2} - \frac{2(\bar{J}\Psi, \ell\Psi)}{2\mu_{12} R^2} + \right. \quad (4)$$

$$\left. + \frac{1}{2\mu_3} (\bar{\nabla}_{r_0} \Psi)^2 \right\} R \sin\beta\, dR\, d\alpha\, d\beta\, d\bar{r}_0 .$$

Следующий шаг – замена координат: $\bar{r}_0 \to \gamma, x, z$, переход к подвижному реперу. В этих координатах компоненты оператора орбитального момента третьей частицы относительно подвижного репера имеют вид

$$\ell'_x = i \frac{z}{x} \frac{\partial}{\partial \gamma} ,$$

$$\ell'_y = -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \quad (5)$$

$$\ell'_z = -i \frac{\partial}{\partial \gamma} ,$$

а оператор кинетической энергии третьей частицы

$$T_3 = -\frac{1}{2\mu_3} \left\{ \frac{1}{x^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} . \quad (6)$$

Рассмотрим подробнее скалярное произведение ($\bar{J}\Psi, \bar{\ell}\Psi$). В координатах подвижного репера оно записывается

$$(\bar{J}\Psi, \bar{\ell}\Psi) = (J'_z \Psi)^* (\ell'_z \Psi) + (J'^{+1}\Psi)^* (\ell'^{+1}\Psi) + (J'^{-1}\Psi)^* (\ell'^{-1}\Psi),$$

где $J'^{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (J'_x - i J'_y)$, $J'^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (J'_x + i J'_y)$,
а $\ell'^{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\ell'_x - i\ell'_y)$, $\ell'^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\ell'_x + i\ell'_y)$, контравариантные циклические компоненты операторов J и ℓ в координатах подвижного репера. Действие операторов J'^{+1} и J'^{-1} на функции Вигнера определяется соотношениями

$$J'^{\pm 1} D^{J*}_{Mm}(\alpha, \beta, \gamma) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{J(J+1) - m(m \pm 1)}\, D^{J*}_{Mm\pm 1}(\alpha, \beta, \gamma) . \quad (7)$$

Оператор J'_z является z' компонентой полного углового момента и поэтому равен ℓ'_z , так как $J'_z = L'_z + \ell'_z$ и $L'_z = 0$. Таким образом,

$$(\bar{J}\Psi, \bar{\ell}\Psi) = \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \right|^2 - \frac{1}{\sqrt{2}} (J'^{+1}\Psi)^* \left[\frac{z}{x} i \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} - \left(z \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \right] - \quad (8)$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2}} (J'^{-1}\Psi)^* \left[-\frac{z}{x} i \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} - \left(z \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \right] .$$

Подставляя выражения (5),(6),(8) в выражение вариационного функционала (4), получим для волновой функции с квантовым числом углового момента J

$$(\psi,T\psi)=\int\Big\{\frac{1}{2\mu_{12}}\Big|\frac{\partial\psi}{\partial R}\Big|^2+\frac{J(J+1)}{2\mu_{12}R^2}+\frac{1}{2\mu_{12}R^2}\Big[-\Big|\frac{\partial\psi}{\partial\gamma}\Big|^2+\frac{z^2}{x^2}\Big|\frac{\partial\psi}{\partial\gamma}\Big|^2+ \tag{9}$$

$$+\Big|z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|^2\Big]+\frac{1}{\sqrt{2}\mu_{12}R^2}(J^{+1}\psi)^*\Big[\frac{z}{x}\Big(i\frac{\partial\psi}{\partial\gamma}\Big)-\Big(z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big)\Big]+$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}\mu_{12}R^2}(J^{-1}\psi)^*\Big[-\frac{z}{x}\Big(i\frac{\partial\psi}{\partial\gamma}\Big)-\Big(z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big)\Big]+$$

$$+\frac{1}{2\mu_3}\Big[\frac{1}{x^2}\Big|\frac{\partial\psi}{\partial\gamma}\Big|^2+\Big|\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|^2+\Big|\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big|^2\Big]\Big\}R^2x\sin\beta\,dR\,d\alpha\,d\beta\,d\gamma\,dx\,dz\,.$$

Волновая функция системы в представлении полного момента, имеющая квантовые числа полного момента J и его проекции на ось OZ, равной M, представляется в виде

$$\Psi^J_M(\bar R,\bar r)=\sum_{m=-J}^{J}D^{J*}_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)F^J_m(R,x,z)\,. \tag{10}$$

Подставляя последнюю формулу в (9) и, интегрируя по углам Эйлера, получим вариационный функционал для уравнения Шредингера в преставлении полного момента:

$$(\psi,H\psi)=\int\sum_{m=-J}^{J}\Big\{\frac{1}{2\mu_{12}}\Big|\frac{\partial F^J_m}{\partial R}\Big|^2+\Big[\frac{J(J+1)-m^2}{2\mu_{12}R^2}+\frac{z^2}{x^2}\,\frac{m^2}{2\mu_{12}R^2}\Big]\big|F^J_m\big|^2+ \tag{11}$$

$$+\frac{1}{2\mu_{12}R^2}\big|\mathcal{L}F^J_m\big|^2+\frac{[J(J+1)-m(m+1)]^{1/2}}{2\mu_{12}R^2}F^{J*}_m\Big[\frac{z}{x}(m+1)F^J_{m+1}+$$

$$+\mathcal{L}F^J_{m+1}\Big]+\frac{[J(J+1)-m(m-1)]^{1/2}}{2\mu_{12}R^2}F^{J*}_m\Big[\frac{z}{x}(m-1)F^J_{m-1}-\mathcal{L}F^J_{m-1}\Big]+$$

$$+\frac{P_m^2}{2\mu_3}+V(R,x,z)\big|F^J_m\big|^2\Big\}\frac{8\pi^2}{2J+1}\,dR\,dx\,dz\,,$$

где $\mathcal{L}=z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}$, $P_m^2=\frac{m^2}{x^2}|F^J_m|^2+\Big|\frac{\partial F^J_m}{\partial x}\Big|^2+\Big|\frac{\partial F^J_m}{\partial z}\Big|^2$;

$$V(R,x,z)=\frac{Z_1Z_2}{R}+\frac{Z_1Z_3}{[x^2+(z+(1-\delta)R)^2]^{1/2}}+\frac{Z_2Z_3}{[x^2+(z-\delta R)^2]^{1/2}}\,,\quad \delta=\frac{m_1}{m_1+m_2}\,.$$

Оператор Шредингера системы коммутирует также с преобразованием четности /12/:

$$P_\lambda:(\bar R,\bar r)\longrightarrow(-\bar R,-\bar r)\,.$$

Действие оператора четности на функции Вигнера определяется соотношением

$$P_\lambda D^J_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)=D^J_{Mm}(\alpha+\pi,\pi-\beta,\pi-\gamma)=(-1)^{J-m}D^J_{M,-m}(\alpha,\beta,\gamma)\,, \tag{12}$$

и, следовательно, собственные функции операторов $\bar J^2$, J_z и P_λ представляются в виде

$$\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)=\Big[\frac{2J+1}{16\pi^2(1+\delta_{m0})}\Big]^{1/2}\Big[D^J_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)+\lambda(-1)^{J-m}D^J_{M-m}(\alpha,\beta,\gamma)\Big]\,, \tag{13}$$

и имеют место следующие равенства

$$\bar J^2\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}=J(J+1)\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}\,;\qquad J_z\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}=-M\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}\,,$$

$$P_\lambda\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}=\lambda\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}\,;$$

$$\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\,d\beta\int_0^{2\pi}d\gamma\,\big[\mathcal{D}^{J\lambda*}_{Mm}\cdot\mathcal{D}^{J'\lambda'}_{M'm'}\big]=\delta_{JJ'}\cdot\delta_{MM'}\cdot\delta_{mm'}\,\delta_{\lambda\lambda'}\,.$$

Функции $\mathcal{D}^{J\lambda}_{Mm}$ называются симметризованными функциями Вигнера /5/.

Теперь мы можем выписать явно зависимость от угловых переменных решения уравнения Шредингера, характеризующегося квантовыми числами полного момента J, его проекции M на ось OZ, а также полной четности λ,

$$\Psi^{J\lambda}_M(\bar R,\bar r)=\sum_{m=0}^{J}\mathcal{D}^{J\lambda*}_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)\cdot F^{J\lambda}_m(R,x,z)\,. \tag{14}$$

Используя представление (14), получим окончательное выражение для вариационного функционала.

$$(\psi,H\psi)=\int\sum_{m=\mu(\lambda)}^{J}\Big\{\frac{1}{2\mu_{12}}\Big|\frac{\partial F^{J\lambda}_m}{\partial R}\Big|^2+\frac{J(J+1)-m^2+\frac{z^2}{x^2}m^2}{2\mu_{12}R^2}\big|F^{J\lambda}_m\big|^2+ \tag{15}$$

$$+\frac{1}{2\mu_{12}R^2}\big|\mathcal{L}F^{J\lambda}_m\big|^2+\frac{\gamma^\lambda_{m,m+1}}{2\mu_{12}R^2}F^{J\lambda*}_m\Big[\frac{z}{x}(m+1)F^{J\lambda}_{m+1}+\mathcal{L}F^{J\lambda}_{m+1}\Big]+$$

$$+\frac{\gamma^\lambda_{m,m-1}}{2\mu_{12}R^2}F^{J\lambda*}_m\Big[\frac{z}{x}(m-1)F^{J\lambda}_{m-1}-\mathcal{L}F^{J\lambda}_{m-1}\Big]+\frac{P_m^2}{2\mu_3}+$$

$$+V(R,x,z)\big|F^{J\lambda}_m\big|^2\Big\}R^2x\,dR\,dx\,dz\,;$$

где

$$\mu(\lambda)=\begin{cases}0, & \text{при}\quad \lambda=(-1)^J\,,\\ 1, & \text{при}\quad \lambda=-(-1)^J\,;\end{cases}$$

$$\gamma^{\lambda}_{m,m+1} = \{[1+\delta_{m0}\lambda(-1)^J][J(J+1)-m(m+1)]\}^{1/2},$$

$$\gamma^{\lambda}_{m,m-1} = (1-\delta_{0m})\{[1+\delta_{m1}\lambda(-1)^J][J(J+1)-m(m-1)]\}^{1/2};$$

$$\mathcal{L} = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}, \quad P^2_m = \frac{m^2}{x^2}\left|F^{J\lambda}_m\right|^2 + \left|\frac{\partial F^{J\lambda}_m}{\partial x}\right|^2 + \left|\frac{\partial F^{J\lambda}_m}{\partial z}\right|^2;$$

$$\mu^{-1}_{12} = m^{-1}_1 + m^{-1}_2, \quad \mu^{-1}_3 = (m_1+m_2)^{-1} + m^{-1}_3$$

$$V(R,x,z) = \frac{Z_1Z_2}{R} + \frac{Z_2Z_3}{[x^2+(z-\delta R)^2]^{1/2}} + \frac{Z_1Z_3}{[x^2+(z+(1-\delta)R)^2]^{1/2}}; \quad \delta = \frac{m_1}{m_1+m_2}$$

Соответствующее вариационному функционалу (I5) уравнение Шредингера в новых координатах имеет вид

$$\sum_{m'=\mu(\lambda)}^{J} (H_{mm'} - \delta_{mm'}E)F^{J\lambda}_{m'} = 0, \quad m = \mu(\lambda), \ldots, J;$$

$$H_{m,m} = \frac{1}{2\mu_{12}}\left\{-\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial}{\partial R}\right) - \frac{1}{R^2}\left[\mathcal{L}^2 + \frac{z}{x}\mathcal{L}\right] + \right. \tag{I6}$$

$$\left. + \frac{1}{R^2}\left[J(J+1) - m^2 + \frac{z^2}{x^2}m^2\right]\right\} + \frac{P^2_m}{2\mu_3} + V(R,x,z);$$

$$H_{m,m\pm1} = \frac{\gamma^{\lambda}_{m,m\pm1}}{2\mu_{12}R^2}\left[\frac{z}{x}(m\pm1) \pm \mathcal{L}\right];$$

и $H_{mm'} = 0$ при $|m-m'| \geq 2$.

В заключение скажем несколько слов о других формах учета симметрии уравнения Шредингера относительно группы трехмерных вращений.

Представление, аналогичное выше изложенному, использовано в /8/. Основное отличие состоит в том, что ось OZ' подвижного репера направлена перпендикулярна плоскости трех частиц, а ось OX' вдоль оси частиц I и 2. Однако это существенно усложняет вывод трехмерных уравнений, тогда как вещественные компоненты представления /8/ совпадают с точностью до знака с соответствующими компонентами представления (I4).

Еще одно представление, основанное на $\mathcal{D}$-функциях Вигнера и распространенное на систему N частиц, получено в работе /9/. Однако автору не известно ни одного вариационного расчета, выполненного в рамках данного представления симметрии.

Наиболее распространенная форма учета симметрии основана на разложении волновой функции по биполярным гармоникам

$$\Psi^J_M(\bar r_1, \bar r_2) = \sum_{j_1,j_2}\{Y_{j_1}\otimes Y_{j_2}\}_{JM} F_{j_1j_2}(r_1, r_2, \theta_{12}), \tag{I7}$$

$j_1 + j_2 = J$, при $\lambda = (-1)^J$ и $j_1 + j_2 = J+1$, при $\lambda = -(-\lambda)^J$. Она была предложена Шварцем в /I0/. Привлекательность этого разложения в том, что волновая функция для P-состояния системы записывается особенно просто:

$$\Psi^1(\bar r_1, \bar r_2) = \bar r_1 G_1(r_1, r_2, \theta_{12}) + \bar r_2 G_2(r_1, r_2, \theta_{12}) \quad \text{для } \lambda = -1; \tag{I7'}$$

$$\Psi^1(\bar r_1, \bar r_2) = [\bar r_1 \times \bar r_2]\cdot \tilde G_1(r_1, r_2, \theta_{12}) \quad \text{для } \lambda = 1.$$

При этом особенности компонент разложения (I7) (при r_1 и r_2 стремящихся к нулю) уже учтены в представлении (I7'). Численные расчеты, использующие данную форму представления, имеются в работах /II,I2,I3/ и многих других.

Отметим, наконец, расчеты, основанные на полном разложении волновой функции по биполярным гармоникам

$$\Psi^J_M(\bar r_1, \bar r_2) = \sum_{j_1 j_2}^{\infty}\{Y_{j_1}\otimes Y_{j_2}\}_{JM} F_{j_1j_2}(r_1, r_2); \tag{I8}$$

здесь суммирование ведется для волновых функций с четностью $\lambda = (-1)^J$, по $j_1 + j_2 = J, J+2, \ldots$, а для функций с четностью $\lambda = -(-1)^J$, по $j_1 + j_2 = J+1, J+3, \ldots$. Это разложение успешно применялось при расчете энергий связи мезомолекулы $dt\mu$ в работе /I4/.

§ 2. <u>Асимптотика волновых функций при $R \to 0$.</u>

Для получения асимптотического поведения волновой функции при $R \to 0$, воспользуемся соотношением Ченга-Фано /I5/, связывающим биполярные гармоники с функциями Вигнера,

$$\{Y_{j_1}\otimes Y_{j_2}\}_{JM}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \tag{I9}$$
$$= \sqrt{2\pi}\sum_{m=0}^{j_2} G^{Jm}_{j_1j_2}\mathcal{D}^{J\lambda*}_{Mm}(\varphi_1, \theta_1, \varphi_{12})\cdot Y_{j_2m}(\theta_{12}, 0),$$

здесь θ_1, φ_1 и θ_2, φ_2 – сферические углы векторов $\bar R$ и $\bar r$, соответственно, а θ_{12} и φ_{12} – сферические углы вектора $\bar r$ относительно репера сферических координат вектора $\bar R$; квантовое число четности $\lambda = (-1)^{j_1+j_2}$ соответствует четности стоящей слева биполярной гармоники; коэффициенты $G^{Jm}_{j_1j_2}$, находящиеся под знаком суммы, определяются через коэффициенты Клебша-Гордана

$$G^{Jm}_{j_1 j_2} = \left[\left(\frac{2}{1+\delta_{om}}\right)\cdot\left(\frac{2j_1+1}{2J+1}\right)\right]^{1/2} C^{Jm}_{j_1 0 j_2 m} .$$

В дальнейшем мы будем рассматривать только случай с четностью $\lambda=(-1)^J$. Случай с противоположной четностью может быть рассмотрен аналогично.

Соотношение (I9) позволяет выразить компоненты волновой функции в представлении (I4) через компоненты разложения по биполярным гармоникам (I8):

$$F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}) = \sqrt{2\pi}\sum_{j_1 j_2}^{\infty} G^{Jm}_{j_1 j_2}\cdot Y_{j_2 m}(\theta_{12},0)F_{j_1 j_2}(R,r), \qquad (20)$$

$$j_2 \geq m, \quad j_1 = |J-j_2|, |J-j_2|+2, \dots$$

Подставляя в (20) соотношение (I8) из Приложения 2, которое определяет в явном виде поведение функции $F_{j_1 j_2}(R,r)$ при $R\to 0$, и суммируя по j_1, получим

$$F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}) = \sum_{j_2=m}^{\infty} R^{j_1} r^{j_2} Y_{j_2 m}(\theta_{12},0)\, H^m_{j_1 j_2}(R,r), \qquad (2I)$$

$$j_1 = |J-j_2|,$$

и функции $H^m_{j_1 j_2}(R,r)$ ограничены. Выражение (2I) определяет явную зависимость $F^{J\lambda}_m$ от внутреннего угла θ_{12}.

Асимптотическое поведение волновой функции можно получить и прямо из (20), выделяя член с асимптотикой $O(R^0)$:

$$F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}) = \sqrt{2\pi}\, G^{Jm}_{oJ}\, r^J\, Y_{Jm}(\theta_{12},0)H_{oJ}(R,r) + O(R^1). \qquad (22)$$

Это соотношение полезно тем, что оно открывает связь между компонентами с различными значениями m при $R\to 0$.

Полученные выражения для компонент волновой функции накладывают существенные ограничения на выбор внутренних переменных при построении вариационного метода, так как наличие явной угловой зависимости компонент при $R\to 0$ требует возможности учета этой зависимости в рамках внутренних координат системы. Так, волновые функции, выраженные в переменных Хиллерааса (r_{12}, r_{23} и r_{13}) или в периметрических координатах, не имеют угловой зависимости при $R=0$ ($r_{12}=R$) и не могут быть корректно использованы для расчетов трехчастичных систем в данном представлении симметрии. Напротив, волновые функции, выраженные через сфероидальные [5] и гиперсферические [6] координаты, могут с успехом использоваться при решении уравнения Шредингера в представлении симметрии Брейта-Хиллерааса.

Отметим особо случай, когда частицы I и 2 тождественны. Тогда уравнение Шредингера обладает симметрией относительно перестановки этих частиц, и, следовательно, волновая функция должна быть либо четной, либо нечетной относительно перестановки. Если волновая функция нечетна, то она равна нулю при $R=0$, и, следовательно,

$$F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}) = \sqrt{2\pi}\, R\Big[r^{J-1}G^{Jm}_{1J-1}\cdot Y_{J-1m}(\theta_{12},0)H_{1J-1}(R,r) + r^{J+1}G^{Jm}_{1J+1}\cdot Y_{J+1m}(\theta_{12},0)\cdot H_{1J+1}(R,r)\Big] + O(R^2), \qquad (23)$$

при $m=0,1,\dots,J$, $R\to 0$.

Это соотношение полезно также при разбиении компонент $F^{J\lambda}_m$ на четную и нечетную составляющие относительно перестановки частиц I и 2, что удобно при построении вариационного метода на основе сфероидальных координат.

Скажем несколько слов об условии Като для компонент представления. При этом будем предполагать, что $F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12})\neq 0$, при $R\to 0$. Соотношение (I9) из Приложения 2 приводит к

$$F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}) = \sqrt{2\pi}\Big[r^J G^{Jm}_{oJ}\, Y_{Jm}(\theta_{12},0)\cdot h^{(0)}_{oJ}\Big(1+\frac{Z_1 Z_2}{\mu_{12}}R\Big) + Rr^{J-1}Y_{J-1,m}(\theta_{12},0)h^{(0)}_{oJ-1} + Rr^{J+1}Y_{J+1,m}(\theta_{12},0)h^{(0)}_{oJ+1}\Big] + O(R^2),$$

и, следовательно,

$$\int_0^{\pi} Y_{Jm}(\theta_{12},0)\frac{\partial F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12})}{\partial R}\sin\theta_{12}\, d\theta_{12} = \frac{Z_1 Z_2}{\mu_{12}}F^{J\lambda}_m(R,r,\theta_{12}), \qquad (24)$$

при $R\to 0$.

Если частицы I и 2 тождественны, то $h^{(0)}_{oJ-1}$ и $h^{(0)}_{oJ+1}$ равны нулю, и условие усреднения по углу θ_{12} (24) может быть опущено, то есть

$$\frac{\partial F^{J\lambda}_m}{\partial R} = \frac{Z_1 Z_2}{\mu_{12}}F^{J\lambda}_m \qquad \text{при} \qquad R\to 0 . \qquad (25)$$

§ 3. Асимптотика волновых функций при $X\to 0$. Осевое вырождение

Рассмотрим уравнение (I6). При этом в соответствии со схемой, предложенной в Приложении 2, будем исследовать уравнение на многообразии $R\geq \varepsilon > 0$. Выписывая систему уравнений относительно переменной X и оставляя только главную часть оператора для диагональных членов уравнения, имеем

$$\left\{\left(\frac{z^2}{2\mu_{12}R^2}+\frac{1}{2\mu_3}\right)\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m^2}{x^2}\right]+D^{\varepsilon}\right\}F_m+$$

$$+A_{mm+1}\left[\frac{z}{x}(m+1)+\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]F_{m+1}+ \qquad (26)$$

$$+A_{mm-1}\left[\frac{z}{x}(m-1)-\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]F_{m-1}=0\,;$$

$$m=0,1,\ldots,J\ ,$$

где $A_{m\,m\pm1}=\frac{\gamma^{\lambda}_{m\,m\pm1}}{2\mu_{12}R^2}$, а за символом D^{ε} скрывается оставшаяся часть оператора. Индексы J и λ у компонент волновой функции здесь и далее мы для простоты опускаем.

Главная часть уравнения (26) распадается на систему не связанных между собой уравнений с характеристическим уравнением

$$-\rho(\rho-1)-\rho+m^2=0\,,\qquad m=0,1,\ldots,J\,. \qquad (27)$$

Корнями уравнения (27) являются $\rho=\pm m$. При $m\neq0$ решение, соответствующее корню $\rho=-m$, имеет полюс в точке $x=0$ и поэтому не может быть включено в общее решение /I/. При $m=0$ общее решение распадается на две компоненты

$$F_0=C_1+C_2\ln x\,,$$

и второе слагаемое не ограничено при $x\to0$, поэтому оно также не может присутствовать в общем решении. Таким образом, из главной части уравнения (24) следует, что общее решение уравнения (I6) может быть записано в виде

$$F_m(R,x,z)=x^m G_m(R,x,z)\,,\qquad m=0,1,\ldots,J\,; \qquad (28)$$

где $G_m(R,x,z)$ – произвольные ограниченные в пространстве функции.

Для того чтобы убедиться, что представление (28) верно для исходного уравнения (26), нам необходимо выполнить подстановку (28). Это приводит к системе уравнений:

$$\left\{\left(\frac{z^2}{2\mu_{12}R^2}+\frac{1}{2\mu_3}\right)\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{2m+1}{x}\frac{\partial}{\partial x}\right]+D^{\varepsilon}\right\}G_m(R,x,z)+$$

$$+A_{m,m+1}\left[2z(m+1)+x\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]G_{m+1}(R,x,z)+ \qquad (29)$$

$$+A_{m,m-1}\left[-\frac{1}{x}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right]G_{m-1}(R,x,z)=0\,,$$

$$m=0,1,\ldots,J\,;$$

В последнем слагаемом уравнения (29) появляется новый член, входящий в главную часть. Для того, чтобы убедиться, что он не добавляет логарифмических членов в асимптотику компонент волновой функции, воспользуемся индукцией по m , при этом будем рассматривать только регулярные ограниченные решения.

При $m=0$ внедиагональный член главной части уравнения отсутствует, и поэтому асимптотика общего решения $G_0(R,x,z)$ соответственно равна

$$G_0(R,x,z)=g_0^{(0)}(R,z)+o(x^0)\,.$$

Пусть утверждение доказано для $G_{M-1}(R,x,z)$, докажем его для $G_M(R,x,z)$. Для этого подставим в М-е уравнение (29) общее решение для $G_{M-1}(R,x,z)$. Эта подстановка определяет систему уравнений для $m=M,M+1,\ldots,J$, и главная часть уравнения с номером М не имеет внедиагональных членов. Следовательно,

$$G_M(R,x,z)=g_M^{(0)}(R,z)+o(x^0)\,.$$

Окончательно получаем, что все компоненты $G_m(R,x,z)$ сохраняют свое асимптотическое поведение $g_m^{(0)}(R,z)+o(x^0)$, и, таким образом, компоненты волновой функции представления (I6) при стремлении x к нулю ведут себя как

$$F_m(R,x,z)=x^m g_m^{(0)}(R,z)+o(x^m)\,, \qquad (30)$$

что и требовалось доказать.

§ 4. Уравнение Шредингера в сфероидальных координатах

В этом параграфе будет получен явный вид уравнения Шредингера в сфероидальных координатах с учетом четной и нечетной составляющих волновой функции.

Как уже отмечалось в § I, начальную точку подвижного репера, связанного с системой трех частиц, можно передвигать вдоль оси частиц I и 2 и после отделения внешних переменных – углов Эйлера. Для этого введем замену переменных:

$$R'=R\,,\quad x'=x\,,\quad z'=z-\frac{\varkappa}{2}R\,, \qquad (31)$$

при этом операторы $\frac{\partial}{\partial R}$ и $\mathcal{L}$ преобразуются как

$$\frac{\partial}{\partial R}=\frac{\partial}{\partial R'}-\frac{\varkappa}{2}\frac{\partial}{\partial z'}\,,\qquad \mathcal{L}=\mathcal{L}'+\frac{\varkappa}{2}R'\frac{\partial}{\partial x'} \qquad (32)$$

и $\mathcal{L}'=z'\frac{\partial}{\partial x'}-x'\frac{\partial}{\partial z'}$.

При $\varkappa=\frac{m_1-m_2}{m_1+m_2}$ начало подвижного репера попадает в середину отрезка, соединяющего частицы I и 2; при $\varkappa=-\frac{2m_2}{m_1+m_2}$ начало репера совпадает с положением частицы I.

Подставляя (31) и (32) в выражение функционала (I5) и опуская штрихи у новых переменных, получим

$$(\Psi H \Psi) = \int \sum_{m=\mu(\lambda)}^{J} \Big\{ \frac{1}{2\mu_{12}} \Big[\Big|\frac{\partial F_m}{\partial R}\Big|^2 - \frac{\varkappa}{2}\Big(\frac{\partial F_m^*}{\partial z}\cdot\frac{\partial F_m}{\partial R} + \frac{\partial F_m^*}{\partial R}\cdot\frac{\partial F_m}{\partial z}\Big) +$$

$$+ \frac{\varkappa^2}{4} P_m^2 + \frac{J(J+1)-2m^2}{R^2}|F_m|^2 + \frac{1}{R^2}\Big(\frac{z^2+x^2}{x^2} m^2 |F_m|^2 + |\mathcal{L} F_m|^2\Big)\Big] + \qquad (33)$$

$$+ \frac{\varkappa}{2\mu_{12} R}\Big[\frac{z}{x^2} m^2 |F_m|^2 + \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial F_m^*}{\partial x}\mathcal{L} F_m + \mathcal{L} F_m^* \frac{\partial F_m}{\partial x}\Big)\Big] +$$

$$+ \frac{\gamma^\lambda_{m,m+1}}{2\mu_{12} R^2} F_m^* \Big[\Big(\frac{z}{x}(m+1) F_{m+1} + \mathcal{L} F_{m+1}\Big) + \frac{\varkappa}{2} R\Big(\frac{m+1}{x} F_{m+1} + \frac{\partial F_{m+1}}{\partial x}\Big)\Big] +$$

$$+ \frac{\gamma^\lambda_{m,m-1}}{2\mu_{12} R^2} F_m^* \Big[\Big(\frac{z}{x}(m-1) F_{m-1} - \mathcal{L} F_{m-1}\Big) + \frac{\varkappa}{2} R\Big(\frac{m-1}{x} F_{m-1} - \frac{\partial F_{m-1}}{\partial x}\Big)\Big] +$$

$$+ \frac{P_m^2}{2\mu_3} + V(R,x,z)|F_m|^2 \Big\} R^2 x \, dR \, dx \, dz .$$

Здесь $\gamma^\lambda_{m,m\pm1}$, $\mu(\lambda)$, $\mathcal{L}$ и P_m^2 определяются так же, как и в формуле (I5) § I. Напомним, что индексы J и λ у компонент волновой функции $F_m^{J\lambda}$ мы для простоты опускаем.

Полученная форма функционала удобна в качестве исходной при получении новых форм уравнения в различных криволинейных координатах.

Положим $\varkappa = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2}$ и перейдем к сфероидальным координатам:

$$\xi = \Big(\sqrt{x^2+(z+R/2)^2} + \sqrt{x^2+(z-R/2)^2}\Big)/R, \qquad (34)$$
$$\eta = \Big(\sqrt{x^2+(z+R/2)^2} - \sqrt{x^2+(z-R/2)^2}\Big)/R .$$

Основные операторы в новых координатах имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{R(\xi^2-\eta^2)}\Big[(\xi^2-1)\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big] ,$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{2}{R}\frac{\rho}{\xi^2-\eta^2}\Big[\xi\frac{\partial}{\partial\xi} - \eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big] , \qquad (35)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{2}{R}\frac{1}{\xi^2-\eta^2}\Big[(\xi^2-1)\eta\frac{\partial}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\xi\frac{\partial}{\partial\eta}\Big] ,$$

$$\mathcal{L} = \frac{\rho}{\xi^2-\eta^2}\Big[\eta\frac{\partial}{\partial\xi} - \xi\frac{\partial}{\partial\eta}\Big] ,$$

$$P_m^2 = \frac{4}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\Big[\frac{m^2(\xi^2-\eta^2)}{\rho^2}|F_m|^2 + (\xi^2-1)\Big|\frac{\partial F_m}{\partial\xi}\Big|^2 + (1-\eta^2)\Big|\frac{\partial F_m}{\partial\eta}\Big|^2\Big] ;$$

где $\rho = \sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}$. Отметим также, что $x = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)} = \frac{R}{2}\rho$.

Подставляя (34) и (35) в (33), получим выражение для функционала в сфероидальных координатах:

$$(\Psi, H\Psi) = \int \sum_{m=\mu(\lambda)}^{J} \Big\{ T^{\sigma}_{m,m} + T^{\varkappa}_{m,m} + \gamma^\lambda_{m,m+1} T_{m,m+1} + \qquad (36)$$
$$+ \gamma^\lambda_{m,m-1} T_{m,m-1} + V(R,\xi,\eta)|F_m|^2\Big\} \frac{R^5}{8}(\xi^2-\eta^2)\, dR\, d\xi\, d\eta ,$$

где

$$T^{\sigma}_{m,m} = \frac{1}{2\mu_{12}}\Big\{\Big|\frac{\partial F_m}{\partial R}\Big|^2 - \frac{1}{R(\xi^2-\eta^2)}\Big[\frac{\partial F^*}{\partial R}\Big((\xi^2-1)\xi\frac{\partial F_m}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\eta\frac{\partial F_m}{\partial\eta}\Big) +$$
$$+ \Big((\xi^2-1)\xi\frac{\partial F_m^*}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\eta\frac{\partial F_m^*}{\partial\eta}\Big)\frac{\partial F_m}{\partial R}\Big] + \frac{J(J+1)-2m^2}{R^2}|F_m|^2 +$$
$$+ \frac{(\xi^2+\eta^2-1+\varkappa^2)}{4} P_m^2\Big\} + \frac{1}{2\mu_3} P_m^2 ,$$

$$T^{\varkappa}_{m,m} = \frac{\varkappa}{2\mu_{12}}\Big\{-\frac{1}{R(\xi^2-\eta^2)}\Big[\frac{\partial F_m^*}{\partial R}\Big((\xi^2-1)\eta\frac{\partial F_m}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\xi\frac{\partial F_m}{\partial\eta}\Big) + \qquad (36')$$
$$+ \Big((\xi^2-1)\eta\frac{\partial F_m^*}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\xi\frac{\partial F_m^*}{\partial\eta}\Big)\frac{\partial F_m}{\partial R}\Big] + \frac{\xi\eta}{2} P_m^2\Big\} ,$$

$$T_{m,m\pm1} = T^{\sigma}_{m,m\pm1} + T^{\varkappa}_{m,m\pm1} ,$$

$$T^{\sigma}_{m,m\pm1} = \frac{1}{2\mu_{12}R^2} F_m^*\Big[\frac{\xi\eta}{\rho}(m\pm1)F_{m\pm1} \pm \mathcal{L} F_{m\pm1}\Big] ,$$

$$T^{\varkappa}_{m,m\pm1} = \frac{\varkappa}{2\mu_{12}R^2} F_m^*\Big[\frac{m\pm1}{\rho} F_{m\pm1} \pm \frac{\rho}{\xi^2-\eta^2}\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi} - \eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big)F_{m\pm1}\Big] ,$$

$$V(R,\xi,\eta) = \frac{Z_1 Z_2}{R} + 2\,\frac{Z_2 Z_3(\xi+\eta) + Z_1 Z_3(\xi-\eta)}{R(\xi^2-\eta^2)} .$$

Волновую функцию системы трех частиц $\Psi(\bar r_1, \bar r_2, \bar r_3)$ можно разложить на две компоненты, симметричную и антисимметричную относительно перестановки частиц I и 2:

$$\Psi(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) = \Psi^s(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) + \Psi^a(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) , \qquad (37)$$
$$P_{12}\Psi^s(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) = \Psi^s(\bar r_2,\bar r_1,\bar r_3) = \Psi^s(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) ,$$
$$P_{12}\Psi^a(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) = \Psi^a(\bar r_2,\bar r_1,\bar r_3) = -\Psi^a(\bar r_1,\bar r_2,\bar r_3) .$$

Компоненты волновой функции $F_m(R,\xi,\eta)$ также можно разложить на две составляющие, четную и нечетную относительно переменной η :

$$F_m(R,\xi,\eta) = F_m^+(R,\xi,\eta) + F_m^-(R,\xi,\eta) ,$$
$$P_\eta F_m^+(R,\xi,\eta) = F_m^+(R,\xi,-\eta) = F_m^+(R,\xi,\eta) , \qquad (38)$$
$$P_\eta F_m^-(R,\xi,\eta) = F_m^-(R,\xi,-\eta) = -F_m^-(R,\xi,\eta) .$$

Разложения (37) и (38) связаны между собой следующим образом. Пусть $F_m(R,\xi,\eta)=F_m^s(R,\xi,\eta)+F_m^a(R,\xi,\eta)$ – разложение компонент волновой функции в соответствии с (37), тогда

$$P_\eta F_m^s(R,\xi,\eta)=(-1)^{J+m}F_m^s(R,\xi,\eta),$$

$$P_\eta F_m^a(R,\xi,\eta)=(-1)^{J+m+1}F_m^a(R,\xi,\eta).$$

Подставим разложение (37) в (36); тогда для билинейных форм, входящих в (36), имеют место соотношения

$$\begin{aligned}
&\int T^\sigma_{m,m}(F^s_m,F^a_m)dV=\int T^\sigma_{m,m}(F^a_m,F^s_m)dV=0,\\
&\int T^{æ}_{m,m}(F^s_m,F^s_m)dV=\int T^{æ}_{m,m}(F^a_m,F^a_m)dV=0,\\
&\int T^\sigma_{m,m\pm1}(F^s_m,F^a_{m\pm1})dV=\int T^\sigma_{m,m\pm1}(F^a_m,F^s_{m\pm1})dV=0,\\
&\int T^{æ}_{m,m\pm1}(F^s_m,F^s_{m\pm1})dV=\int T^{æ}_{m,m\pm1}(F^a_m,F^a_{m\pm1})dV=0,\\
&\int V(R,\xi,\eta)F^{s*}_mF^a_m\,dV=\int V(R,\xi,\eta)F^{a*}_mF^s_m\,dV=0.
\end{aligned}\qquad(39)$$

Соотношения (39) позволяют упростить вычисление функционала при использовании волновой функции в представлении

$$\Psi^{J\lambda}_M(\bar R,\bar r)=\sum_{m=\mu(\lambda)}^{J}\mathfrak{D}^{J\lambda^*}_{Mm}(\alpha,\beta,\gamma)\left[F^{J\lambda s}_m(R,\xi,\eta)+F^{J\lambda a}_m(R,\xi,\eta)\right]\qquad(40)$$

и получить уравнение Шредингера в операторной форме с учетом симметричной и антисимметричной компонент

$$\sum_{m'=\mu(\lambda)}^{J}\ \sum_{t'\in\{s,a\}}\left(H^{tt'}_{mm'}-\delta_{mm'}\delta_{tt'}E\right)F^{t'}_{m'}=0\qquad(41)$$

$$m=\mu(\lambda),\dots,J,\quad t\in\{s,a\};$$

операторы $H^{tt'}_{mm'}$ уравнения (41) определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
H^{ss}_{m,m}=H^{aa}_{mm}=\frac{1}{2\mu_{12}}&\left\{-\frac{\partial^2}{\partial R^2}-2\frac{\partial}{\partial R}+\frac{2}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[(\xi^2-1)\xi\left(R\frac{\partial^2}{\partial R\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\right.\right.\\
&\left.\left.+(1-\eta^2)\eta\left(R\frac{\partial^2}{\partial R\partial\eta}+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]+\frac14(\xi^2+\eta^2-1+æ^2)P_m^2+\frac{J(J+1)-2m^2}{R^2}\right\}+\\
&+\frac{1}{2\mu_3}P_m^2+V(R,\xi,\eta);
\end{aligned}\qquad(41')$$

$$\begin{aligned}
H^{sa}_{m,m}=H^{a,s}_{m,m}=\frac{æ}{2\mu_{12}}&\left\{\frac{2}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[(\xi^2-1)\eta\left(R\frac{\partial^2}{\partial R\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\right.\right.\\
&\left.\left.+(1-\eta^2)\xi\left(R\frac{\partial^2}{\partial R\partial\eta}+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{\xi\eta}{2}P_m^2\right\};
\end{aligned}$$

$$H^{ss}_{m,m\pm1}=H^{aa}_{m,m\pm1}=\frac{1}{2\mu_{12}R^2}\left[\frac{\xi\eta}{\rho}(m\pm1)\pm\mathcal{L}\right];$$

$$H^{sa}_{m,m\pm1}=H^{as}_{m,m\pm1}=\frac{æ}{2\mu_{12}R^2}\left[\frac{m\pm1}{\rho}\pm\frac{\rho}{\xi^2-\eta^2}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}-\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right];$$

$H_{mm'}=0$, при $|m-m'|\geq 2$; здесь

$$P_m^2=\frac{4}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[\frac{m^2(\xi^2-\eta^2)}{\rho^2}-\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right];$$

$æ=\dfrac{m_1-m_2}{m_1+m_2}$, а операторы $\mathcal{L}$ и $V(R,\xi,\eta)$ определяются в (36').

Как видно из определения матричных элементов (41'), уравнения (41) хорошо приспособлены для адиабатических систем трех частиц, когда две тяжелые частицы образуют ось $0z'$ и третья легкая частица вращается вокруг оси. В этом случае приведенная масса тяжелых частиц μ_{12} много больше приведенной массы третьей частицы μ_3, и параметр $m=\mu_3/\mu_{12}$ является параметром адиабатичности системы. Внедиагональные члены уравнения (41), связывающие компоненты с различными m и различной симметрией относительно перестановки тяжелых частиц, малы. Таким образом, следует ожидать, что одна из компонент разложения (40) является доминирующей.

Приложение I

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ УГЛОВОГО МОМЕНТА

Материал данного приложения заимствован из работы [7] и излагается в соответствии с принятыми там обозначениями.

1. Сферические координаты.

Величины

$$\begin{aligned}
r&=\sqrt{x^2+y^2+z^2}, && 0\leq r<\infty,\\
\theta&=\arccos\left(z/\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right), && 0\leq\theta\leq\pi,\\
\varphi&=\arccos\left(x/\sqrt{x^2+y^2}\right), && 0\leq\varphi\leq2\pi,
\end{aligned}\qquad(1)$$

называются сферическими координатами точки в трехмерном пространстве.

С ними связан репер сферических координат:

$$\bar{e}_r = \frac{\partial}{\partial r}, \quad \bar{e}_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \bar{e}_\varphi = \frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

2. Циклические координаты. При построении компонент операторов углового момента удобно использовать циклические координаты, которые определяются соотношениями

$$X_{+1} = -(x + iy)/\sqrt{2}, \quad X_0 = z, \quad X_{-1} = (x - iy)/\sqrt{2} \tag{2}$$

в случае ковариантных координат, и соотношениями

$$X^{+1} = -(x - iy)/\sqrt{2}, \quad X^0 = z, \quad X^{-1} = (x + iy)/\sqrt{2} \tag{2'}$$

в случае контравариантных координат.

3. Углы Эйлера. Положение подвижного репера может быть определено углами Эйлера, соответствующими поворотам вокруг координатных осей неподвижного репера:

а – поворот вокруг оси OZ на угол γ $(0 \le \gamma < 2\pi)$,
б – поворот вокруг оси OY на угол β $(0 \le \beta \le \pi)$,
в – поворот вокруг оси OZ на угол α $(0 \le \alpha < 2\pi)$.

Совокупность этих поворотов, выполненных в указанном порядке, переводит неподвижный репер в подвижный.

4. Операторы угловых моментов. Оператор полного углового момента определяется изменением произвольной волновой функции Ψ при повороте системы координат на бесконечно малый угол $\delta\omega$ вокруг оси $\bar{n}$:

$$\Psi \to \Psi' = (1 - i\,\delta\omega \cdot \bar{n} \cdot \bar{J})\Psi,$$

декартовы компоненты оператора $\bar{J}$ удовлетворяют условию эрмитовости

$$(J_i)^+ = J_i, \quad i = x, y, z.$$

Циклические компоненты оператора $\bar{J}$ определяются

$$J_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x + iJ_y), \quad J_0 = J_z, \quad J_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x - iJ_y), \tag{4}$$

и их эрмитовосопряженные операторы равны $(J_\mu)^+ = (-1)^\mu J_{-\mu}$.

Для волновой функции, выраженной через углы Эйлера и внутренние переменные, оператор полного углового момента может быть выписан явно:

$$J_x = i\left[\operatorname{ctg}\beta \cos\alpha \frac{\partial}{\partial\alpha} + \sin\alpha \frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right],$$

$$J_y = i\left[\operatorname{ctg}\beta \sin\alpha \frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\alpha \frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right],$$

$$J_z = -i\frac{\partial}{\partial\alpha},$$

в координатах неподвижного репера, и

$$J'_x = -i\left[\operatorname{ctg}\beta \cos\gamma \frac{\partial}{\partial\gamma} + \sin\gamma \frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right],$$

$$J'_y = i\left[\operatorname{ctg}\beta \sin\gamma \frac{\partial}{\partial\gamma} - \sin\gamma \frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right],$$

$$J'_z = -i\frac{\partial}{\partial\gamma},$$

в координатах подвижного репера.

Оператор орбитального момента в координатном представлении определяется

$$L = -i\,[\bar{r} \times \bar{\nabla}];$$
$$L_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad L_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{5}$$

5. Неприводимые тензоры. Неприводимым тензором ранга J мы будем называть набор величин $\{\mathfrak{M}_{JM}\}_{M=-J}^{J}$, определенных в конфигурационном пространстве, которые удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям относительно оператора полного момента:

$$[J_{\pm1}, \mathfrak{M}_{JM}] = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{J(J+1) - M(M\pm1)}\,\mathfrak{M}_{JM\pm1}, \quad [J_0, \mathfrak{M}_{JM}] = M\,\mathfrak{M}_{JM}. \tag{6}$$

Частным случаем неприводимого тензора ранга J является набор волновых функций с квантовым числом полного момента J, образующих $2J+1$ -мерное подпространство, инвариантное относительно вращений.

Общую фразу компонент тензора в случае целого ранга J мы выбираем так, чтобы

$$(\mathfrak{M}_{JM})^* = (-1)^{-M}\mathfrak{M}_{J,-M}. \tag{6'}$$

При повороте системы координат, определяемом углами Эйлера α, β, γ, компоненты неприводимого тензора $\mathfrak{M}_{JM}$ преобразуются

$$\mathfrak{M}_{JM'}(x') = \sum_M \mathfrak{M}_{JM}(x)\,D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma), \tag{7}$$

где X' и X –координаты системы в подвижной и неподвижной системах координат соответственно, а $D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)$ – D –функции Вигнера.

Пусть $\mathcal{M}_{JM}(X)$ –тензор, зависящий от углов Эйлера и внутренних координат Y, тогда $\mathcal{M}_{JM}(\alpha,\beta,\gamma,Y)$ в неподвижной системе координат имеет вид

$$\mathcal{M}_{JM}(\alpha,\beta,\gamma,Y)=\sum_{M'=-J}^{J} D^{J*}_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)\cdot\mathcal{M}_{JM'}(0,0,0,Y). \tag{8}$$

Таким образом, формула (8) определяет явную зависимость компонент неприводимого тензора от углов Эйлера.

6. D –функции Вигнера. Определим оператор поворота $\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)$, действующий на волновую функцию в исходной системе координат, как оператор, переводящий ее в волновую функцию, выраженную в повернутой системе координат:

$$\Psi'(S)=\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)\Psi(S),$$
$$\Psi'(S')=\Psi(S),$$

где S' – набор переменных, определяющий волновую функцию в повернутой системе координат. D –функция Вигнера $D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)$ определяются как матричные элементы оператора $\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)$ в JM – представлении

$$\langle JM|\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma)|J'M'\rangle=\delta_{JJ'}D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{9}$$

Они удовлетворяют условию унитарности

$$\sum_{M=-J}^{J} D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)\cdot D^{J*}_{MM''}(\alpha,\beta,\gamma)=\delta_{M'M''} \tag{10}$$

и условию ортогональности и нормировки

$$\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{\pi}\sin\beta\,d\beta\int_0^{2\pi}d\gamma\left[D^{J_2*}_{M_2M_2'}(\alpha,\beta,\gamma)\cdot D^{J_1}_{M_1M_1'}(\alpha,\beta,\gamma)\right]=\frac{8\pi^2}{2J_1+1}\delta_{J_1J_2}\delta_{M_1M_2}\delta_{M_1'M_2'}. \tag{11}$$

Функции Вигнера являются собственными функциями трех операторов:

$$J_z D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=-i\frac{\partial}{\partial\alpha}D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=-MD^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma),$$
$$J'_z D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=-i\frac{\partial}{\partial\gamma}D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=-M'D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma), \tag{12}$$
$$\vec{J}^2 D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=-\left[\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}+ctg\beta\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}-2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)\right]D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=J(J+1)D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma).$$

Они также удовлетворяют соотношениям

$$J_{\pm1}D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=\frac{1}{\sqrt2}(\mp J_x-iJ_y)D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=$$
$$=\frac{i}{\sqrt2}e^{\pm i\alpha}\left[\mp ctg\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+i\frac{\partial}{\partial\beta}\pm\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=$$
$$=\mp\sqrt{\frac{J(J+1)-M(M\mp1)}{2}}D^J_{M\mp1,M'}(\alpha,\beta,\gamma); \tag{13}$$
$$J'_{\pm1}D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=\frac{1}{\sqrt2}(\mp J'_x+iJ'_y)D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=$$
$$=-\frac{i}{\sqrt2}e^{\pm i\gamma}\left[\mp ctg\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}+i\frac{\partial}{\partial\beta}\pm\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right]D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma)=$$
$$=\pm\sqrt{\frac{J(J+1)-M'(M'\mp1)}{2}}D^J_{M,M'\mp1}(\alpha,\beta,\gamma).$$

7. Сферические функции и биполярные гармоники. Функции $Y_{jm}(\theta,\varphi)$, определенные на двумерной сфере и удовлетворяющие соотношениям

$$L_{\pm1}Y_{jm}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{j(j+1)-m(m\pm1)}{2}}Y_{jm\pm1}(\theta,\varphi),$$
$$L_0Y_{jm}(\theta,\varphi)=mY_{jm}(\theta,\varphi), \tag{14}$$

где L_μ – циклические компоненты оператора орбитального момента, называются сферическими функциями. Общая фаза для сферических функций выбирается так, чтобы набор $\{Y_{jm}\}^j_{m=-j}$ определял неприводимый тензор ранга j.

Условие нормировки и ортогональности функций $Y_{jm}(\theta,\varphi)$

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\left[Y^*_{jm}(\theta,\varphi)Y_{j'm'}(\theta,\varphi)\right]=\delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{15}$$

Сферические функции можно выразить через D –функции Вигнера

$$Y_{jm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}}D^{j*}_{m0}(\varphi,\theta,0).$$

Мы также используем в работе функции, зависящие от двух векторов $\vec r_1$ и $\vec r_2$,

$$\{Y_{j_1}\otimes Y_{j_2}\}_{JM}(\theta_1,\varphi_1;\theta_2,\varphi_2)=$$
$$=\sum_{m_1m_2}C^{JM}_{j_1m_1j_2m_2}Y_{j_1m_1}(\theta_1,\varphi_1)\cdot Y_{j_2m_2}(\theta_2,\varphi_2), \tag{16}$$

где $C^{JM}_{j_1m_1j_2m_2}$ – коэффициенты Клебша-Гордана. Такие функции образуют базис биполярных сферических гармоник в пространстве $L_2(S^2\times S^2)$ на четырехмерном торе $S^2(\theta_1,\varphi_1)\times S^2(\theta_2,\varphi_2)$.

Соотношение (16) определяет биполярные сферические гармоники так, чтобы функции с фиксированным J составляли компоненты неприводимого тензора ранга J.

Приложение 2

АНАЛИЗ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ОСОБЕННОСТЯМИ ПЕРВОГО РОДА

В этом приложении будут рассмотрены системы обыкновенных дифференциальных уравнений с особенностями первого рода

$$W' = \frac{A}{x} W + B(x) W, \qquad (I)$$

где A – постоянная квадратная матрица размерности $n \times n$, а $B(x)$ – матрица-функция, непрерывная в окрестности нуля. Особая точка вида (I) является регулярной особой точкой. Фундаментальная матрица системы в этом случае может быть представлена в виде

$$\Phi(x) = S(x) X^P, \qquad (2)$$

и матрица $S(x)$ непрерывна в окрестности нуля /I6/, здесь X^P – показательная функция от матриц.

Рассмотрим систему

$$W_o' = \frac{A}{x} W_o \qquad (3)$$

и предположим, что J -жорданова форма матрицы A, причем J и A связаны равенством $AT = TJ$ и T – некоторая неособенная матрица. Тогда фундаментальное решение системы может быть представлено в виде

$$\Phi_o(x) = X^A T = T X^J. \qquad (4)$$

Для жордановой клетки размерности ℓ_κ

$$J_\kappa = \begin{pmatrix} \lambda_\kappa & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \lambda_\kappa & 1 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_\kappa & \cdot & 0 \\ \dots & \dots & \dots & & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \lambda_\kappa \end{pmatrix},$$

соответствующей собственному значению λ_κ и собственному вектору v_κ, функция X^{J_κ} может быть явно выписана

$$X^{J_\kappa} = X^{\lambda_\kappa} \begin{pmatrix} 1 & \ln x & \frac{1}{2!}\cdot(\ln x)^2 & \cdot \frac{1}{(\ell_\kappa-1)!}(\ln x)^{\ell_\kappa-1} \\ 0 & 1 & \ln x & \cdot \frac{1}{(\ell_\kappa-2)!}(\ln x)^{\ell_\kappa-2} \\ 0 & 0 & 1 & \cdot \frac{1}{(\ell_\kappa-3)!}(\ln x)^{\ell_\kappa-3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \cdot\ 1 \end{pmatrix}. \qquad (5)$$

Это показывает, что для каждого собственного вектора v_κ матрицы A существует ровно ℓ_κ решений уравнения (3), имеющих вид

$$\omega_{\kappa,i}(x) = X^{\lambda_\kappa} (\ln x)^i v_\kappa + o(X^{\lambda_\kappa}(\ln x)^i), \qquad (6)$$
$$i = 0, 1, \dots, \ell_\kappa - 1,$$

и эти решения линейно независимы.

В общем случае для системы (I) имеет место аналогичный результат.

Теорема (см. /I6/). Для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (I) существует фундаментальная матрица решений, составленная из решений типа (6). Иначе говоря, каждому решению, образующему фундаментальную матрицу $W(x)$, можно сопоставить числа κ и $i = 0, 1, \dots, \ell_\kappa - 1$, где κ и ℓ_κ – номер и размерность некоторой жордановой клетки J_κ матрицы A, таким образом, чтобы выполнялось

$$\lim_{x \to 0} \left[W_{\kappa,i}(x) x^{-\lambda_\kappa} (\ln x)^{-i} - v_\kappa \right] = 0, \qquad (7)$$

где λ_κ и v_κ – собственное значение и собственный вектор, соответствующие жордановой клетке J_κ матрицы A.

Из сформулированной теоремы видно, что для определения поведения решения уравнения (I) в окрестности нуля во многих случаях достаточно рассматривать главную часть уравнения (3).

Однако при получении асимптотики общего решения уравнения следует соблюдать осторожность. Приводимый ниже пример иллюстрирует возможные трудности.

Пусть система уравнений имеет вид

$$W' = \frac{A}{x} W + B W, \qquad (8а)$$

где A и B постоянные матрицы:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (8б)$$

Общее решение главной части уравнения равно

$$W_c^o = c_1 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ x^3 \end{pmatrix},$$

в то время как общее решение исходной задачи может быть выражено

$$W_c^* = c_1 \begin{pmatrix} x \\ x^2 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ x^3 \end{pmatrix};$$

и вторая компонента общего решения имеет асимптотику $O(x^2)$, а не $O(x^3)$, как это следует из решения, использующего только главную часть уравнения.

Пусть матрица A в уравнении (I) диагональна

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ 0 & & \ddots\ \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Для анализа поведения решения системы (I) бывает полезна следующая подстановка

$$W_i(x) = x^{\omega_i} V_i(x), \qquad i = 1, \dots, n, \tag{9}$$

где ω_i – некоторые, вообще говоря, произвольные числа. Назовем подстановку (9) разрешимой, если уравнение (I) после подстановки переходит в уравнение того же вида

$$V'(x) = \frac{C}{x} V(x) + D(x)\, V(x), \tag{10}$$

где C и $D(x)$ – матрицы $n \times n$, и $D(x)$ – непрерывная функция в окрестности нуля. Очевидно, что для разрешимой подстановки анализ поведения общего решения задачи (I) сводится к исследованию уравнения (10). Следует отметить, однако, что матрица C при этом может не совпадать с матрицей

$$C' = \begin{pmatrix} \lambda_1 - \omega_1 & & 0 \\ & \lambda_2 - \omega_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \lambda_n - \omega_n \end{pmatrix},$$

получаемой в результате применения подстановки к уравнению (3). Более того, использование значений ω_i, равных λ_i, может, вообще, не приводить к разрешимой подстановке. В этом легко убедиться на рассмотренном выше примере.

По счастливой случайности, большинство физических задач свободно от указанных недостатков. Тем не менее, для получения строго обоснованных результатов необходимо учитывать особенности применения подстановки (9) и, в частности, доказывать ее разрешимость.

Проиллюстрируем сказанное на примере получения асимптотик компонент разложения волновой функции задачи трех тел по биполярным гармоникам,

$$\Psi^J_M(\bar R, \bar r) = \sum_{j_1, j_2} \{ Y_{j_1} \otimes Y_{j_2} \}_{JM} F_{j_1 j_2}(R, r). \tag{11}$$

Подстановка волновой функции (II) в уравнение Шредингера и усреднение по сферическим углам векторов $\bar R$ и $\bar r$ приводит к бесконечной системе уравнений

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{1}{2\mu_{12}} \left[-\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2 \frac{\partial}{\partial R}\right) + \frac{j_1(j_1+1)}{R^2} \right] + \frac{Z_1 Z_2}{R} + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2\mu_3}\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{j_2(j_2+1)}{r^2} \right] \right\} F_{j_1 j_2}(R,r) + \\ &+ \sum_{j_1' j_2'} V^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r) F_{j_1' j_2'}(R,r) = 0, \qquad j_1 + j_2 = J, J+1, \dots \end{aligned} \tag{12}$$

Матричные элементы, стоящие под знаком суммы, выражаются через потенциальную энергию:

$$V^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r) = \int \{ Y_{j_1'} \otimes Y_{j_2'} \}^*_{JM} \left[\frac{Z_1 Z_3}{r_{13}} + \frac{Z_2 Z_3}{r_{23}} \right] \{ Y_{j_1} \otimes Y_{j_2} \}_{JM}\, d\Omega_1\, d\Omega_2, \tag{13}$$

где $r_{23} = |\bar r - \varkappa \bar R|$, $r_{13} = |\bar r + (1-\varkappa)\bar R|$, а $\varkappa = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$.

Рассмотрим асимптотику компонент при $R \to 0$. Для этого рассмотрим уравнение (12) на многообразии $r \geqslant \varepsilon > 0$, что позволяет заменить в (12) члены, зависящие только от переменной r неопределенной константой $O(\varepsilon^0)$.

Характеристические уравнения для главной части (12) равны

$$-\rho(\rho-1) - 2\rho + j_1(j_1+1) = 0, \qquad j_1 = 0, 1, \dots,$$

и имеют корни $\rho_1 = j_1$, $\rho_2 = -(j_1+1)$, поэтому общее решение главной части уравнений (12) имеет вид

$$W_{j_1 j_2}(R,r) = C_1 R^{j_1} + C_2 R^{-(j_1+1)}. \tag{14}$$

Второе слагаемое в (14) имеет особенность в нуле и должно быть отброшено, так как волновая функция непрерывна во всем пространстве /I/.

Выполним теперь подстановку

$$F_{j_1 j_2}(R,r) = R^{j_1} G_{j_1 j_2}(R,r), \tag{15}$$

обращая особое внимание на выражение, стоящее под знаком суммы в (12).

Для этого заметим, что функция $\frac{1}{r_{13}}$ разлагается по биполярным гармоникам /7/

$$\frac{1}{r_{13}} = \frac{b_0}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell(r) R^\ell \{ Y_\ell \otimes Y_\ell \}_{00}, \tag{16}$$

где $a_\ell(r)$ – некоторые вполне определенные функции от r. Аналогичное разложение имеет место и для функции $\frac{1}{r_{23}}$. Подставляя разложение (16) для функций $\frac{1}{r_{13}}$ и $\frac{1}{r_{23}}$ в (13), мы получим для матричных элементов $V^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r)$ асимптотику при $R \to 0$

$$V^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r) = C \cdot R^{|j_1' - j_1|} + o\left(R^{|j_1' - j_1|}\right).$$

Уравнение (12) после подстановки (15) будет иметь вид

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{1}{2\mu_{12}} \left[-\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{2(j_1+1)}{R}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{Z_1 Z_2}{R} \right] + O(\varepsilon^0) \right\} G_{j_1 j_2}(R,r) + \\ &+ \sum_{j_1' j_2'} W^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r) G_{j_1' j_2'}(R,r) = 0, \qquad j_1 + j_2 = J, J+1, \dots \end{aligned} \tag{17}$$

где $W^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r) = R^{j_1' - j_1} V^{j_1 j_2}_{j_1' j_2'}(R,r)$, и потому ограниченные функции при $R \to 0$. Это доказывает, что асимптотика компонент волновой функции $F_{j_1 j_2}(R,r) = O(R^{j_1})$, при $R \to 0$.

Аналогично получается асимптотика для $r \to 0$; и, таким образом, компоненты разложения (II) представляются в виде

$$F_{j_1 j_2}(R,r) = R^{j_1} r^{j_2} H_{j_1 j_2}(R,r), \quad (18)$$

и функции $H_{j_1 j_2}(R,r)$ ограничены.

Из уравнения (17) можно получить более полную информацию относительно компонент волновой функции. А именно, если отбросить члены порядка $O(R^0)$, то уравнения (17) по-прежнему образуют несвязанную систему уравнений, из которых следует, что

$$G_{j_1 j_2}(R,r) = g^{(0)}_{j_1 j_2}\left[1 + \frac{Z_1 Z_2}{\mu_{12}(j_1+1)} R + O(R^2)\right]. \quad (19)$$

Условие (19) известно в литературе как условие Като (см.,например[2]).

Литература

1. Kato T. Comm. on Pure and Appl. Math.,1957, v.10, p.151.
2. Pack R.T., Brown W.B. J.of Chem. Phys., 1966, v.45,p.556.
3. Hylleraas F.A. Zeits fur Physik, 1929, v.54, p.347.
4. Breit G. Phys. Rev. , 1930, v.35, p.569.
5. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т.13, с.1336.
6. Виницкий С.И., Касчиев М.С., Пузынин И.В. ОИЯИ, Р4-87-8, Дубна, 1987.
7. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. М., Наука, 1975.
8. Bhatia A.K., Temkin A. Rev. Mod. Phys., 1964,v.36, p.1050.
9. Curtis C.F., Hirschfelder J.O., Alder F., J. Chem. Phys., 1950, v.18, p.1638.
10. Schwartz C.,Phys. Rev., 1961, v.123, p.1700.
11. Фролов А.М., Эфрос В.Д. Письма в ЖЭТФ, 1984, т.39, с.449.
12. Chi-Yu Hu. Phys. Rev. A, 1985, v.32, p.1245.
13. Szalewicz K., Monkhorst H.J.,Kolos W.,Scrinzi A., Phys. Rev. A, 1987, v.36, p.5494.
14. Kamimura M., Muon Catalyzed Fusion, 1988, v.3, p.335.
15. Chang E.S., Fano U. Phys. Rev. A, 1972,v.6,p.173.
16. Dunkel O. Proceedings of the Amer. Acad. of Science, 1902-1903, v.38, p.341.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 декабря 1988 года.

Коробов В.И. Р4-88-910

Анализ уравнения Шредингера в представлении симметрии Брейта – Хиллерааса

Исследуется нерелятивистское уравнение Шредингера для системы трех частиц. Получены асимптотики поведения решения уравнения Шредингера в окрестности особенностей пространства внутренних переменных, связанных с представлением симметрии Брейта – Хиллерааса. Подробно рассматривается осевое вырождение. Для компонент волновой функции выписываются уравнение Шредингера и вариационный функционал, выраженные в сфероидальных координатах.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Korobov ... '4-88-910
Schroed...
Breit –...
Nonr... a three-
particl... of the so-
lution ... larities of
inner v... Hylleraas
symmetr... singularity
is exam... and varia-
tional ... dinated are
written ....

The ... he Labora-
tory of ... JINR.

Pre... 1988