сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-93-460

В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА «ПОВЕРХНОСТНЫХ» ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ СИСТЕМ ТИПА $ZH\mu$. ТЕСТОВЫЙ РАСЧЕТ СИСТЕМЫ $dt\mu$

1993

Одним из эффективных способов решения задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, является предложенный в [1] метод «поверхностных» гиперсферических функций. Существенным достоинством этого метода является возможность использовать полученные «поверхностные» функции для решения как задачи на связанные состояния, так и задачи рассеяния.

В настоящей работе предлагается вариационный метод расчета «поверхностных» функций для систем типа $ZH\mu$, где Z означает легкое ядро с зарядом $1 \div 3$, H означает одно из ядер p, d, t. Данный метод — естественное обобщение использованного в [2] способа расчета системы H^-.

Численные результаты приведены для системы $dt\mu$, которая является удобным объектом для тестирования, поскольку имеется значительное количество высокоточных расчетов этой системы. Кроме того, в работе [3] для расчета $dt\mu$ непосредственно использовался метод «поверхностных» гиперсферических функций.

МЕТОД

Запишем уравнение Шредингера системы трех заряженных частиц в виде

$$\left(-\Delta \bar{x}_i - \Delta \bar{y}_i + \sum_{m=1}^{3} \frac{q_m}{|\bar{x}_m|} - E\right) \psi = 0. \tag{1}$$

В качестве единиц длины и энергии использованы соответственно $\hbar^2/(m_1 e^2)$, $m_1 e^4/(2\hbar^2)$ и введены масштабированные координаты Якоби:

$$\bar{x}_i = \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_1(m_j + m_k)}}\,(\bar{r}_k - \bar{r}_j),$$

$$\bar{y}_i = \sqrt{\frac{m_i(m_j + m_k)}{m_1(m_1 + m_2 + m_3)}}\left(\bar{r}_i - \frac{m_j \bar{r}_j + m_k \bar{r}_k}{m_j + m_k}\right); \tag{2}$$

здесь и далее будем считать тройку $\{ijk\}$ четной перестановкой чисел $\{123\}$. Величины q_i определены следующим образом:

$$q_i = 2Z_j Z_k \sqrt{\frac{m_j m_k}{m_1(m_j + m_k)}}\,; \tag{3}$$

m_i, Z_i, $\overline{r}_i$ — масса, заряд и радиус-вектор i-й частицы.

Различные пары координат Якоби связаны между собой преобразованием

$$\begin{aligned} \overline{x}_i &= -c_k\overline{x}_j - s_k\overline{y}_i\,, \\ \overline{y}_i &= s_k\overline{x}_j - c_k\overline{y}_j\,, \end{aligned} \tag{4}$$

где

$$c_i = \sqrt{\frac{m_j m_k}{(m_i + m_j)(m_i + m_k)}}\,,$$

$$s_i = \sqrt{\frac{m_i(m_1 + m_2 + m_3)}{(m_i + m_j)(m_i + m_k)}}\,. \tag{5}$$

В том случае, если тройка $\{ijk\}$ есть нечетная перестановка $\{123\}$, в (4) следует заменить $s_k \to -s_k$.

В дальнейшем для простоты ограничимся рассмотрением систем, имеющих полный орбитальный момент $L = 0$.

Введем гиперсферические координаты ρ, α_i, θ_i:

$$|\overline{x}_i| = \rho\cos\frac{\alpha_i}{2}\,, \qquad |\overline{y}_i| = \rho\sin\frac{\alpha_i}{2}\,,$$

$$\cos\theta_i = \frac{(\overline{x}_i\,\overline{y}_i)}{|\overline{x}_i|\,|\overline{y}_i|}\,, \qquad 0 \le \alpha_i,\ \ \theta_i \le \pi. \tag{6}$$

Уравнение (1) принимает вид (при $L = 0$):

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{4}{\rho^2}\Box + \frac{1}{\rho}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\dfrac{\alpha_m}{2}} - E\right]\psi = 0, \tag{7}$$

где

$$\Box = \frac{1}{\sin^2\alpha_i}\left[\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\left(\sin^2\alpha_i\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\right) + \frac{1}{\sin\theta_i}\frac{\partial}{\partial\theta_i}\left(\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right)\right]. \tag{8}$$

Различные наборы гиперуглов связаны соотношениями

$$\begin{aligned} \cos\alpha_i &= c_k\cos\alpha_j + s_k\sin\alpha_j\cos\theta_j\,, \\ \sin\alpha_i\cos\theta_i &= c_k\sin\alpha_j\cos\theta_j - s_k\cos\alpha_j\,. \end{aligned} \tag{9}$$

Инвариантный элемент объема на гиперсфере есть $d\Omega = \sin^2\alpha_i\,d\cos\theta_i$.

«Поверхностные» функции φ_n по определению являются решением уравнения на собственные значения

$$\left(\Box - \frac{1}{4}\rho\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\dfrac{q_m}{2}} + \lambda_n\right)\varphi_n = 0 \tag{10}$$

и параметрически зависят от гиперрадиуса ρ.

При разложении решения (7) по φ_n:

$$\psi = \rho^{-5/2}\sum_n v_n(\rho)\,\varphi_n, \tag{11}$$

получаем систему одномерных дифференциальных уравнений

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_n + E\right)v_n + \sum_i\left(Q_{ni}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial}{\partial\rho}Q_{ni} - P_{ni}\right)v_i = 0, \tag{12}$$

где

$$Q_{ni} = \left\langle \varphi_n \Big| \frac{\partial\varphi_i}{\partial\rho}\right\rangle, \tag{13}$$

$$P_{ni} = \left\langle \frac{\partial\varphi_n}{\partial\rho} \Big| \frac{\partial\varphi_i}{\partial\rho}\right\rangle, \tag{14}$$

$$\varepsilon_n = \frac{4}{\rho^2}\lambda_n. \tag{15}$$

Таким образом, решение уравнения (10) позволяет определить величины λ_n, P_{ni}, Q_{ni} и свести исходную задачу к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений (12).

Для решения (10) используем вариационную процедуру, разлагая φ_n по системе пробных функций

$$\varphi_n(\alpha,\theta) = \sum_{i=1}^{N} c_i^{(n)}\chi_i(\alpha,\theta). \tag{16}$$

В результате из (10) получим систему линейных алгебраических уравнений для коэффициентов $c_i^{(n)}$:

$$\sum_{i=1}^{N}\left(D_{ki} - \frac{\rho}{4}\sum_{m=1}^{3} q_m U_{ki}^{(m)} + \lambda_n S_{ki}\right)c_i^{(n)} = 0, \tag{17}$$

где

$$S_{ki} = \langle\chi_k|\chi_i\rangle, \quad D_{ki} = \langle\chi_k|\Box|\chi_i\rangle, \quad U_{ki}^{(m)} = \langle\chi_k\left|\frac{1}{\cos\frac{\alpha_m}{2}}\right|\chi_i\rangle. \tag{18}$$

Выберем следующую систему пробных функций:

$$\chi_i = \begin{cases} \phi^{(3)}_{n_i l_i}(\alpha_3)\, P_{l_i}(\cos\theta_3), & 1 \le i \le N_1; \\ \phi^{(2)}_{n_i l_i}(\alpha_2)\, P_{l_i}(\cos\theta_2), & N_1 < i \le N_1 + N_2; \\ \sin^{(l_i)}\alpha_3\, C^{l_i+1}_{n_i-l_i-1}(\cos\alpha_3)\, P_{l_i}(\cos\theta_3), & N_1 + N_2 < i \le N; \end{cases} \tag{19}$$

здесь $N_1 + N_2 + N_3 = N$, а

$$\phi^{(m)}_{nl}(\alpha) = \Phi_{nl}\left(\frac{|q_m|}{n}\rho\cos\frac{\alpha}{2}\right), \tag{20}$$

$$\Phi_{nl}(t) = e^{-t/2}\, t^l L^{2l+1}_{n-l-1}(t). \tag{21}$$

В формулах (19), (20) (21) $P_l(x)$, $L^k_m(x)$, $C^m_n(x)$ есть многочлены Лежандра, Лагерра, Гегенбауэра соответственно.

При построении базиса (19) для вариационного расчета предполагалось, что частицы перенумерованы следующим образом: $1 - \mu$, $2 - H$, $3 - Z$. Существенно, что система (19) обеспечивает описание решения (10) в пределе как больших ($\rho \to \infty$), так и малых ($\rho \to 0$) значений гиперрадиуса. Аналогичный анзац для «поверхностных» функций использовался также в работе [4]. Заметим, что использованная система пробных функций легко адаптируется к различным значениям параметра ρ с помощью простого изменения количества функций различного типа в (19).

Для вычисления величин Q_{ni}, P_{ni} использованы выражения

$$Q_{ni} = -\frac{1}{4}(\lambda_i - \lambda_n)^{-1} V_{ni}, \tag{22}$$

$$P_{ni} = -Q^2_{ni}, \tag{23}$$

где

$$V_{ni} = \langle\varphi_n\left|\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos\frac{\alpha_m}{2}}\right|\varphi_i\rangle. \tag{24}$$

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для тестирования метода и программы для ЭВМ был произведен расчет системы $dt\mu$. Значения масс были такими же, как и в [3]. Относительная точность вычисления интегралов (18) составляла 10^{-6}. Результаты расчета двух нижних термов $\varepsilon_n(\rho)$ и соответствующих матричных элементов $P_{ni}(\rho)$ приведены в табл.1. При этом зависимость количества пробных функций различного типа N_1, N_2, N_3 от гиперрадиуса имела следующий вид

$N_1 = N_2 = 1$, $N_3 = 55$ при $\rho < 5$,
$N_1 = N_2 = 3$, $N_3 = 45$ при $5 \le \rho < 21$,
$N_1 = N_2 = 6$, $N_3 = 21$ при $21 < \rho$.

Таблица 1

ρ	ε_1	ε_2	P_{11}	P_{12}	P_{22}
1,01	1,015852	14,529068	0,141336	−0,003195	0,049148
2,01	−0,689976	3,856160	0,068151	−0,006846	0,046809
3,01	−1,107776	1,566069	0,035296	−0,004239	0,045388
4,01	−1,238973	0,643261	0,020086	−0,002007	0,041704
5,01	−1,271656	0,148815	0,012526	0,000958	0,034692
6,01	−1,265482	−0,160687	0,008519	0,000506	0,026330
7,01	−1,243175	−0,371229	0,006242	−0,000303	0,019031
8,01	−1,214982	−0,520855	0,004883	−0,000203	0,013636
9,01	−1,185591	−0,629916	0,004043	−0,000147	0,009927
10,01	−1,156999	−0,710551	0,003508	−0,000112	0,007424
11,01	−1,130154	−0,770843	0,003165	−0,000087	0,005716
12,01	−1,105608	−0,816273	0,002948	−0,000067	0,004533
13,01	−1,083614	−0,850688	0,002814	−0,000049	0,003704
14,01	−1,064213	−0,875853	0,002738	−0,000030	0,003121
15,01	−1,047316	−0,896782	0,002705	0,000011	0,002716
16,01	−1,032769	−0,911964	0,002709	0,000010	0,002458
17,01	−1,020381	−0,923508	0,002760	0,000032	0,002332
18,01	−1,009945	−0,932247	0,002875	0,000056	0,002341
20,01	−0,994093	−0,943679	0,003429	0,000104	0,002842
25.01	−0,974736	−0,952883	0,005054	0,000165	0,004791
30.01	−0,969662	−0,952217	0,001496	0,000083	0,001460

Зависимость полученных результатов от числа пробных функций позволяет заключить, что уже при сравнительно небольшом (50 функций) базисе достигается относительная погрешность, не превышающая 10^{-3}. Зависимость $\varepsilon_{1,2}(\rho)$ хорошо согласуется с приведенной в [3].

Скорость сходимости вариационного расчета при увеличении базиса иллюстрируется табл.2, в которой приведены зависимость $\varepsilon_{1,2}$, P_{11} от числа и типа пробных функций в точке $\rho = 8{,}01$.

Таблица 2

n_1	n_2	n_3	ε_1	ε_2	P_{11}
1	1	45	−1,213694	−0,520750	0,004898
1	1	66	−1,215808	−0,520855	0,004925
3	3	36	−1,213260	−0,520895	0,004851
3	3	55	−1,215389	−0,520903	0,004892
3	3	78	−1,216238	−0,520927	0,004919
3	3	105	−1,216482	−0,520971	0,004927

Это значение гиперрадиуса близко к положению минимума эффективной потенциальной энергии основного терма $\dfrac{15}{4\rho^2} + \varepsilon_1(\rho)$.

Результаты, приведенные в табл.1, были использованы для расчета уровней энергии мезомолекулы. В одноуровневом приближении (одно уравнение системы (12)) получены значения $E_0 = 1{,}0756$ и $E_1 = 0{,}9742$, что соответствует энергиям связи 314,67 и 29,4 эВ. Сравнение с результатом одноуровневого приближения в [3] (317,776 и 32,144 эВ) показывает справедливость оценки относительной погрешности расчета на уровне 10^{-3}. Если в одноуровневом приближении дополнительно опустить член $P_{11}(\rho)$, то полученные значения энергии должны быть нижней границей для точных значений.

В этом случае были получены следующие значения: $E_1 = 1{,}0810$, $E_2 = 0{,}9786$, что соответствует энергиям связи 329,86 и 41,78 эВ.

Авторы признательны Е.А.Колгановой за ценную помощь в численном решении системы дифференциальных уравнений (12).

Два автора, В.Б.Беляев и О.И.Картавцев, выполняли эту работу при частичной поддержке фонда Гейзенберг — Ландау.

ЛИТЕРАТУРА

1. Macek J.H. — J. Phys., 1968, B1, p.831.
2. Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. — ОИЯИ, Р4-92-297, Дубна, 1992.
3. Gusev V.V. et al. — Few-Body Systems 9, 1990, p.137.
4. Belyaev V.B. et al. — Few-Body Systems, Suppl, 1992, 6, p.332.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 декабря 1993 года.

Беляев В.Б., Картавцев О.И., Кочкин В.И. P4-93-460

Вариационный метод расчета «поверхностных» гиперсферических функций для систем типа $ZH\mu$

Тестовый расчет системы $dt\mu$

Предложен и реализован вариационный метод вычисления «поверхностных» гиперсферических функций для задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Вариационные «поверхностные» функции используются для построения матрицы эффективных потенциалов в системе гиперрадиальных уравнений. Численные расчеты проведены для системы $dt\mu$.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации и Лаборатории теоретической физики им.Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1993

Перевод авторов

Belyaev V.B., Kartavtsev O.I., Kochkin V.I. P4-93-460

Variational Method for the Calculation of the «Surface» Hyperspherical Functions for the Systems of $ZH\mu$-type. The Test Calculation of the $dt\mu$-System

The variational approach is applied for the calculation of the «surface» hyperspherical function for the three-body problem with Coulomb interaction. The variational «surface» function is applied for the construction of the matrix of the effective potentials in the systems of the hyperradial differential equations. The numerical calculation has been performed for the $dt\mu$-system.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1993