JINR - P11 - 2000-146

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

NOV 17 2000

LIBRARY

P11-2000-146

В.И.Кочкин

О ПОСТРОЕНИИ ГИПЕРСФЕРИЧЕСКОГО БАЗИСА В ПРОБЛЕМЕ ТРЕХ ТЕЛ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Fermilab Library
0 1160 0089127 9

2000

Уравнение Шредингера для трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона, в координатах Якоби $\bar{x}_i$, $\bar{y}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ имеет вид [4, 5, 6]:

$$(-\Delta\bar{x}_i - \Delta\bar{y}_i + \sum_{n=1}^{3} \frac{q_n}{|\bar{x}_n|} - E)\psi = 0, \tag{1}$$

где

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

$$\bar{y}_i = \sqrt{\frac{m_i(m_j + m_k)}{m_1(m_1 + m_2 + m_3)}}\left(\bar{r}_i - \frac{m_j\bar{r}_j + m_k\bar{r}_k}{(m_j + m_k)}\right), \quad i, j, k = 1, 2, 3,$$

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

$m_i, Z_i, \bar{r}_i$ — соответственно массы, заряды и радиусы-векторы каждой из i частиц, $i = 1, 2, 3$.

В гиперсферических координатах ρ, α_i, θ_i при $|\bar{x}_i| = \rho\cos(\alpha_i/2)$; $|\bar{y}_i| = \rho\sin(\alpha_i/2)$; $\cos(\theta_i) = (\bar{x}_i\bar{y}_i)/|\bar{x}_i||\bar{y}_i|$ уравнение (1) принимает вид:

$$\left[-\frac{1}{\rho^5}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{4}{\rho^2}\Box + \frac{1}{\rho}\sum_{n=1}^{3}\frac{q_n}{\cos(\alpha_n/2)} + \frac{2L(L+1)}{\rho^2\cos^2(\alpha_1/2)} - E\right]\psi_L = 0 \tag{2}$$

Здесь

$$\Box = \frac{1}{\sin^2\alpha}\left[\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right].$$

Разделяя в уравнении (2) радиальную и угловую части [1] и рассматривая ρ как параметр, приходим к уравнению:

$$\left(\Box - \frac{\rho}{4}\sum_{m=1}^{3}\frac{q_m}{\cos(\alpha_m/2)} - \frac{L(L+1)}{2\cos^2(\alpha_1/2)} + \lambda_n(\rho)\right)\varphi_n(\rho, \Omega) = 0 \tag{3}$$

$\rho = const$, $0 < \rho < \infty$, $0 \le \alpha_i$, $\theta_i \le \pi$.

Уравнение (3) при граничных условиях $\varphi_n(0) = \varphi_n(\infty) = 0$, $n = 1, 2, \ldots, N$ является основным уравнением для определения базиса гиперсферических поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$ и решается численно на ЭВМ вариационным методом с помощью анзаца, имеющего вид [2]:

$$\varphi_n(\rho, \alpha, \theta) = \sum_{k=1}^{N} C_k^{(n)}(\rho)\chi_k(\rho, \alpha, \theta), \tag{4}$$

ρ — параметр, $n = 1, 2, \ldots, N$; здесь $C_k^{(n)}$ — неизвестные числовые коэффициенты, а $\chi_k(\rho, \alpha, \theta)$ — заданные пробные функции, обеспечивающие асимптотическое поведение решения $\Psi_L(\rho, \Omega)$ в уравнении (2) как при $\rho \to 0$, так и при $\rho \to \infty$. Пробные функции χ_k для малых, средних и больших значений ρ имеют вид [3]:

$$\begin{cases} \chi_k = \Phi^{(3)}_{n_k l_k}(\alpha_3) P_{l_k}(\cos\theta_3), \; {\scriptstyle 1 \le k \le N_1, 0 < \rho \le 5} \\ \chi_k = \Phi^{(2)}_{n_k l_k}(\alpha_2) P_{l_k}(\cos\theta_2), \; {\scriptstyle N_1 < k \le N_1 + N_2, 5 < \rho \le 15} \\ \chi_k = \sin^{l_k}\alpha_3 C^{l_k+1}_{n_k - l_k - 1}(\cos\alpha_3) P_{l_k}(\cos\theta_3), \; {\scriptstyle N_1 + N_2 < k \le N, 15 < \rho} \end{cases} \tag{5}$$

$$\Phi^{(m)}_{nl}(\alpha) = \Phi_{nl}\left(\frac{q_m}{n}\rho\cos\frac{\alpha}{2}\right), \quad \Phi_{nl}(t) = e^{-t/2} t^l L^{2l+1}_{n-l-1}(t), \tag{6}$$

$P_l(x), L^k_m(t), C^m_n(x)$ — многочлены Лагранжа, Лагерра, Гегенбауэра.

После определения гиперсферического базиса поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$ общее решение уравнения (2) представляется в виде:

$$\Psi_L(\rho, \Omega) = \rho^{-5/2} \sum_{n=1}^{N} U_n(\rho) \varphi_n(\rho, \Omega), \tag{7}$$

где снова $U_n(\rho)$ есть неизвестные радиальные функции.

Из уравнения (2) для неизвестных функций $U_n(\rho)$ после определения $\varphi_n(\rho, \Omega)$ получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15}{4\rho^2} - \varepsilon_n(\rho) + E\right] U_n(\rho) + \sum_{k=1}^{n} \left[Q_n k \frac{d}{d\rho} + \frac{d}{d\rho} Q_{nk} - P_{nk}\right] U_k(\rho) = 0, \tag{8}$$

$n = 1, 2, \ldots N; \varepsilon_n(\rho) = 4/\rho^2 \lambda_n(\rho); Q_{nk}(\rho) = \langle \varphi_n | \frac{\partial}{\partial\rho} \varphi_k \rangle, P_{nk} = \langle \frac{\partial}{\partial\rho} \varphi_n | \frac{\partial}{\partial\rho} \varphi_k \rangle.$

Далее речь идет только о решении уравнения (3).

Итак, решая уравнение (3) для поверхностных функций $\varphi_n(\rho, \Omega)$, после подстановки (4) по методу Галеркина получаем систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных числовых коэффициентов $C_k^{(n)}$ в виде [8]:

$$\sum_{k=1}^{N} \left(D_{nk} - \frac{\rho}{4} \sum_{m=1}^{3} q_m U^m_{nk} - W_{nk} + \lambda_n S_{nk}\right) C_k^{(n)} = 0, n = 1, 2, \ldots, N \tag{9}$$

$$S_{nk} = \langle \chi_n | \chi_k \rangle; \quad D_{nk} = \langle \chi_n | \Box | \chi_k \rangle$$

$$U^{(m)}_{nk} = \langle \chi_n | U^{(m)} | \chi_k \rangle; \quad W_{nk} = \left\langle \chi_n \left| \frac{1}{\cos_2(\alpha_1/2)} \right| \chi_k \right\rangle.$$

В матричном виде уравнение (9) будет

$$(D - U - W + \lambda\bar{S}) = 0, \tag{10}$$

где $D = (D_{nk})$; $U = \sum\limits_{m=1}^{3} U_{nk}^{(m)}$; $W = (W_{nk})$; $\hat{S} = (S_{nk})$.

Обозначая $A = D - U - W$, $\hat{S} = -S$ получим

$$A\bar{c} = \lambda S\bar{c}. \tag{11}$$

Матричное уравнение (11) есть обобщенная алгебраическая задача на собственные значения. Величины Q_{nk}, P_{nk} в системе уравнений (8) в данной задаче эффективно и удобно вычисляются по соотношениям

$$Q_{nk} = -\frac{1}{4}(\lambda_k - \lambda_n)^{-1} V_{nk}; P_{nk} = -Q_{nk}^2;$$

$$V_{nk} = \langle\varphi_n| \sum_{m=1}^{3} \frac{q_m}{\cos(\alpha_m/2}|\varphi_k\rangle.$$

Работа с программой вычисления гиперсферического базиса показала, что, во-первых, при увеличении размерности матрицы системы и, во-вторых, при больших значениях параметра ρ происходит потеря точности, что затрудняло численную проверку сходимости вариационного метода.

Было найдено, что трудности возникают при вычислении двойных интегралов, например, вида

$$S_{ki} = \int\limits_0^{\pi} d\alpha_3 \sin^2\alpha_3 \Phi_{n_i l_i}^{(3)}(\alpha_3) \int\limits_{-1}^{1} dz_3 \Phi_{n_k l_k}^{(2)}(\alpha_2) P_{l_i}(z_3) P_{l_k}(z_2),$$

$$2\cos^2(\alpha_2/2) = 1 + \cos\alpha_3\cos\omega_1 + z_3\sin\alpha_3\sin\omega_1, \tag{12}$$

$$z_2 = \frac{z_3\sin\alpha_3\cos\omega_1 - \cos\alpha_3\sin\omega_1}{\sqrt{1 - (\cos\alpha_3\sin\omega_1 + z_3\sin\alpha_3\sin\omega_1)^2}};$$

здесь ω_i — фиксированные константы; α_i, z_i — переменные интегрирования.

На отрезке внешнего интегрирования $[0, \pi]$ были определены и выделены участки, в которых происходит потеря точности при вычислении всего подынтегрального выражения в (12) и подобных случаях.

Расширение используемого гиперсферического базиса и увеличение области значений параметра ρ в сторону его бóльших значений позволило рассчитать сечения упругого и неупругого рассеяния в системах ^{3,4}He$d\mu$ вблизи порога $d\mu$ [7].

Иллюстрация сходимости метода расчета приведена в таблице 1.

Таблица 1

Система ^{4}He$d\mu$, $\rho = 15.0$, $L = 0$.

N_1	N_2	N_3	$\varepsilon_2\,(\varepsilon_n = 4/\rho^2\lambda_n)$
3	3	105	−1.0309243
3	3	210	−1.0315926
3	3	276	−1.0316257
3	3	300	−1.0316326

Список литературы

[1] J.H.Macek. J.Phys. B1, 831 (1968).

[2] В.Б. Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. Сообщения ОИЯИ, Р4-92-297, Дубна, 1992.

[3] В.Б.Беляев, О.И.Картавцев, В.И.Кочкин. Сообщения ОИЯИ, Р4-93-460, Дубна, 1993.

[4] V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Phys. Rev., A52, 1765 (1995).

[5] V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Hyperfine Interactions 101/102 (1996) 359-363.

[6] V.B.Belyaev, O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin, E.A.Kalganova. Z.fur Phys. D, 41, 239-244 (1997).

[7] O.I.Kartavtsev, V.I.Kochkin and E.A.Kalganova. Resonances anf near-threshold scattering in ^{3,4}He$d\mu$. Hyperfine Interactions 118 (1999) 235-237.

[8] В.И.Кочкин. Программа на языке ФОРТРАН... Сообщение ОИЯИ, Р11-96-130, Дубна, 1996.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 июня 2000 года.

Кочкин В.И. P11-2000-146
О построении гиперсферического базиса в проблеме трех тел с кулоновским взаимодействием

Модифицирован ранее предложенный и реализованный в фортран-программе гибкий вариационный метод построения «поверхностных» гиперсферических функций. Повышена на порядок относительная точность вычислений.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2000

Перевод автора

Kochkin V.I. P11-2000-146
On Construction of the Hyperspherical Basis in the Three-Body Problem with Coulomb Interaction

Formerly proposed and realized in FORTRAN programme the flexible variational method for the construction of «surface» hyperspherical functions is modified. The relative accuracy of the calculations is raised by the order.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2000