УДК 530.145 Вестник СПбГУ. Сер. 4, 2010, вып. 3

В. В. Пупышев

СТРОЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ СИСТЕМ ТРЁХ ЧАСТИЦ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ТРОЙНОГО УДАРА*

Напомним некоторые определения, принятые в атомной физике [1] и квантовой теории рассеяния для систем нескольких частиц [2].

Пусть $\{p_1, p_2, p_3\}$ – система трёх нерелятивистских попарно взаимодействующих частиц p_1, p_2 и p_3. Пусть также H_0 и E – свободный гамильтониан и полная энергия этой системы $\{p_1, p_2, p_3\}$, а V_1, V_2 и V_3 – взаимодействия между частицами p_2 и p_3, p_1 и p_3, p_1 и p_3, соответственно.

Гелиоподобной [1] называется система $\{p_1, p_2, p_3\}$, в которой одинаковые частицы p_1 и p_2 имеют конечные массы $m_1 = m_2$ и кулоновские заряды $z_1, z_2 = -1$, частица p_3 считается бесконечно тяжёлым ядром ($m_3 = \infty$) с зарядом z_3, а все парные взаимодействия являются кулоновскими. Пример гелиоподобной системы – атом гелия ^{3}He, в котором p_1 и p_2 – электроны, а p_3 – ядро $^3_2$He гелия с зарядом $z_3 = 2$.

Для исследования свойств гелиоподобных систем удобно поместить ядро p_3 в начальную точку O неподвижной декартовой системы координат S_3 в трёхмерном координатном пространстве и использовать периметрические координаты (a_1, a_2, a_{12}), где a_1 и a_2 – длины радиусов-векторов $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ частиц p_1 и p_2, а a_{12} – длина вектора $\mathbf{a}_{12} \equiv \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Во многих случаях более удобны гиперсферические координаты $(r_a, \theta_a, \alpha_a)$: гиперрадиус $r_a \equiv (a_1^2 + a_2^2)^{1/2}$, угол θ_a между векторами $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ и угол $\alpha_a \equiv (1/2)\,\mathrm{arctg}(a_2/a_1)$. Для гелиоподобной системы точка с $r_a = 0$ называется точкой тройного удара.

Исследование системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ трёх частиц с конечными массами начинается с разделения движения их центра масс – точки O – от относительного движения [2]. После этого выбирается произвольно ориентированная система координат S_3 с начальной точкой O. В S_3 удобно использовать в качестве относительных координат три пары векторов Якоби $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$, $i = 1, 2, 3$, и три отвечающих им набора гиперсферических координат (r, Ω_i): гиперрадиус r и совокупность Ω_i пяти гиперсферических углов:

$$r = \left(x_i^2 + y_i^2\right)^{1/2}, \ \Omega_i = (\hat{x}_i, \hat{y}_i, \varphi_i), \ \mathrm{tg}\varphi_i = y_i/x_i.$$

В шестимерном координатном пространстве $\mathbb{R}^6$ с координатами $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ или (r, Ω_i) точкой тройного удара называется точка с $r = 0$.

В подходе Э. Шрёдингера волновая функция Ψ системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ в $\mathbb{R}^6$ определяется как регулярное решение уравнения Шрёдингера

$$\left[H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) - E + \sum_{k=1}^{3} V_k(x_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i))\right] \Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = 0. \tag{1}$$

В подходе Л. Д. Фаддеева [2] эта же функция $\Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ представляется суммой

$$\Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \Psi_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) + \sum_{k \neq i} \Psi_k(\mathbf{x}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i), \mathbf{y}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i))$$

* По материалам доклада на юбилейном семинаре «Вычислительная физика» 29–30 октября 2009 г., С.-Петербург.

трёх компонент Ψ_i, подчинённых в $\mathbb{R}^6$ системе уравнений

$$[H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) - E]\, \Psi_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = -V_i(x_i)\Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i),\ i = 1, 2, 3. \tag{2}$$

Для трёхчастичного состояния с полным угловым моментом ℓ компоненты Ψ_i можно заменить их разложениями

$$\Psi_i(r, \Omega_i) = 2(r \sin 2\varphi_i)^{-1} \sum_{a+b=\ell} U^{\ell}_{iab}(r, \varphi_i)\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$$

по бисферическим гармоникам $\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$. Используя такие ряды, удается свести шестимерную систему (2) к бесконечной системе двумерных интегродифференциальных уравнений Фаддеева для приведенных бисферических компонент U^{ℓ}_{iab}.

В ядерной и молекулярной физике наряду с чисто кулоновскими потенциалами $V_k(x_k) = q_k/x_k$, $k = 1, 2, 3$, часто используются потенциалы более широкого класса

$$V_k(x_k) = q_k/x_k + \bar{V}_k(x_k) = \sum_{n=-1}^{\infty} V_{kn}x_k^n,\ k = 1, 2, 3, \tag{3}$$

и типичными являются три случая:

$$A)\ V_{k,-1} \neq 0;\ B)\ V_{k,-1} = 0, V_{k1} \neq 0;\ C)\ V_{k,2n-1} = 0,\ n = 0, 1, \ldots, \tag{4}$$

где $q_k \equiv V_{k,-1}$ и все V_{kn}, $n \geqslant 0$, – известные константы.

Поэтому построение и анализ разложений регулярных решений уравнений Шрёдингера и Фаддеева вблизи точки тройного удара в случае потенциалов такого класса представляется актуальным и важным. Разложения формальных регулярных решений уравнений Шрёдингера или Фаддеева, содержащие вблизи такой точки целые степени гиперрадиуса и его логарифма, называем далее разложениями фоковского типа.

В квантовой механике анализ строения многочастичных волновых функций вблизи точки тройного удара начался с исследования разложений регулярного решения Ψ уравнения Шрёдингера для гелиоподобных систем в состоянии с нулевым полным угловым моментом ℓ.

Еще в 1935 году в работе Бартлетта и др. [3] было впервые показано, что такое решение нельзя представить в виде ряда

$$\Psi(a_1, a_2, a_{12}) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{p=0}^{\infty} C_{nmp} a_1^n a_2^m a_{12}^p,$$

содержащего числовые коэффициенты C_{nmp} и целые неотрицательные степени переменных a_1, a_2 и a_{12}. Позже в 1937 году Бартлетт в [4] указал на существование формального решения Ψ в виде ряда, содержащего не только целые степени расстояний между частицами, но и целые степени логарифмов таких расстояний.

Разложение формального решения Ψ уравнения Шрёдингера для ${}^1S_0$-состояния атома ^{3}He вблизи точки тройного удара впервые получено А. В. Фоком в работе [5]. Эта работа была выполнена по следующей схеме. Протон считался неподвижным кулоновским центром, помещенным в начало O неподвижной системы координат S_3. Движение двух электронов описывалось трёхмерным уравнением Шрёдингера, записанным в гиперсферических координатах $(r_a, \theta_a, \alpha_a)$. Общее регулярное решение $\Psi^{\varepsilon,0}$ этого уравнения заменялось искомым двойным рядом по целым степеням гиперрадиуса r_a, его логарифма и неизвестным функциям Ψ_{nm} двух гиперуглов:

$$\Psi(r_a, \theta_a, \alpha_a) = \sum_{n=0}^{\infty} r_a^n \sum_{m=0}^{M(n)} (\ln r_a)^m \Psi_{nm}(\theta_a, \alpha_a).$$

Далее для функций Ψ_{nm} выводилась рекуррентная цепочка дифференциальных уравнений второго порядка, содержащая квадрат двумерного оператора гипермомента $\Lambda^2(\theta_a, \alpha_a)$, для которого собственными функциями являются известные в явном виде гипергармоники $Y_{\lambda n}(\theta_a, \alpha_a)$. Затем с помощью разложений искомых функций Ψ_{nm} по таким гипергармоникам доказывалось, что полученная цепочка разрешима, а верхний предел суммирования $M(n)$ зависит от индекса n и равен целой части $[n/2]$ числа $n/2$. При доказательстве оказалось, что каждая функция Ψ_{nm} содержит $M(n)+1$ неизвестных числовых коэффициентов C^p_{nm}, $p = 1, 2, \dots [n/2] + 1$.

Анализ Фока был продолжен А. М. Ермолаевым. Его вклад [6–8] в исследование строения собственных функций оператора Шрёдингера для гелиоподобных систем является фундаментальным. В [6] Ермолаев доказал, что строение пространственной волновой функции Ψ гелиоподобной системы зависит от полного спина J:

$$\Psi = \sum_{n}^{\infty} r_a^{n-1} \sum_{m=0}^{[n-J-1]} (\ln r_a)^m \Phi^J_{nm}(\theta_a, \alpha_a), \begin{cases} n = 1, 3/2, 2, \dots & J = 0, \\ n = 2, 5/2, 3, \dots & J = 1. \end{cases}$$

Затем Ермолаев дал исчерпывающий анализ рекуррентной цепочки дифференциальных уравнений для угловых функций Φ^J_{nm}, доказал её разрешимость, создал метод построения таких функций, позволяющий выделить в явном виде их особенности в точках парных соударений двух электронов ($\alpha_a = \pi$) и каждого электрона с неподвижным ядром ($\alpha_a = 0$) и впервые построил теорию возмущений [7, 8] по взаимодействию между электронами, в которой каждое приближение строится в виде двойного ряда по степеням r_a^n и $(\ln r_a)^m$.

В обзорной работе [9] дан сравнительный анализ огромного числа исследований фоковского разложения решений уравнения Шрёдингера для атомных систем из трёх и более частиц с парными чисто кулоновскими взаимодействиями и различными типами симметрии волновой функции. Большинство работ, процитированных в этом обзоре, выполнены по представленной выше и ставшей классической фоковской схеме, в которой изначально предполагается наличие целых степеней логарифма гиперрадиуса в разложении искомой волновой функции, а ключевыми являются двумерные дифференциальные уравнения.

Работой [10] С. П. Меркурьев и его ученики А. А. Квицинский и В. В. Кострыкин начали обобщение фоковского разложения в рамках дифференциальных уравнений Фаддеева на случай произвольных масс частиц и центральных парных взаимодействий, представимых рядами по целым степеням x^n, $n = -1, 0, \dots$, расстояния x между двумя соответствующими частицами. Предложенный авторами вывод разложения фаддеевских компонент Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3, подчинённых системе трёх шестимерных дифференциальных уравнений Фаддеева (2), выполнен по фоковской схеме. Эти компоненты строились в виде фоковских рядов

$$\Psi_i = \sum_{n=0} r^n \sum_{m=0}^{[n/2]} (\ln r)^m \Phi_i^{nm}(\Omega_i),$$

по целым степеням r^n и $(\ln r)^m$ и искомым функциям $\Psi_i^{nm}(\Omega_i)$, зависящим от совокупностей Ω_i пяти гиперуглов и подчинённым рекуррентной цепочке дифференциальных уравнений. Решения её первых трёх уравнений авторы получили в явном виде. Точное решение следующих уравнений – очень трудная задача, потому что их правые части устроены довольно сложно, а число независимых переменных, равное пяти, слишком велико. Численный анализ таких уравнений принципиально невозможен по простой причине: искомые функции Ψ_i^{nm} содержат в качестве слагаемых общие решения соответствующих однородных уравнений, эти слагаемые определены с точностью до произвольных множителей, а зафиксировать их значения без потери общности нельзя.

Все перечисленные выше трудности удалось преодолеть в рамках другого подхода к выводу разложений фоковского типа [11, 12].

Представим схему этого подхода и некоторые наиболее интересные результаты.

Считается, что в системе трёх частиц все парные взаимодействия являются центральными взаимодействиями более общего вида (3), чем кулоновские. Единообразно исследуются три случая (4).

Исходной является система двумерных интегродифференциальных уравнения Фаддеева для состояния трёх частиц с выбранными полным угловым моментом ℓ и чётностью σ относительно инверсии обоих векторов Якоби $\mathbf{x}_i$ и $\mathbf{y}_i$.

По определению, полагается $K = \ell$ для нормальной чётности $\sigma = (-1)^\ell$ и $K = \ell + 1$ в случае аномальной чётности $\sigma = (-1)^{\ell+1}$.

Далее строится фундаментальная система регулярных решений исследуемой системы интегродифференциальных уравнений.

Для этого сначала доказывается, что все компоненты $\Phi_{iab}^L(r, \varphi_i)$ фундаментальных регулярных решений являются двойными бесконечными рядами по целым степеням гиперрадиуса r, его логарифма и искомым функциям $\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi_i)$ одного гиперугла φ_i.

Построение функций Φ_{iab}^{Lnm} сводится к решению рекуррентной цепочки обыкновенных дифференциальных уравнений с однородными граничными условиями в точках $\varphi_i = 0, \pi/2$. Такая рекуррентная краевая задача довольно проста и, что самое главное, не содержит никаких неопределённых коэффициентов. Поэтому решение довольно большого числа её первых уравнений не вызывает принципиальных затруднений.

Затем фаддеевские бисферические компоненты U_{iab}^ℓ записываются в виде сумм по индексу $L = K, K+2, \ldots$ от произведений $C_{iab}^L \Phi_{iab}^L(r, \varphi_i)$ произвольных числовых коэффициентов C_{iab}^L и компонент $\Phi_{iab}^L(\varphi_i)$ всех фундаментальных решений, представленных их описанными выше двойными рядами.

Найденные разложения компонент U_{iab}^ℓ используются для восстановления разложений фоковского типа для регулярных решений исходных регулярных шестимерных уравнений Шрёдингера (1) и Фаддеева (2) и проекций таких решений на угловые базисы, образованные бисферическими гармониками $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$, гипергармониками $Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i)$ или симметризованными D-функциями Вигнера.

Для примера приведём представление фаддеевских компонент Ψ_i:

$$\Psi_i = 2(r \sin 2\varphi_i)^{-1} \sum_{a+b=\ell} \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \sum_{L=K}^{\infty} C_{iab}^L \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} (\ln r)^m \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi_i).$$

Здесь индекс $M(n)$ определяется строением (4) парных взаимодействий: $M(n) = [n/2], [n/6], 0$ в случае A), B) и C), соответственно. Поэтому волновая функция Ψ

при $r \to 0$ имеет функционально разную асимптотику: в случае A) –

$$\Psi = r^K \sum_{a+b=K} \left[X_{ab}^K Y_{Kab}^{\ell m}(\Omega_i) + 2r \operatorname{cosec} 2\varphi_i f_{ab}^{K1}(\varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) + \right.$$
$$\left. + \, r^2 (\ln r) B_{ab}^{K2} Y_{K+2,ab}(\Omega) + O(r^2) \right],$$

а в случае B) –

$$\Psi = r^K \sum_{a+b=K} \left\{ \left[X_{ab}^K + r^2 F_{Kab}^{K2} \right] Y_{Kab}^{\ell m}(\Omega_i) + 2r^3 \operatorname{cosec} 2\varphi f_{ab}^{K3}(\varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \right\} +$$
$$+ \, r^{K+2} \sum_{a+b=K}^{L+2} X_{ab}^{K+2} Y_{K+2,ab}^{\ell m}(\Omega_i) + O(r^{K+4}).$$

Здесь X_{ab}^K и X_{ab}^{K+2} – произвольные коэффициенты, а все коэффициенты B_{ab}^{K2}, F_{Kab}^{K2} и функции $f_{ab}^{K1}(\varphi)$, f_{ab}^{K3} несложно вычислить.

Кроме указанной особенности строения волновой функции $\Psi(r, \Omega_i)$ стоит отметить еще одну: существуют два особых луча $\varphi_i = \gamma_{ki}$, $k \neq i$, при переходе через которые меняется функциональный вид асимптотики этой функции при $r \to 0$. Эти лучи определяются кинематическими углами γ_{ki}. Для примера приведём такую асимптотику в случае A) и $\ell = 0$:

$$\Psi = X \left[2 + x_i V_{i,-1} + \sum_{k \neq i} V_{k,-1} g(x_i, y_i; \gamma_{ki}) \right] + 4B(x_i^2 - y_i^2) \ln(x_i^2 + y_i^2).$$

Здесь X и B – коэффициенты, а функция g такова:

$$g(x, y; \gamma_{ki}) \equiv \begin{cases} cx + (\tilde{s}y)^2/(3cx), & y \leqslant x \operatorname{ctg} \gamma_{ki}, \\ \tilde{s}y + (cx)^2/(3\tilde{s}y), & y \geqslant x \operatorname{ctg} \gamma_{ki}, \end{cases}$$

где для краткости записи положено $x \equiv x_i$, $y \equiv y_i$; $c \equiv \cos \gamma_{ki}$, а $\tilde{s} \equiv |\sin \gamma_{ki}|$.

Литература

1. *Друкарёв Г. Ф.* Столкновение электронов с атомами и молекулами. М., 1978.

2. *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М., 1985.

3. *Bartlett J. H., Gibson J. J., Dunn C. G.* The normal helium atom // Phys. Rev. 1935. Vol. 47. P. 679–680.

4. *Bartlett J. H.* The helium wave equation // Phys. Rev. 1937. Vol. 51. P. 661–669.

5. *Фок В. А.* Об уравнении Шрёдингера для атома гелия // Изв. Акад. наук СССР. Сер. физ. 1954. Т. 18. Вып. 2. С. 161–172.

6. *Ермолаев А. М.* // Вестн. ЛГУ. 1958. Т. 14. С. 48–64.

7. *Ермолаев А. М.* // Вестн. ЛГУ. 1961. Т. 16. С. 19–33.

8. *Ермолаев А. М.* // ДАН СССР. 1968. Т. 12. С. 1144–1149.

9. *Abbott P. C., Maslen E. N.* Coordinate systems and analytic expansions for three-body atomic wavefunctions: I. Partial summation for the Fock expansion in hyperspherical coordinates // J. Phys. (A). 1987. Vol. 20. P. 2043–2075.

10. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* Faddeev aproach to the three-body problem in total-angular-momentum representation // Few-Body Syst. 1989. Vol. 6. N 2. P. 97–113.

11. *Pupyshev V. V.* Asymptotic expansions of wave functions of three identical particles for small hyperradius and S-wave potentials // Few-Body Syst. 1990. Vol. 8. N 3. P. 105–122.

12. *Пупышев В.В.* Обобщения разложений Фока и Като для систем трёх квантовых частиц // Физ. элементарн. част. атом. ядра. 2009. Т. 40. Вып. 4. С. 763–892.

Статья поступила в редакцию 19 марта 2009 г.