Р11-2019-9

И. В. Амирханов, Н. Р. Саркар, И. Сархадов

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ПРИБЛИЖЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

Доложено на Всероссийской конференции с международным участием «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем», 16–20 апреля 2018 г., Российский университет дружбы народов, Москва

Амирханов И. В., Саркар Н. Р., Сархадов И. P11-2019-9
Об одном методе приближенно-аналитического решения квантово-механической задачи трех тел

Предложен метод исследования решений одной квантово-механической задачи трех тел. Рассмотрена краевая задача для системы из двух частиц, движущихся в потенциальном поле третьей частицы. Потенциалы взаимодействия между частицами выбраны квадратично растущими. В этом случае задача двух тел имеет точное решение. Решение исходной задачи трех тел представлено в виде разложения по решениям задачи двух тел. Для коэффициентов разложения получено однородное линейное матричное уравнение. Приравнивая определитель этого уравнения к нулю, находим собственные значения исходной задачи и коэффициенты разложения. Так как элементы матрицы алгебраических уравнений с решениями задачи двух тел вычисляются аналитически, собственные значения задачи трех тел явным образом зависят от параметров потенциалов. Меняя эти параметры произвольным образом, можно получить желаемые спектры, т. е. можно управлять собственными значениями исходной задачи.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2019

Amirkhanov I. V., Sarker N. R., Sarkhadov I. P11-2019-9
About One Method of Approximate-Analytical Solution of the Quantum-Mechanical Three-Body Problem

A method is proposed for investigating the solutions of a single quantum-mechanical three-body problem. The boundary value problem for a system of two particles moving in the potential field of the third particle is studied. The interaction potentials between the particles are chosen to be quadratically growing. In this case, the two-body problem has an exact solution. The solution of the original three-body problem is represented as an expansion in the solutions of the two-body problem. The coefficients of the expansion yield a homogeneous linear matrix equation. Equating the determinant of this equation to zero, we find the eigenvalues of the original problem and the coefficients of the expansion. Since the elements of the matrix of algebraic equations with solutions of the two-body problem are calculated analytically, the eigenvalues of the three-body problem depend explicitly on the parameters of the potentials. Changing these parameters in an arbitrary way, we can obtain the desired spectra, i.e., one can control the eigenvalues of the original problem.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2019

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании решений многочастичной задачи часто бывает удобным свести эту задачу к решениям задачи трех тел. Подобные задачи возникают при изучении энергетических состояний системы, состоящей из двух частиц, движущихся в потенциальном поле третьей частицы или в самосогласованном поле других частиц [1, 2]. К таким системам относится [3] атом He, содержащий два электрона, движущихся в кулоновском поле ядра с зарядом $Z = 2$. В данной работе предлагаем метод решения подобной задачи с квадратично растущим потенциалом.

Сначала рассмотрим систему двух нетождественных частиц. Оператор Гамильтона системы можно записать в виде

$$H = H_1 + H_2 + V_{12}, \tag{1}$$

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 + C_1\, r_1^2,$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 + C_2\, r_2^2, \quad V_{12}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = C_3|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2,$$

где H_1, H_2 — оператор Гамильтона каждой частицы с квадратично растущим потенциалом; V_{12} — потенциал взаимодействия между частицами; C_1, C_2 и C_3 — параметры задачи.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Задача сводится к нахождению собственных функций и собственных значений стационарного уравнения Шредингера

$$H\psi = E\psi \tag{2}$$

при условии сохранения нормировки

$$\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = 1. \tag{3}$$

Задача двух тел

$$\begin{gathered} H_1\varphi_{1n}(\mathbf{r}_1) = E_{1n}\varphi_{1n}(\mathbf{r}_1), \quad H_2\varphi_{2m}(\mathbf{r}_2) = E_{2m}\varphi_{2m}(\mathbf{r}_2), \\ n, m = 1, 2, 3, \ldots, \end{gathered} \tag{4}$$

имеет точное решение. Так как решения φ_{1n} и φ_{2m} являются полным набором ортонормированных функций, то решения уравнения (2) будем искать в виде

$$\psi = \sum_{n,m=1}^{N,M} B_{nm}\varphi_{1n}\varphi_{2m}, \tag{5}$$

где N, M — максимальные количества членов, удерживаемых в разложении. В качестве $\varphi_{1n}(r_1)$ и $\varphi_{2m}(r_2)$ выбираем сферически-симметричные решения, т. е. $l = 0$. Подставляя (5) в (2), получаем однородную систему алгебраических уравнений для нахождения E и B_{nm}:

$$[E - E_{1n} - E_{2m}]\, B_{nm} = \sum_{n',m'=1}^{N,M} W_{nm\,n'm'} B_{n'm'}, \tag{6}$$

где

$$W_{nm\,n'm'} = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2\, \varphi_{1n}(r_1)\, \varphi_{2m}(r_2)\, V_{12} \varphi_{1n'}(r_1)\, \varphi_{2m'}(r_2).$$

После интегрирования по углам получаем

$$[E - E_{1n} - E_{2m}]\, B_{nm} = C_3 \left[\sum_{m'} A_{mm'} B_{nm'} + \sum_{n'} D_{nn'} B_{n'm} \right], \tag{7}$$

где

$$A_{mm'} = \int dr_2 r_2^2\, \varphi_{2m}(r_2)\, \varphi_{2m'}(r_2), \quad D_{nn'} = \int dr_1 r_1^2\, \varphi_{1n}(r_1)\, \varphi_{1n'}(r_1).$$

Для вычисления $A_{mm'}$ и $D_{nn'}$ приведем явный вид φ_{1n} и φ_{2m}. Несколько нижних собственных функций φ_{1n} и собственных значений E_{1n} $(n = 1, 2, 3)$ имеют вид [4]

$$\varphi_{11} = N_{11}\, r\, \mathrm{e}^{-\beta_1 r^2}, \quad \varphi_{12} = N_{12}\, r(r^2 - a_1)\, \mathrm{e}^{-\beta_1 r^2},$$
$$\varphi_{13} = N_{13}\, r(r^2 - a_2)(r^2 - a_3)\, \mathrm{e}^{-\beta_1 r^2},$$

где N_{1i} $(i = 1, 2, 3)$ — нормировочные постоянные,

$$N_{11} = 2\left(\frac{C_1^3}{\pi}\right)^{1/4}, \quad N_{12} = N_{11}\sqrt{\frac{2C_1}{3}}, \quad N_{13} = N_{11}\sqrt{\frac{2}{15}}C_1,$$
$$E_{11} = 3\sqrt{C_1}, \quad E_{12} = 7\sqrt{C_1}, \quad E_{13} = 11\sqrt{C_1},$$
$$a_1 = \frac{3}{2\sqrt{C_1}}, \quad a_2 = \frac{5 - \sqrt{10}}{2\sqrt{C_1}}, \quad a_3 = \frac{5 + \sqrt{10}}{2\sqrt{C_1}}, \quad \beta_1 = \frac{\sqrt{C_1}}{2},$$
$$D_{11} = \frac{3}{2\sqrt{C_1}}, \quad D_{22} = \frac{7}{2\sqrt{C_1}}, \quad D_{33} = \frac{11}{2\sqrt{C_1}},$$
$$D_{12} = D_{21} = \sqrt{\frac{3}{2C_1}}, \quad D_{23} = D_{32} = \sqrt{\frac{5}{2C_1}}.$$

Решения φ_{2m} и $A_{mm'}$ получаются заменой C_1 на C_2.

Рассмотрим ряд частных случаев.

При $C_3 = 0$ получаем точные решения двух невзаимодействующих частиц в поле третьей частицы $E = E_{1n} + E_{2m}$.

Пусть $M = N = 1$.

Тогда решение системы (7) будет

$$E = 3\sqrt{C_1} + 3\sqrt{C_2} + C_3 \left(\frac{3}{2\sqrt{C_1}} + \frac{3}{2\sqrt{C_2}} \right).$$

Пусть $N = 2$, $M = 2$ (E_i, $i = 1, 2, 3, 4$).

В этом случае система (7) имеет точные решения при произвольных C_1, C_2, C_3. Однако эти решения имеют очень громоздкий вид, поэтому ниже приводим результаты при фиксированных значениях этих параметров.

При $C_1 = C_2 = C_3 = 1$ E_1, E_2, E_3, E_4 принимают следующие значения:

$$E_1 = 15 - \sqrt{42}, \quad E_2 = 15, \quad E_3 = 15, \quad E_4 = 15 + \sqrt{42},$$

или

$$E_1 = 8{,}5192593015921398,\ E_2 = 15,\ E_3 = 15,\ E_4 = 21{,}480740698407860;$$

при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}6$

$$E_1 = 7{,}5962975655574816,\ E_2 = 13,\ E_3 = 13,\ E_4 = 18{,}403702434442518;$$

при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}3$

$$E_1 = 6{,}8416741204591536,\ E_2 = 11{,}5,\ E_3 = 11{,}5,$$
$$E_4 = 16{,}158325879540846,$$

а при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0$

$$E_1 = 6,\ E_2 = 10,\ E_3 = 10,\ E_4 = 14.$$

Из полученных результатов следует, что при $C_3 \to 0$ переходим к точным решениям задачи двух невзаимодействующих частиц.

Пусть $N = 3$, $M = 3$ (E_i, $i = 1, 2, 3 \ldots, 9$).

При $C_1 = C_2 = C_3 = 1$

$$\begin{aligned} E_1 &= 8{,}4953478419492323, & E_2 &= 14{,}254816359887296,\\ E_3 &= 14{,}593440654981999, & E_4 &= 20{,}352909172920062,\\ E_5 &= 21{,}141787021126772, & E_6 &= 21{,}505303805953166,\\ E_7 &= 26{,}901255539064835, & E_8 &= 27{,}603396618985933, \end{aligned}$$
$$E_9 = 34{,}151742985130706;$$

при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}6$

$$E_1 = 7{,}5913238112972174, \quad E_2 = 12{,}673119948048569,$$
$$E_3 = 12{,}829075272660092, \quad E_4 = 17{,}910871410235905,$$
$$E_5 = 18{,}264047670585620, \quad E_6 = 18{,}425080919190408,$$
$$E_7 = 23{,}345843809931447, \quad E_8 = 23{,}662832378763668,$$
$$E_9 = 29{,}097804779287073;$$

при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}3$

$$E_1 = 6{,}5727414176233215, \quad E_2 = 10{,}977354277817807,$$
$$E_3 = 10{,}977354277817807, \quad E_4 = 15{,}381967138012292,$$
$$E_5 = 15{,}409016430993854, \quad E_6 = 15{,}409016430993854,$$
$$E_7 = 19{,}813629291188339, \quad E_8 = 19{,}813629291188339,$$
$$E_9 = 24{,}24529144436438,$$

а при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0$

$$E_1 = 6, \quad E_2 = 10, \quad E_3 = 10, \quad E_4 = 14, \quad E_5 = 14,$$
$$E_6 = 14, \quad E_7 = 18, \quad E_8 = 18, \quad E_9 = 22.$$

Из полученных результатов следует, что при $C_3 \to 0$ переходим к точным решениям задачи двух невзаимодействующих частиц.

Коэффициенты B_{nm} находим с учетом условия нормировки (3).

Рассмотрим систему двух тождественных частиц.

В нерелятивистском приближении (и в отсутствие внешнего магнитного поля) оператор Гамильтона системы двух одинаковых частиц, не содержащий операторов спина частиц, можно записать в виде

$$H = H_1 + H_2 + V_{12},$$

где

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 + C_1 r_1^2, \quad H_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 + C_2 r_2^2,$$
$$V_{12}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = C_3|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 \tag{8}$$

при $\mu_1 = \mu_2$ и $C_1 = C_2$.

Поэтому волновая функция двух частиц может быть записана в виде произведения функции $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, зависящей только от пространственных координат (координатной функции), и функции $\chi(s_{1z}, s_{2z})$, зависящей только от спиновых координат (спиновой функции):

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = \chi(s_{1z}, s_{2z})\, \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Если обозначить волновые функции двух возможных спиновых состояний частицы со спином $1/2$ соответственно через $\chi(1)$ и $\chi(2)$, то антисимметричная функция (суммарный спин равен нулю) будет иметь вид

$$\chi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi(1)\,\chi(2) - \chi(2)\,\chi(1)),$$

а симметричную спиновую функцию (суммарный спин равен единице) можно записать как

$$\chi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi(1)\,\chi(2) + \chi(2)\,\chi(1)).$$

Аналогично симметричные (ψ_s) и антисимметричные (ψ_a) координатные функции имеют вид

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\varphi_1(\mathbf{r}_1)\,\varphi_2(\mathbf{r}_2) + \varphi_1(\mathbf{r}_2)\,\varphi_2(\mathbf{r}_1)),$$
$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\varphi_1(\mathbf{r}_1)\,\varphi_2(\mathbf{r}_2) - \varphi_1(\mathbf{r}_2)\,\varphi_2(\mathbf{r}_1)).$$

Тогда $\chi_a\psi_s$ описывает парасостояние со спином $s = 0$, а $\chi_s\psi_a$ описывает ортосостояние со спином $s = 1$.

Учитывая вышесказанное, решения уравнения (2) будем искать в виде

$$\psi = \sum_{n,m=1}^{N,M} B_{nm}(\varphi_{1n}(\mathbf{r}_1)\,\varphi_{2m}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_{1n}(\mathbf{r}_2)\,\varphi_{2m}(\mathbf{r}_1)). \tag{9}$$

Подставляя (9) в (2), получаем однородную систему алгебраических уравнений для нахождения E и B_{nm}:

$$(E - E_{1n} - E_{2m})B_{nm} = C_3 \left(\sum_{n'}(D_{nn'}B_{n'm} \pm A_{mn'}B_{n'n}) + \right.$$
$$\left. + \sum_{m'}(A_{mm'}B_{nm'} \pm D_{nm'}B_{mm'})\right). \tag{10}$$

При $C_3 = 0$ получаем точные решения задачи двух невзаимодействующих частиц в поле третьей частицы $E = E_{1n} + E_{2m}$.

Пусть $M = N = 1$. Тогда с учетом того, что $A_{11} = D_{11}$ и $E_{11} = E_{21}$, получаем $E_+ = 2E_{11} + 4C_3D_{11}$ — ортосостояние со спином $s = 1$, а $E_- = 2E_{11}$ — парасостояние со спином $s = 0$.

Ниже представлены значения E_+ и E_- при различных значениях C_3.

Для E_{+i} $(i = 1, 2, 3, 4)$:

10, 0,619168480353141, 20, 29,380831519646859 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 1$,

8,5192593015921398, 10, 15, 21,480740698407860 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}5$,

6, 10, 10, 14 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0$,

а для E_{-i} $(i = 1, 2, 3, 4)$:

6, 10, 14, 20 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 1$,

6, 10, 14, 15 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0{,}5$,

6, 10, 10, 14 при $C_1 = C_2 = 1$, $C_3 = 0$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Решения исходной задачи трех тел сведены к решениям однородных матричных уравнений (7) и (10). Если в разложениях (5), (9) оставлять несколько членов, то уравнения (7) и (10) будут иметь точные решения при произвольных параметрах C_1, C_2 и C_3, а в общем случае для любых N, M уравнения (7) и (10) необходимо решать численно при фиксированных параметрах C_1, C_2 и C_3, что является предметом дальнейшей работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 17-01-00661а и 19-01-00645а.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Каширина Н. И., Лахно В. Д.* Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 292 с.
2. *Амирханов И. В., Пузынин И. В., Стриж Т. А., Лахно В. Д.* Решение уравнений ЛЛП в теории биполярона // Изв. РАН. Сер. физ. 1995. Т. 59, № 8. С.106–110.
3. *Давидов А. С.* Квантовая механика. Изд. 2-е. М.: Наука, 1973.
4. *Амирханов И. В., Саркар Н. Р.* Об одном методе исследования самосогласованной нелинейной краевой задачи на собственные значения с растущими потенциалами // Вестн. РУДН. Сер. МИФ. 2018. Т. 26, № 1. С. 51–59.

Получено 4 февраля 2019 г.

Редактор *Е. В. Сабаева*

Подписано в печать 20.03.2019.
Формат $60 \times 90/16$. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,63. Тираж 215 экз. Заказ № 59648.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@jinr.ru
www.jinr.ru/publish/