

# 1/N-РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ

СЕРГЕЕВ А. В.

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ОПТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. С. И. ВАВИЛОВА

(Поступила в редакцию 6 января 1989 г.)

Разложение по степеням  $1/N$ , где  $N$  — размерность пространства, используется для расчета энергии связанных состояний квантовомеханической системы трех частиц. Доказано, что предел  $N \rightarrow \infty$  соответствует классическому движению жесткой конфигурации частиц в четырехмерном пространстве. Результаты суммирования ряда по  $1/N$  обсуждаются на примерах ангармонического осциллятора, мезоатома  $\mu\alpha$  и экранированного гелия.

## 1. Введение

Исходная задача сначала обобщается на случай пространства переменной размерности  $N$ . В пределе  $N \rightarrow \infty$  частицы образуют стабильную жесткую конфигурацию. Квантовые колебания вокруг равновесной конфигурации описываются теорией возмущений по степеням  $1/N$ . В окончательные формулы, выведенные в пределе больших  $N$ , подставляется физическая размерность  $N=3$ , что часто дает хорошее приближение к исходной теории.

Впервые  $1/N$ -разложение для задачи трех тел было развито в работе [1] применительно к обобщенным гелиевым гамилтонианам. Методом, основанным на представлении Гольштейна — Примакова для псевдоспиновой алгебры, в [1] найдены первые три члена  $1/N$ -разложения. В [2] сообщалось о вычислении более простым методом семи коэффициентов  $1/N$ -разложения для гелия и гелиеподобных ионов, что позволило определить энергию с точностью до 3–4 знаков. Позднее в [3] сходным методом вычислено 11 коэффициентов для гелия. Различным аспектам  $1/N$ -разложения для задачи трех тел посвящены также работы [4–8], однако там рассматривались только низшие порядки разложения и преимущественно гелиеподобные системы.

В настоящей работе впервые установлено, что предел  $N \rightarrow \infty$  отвечает классическому движению жесткой треугольной конфигурации частиц в четырехмерном пространстве. Для вычисления коэффициентов  $1/N$ -разложения высокого порядка используется тот же подход, что и в [2, 3]. В качестве примеров рассмотрены трехчастичный ангармонический осциллятор, мезоатом  $\mu\alpha$  и экранированный атом гелия. В двух последних случаях результаты суммирования  $1/N$ -разложения согласуются с результатами более точных вариационных расчетов.

## 2. Описание метода

Рассмотрим систему частиц с массами  $m_1, m_2, m_3$ , взаимодействующих посредством потенциала  $V(r_{23}, r_{31}, r_{12})$  в пространстве размерности  $N_0=3$ , где  $r_{ij}$  — расстояние между частицами  $i$  и  $j$ . Введем

$$U(s_{23}, s_{31}, s_{12}) = N_0^2 V(N_0^{-2} s_{23}, N_0^{-2} s_{31}, N_0^{-2} s_{12}). \quad (1a)$$

Обобщенный  $N$ -мерный потенциал будем полагать равным

$$V_N(r_{23}, r_{31}, r_{12}) = N^{-2} U(N^{-2} r_{23}, N^{-2} r_{31}, N^{-2} r_{12}). \quad (1b)$$

Очевидно, что  $V_{N_0} = V$ .

Ограничимся здесь рассмотрением  $S$ -состояний, или таких состояний,

волновая функция которых зависит только от расстояний между частицами. Действие  $N$ -мерного оператора кинетической энергии на волновую функцию  $S$ -состояния можно записать в виде

$$T_N \psi(r_{23}, r_{31}, r_{12}) = \left[ T - \frac{N-3}{2} \sum_{i=1}^3 \left( \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_k} \right) \frac{1}{r_{ik}} \frac{\partial}{\partial r_{ik}} \right] \psi, \quad (2)$$

$$T = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial}{\partial r_{ki}} \right) (1 + \cos \theta_i) \left( \frac{\partial}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial}{\partial r_{ki}} \right) + \left( \frac{\partial}{\partial r_{ij}} - \frac{\partial}{\partial r_{ki}} \right) (1 - \cos \theta_i) \left( \frac{\partial}{\partial r_{ij}} - \frac{\partial}{\partial r_{ki}} \right) \right],$$

где  $j, k$  таковы, что  $(i, j, k)$  образует четную перестановку тройки чисел  $(1, 2, 3)$ ,  $\cos \theta_i = (r_{ij}^2 + r_{ki}^2 - r_{jk}^2) (2r_{ij}r_{ki})^{-1}$ . Используется система единиц, где  $\hbar=1$ .

Преобразование  $\Phi = S_{\Delta}^{(N-3)/2} \psi$ , где  $S_{\Delta}$  — площадь треугольника со сторонами  $r_{23}, r_{31}, r_{12}$ , убирает из (2) слагаемые, линейные по производным.  $N$ -мерное уравнение Шредингера с потенциалом  $V_N$  приводится к виду

$$(T + V_N + (N-3)^2 U_c - E) \Phi = 0, \quad (3)$$

где

$$U_c = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i h_i^2},$$

$h_i = 2S_{\Delta}/r_{jk}$  — высота треугольника,  $E$  — энергия. Слагаемое в (3), содержащее потенциал  $U_c$ , аналогично центробежному члену  $(N-1)(N-3)/(8mr^2)$  для одной частицы в сферически-симметричном поле.

Произведем масштабное преобразование  $r_{ij} = N^2 s_{ij}$  и запишем (3) в виде

$$(N^{-2} T + U_{eff} + (-6N^{-1} + 9N^{-2}) U_c - \varepsilon) Y = 0, \quad (4)$$

где  $Y(s_{23}, s_{31}, s_{12}) = \Phi(r_{23}, r_{31}, r_{12})$ ,  $U_{eff} = U + U_c$  — эффективный потенциал,  $\varepsilon = N^2 E$  — приведенная энергия. Параметр  $N^{-1}$  входит в коэффициенты при вторых производных в уравнении (4) таким же образом, как и постоянная Планка.

Предположим, что эффективный потенциал имеет минимум. Тогда, как можно показать, энергия разлагается в ряд по степеням  $1/N$ :

$$\varepsilon = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon_k N^{-k}. \quad (5)$$

В классическом пределе  $N \rightarrow \infty$  волновая функция  $Y$  локализуется в окрестности минимума  $U_{eff}$ , а энергия становится равной  $\varepsilon_0$  — минимуму  $U_{eff}$ .

В приближении гармонического осциллятора функция  $U_{eff} - \varepsilon_0$  в окрестности минимума приближается квадратичной формой от величин, характеризующих отклонение координат от точки равновесия. Из уравнения (4) находим  $\varepsilon_1 = \varepsilon_{osc} - 6U_c$ , где  $U_c$  берется в точке минимума  $U_{eff}$ ,

$$\varepsilon_{osc} = \sum_{i=1}^3 \left( p_i + \frac{1}{2} \right) \omega_i,$$

— энергия гармонического осциллятора с частотами  $\omega_i$  в состоянии с квантовыми числами  $p_i$  ( $i=1, 2, 3$ ).

Более высокие коэффициенты разложения ( $\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$  и т. д.) представляют собой ангармонические поправки. Для их вычисления существует рекуррентная процедура, которая описана в [3] для атома гелия. В на-

стоящей работе для потенциала общего вида применяется сходная процедура, которая здесь не приводится из-за весьма громоздких формул.

### 3. Предел $N \rightarrow \infty$ и классическая механика

Рассмотрим классическое движение двух взаимодействующих частиц в центральном поле, т. е. ограничимся здесь случаем  $m_3 = \infty$ . Точно так же, как движение одной частицы в центральном поле происходит в одной плоскости, движение двух частиц происходит в пределах одного четырехмерного пространства (или пространства меньшей размерности), которое натянуто на радиусы-векторы частиц  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{s}$  и векторы импульсов  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{q}$  в какой-либо момент времени.

В четырехмерном пространстве из компонент тензора момента импульса

$$L_{ij} = r_i p_j - r_j p_i + s_i q_j - s_j q_i$$

можно составить два сохраняющихся инварианта

$$L^2 = \frac{1}{4} L_{ij} L_{ij}, \quad M = \frac{1}{4} L_{ij} \bar{L}_{ij},$$

где  $\bar{L}_{ij} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijkl} L_{kl}$ ,  $\varepsilon_{ijkl}$  — тензор, антисимметричный по всем индексам и такой, что  $\varepsilon_{1234} = 1$ . Следующие неотрицательные инварианты выражаются через  $L^2$  и  $M$ :

$$K_{\pm}^2 = \frac{1}{8} (L_{ij} \pm \bar{L}_{ij}) (L_{ij} \pm \bar{L}_{ij}) = L^2 \pm M \geq 0,$$

откуда следует, что  $M$  заключено в пределах  $-L^2 \leq M \leq L^2$ . Инвариант  $M$  можно записать в виде определителя

$$M = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijkl} r_i p_j s_k q_l.$$

Очевидно, что при  $M=0$  движение частиц становится трехмерным. В противоположном крайнем случае, когда  $M = \pm L^2$  и движение «до предела» четырехмерно,  $K_{\mp}^2 = 0$ , откуда  $L_{ij} = \pm \bar{L}_{ij}$  для любых  $i, j$ .

Опишем теперь классическое движение частиц, при котором расстояния между частицами и силовым центром и между самими частицами (соответственно  $r$ ,  $s$  и  $t$ ) сохраняются. Такое четырехмерное движение частиц будет соответствовать статическому решению задачи в переменных  $r, s, t$ , когда  $r = r^{(0)}$ ,  $s = s^{(0)}$ ,  $t = |\mathbf{r} - \mathbf{s}| = t^{(0)}$ , а  $(r^{(0)}, s^{(0)}, t^{(0)})$  — минимум эффективного потенциала, который возникает в квантовой задаче в пределе  $N \rightarrow \infty$  и включает центробежный член

$$V_c(r, s, t) = (N^2/8) (1/m_1 h_1^2 + 1/m_2 h_2^2),$$

где  $h_1 = 2S_{\Delta}/s$ ,  $h_2 = 2S_{\Delta}/r$ ,  $S_{\Delta} = r_1 s_2 - r_2 s_1$ .

Зададим  $L = N/2$  и  $M = L^2$ . Введем оси 1, 2 подвижной системы координат в плоскости треугольника, оси 3, 4 — в ортогональном дополнении к ней. При вращении осей 3, 4 компоненты  $L_{13}$  и  $L_{14}$  преобразуются подобно компонентам двумерного вектора, поэтому всегда можно достигнуть, чтобы  $L_{14} = 0$ . С учетом того, что  $L_{ij} = \bar{L}_{ij}$ , единственными ненулевыми компонентами тензора момента импульса будут

$$L_{13} = L_{43} = -L_{31} = -L_{24} = N/2$$

и будут справедливы уравнения

$$r_1 p_3 + s_1 q_3 = L_{13} = L, \quad r_2 p_3 + s_2 q_3 = L_{23} = 0, \quad (6a)$$

$$r_1 p_4 + s_1 q_4 = L_{14} = 0, \quad r_2 p_4 + s_2 q_4 = L_{24} = -L. \quad (6b)$$

Подставляя решение уравнений (6) относительно неизвестных  $p_3, q_3, p_4, q_4$  в формулу для кинетической энергии, находим

$$T = (p_1^2 + p_2^2)/2m_1 + (q_1^2 + q_2^2)/2m_2 + V_c(r, s, t).$$

Зададим в начальный момент времени импульсы и координаты частиц так, чтобы

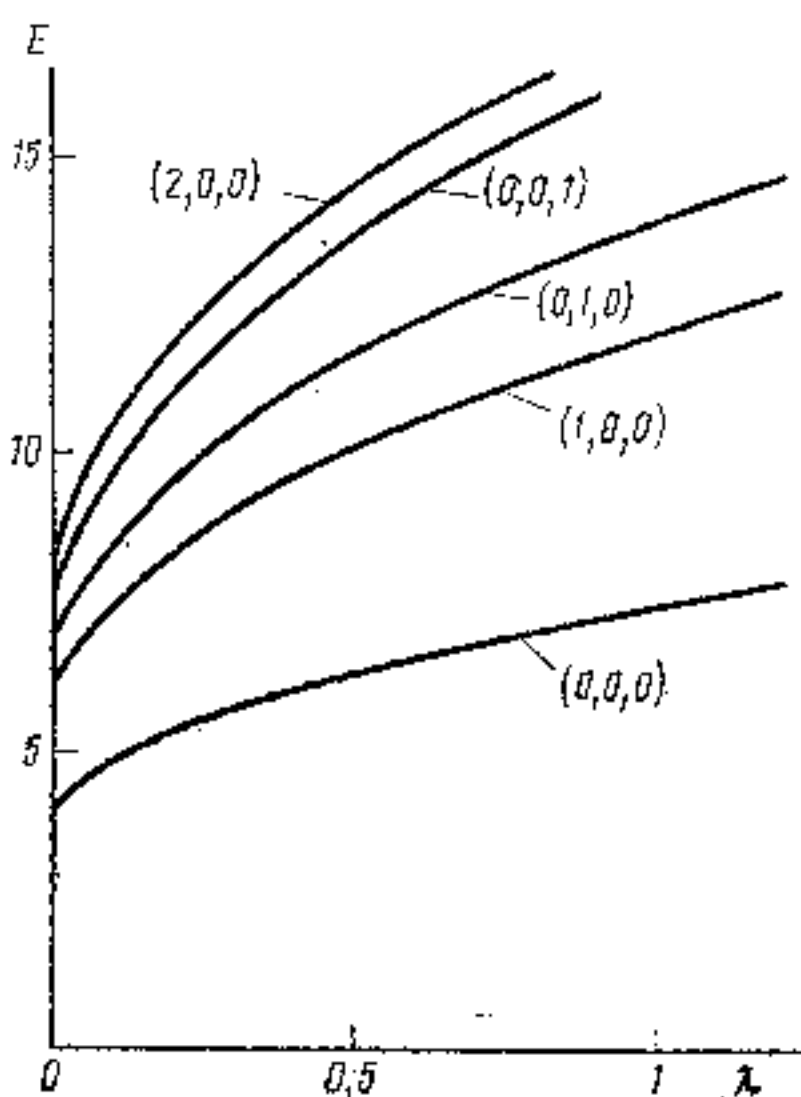
$$p_1 = p_2 = q_1 = q_2 = 0, \quad r = r^{(0)}, \quad s = s^{(0)}, \quad t = t^{(0)}. \quad (7)$$

Тогда полная энергия совпадает с минимумом эффективного потенциала  $V+V_c$ , а, поскольку она сохраняется, условия (7) будут выполняться в любой момент времени. В этом случае расстояния  $r, s, t$  сохраняются.

#### 4. Примеры $1/N$ -разложения

##### 4.1. Ангармонический осциллятор

Здесь рассматривается ангармонический осциллятор с массами частиц  $m_1=m_2=1, m_3=\infty$  и одинаковыми парными потенциалами взаимодействия  $v(r_{ij})=r_{ij}^2/2+\lambda r_{ij}^4$ , дающими в сумме потенциал  $V$ . На рисунке изображены



Уровни энергии трехчастичного ангармонического осциллятора в зависимости от параметра ангармоничности

При больших  $\lambda$  в потенциале доминируют слагаемые  $\lambda r_{ij}^4$ . В случае, когда  $v=r_{ij}^4$ , расчеты выявили неожиданное соотношение между частотами:

$$\omega_1 : \omega_2 : \omega_3 = 1 : 1,419 : 2,003 \approx \sqrt{2} : 2.$$

Следовательно, при больших  $N$  состояния с одинаковой суммой  $2p_3+p_1$  имеют весьма близкие энергии и для них  $1/N$ -разложение перестает хорошо работать из-за сильной расходимости. Выпишем энергии нескольких низлежащих состояний для случая  $v=r_{ij}^4$ :

$$E(0, 0, 0) = 6,417, \quad E(1, 0, 0) = 10,73, \quad E(0, 1, 0) = 12,51.$$

$$E(0, 0, 1) = 15, \quad E(2, 0, 0) \approx E(0, 0, 1).$$

Приводятся только те десятичные знаки, которые совпадают у аппроксимант  $[3/3], [3/4], [4/4]$  и являются надежными.

##### 4.2. Мезоатом $\mu\alpha$

Рассматривается основное состояние мезоатома  $\mu\alpha$  ( $m_1=m_2=205,769, m_3=7293,4$ ).

Чтобы учесть полюс второго порядка у энергии при  $N=1$  [4], будем вести разложение по  $1/(N-1)$ :

$$E' = (N-1)^{-2} \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon_k' (N-1)^{-k},$$

уровни энергии  $E=N^{-2}\varepsilon$  в зависимости от параметра ангармоничности  $\lambda$ , полученные суммированием  $1/N$ -разложения методом аппроксимант Паде. Около каждой кривой в скобках указаны квантовые числа  $(p_1, p_2, p_3)$ .

При  $\lambda=0$  задача сводится к гармоническому осциллятору. В этом случае из коэффициентов  $1/N$ -разложения отличны от нуля только  $\varepsilon_0$  для основного состояния и  $\varepsilon_0, \varepsilon_1$  для возбужденных состояний. Энергия состояния  $(p_1, p_2, p_3)$  вычисляется точно:

$$E = (27/N^3) [p_1 + N/6 + (p_2 + N/6)(\sqrt{3}+1)/2 + (p_3 + N/6)\sqrt{3}].$$

Заметим, что множитель  $27/N^3$  возникает из-за коэффициента  $(3/N)^6$  перед  $r_{ij}^2/2$  в  $N$ -мерном потенциале  $V_N$  (см. формулы (1)). Энергии состояний с одинаковыми суммами  $p_1+p_2+p_3$  и с  $p_1=p_3$  совпадают друг с другом и составляют вырожденный уровень.

$\delta$	[2/1] ( $\delta$ )	[4/4]'	Вариационный расчет [12]	$\delta$	[2/1] ( $\delta$ )	[4/4]'	Вариационный расчет [12]
0	-2,90372	-2,9039	-2,90372	0,6	-1,449	-1,4563	-1,45856
0,2	-2,34682	-2,3467	-2,34700	0,8	-1,086	-1,106	-1,11033
0,4	-1,8661	-1,8673	-1,86845	1,0	-0,77	-0,804	-0,81821

где  $E'$  — энергия для  $N$ -мерной задачи с потенциалом  $V_N'$ , определяемым по формулам (1) с заменой  $N_0 \rightarrow N_0 - 1$  и  $N \rightarrow N - 1$ . Соответствующие аппроксиманты следующие:

[0/0]'	[3/4]'	[4/4]'	[4/5]'	Вариационный расчет [9]
-549,2	-584,5	-583,05	-583,1	-583,044

Как видно, они хорошо согласуются с вариационным расчетом [9]. В кулоновском случае  $V_N = V_N' = V$  и  $E = E'$ , поэтому коэффициенты  $\epsilon_k$  и  $\epsilon_k'$  взаимосвязаны.

Два члена  $1/N$ -разложения для мезоатома  $\mu\alpha$  были недавно получены в [8], однако коэффициент  $\epsilon_1' = -651,1$  отличается от результата настоящей работы ( $\epsilon_1' = -481,4$ ) и, по-видимому, ошибочен.

### 4.3. Экранированный атом гелия

Рассмотрим систему трех частиц с массами  $m_1 = m_2 = 1$ ,  $m_3 = \infty$ , взаимодействующих между собой посредством потенциала Юкавы:

$$V(r_1, r_2, r_{12}) = -\frac{2}{r_1} \exp(-\delta r_1) - \frac{2}{r_2} \exp(-\delta r_2) + \frac{1}{r_{12}} \exp(-\delta r_{12}). \quad (8)$$

Так же как и для одной частицы в потенциале Юкавы [10], здесь можно использовать теорию возмущений по степеням параметра экранирования  $\delta$ :

$$E = \sum_{k=0}^{\infty} E^{(k)} \delta^k.$$

Невозмущенная энергия,  $E^{(0)} = -2,903724$ , является энергией основного состояния гелия. Так как  $\partial V / \partial \delta = 3$  при  $\delta = 0$ , то  $E^{(1)} = 3$ . Следующие два коэффициента выражаются через средние значения, вычисленные в [11]:

$$E^{(2)} = 1/2 (\langle r_{12} \rangle - 4 \langle r_1 \rangle) = -1,147909,$$

$$E^{(3)} = -1/6 (\langle r_{12}^2 \rangle - 4 \langle r_1^2 \rangle) = 0,3762487.$$

Результаты расчета [2/1] ( $\delta$ ) приведены во втором столбце таблицы.

В таблице даны также результаты суммирования разложения по  $1/(N-1)$ . При  $\delta \geq 0,3$  они лучше согласуются с вариационным расчетом [12] (четвертый столбец таблицы), чем результаты разложения по  $\delta$ . Отметим, что эффективный потенциал экранированного гелия имеет минимум, отвечающий равнобедренной конфигурации частиц, при  $\delta < \delta_c \approx 1,2554$ .

Известно [13], что энергия основного состояния при  $N=5$  совпадает с энергией возбужденного состояния  $(2p)^2 \ ^3P$  в реальном трехмерном пространстве. Соответствующие результаты для экранированного гелия:

$\delta$	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25
[4/4]'	-0,710505	-0,56969	-0,44596	-0,33784	-0,24434	-0,16450

При  $\delta = 0$  приближенный результат совпадает с точным ( $-0,710500$  из работы [14]) до пяти знаков после запятой.

Описан метод получения коэффициентов  $1/N$ -разложения для широкого класса аналитических потенциалов. Тот факт, что для задачи двух тел предел  $N \rightarrow \infty$  отвечает вращению тел вокруг общего центра масс, обобщен на менее тривиальный случай задачи трех тел. Испытание метода на нескольких модельных примерах показало его эффективность как для основного, так и для некоторых возбужденных состояний.

Автор выражает благодарность А. И. Шерстюку, Е. А. Соловьеву и В. С. Попову за полезные обсуждения.

#### Литература

1. *Mlodinow L. D., Papaniolaou N.* // *Ann. Phys.* 1981. V. 131. P. 1.
2. *Сергеев А. В.* // Всесоюз. конф. по теории атомов и атомных спектров. Тез. докл. Минск: БГУ, 1983. С. 66.
3. *Goodson D. Z., Herschbach D. R.* // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V. 58. P. 1628.
4. *Doren D. J., Herschbach D. R.* // *Chem. Phys. Lett.* 1985. V. 118. P. 115.
5. *Doren D. J., Herschbach D. R.* // *J. Chem. Phys.* 1986. V. 85. P. 4557.
6. *Van der Merwe P. du T.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 5976.
7. *Van der Merwe P. du T.* // *Phys. Rev.* 1986. V. D33. P. 3383.
8. *Van der Merwe P. du T.* // *Phys. Rev.* 1988. V. A38. P. 1187.
9. *Адамов М. Н., Демков Ю. Н., Филинский А. В.* // *Вестн. ЛГУ. Физика, химия.* 1983. № 4. С. 73.
10. *Сергеев А. В., Шерстюк А. И.* // *ЯФ.* 1984. Т. 39. С. 1158.
11. *Pekeris C. L.* // *Phys. Rev.* 1959. V. 115. P. 1216.
12. *Hashino T. et al.* // *Phys. Lett.* 1987. V. A123. P. 236.
13. *Herrick D. R., Stillinger F. H.* // *Phys. Rev.* 1975. V. A11. P. 42.
14. *Mittal J.* // *Phys. Rev.* 1965. V. 138. P. A1010.

#### THE $1/N$ EXPANSION FOR THREE-BODY PROBLEM

SERGEEV A. V.

The expansion in powers of  $1/N$  ( $N$  is the dimension of the space) is used for calculating the energy of the bound states of a quantum-mechanical three-body system. The limit  $N \rightarrow \infty$  is proved to correspond to the classical motion of a rigid configuration of particles in the four dimensional space. The results of summing the  $1/N$  power series are discussed using as examples the anharmonical oscillator, the mesoatom  $\mu\alpha$ , and screened helium.