

Применение дифференциальных уравнений Фаддеева для исследования системы тримера гелия

А. А. Коробицин^{1*} Е. А. Колганова^{1,2}

¹Объединенный институт ядерных исследований,

Лаборатория теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова. Россия,
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6.

²Государственный университет «Дубна». Россия, 141982,

Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, д. 19

(Статья поступила 08.07.2019; Подписана в печать 02.09.2019)

На основе дифференциальных уравнений Фаддеева исследуются свойства трёхатомной системы ${}^4\text{He}_3$. Выполнен расчет спектра тримера гелия с различными реалистическими силами. Проведена оценка влияния современных потенциальных моделей на характеристики системы трех частиц.

PACS: 03.65.-w, 21.45.+v, 31.15.-p

УДК: 539.1

Ключевые слова: уравнения Фаддеева, эффект Ефимова, тример гелия.

ВВЕДЕНИЕ

Трёхатомные кластеры представляют собой большой класс молекул, взаимодействие которых описывается потенциалами ван-дер-ваальсового типа. Они обладают рядом интересных свойств, в частности, в них может проявляться квантово-механический эффект Ефимова [1]. Теоретически предсказанный более 40 лет назад эффект Ефимова получил экспериментальное подтверждение лишь в последнее десятилетие. Собственно эффект Ефимова состоит в появлении бесконечного числа связанных состояний в трёхчастичной системе в случае, когда ни одна из парных подсистем не имеет связанных состояний, но хотя бы две из них обладают бесконечными длинами рассеяния. Данный эффект был экспериментально подтверждён только в 2006 г. в ультрахолодном газе атомов цезия ${}^{133}\text{Cs}$ [2]. Одним из лучших теоретически предсказанных примеров этого явления является тример гелия ${}^4\text{He}_3$, возбужденное состояние которого имеет ефимовскую природу [3, 4]. В недавнем эксперименте [5] удалось определить очень малую энергию связи димера гелия ${}^4\text{He}$ равную 1.76 ± 0.15 мК, а в работе [6] была измерена энергия возбуждённого состояния тримера относительно энергии связи димера. Исследование ефимовских состояний ультрахолодных кластеров и поиск универсальных закономерностей важны для анализа имеющихся экспериментальных данных, а также для предсказания существования таких состояний. Существует много реалистических моделей He-He потенциала, которые все более и более точно воспроизводят данные двух частиц [4]. Для оценки влияния потенциальных моделей на свойства системы трёх тел необходимы достаточно точные методы исследования. Один из таких эффективных методов изучения трёхатомных кластеров основан на использовании дифференциальных уравнений Фаддеева.

В настоящей работе усовершенствованный алгоритм решения дифференциальных уравнений Фаддеева применен для изучения свойств тримера гелия с использованием современных реалистических потенциалов PRZ2010 [7] и PRZ2017 [8] построенных в 2010 и 2017 годах соответственно, а также потенциалов — ТТУ [9] и HFD-B [10]. Проводится анализ влияния современных потенциалов на численные результаты энергии связи тримера гелия. Результаты расчетов сравниваются с результатами, полученными различными авторами другими методами, и с экспериментом.

1. МЕТОД

Для описания системы трёх частиц используются приведенные координаты Якоби $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$, ($\alpha = 1, 2, 3$), которые выражаются через радиус-векторы частиц \mathbf{r}_α и их массы m_α по формулам [11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_\alpha &= \left[\frac{2m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} (\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\gamma), \\ \mathbf{y}_\alpha &= \left[\frac{2m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} \left(\mathbf{r}_\alpha - \frac{m_\beta \mathbf{r}_\beta + m_\gamma \mathbf{r}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

где (α, β, γ) образуют циклическую перестановку индексов частиц (1, 2, 3). Набор координат α описывает разбиение трех частиц на пару частиц $(\beta\gamma)$ и отдельную частицу α . Координаты $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$ задают шестимерные векторы $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)$. Векторы Якоби $\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta$ отвечающие при $\beta \neq \alpha$ тому же вектору \mathbf{X} , что и пара $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$, получаются из $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$ преобразованием поворота

$$\mathbf{x}_\beta = c_{\beta\alpha} \mathbf{x}_\alpha + s_{\beta\alpha} \mathbf{y}_\alpha, \quad \mathbf{y}_\beta = -s_{\beta\alpha} \mathbf{x}_\alpha + c_{\beta\alpha} \mathbf{y}_\alpha \quad (2)$$

*E-mail: korooa@theor.jinr.ru

где коэффициенты $c_{\beta\alpha}, s_{\beta\alpha}$ даются формулами

$$c_{\beta\alpha} = - \left(\frac{m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\gamma)(m_\beta + m_\gamma)} \right)^{1/2},$$

$$s_{\beta\alpha} = (-1)^{\beta-\alpha} \text{sign}(\alpha - \beta) (1 - c_{\beta\alpha}^2)^{1/2},$$

и удовлетворяют условию $c_{\beta\alpha}^2 + s_{\beta\alpha}^2 = 1$.

Для эффективного исследования трёхчастичных систем применяются вычислительные алгоритмы, основанные на использовании дифференциальных уравнений Фаддеева [11–13]. Мы рассматриваем случай, когда частицы являются тождественными бозонами с нулевым спином, взаимодействующие посредством центрального потенциала V , т.е. $V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha) = V_\alpha(x_\alpha)$, $\alpha = 1, 2, 3$. В этом случае полная волновая функция должна быть инвариантной относительно перестановки частиц в каждой паре α , $\Psi(-\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \Psi(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)$, $\alpha = 1, 2, 3$.

Полную волновую функцию $\Psi(\mathbf{X})$ можно записать в виде суммы компонент Фаддеева $F_\alpha(\mathbf{X})$

$$\Psi(\mathbf{X}) = \sum_\alpha F_\alpha(\mathbf{X}) \quad (3)$$

Компоненты Фаддеева F_α удовлетворяют соответствующей системе дифференциальных уравнений в модели твердого кора [13]

$$(-\Delta_{\mathbf{x}} - E) F_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{x}_\alpha| < c, \\ -V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha) \Psi(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha), & |\mathbf{x}_\alpha| > c, \end{cases} \quad (4)$$

$$\Psi(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) \Big|_{|\mathbf{x}_\alpha|=c} = 0, \quad (5)$$

где E — полная энергия системы, а через c обозначена область твердого кора. Значения кора c выбирается таким образом, чтобы его дальнейшее уменьшение не влияло на значение энергии основного состояния тримера в четырех значащих цифрах. В уравнении (4) после замены потенциала с сильным отталкиванием на малых расстояниях моделью твердого кора вместо суммы лапласиана и огромного потенциального члена внутри области кора нужно аппроксимировать только сам лапласиан $-\Delta_{\mathbf{x}}$. Это обстоятельство приводит к значительному уменьшению численных ошибок.

В настоящей работе мы применяем вышеуказанный формализм к трёхатомной системе ${}^4\text{He}_3$ с полным угловым моментом $L = 0$. Разлагая компоненту Фаддеева F в ряд по бисферическим гармоникам, получим

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_l \frac{F_l(x, y)}{xy} \mathcal{Y}_{l0}(\hat{x}, \hat{y}), \quad (6)$$

где $x = |\mathbf{x}|, y = |\mathbf{y}|, \hat{x} = \mathbf{x}/x$ и $\hat{y} = \mathbf{y}/y$. В результате уравнения (4) и граничные условия (5) преобразуются в следующую систему парциальных интегро-

дифференциальных уравнений

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + l(l+1) \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right) - E \right) F_l(x, y) = \begin{cases} 0, & x < c, \\ -V(x) \Psi_l(x, y), & x > c. \end{cases} \quad (7)$$

и парциальные граничные условия

$$F_l(x, y) \Big|_{x=0} = F_l(x, y) \Big|_{y=0} = 0, \quad (8)$$

$$\Psi_l(x, y) \Big|_{x=c} = 0.$$

Парциальная компонента $\Psi_l(x, y)$ полной волновой функции (3) связана с парциальными компонентами Фаддеева $F_l(x, y)$ соотношением

$$\Psi_l(x, y) = F_l(x, y) + 2 \sum_{l'} \int_{-1}^{+1} d\eta h_{ll'}(x, y, \eta) F_{l'}(x', y'), \quad (9)$$

где

$$x' = \sqrt{\frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}xy\eta}, \quad (10)$$

$$y' = \sqrt{\frac{3}{4}x^2 + \frac{1}{4}y^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}xy\eta}, \quad (11)$$

с $\eta = \hat{x} \cdot \hat{y}$. Ядра $h_{ll'}(x, x', \eta) \equiv h_{(1;l)(2;l'l')}(x, x', \eta)$ представляют собой частный случай (отвечающий равным массам частиц и нулевому значению полного углового момента) более общих функций $h_{(\alpha;l\lambda)(\beta;l'\lambda')}(x, y, \eta)$ [11].

Для задачи на связанные состояния асимптотические граничные условия для парциальных компонент Фаддеева имеют вид

$$F_l(x, y) = \delta_{l0} \psi_d(x) \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d}y) \left[a_0 + o(y^{-1/2}) \right] + \frac{\exp(i\sqrt{E}\rho)}{\sqrt{\rho}} \left[A_l(\theta) + o(\rho^{-1/2}) \right], \quad (12)$$

где E — энергия связанного состояния, ε_d — энергия димера, $\psi_d(x)$ — волновая функция димера, которая предполагается равной нулю при $x < c, \rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. Коэффициенты a_0 и $A_l(\theta)$ описывают асимптотические вклады в парциальную компоненту Фаддеева F_l от $(2+1)$ и $(1+1+1)$ каналов соответственно.

Для расчета связанных состояний в системе трёх атомов гелия ${}^4\text{He}_3$ использовались интегродифференциальные уравнения Фаддеева в модели твердого кора (7) с граничными условиями (8) и (12). В качестве взаимодействия между атомами гелия были выбраны четыре реалистических потенциала — PRZ2010 [7], PRZ2017 [8], TTY [9] и HFD-B [10].

Таблица I: Абсолютные значения энергии связи димера $|\varepsilon_d|$ (в мК) для используемых потенциалов

Потенциал	TTY [9]	HFD-B [10]	PRZ2010 [7]	PRZ2017 [8]	Эксп. [15, 16]	Эксп. [5]
$ \varepsilon_d $	1.32103	1.69213	1.62087	1.61768	$1.3^{+0.25}_{-0.19}$	$1.76^{+0.15}_{-0.15}$

Таблица II: Абсолютные значения энергии основного состояния E_0 тримера ${}^4\text{He}_3$ (в мК)

Potential	TTY [9]				HFD-B [10]			PRZ2010 [7]	PRZ2017 [8]		
	l_{max}	*	[12] [†]	[17] [†]	[18]	*	[12] [†]	[17] [†]	[18]	*	*
E_0	0	89.03	89.0			94.37	94.2			93.02	92.98
	2	121.21	121.2			127.85	127.7			126.31	126.26
	4	125.85	125.8	126.4	126.54	132.70	132.5	133.0	133.08	131.04	130.99

* — результаты наших расчетов, [†] — использовалась величина $\hbar^2/m = 12.12 \text{ K}\text{\AA}^2$

Каждый из этих потенциалов поддерживает единственное слабосвязанное состояние димера. Энергия связи ε_d этого состояния представлена в табл. I. Отметим, что энергия связи ${}^4\text{He}_2$, полученная с потенциалами HFD-B [10], PRZ2010 [7], PRZ2017 [8] близка к результатам недавнего эксперимента [5], в то время как расчет с потенциалом TTY [9] ближе к более раннему эксперименту [15, 16]. Разница в величине энергии связи димера гелия для потенциалов PRZ2010 [7] и PRZ2017 [8] составляет всего 3.12 мК (менее 0.2%), что существенно меньше величины экспериментальной погрешности 0.15 мК.

При конкретных численных расчетах приходится ограничиваться лишь конечным числом уравнений в (7), полагая, что $l \leq l_{max}$. В настоящих расчетах l_{max} принималось равным 4, значение кора $c = 1$, $\hbar^2/m = 12.119282 \text{ K}\text{\AA}^2$, атомная масса гелия взята из [14]. Для решения дифференциального уравнения Фаддеева (7) мы использовали конечно-разностную аппроксимацию.

2. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Наши результаты для энергии связи основного состояния E_0 тримера ${}^4\text{He}_3$, а так же результаты, полученные другими авторами, представлены в табл. II. Как видно из табл. II, наибольший вклад в энергию связи основного состояния вносят парциальные каналы $l = 0$ и $l = 2$, причем последний дает чуть более 22%, и величина этого вклада примерно одна и та же для всех используемых потенциалов. Вклад парциальной волны с $l = 4$ составляет всего 3–4%. Оценка вклада более высоких парциальных моментов дает менее 1%. Видно, что значения энергии связи, вычисленные при $l_{max} = 4$, находятся в хорошем согласии с результатами других авторов.

Результаты, полученные для энергии связи возбужденного состояния E_1 тримера представлены

в табл. III. Для того чтобы проиллюстрировать сходимость наших результатов на рис. 1 приведена зависимость E_1 от параметров сетки в случае потенциала PRZ2010 [7]. Из табл. III видно, что парциальная компонента с $l = 0$ обеспечивает около 84% величины энергии связи возбужденного состояния. Вклад в E_1 от парциального канала с $l = 2$ имеет порядок 14–15%, тогда как $l = 4$ дает 2%. Таким образом, величины этих вкладов примерно совпадают с аналогичными величинами для основного состояния.

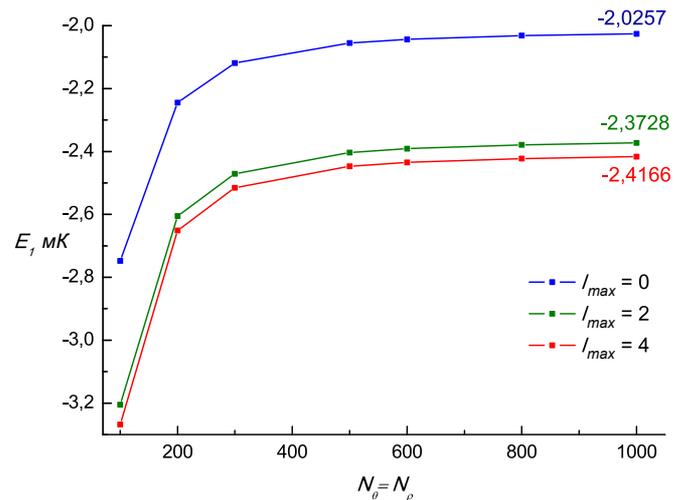


Рис. 1: Зависимость энергии возбужденного состояния E_1 (мК) тримера ${}^4\text{He}_3$ от числа узлов сетки $N_\theta = N_\rho$, вычисленная с потенциалом PRZ2010 [7]

Экспериментально была измерена энергия связи возбужденного состояния тримера гелия относительно двухчастичного порога, которая составила $|E_1 - \varepsilon_d| = 0.98 \pm 0.2 \text{ мК}$ [6]. Из табл. IV видно, что все потенциальные модели хорошо воспроизводят этот результат.

Таблица III: Абсолютные значения энергии возбуждённого состояния E_1 тримера ${}^4\text{He}_3$ (в мК)

Потенциал	TTY [9]					HFD-B [10]			PRZ2010 [7]	PRZ2017 [8]	
	l_{max}	*	[12] [†]	[17] [†]	[18]	*	[12] [†]	[17] [†]	[18]	*	*
E_1	0	2.031	2.02			2.461	2.45			2.03	2.02
	2	2.261	2.25			2.715	2.71			2.37	2.37
	4	2.287	2.28	2.28	2.291	2.736	2.74	2.73	2.742	2.42	2.41

* — результаты наших расчетов, [†] — использовалась величина $\hbar^2/m = 12.12 \text{ K}\text{\AA}^2$

Таблица IV: Сравнение энергии связи возбуждённого состояния тримера гелия относительно энергии связи димера $|E_1 - \epsilon_d|$ (в мК), вычисленные с различными потенциалами, с результатом эксперимента [6]

Потенциал	TTY [9]	HFD-B [10]	PRZ2010 [7]	PRZ2017 [8]	Эксп. [6]
$ E_1 - \epsilon_d $	0.97	1.04	0.80	0.79	0.98 ± 0.2

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе используется усовершенствованный алгоритм решения дифференциальных уравнений Фаддеева в модели твердого кора, который применяется для изучения свойств тримера гелия с исполь-

зованием реалистических потенциалов PRZ2010 [7], PRZ2017 [8], TTY [9] и HFD-B [10]. Показано, что все современные потенциальные модели хорошо воспроизводят значение энергии связи основного и возбужденного состояния тримера гелия.

- [1] Efimov V. N. // Phys. Atom. Nucl. 1970. **12**. P. 1080. // Phys. Lett. B. 1970. **33**. P. 563.
- [2] Kraemer T., Mark M., Waldburger P., Danzl J. G., Chin C., Engeser B., Lange A. D., Pilch K., Jaakkola A., Näggerl H.-C., Grimm R. // Nature. 2006. **440**. P. 315.
- [3] Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W. // Few-Body Syst. 2011. **51**. P. 249.
- [4] Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W. // Few-Body Syst. 2017. **58**. P. 35.
- [5] Zeller S., Kunitski M., Voigtsberger J., Kalinin A., Schottelius A., Schober C., Waitz M., Sann H., Hartung A., Bauer T., et al. // Proc. Nat. Acad. Sci. 2016. **113**. P. 14651.
- [6] Kunitski M., Zeller S., Voigtsberger J., Kalinin A., Schmidt L. Ph. H., Schoeffler M., Czasch A., Schöllkopf W., Grisenti R. E., Jahnke T., Blume D., Doerner R. // Science. 2015. **348**. P. 551.
- [7] Przybytek M., Cencek W., Komasa J., Lach G., Jeziorski B., Szalewicz K. // Phys. Rev. Lett. 2010. **104**. P. 183003.
- [8] Przybytek M., Cencek W., Jeziorski B., Szalewicz K. // Phys. Rev. Lett. 2017. **119**. P. 123401.
- [9] Tang K. T., Toennies J. P., Yiu C. L. // Phys. Rev. Lett. 1995. **74**. P. 1546.
- [10] Aziz R. A., McCourt F. R. W., Wong C. C. K. // Mol. Phys. 1987. **61**. P. 1487.
- [11] Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. // Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М., 1985.
- [12] Motovilov A. K., Sandhas W., Sofianos S. A., Kolganova E. A. // Eur. Phys. J. D. 2001. **13**. P. 33.
- [13] Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W. // Physics of Particles and Nuclei. 2009. **40**. P. 206.
- [14] Mills I., Cvitaš T., Homann K., Kallay N., Kuchitsu K. // Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry. Oxford, 1993.
- [15] Grisenti R., Schöllkopf W., Toennies J. P., Hegerfeld G. C., Köhler T., Stoll M. // Phys. Rev. Lett. 2000. **85**. P. 2284.
- [16] Cencek W., Przybytek M., Komasa J., Mehl J. B., Jeziorski B., Szalewicz K. // J. Chem. Phys. 2012. **136**. P. 224303.
- [17] Roudnev V., Yakovlev S. // Chem. Phys. Lett. 2000. **328**. P. 97.
- [18] Roudnev V., Cavagnero M. // J. Phys. B. 2011. **45**. P. 025101.

Investigation of the helium trimer via Faddeev differential equations

A. A. Korobitsin^{1,a}, E. A. Kolganova^{1,2,b}

¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics,
Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia.*

²*Dubna State University, Dubna 141982, Russia*
E-mail: ^akoroaa@theor.jinr.ru, ^bkea@theor.jinr.ru

Properties of the helium trimer ${}^4\text{He}_3$ are studied using the Faddeev differential equations. The spectrum of the helium trimer is calculated using different realistic forces. The influence assessment of modern potential models on the properties of the three-particle system is done.

PACS: 03.65.-w, 21.45.+v, 31.15.-p.

Keywords: Faddeev equations, Efimov effect, helium trimer.

Received 08 July 2019.

Сведения об авторах

1. Коробицин Артём Александрович — мл. науч. сотрудник; e-mail: koroaa@theor.jinr.ru.
2. Колганова Елена Александровна — канд. физ.-мат. наук, доцент, ст. науч. сотрудник; e-mail: kea@theor.jinr.ru.