

УДК 539.171.11

**Е. А. Колганова, О. П. Клименко, А. А. Коробицин, Д. В. Фурсаев,
В. А. Руднев**

Исследование трехатомных кластеров в рамках уравнений Фаддеева

В рамках дифференциальных уравнений Фаддеева выполнены расчеты энергий связи трехатомных кластеров ${}^4\text{He}_3$ и ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$. Полученные результаты показывают, что различные методы дают довольно близкие результаты для различных потенциальных моделей. Показано, что энергия возбужденного состояния обеих систем близка к двухчастичному порогу, что может указывать на ефимовскую природу возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$.

Ключевые слова: трехатомные кластеры, уравнения Фаддеева

Об авторах

Колганова Елена Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры фундаментальных проблем физики микромира государственного университета «Дубна», старший научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований. E-mail: kea@theor.jinr.ru. 141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6.

Клименко Ольга Павловна – старший преподаватель кафедры ядерной физики государственного университета «Дубна», младший научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Коробицин Артём Александрович – младший научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Фурсаев Дмитрий Владимирович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой фундаментальных проблем физики микромира государственного университета «Дубна», ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Руднев Владимир Александрович – доктор физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной физики Санкт-Петербургского государственного университета.

Исследование трехатомных систем при ультранизких энергиях, и, прежде всего, эффекта Ефимова [1], является одним из наиболее активно развивающихся направлений в настоящее время. Межатомное взаимодействие в таких системах описывается потенциалами ван-дер-ваальсовского типа, в котором присутствует очень сильная отталкивательная компонента на малых расстояниях между атомами. С другой стороны, этот потенциал убывает довольно медленно и поэтому необходимо включать в рассмотрение очень широкие области конфигурационного пространства с характерным размером в сотни или даже тысячи ангстрем. Такие особенности межатомного взаимодействия в трехчастичных кластерах требуют развития точных теоретических методов и вычислительных алгоритмов.

Методы

Одним из наиболее эффективных мето-

дов исследования трехчастичных систем являются алгоритмы, основанные на численном решении дифференциальных уравнений Фаддеева [2]. Этот метод позволяет вычислять спектр, волновые функции и амплитуды рассеяния для процессов $2 \rightarrow 2, 3$. Распространение дифференциальной формулировки задачи рассеяния $2 \rightarrow 2, 3$ в область комплексных энергий дает также возможность вычисления резонансов [3; 4].

Конфигурационное пространство системы трех частиц образуют шестимерные векторы $\mathbf{X} \equiv (\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha)$, трехмерные компоненты которых являются приведенными векторами Якоби $\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha$, где $\alpha = 1, 2, 3$:

$$\vec{x}_\alpha = \left[\frac{2m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} (\vec{r}_\beta - \vec{r}_\gamma),$$

$$\vec{y}_\alpha = \left[\frac{2m_\alpha (m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \left(\vec{r}_\alpha - \frac{m_\beta \vec{r}_\beta + m_\gamma \vec{r}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right), \quad (1)$$

где \vec{r}_α – радиус-векторы частиц с массами m_α , а индексы (α, β, γ) образуют циклическую перестановку индексов $(1, 2, 3)$. Якобиевские векторы с альтернативными индексами получаются с помощью преобразования поворота [2; 5].

$$\left(-\Delta_{\vec{x}_\alpha} - \Delta_{\vec{y}_\alpha} + V_\alpha(|\vec{x}_\alpha|) - E \right) \Phi_\alpha(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha) = -V_\alpha(|\vec{x}_\alpha|) \sum_{\beta \neq \alpha} \Phi_\beta(\vec{x}_\beta, \vec{y}_\beta), \quad (3)$$

где V_α – потенциал взаимодействия в паре α , а E – полная энергия системы. Существование и единственность решения дифференциальных уравнений Фаддеева (3) в случае локальных взаимодействий между частицами для любых значений энергии E была доказана в [2]. В случае центральных потенциалов возможна редукция шестимерных уравнений (3). Поскольку исходный гамильтониан системы трех частиц инвариантен относительно поворота плоскости трех частиц, то углы Эй-

лера, задающие ориентацию этой плоскости, можно отделить от внутренних координат, которые описывают относительное расположение частиц в этой плоскости. Для этой цели в работе [5] было предложено использовать разложение шестимерных фаддеевских компонент по D -функциям Вигнера. В результате получается следующая система трехмерных дифференциальных уравнений для соответствующей проекции компоненты Фаддеева [5]:

$$\Psi(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha) = \sum_\alpha \Phi_\alpha(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha), \quad (2)$$

которые удовлетворяют системе связанных дифференциальных уравнений

лера, задающие ориентацию этой плоскости, можно отделить от внутренних координат, которые описывают относительное расположение частиц в этой плоскости. Для этой цели в работе [5] было предложено использовать разложение шестимерных фаддеевских компонент по D -функциям Вигнера. В результате получается следующая система трехмерных дифференциальных уравнений для соответствующей проекции компоненты Фаддеева [5]:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} - \left[\frac{1}{x_\alpha^2} + \frac{1}{y_\alpha^2} \right] \frac{\partial}{\partial z_\alpha} [1 - z_\alpha^2] \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + V_\alpha(x_\alpha) - E \right) \Phi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha) = -V_\alpha(x_\alpha) \sum_{\beta \neq \alpha} \Phi_\beta(x_\beta, y_\beta, z_\beta), \quad (4)$$

где x_α, y_α и z_α связаны с соответствующими координатами Якоби:

$$x_\alpha = |\vec{x}_\alpha|, y_\alpha = |\vec{y}_\alpha|, z_\alpha = \frac{(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha}, \\ x_\alpha, y_\alpha \in [0, \infty), z_\alpha \in [-1, 1].$$

В случае, когда две частицы в трехчастичной системе тождественны, уравнения Фаддеева (4) упрощаются. Например, в рассматриваемом нами случае системы ${}^4\text{He}_2\text{Li}$, частицы 1 и 2, соответствующие атомам ${}^4\text{He}$,

тождественны и компоненты Фаддеева $\Phi_1(x_1, y_1, z_1)$ и $\Phi_2(x_2, y_2, z_2)$ преобразуются друг в друга с помощью соответствующего преобразования поворота. Поэтому достаточно рассматривать только две независимые компоненты Фаддеева.

Асимптотические граничные условия с учетом единственности связанного состояния каждой парной подсистемы имеют вид

$$\Phi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha) = \psi_d(x_\alpha) \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y_\alpha) a_0(z_\alpha) + A\left(\frac{y_\alpha}{x_\alpha}, z_\alpha\right) \exp(i\sqrt{E}\rho) / \sqrt{\rho}, \quad (5)$$

где ψ_d и ε_d – волновая функция и энергия связи соответствующего димера, а величина $\rho = \sqrt{x_\alpha^2 + y_\alpha^2}$ – гиперрадиус. Коэффициенты $a_0(z_\alpha)$ и $A(y_\alpha/x_\alpha, z_\alpha)$ описывают вклад кана-

лов упругого рассеяния (2+1) и трехчастичного развала (1+1+1). Последним слагаемым в (5) при энергии ниже трехчастичного порога развала можно пренебречь.

2. Результаты

Для описания взаимодействия между атомами гелия использовался недавно предложенный потенциал *PRZ* [6], а для взаимодействия атома He с атомом Li – *KTTY* потенциал [7; 8]. Вычисленное абсолютное значение энергии связи димера гелия 1.62 мК оказалось близко к экспериментальному значению 1.76 ± 0.15 мК [9]. Энергия связи димера ${}^4\text{He}{}^6\text{Li}$ меньше по абсолютному значению, чем в димере ${}^4\text{He}_2$ и в трехчастичной системе ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$ энергией нижайшего порога развала будет энергия димера гелия, в то время как в системе ${}^4\text{He}_2{}^7\text{Li}$ таким порогом является энергия связи ${}^4\text{He}{}^7\text{Li}$ [10].

Для вычисления энергии связи системы ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$ мы решаем уравнения (4) с граничными условиями (5). Детали используемой численной процедуры описаны в [11]. Полученные результаты в сравнении с результатами других авторов приведены в табл. 1.

Во второй и третьей строках табл. 1 приведены используемые в расчетах модели He–He взаимодействия и энергии связи димера гелия, которую они дают. В работах [12; 13] вычисления проводились методом Монте-Карло с использованием He–He потенциалов

HFD-B [14] и *TTY* [15]. В работе [16] для вычисления спектра с использованием потенциала *Jeziorska* [17] использовался метод адиабатического гиперсферического разложения (колонка 4). Адиабатический гиперсферический метод использовался также в работе [18] с использованием модели He–He взаимодействия *LM2M2* [19]. Следует также отметить работу [20], в которой впервые была дана оценка верхней границы основного состояния -31.4 мК для ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$, используя адиабатический гиперсферический метод. Для сравнения в табл. 2 приведены энергии связи системы тримера гелия, возбужденное состояние которой является ефимовским состоянием [3; 22]. И хотя энергии связи основных состояний этих систем отличаются более чем в два раза, энергии возбужденных состояний довольно близки, что может указывать на ефимовскую природу этого состояния и в системе ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$. Длина рассеяния атома лития на димере гелия получилась довольно большой 144 \AA , что не удивительно, поскольку в рассматриваемой системе имеется возбужденное состояние, которое лежит довольно близко к парному порогу развала.

Таблица 1. Абсолютные значения энергии связи димера гелия $|\varepsilon_d|$ (мК), основного $|E_0|$ (мК) и возбужденного $|E_1|$ (мК) состояний системы ${}^4\text{He}{}^6\text{Li}$, вычисленные с He–Li потенциалом *KTTY* [25]

He–He потенциал	*	[12]	[16]	[18]
	<i>PRZ</i> [6]	<i>HFD-B</i> [14]	<i>Jeziorska</i> [15]	<i>LM2M2</i> [19]
$ \varepsilon_d $ (мК)	1.62	1.68	1.74	1.31
$ E_0 $ (мК)	58.38	58.72	58.88	57.23
$ E_1 $ (мК)	2.049		2.09	1.937

Таблица 2. Абсолютные значения энергии связи основного $|E_0|$ (мК) и возбужденного $|E_1|$ (мК) состояний системы ${}^4\text{He}_3$

He–He потенциал	*	*	[11]	[21]
	<i>PRZ</i> [6]	<i>HFD-B</i> [14]	<i>HFD-B</i> [14]	<i>HFD-B</i> [14]
$ \varepsilon_d $ (мК)	1.62	1.68	1.68	1.68
$ E_0 $ (мК)	131.6	133.0	133.1	133.24
$ E_1 $ (мК)	2.424	2.741	2.742	–

Заключение

Используя трехмерные дифференциальные уравнения Фаддеева, выполнены расчеты энергий связи трехатомного кластера ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$, а также длины рассеяния атома лития на ди-

мере гелия. Полученные результаты и сравнение с вычисленными энергиями связи тримера гелия показывают, что различные методы дают близкие результаты, несмотря на использование различных потенциальных моделей

для взаимодействия между атомами гелия. Показано, что современные потенциальные модели поддерживают возбужденное состояние в системах ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$ и ${}^4\text{He}_3$, энергия которого очень близка к пороговой энергии. Большая величина длины рассеяния может указывать на ефимовскую природу возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$.

Библиографический список

1. Ефимов В.Н. Слабосвязанные состояния трех резонансно взаимодействующих частиц // *Ядерная физика*. 1970. Т. 12. С. 1080–1090.
2. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985. 400 с.
3. Колганова Е.А., Мотовилов А.К. О механизме возникновения ефимовских состояний в тримере гелия ${}^4\text{He}$ // *Ядерная Физика*. 1999. Т. 62. С. 1253–1267.
4. Kolganova E.A., Motovilov A.K., Ho Y.K. Complex scaling of the Faddeev operator // *Nucl. Phys. A*. 2001. V. 684. P. 623–625.
5. Kostykin V.V., Kvinstinsky A.A., Merkuriev S.P. Faddeev approach to the three-body problem in total-angular-momentum representation // *Few-Body Syst.* 1989. V. 6. P. 97–113.
6. Przybytek M., Cencek W., Komasa J. et al. Relativistic and Quantum Electrodynamics Effects in the Helium Pair Potential // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 183003; Erratum // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 108. P. 129902.
7. Kleinekathöfer U., Lewerenz M., Mladenov M. Long Range Binding in Alkali-Helium Pairs // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 4717–4720.
8. Kleinekathöfer U., Tang K.T., Toennies J.P., Yiu C.L. Potentials for some rare gas and alkali-helium systems calculated from the surface integral method // *Chem. Phys. Lett.* 1996. V. 249. P. 257–263.
9. Zeller S., Kunitski M., Voigtsberger J., et al. Imaging the He₂ quantum halo state using a free electron laser // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2016. V. 113. P. 14651–14655.
10. Kolganova E.A., Roudnev V. Weakly Bound LiHe₂ Molecules in the Framework of Three-Dimensional Faddeev Equations // *Few-Body Syst.* 2019. V. 60. P. 32.
11. Kolganova E.A., Roudnev V., Cavagnero M. Helium trimer calculations with a public quantum three-body code // *Phys. Atom. Nucl.* 2012. V. 75. P. 1240–1244.
12. Stipanović P., Vranješ Markić L., Zarić D., and Boronat J. Ground-state properties of weakly bound helium-alkali trimers // *J. Chem. Phys.* 2017. V. 146. P. 014305.
13. Di Paola C., Gianturco F.A., Paesani F. et al. Ground states of weakly bound three-atom systems: energies and shapes of ${}^4\text{He}_2\text{X}$ clusters from Monte Carlo calculations // *J. Phys. B*. 2002. V. 35. P. 2643–2660.
14. Aziz R.A., McCourt F.R.W., Wong C.C.K. A new determination of the ground state interatomic potential for He₂ // *Mol. Phys.* 1987. V. 61. P. 1487–1511.
15. Tang K.T., Toennies J.P. and Yiu C.L. Accurate Analytical He-He van der Waals Potential Based on Perturbation Theory // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. P. 1546.
16. Suno H., Hiyama E., Kamimura M. Theoretical Study of Triatomic Systems Involving Helium Atoms // *Few-Body Syst.* 2013. V. 54. P. 1557–1560.
17. Jeziorska M., Cencek C., Patkowski K. et al. Pair potential for helium from symmetry-adapted perturbation theory calculations and from supermolecular data // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 127. P. 124303–124313.
18. Suno H. Structure of the weakly bound triatomic He₂Li and He₂Na molecules // *Phys. Rev. A*. 2017. V. 96. P. 012508.
19. Aziz R.A., Slaman M.J. An examination of ab initio results for the helium potential energy curve // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 94. P. 8047–8053.
20. Yuan J.M., Lin C.D. LETTER TO THE EDITOR: Weakly bound triatomic He₂Li and He₂Na molecules // *J. Phys. B*. 1998. V. 31. P. L637–L645.
21. Stipanović P., Vranješ Markić L. and Boronat J. Elusive structure of helium trimers // *J. Phys. B*. 2016. V. 49. P. 185101.
22. Kolganova E.A., Motovilov A.K., Sandhas W. The ${}^4\text{He}$ trimer as an Efimov system: latest developments // *Few-Body Syst.* 2017. V. 58. P. 35.

Поступила в редакцию
16.12.2019