МЕЗОМОЛЕКУЛЯР УЧ ЖИСМ МАСАЛАСИНИ ЕЧИШДА ФАДДЕЕВ-ХАНН ТЕНГЛАМАЛАРИ

М.НОСИРОВ, Х.ҚОДИРОВА, Д.ДОЛИМОВА

Рассмотрен формализм уравнений Фаддеева-Хана для мезомолекулярной задачи трех тел. Конкретные расчеты проведены для энергии основного состояния мезомолекулярных систем.

This article discusses formalism of Fadeev-Hahn equations for mezomolecular tasks of three bodies. Definite calculations have been made for energy of general condition of mezomolecular system.

Кейинги пайтда μ-катализли термоядро синтези муаммолари туфайли квантомеханик уч жисм масаласи олимларни ўзига жалб қилмоқда. Фаддеевнинг ишларидан сўнг кам сонли системаларни сифат ва сон жиҳатдан тавсифлашда бир мунча ютуқларга эришилди. Унинг ишларида биринчи марта уч жисмли квантомеханик системани тавсифлаш учун математик нуқтаи назардан коррект тенгламалар тузилди. Кейин бу тенгламалар Якубовский томонидан ихтиёрий сондаги системалар учун умумлаштирилди. Кейинроқ эса уч ва ундан ортиқ заррали системалар учун Фаддеев тенгламаларининг турли модификациялари яратилди.

Фаддеев-Якубовский тенгламалари тўлқин функциянинг компонентлари учун шакллантирилганлиги ва физик асимптоталарга эга бўлганлиги учун уч жисмнинг юқори ва қуйи энергияли сочилиш ҳамда боғланган ҳолатларини тавсифлашда Шредингер тенгламасига нисбатан анча самарали ҳисобланади.

Қуйи энергияларда учинчи канал берк бўлганда, Фаддеев тенгламаларини тўлқин функциянинг уч эмас, иккита компоненти учун ёзиш мумкин. Бу усулда ҳосил қилинган Фаддеев тенгламалари Шредингер тенгламасига эквивалент ва Фаддеев-Ханн тенгламалари дейилади.

Илгари Фаддеев-Ханн тенгламалари Кулон ўзаро таъсирга эга бўлган турли кам сонли системаларни тавсифлаш учун ишлатилган. Жумладан, бу тенгламалар асосида (eH) –сочилиш, (pH) – сочилиш каби ситемаларнинг сочилиш ва боғланган ҳолат масалаларини ечишда самарали қўлланилган.

Фаддеев-Ханн тенгламаларини ечиш учун, одатда, каналларнинг кучли боғи методи қўлланилади, бу методда тўлқин функциянинг компонентлари система ичидаги икки жисмнинг хусусий функциялари бўйича қаторга ёйилади. Бу метод Фаддееев тенгламаларини ечишда Шредингер тенгламасига нисбатан самаралироқ эканлиги исботланган. Лекин бунда нишоннинг узлуксиз спектри ҳисобга олинмайди.

Шунинг учун бу ишда Штурм функциялари методидан фойдаланиш тавсия этилади. Бу методда Фаддеев-Ханн тенгламаларини ечиш учун хусусий функциялар ўрнига Штурм функциялари ишлатилади.

Бу ишда учта зарядли зарралар ҳаракатини ўрганишда μ-молекуляр водород изотоплари мисолида Фаддеев-Ханн тенгламаларини ечиш учун Штурм функциялари методидан фойдаланиш кўриб чиқилади. Кейинги пайтларда Фаддеев-Ханн тенгламалари атом ва μ-молекуляр системалардаги эластик сочилиш, қайта тақсимланадиган сочилиш ва боғланган ҳолатларни тавсифлаш учун ишлатилмоқда.

Водородсимон атомларнинг Штурм функцияларинии аниқлаймиз ва уларнинг чизиқли комбинациясини топамиз (R_n). Кейин бу функцияларни μ-молекуляр системалар учун Фаддеев-Ханн тенгламаларини ечишда ишлатамиз.

Маълумки, Штурм функциялари

$$\left(H_0 - V/\nu_m\right)S_m(r) = zS_m(r) \qquad (1)$$

тенгламани ечиш орқали аниқланади ва

$$\left\langle S_n \middle| V \middle| S_m \right\rangle = -\nu_m \delta_{nm} \qquad (2)$$

ортонормаллашган шартларни қаноатлантиради, бу ерда H_o - икки жисм нисбий ҳаракатини тавсиф-

ловчи кинетик энергия оператори, V - икки жисм орасидаги марказий потенциал, $\nu_м$ - Штурм операторининг хусусий қийматлари, z - ихтиёрий энергия.

(1) тенгламанинг

$$V(r) = -1/r \quad (3)$$

потенциал билан ечимини

$$S_m = \oint_m (p) e^{-ap} / p \quad (4)$$

кўринишда қидирамиз, бу ерда

$$p = \mu r, a^2 = z / E_1, \quad (5)$$

μ-келтирилган масса, z=1, E_1=-μ/2.

(3) ва (4) ни (1) га қўямиз ва ν_m

$$\nu_m = 1/am \quad (6)$$

ифодани ҳосил қиламиз. z=E_1 бўлганда $\nu_м$=1/m бўлади. (2) шартларни қаноатлантирувчи Штурм функциялари

$$S_m = \frac{2\mu e^{x/2}}{m! x} \frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}} \left(e^{-x} x^m\right), \quad (7)$$

кўринишга эга бўлади, бу ерда x=2μp.

Энди Штурм функцияларининг чизиқли комбинацияларини оламиз:

$$\left| R_i \right\rangle = \sum_m c_{im} \left| S_m \right\rangle, \quad (8)$$

C_{im} коэффициентларни

$$\left\langle R\, i \middle| R_j \right\rangle = \delta_{ij},$$
$$\left\langle R_i \middle| H_0 + V \middle| R_j \right\rangle = \bar{E}_i \delta_{ij} \quad (9)$$

шартлардан аниқлаймиз. (8) қаторни Шредингер тенгламасига қўямиз ҳамда c_{im} ва E ларни аниқлаш учун

$$\sum_m A_{nm}^{\ i} c_{im} = 0, \quad (10)$$

бир жинсли алгебраик тенгламалар системасини ҳосил қиламиз, бу ерда

$$A_{nm}^{\ i} = (z - \bar{E}_i) S_{nm} + (1 - v_n) \delta_{nm}$$
$$S_{nm} = \langle S_n | S_m \rangle$$

z ни танлаш ҳақида қисқача тўхталиб ўтамиз. Биз танлаган z=E_1 қиймат энг яхшиси бўлмаслиги мумкин. Қандай қилиб z нинг энг яхшисини танлаш мумкин, бошқача айтганда, z нинг қандай қийматида μ-молекуляр системалар учун Фаддеев-Ханн тенгламалари битта Штурм функцияси билан тажриба натижаларини тўла тавсифлайди. (6) дан кўриниб турибдики, m=1 бўлганда

ν_1=1/α (11)

ва (2) ни қаноатлантирувчи Штурм функциялари

$$S_1 = 2\mu\sqrt{a}e^{-a\mu r} \qquad (12)$$

кўринишга эга бўлади. Шунинг учун R_1 функция

$$R_1 = 2\left(-2\mu z\right)^{3/4}\exp\left(-\left(2\mu z\right)^{1/2}r\right), \qquad (13)$$

кўринишга, E_1 энергия эса

$$\overline{E}_1 = -\left(z+\left(-2\mu z\right)^{1/2}\right) \qquad (14)$$

га тенг бўлади. Агар E_1 ни z нинг функцияси сифатида қарасак, бу функция $[-\infty; 0]$ оралиқда аниқланган, z=0 ва z=-2μ нуқталарда иккита нолга эга ва z=-μ/2 нуқтада минимумга эришади.

Учта зарядланган зарралардан иборат квантомеханик системанинг боғланган ҳолатини кўриб чиқамиз. L=M=0 бўлганда, бурчак қисмлар ажратилгандан сўнг, уч заррали Фаддеев-Ханн тенгламаларининг радиал қисми учун

$$\left[E+\frac{1}{2M_i}Dp_i+\frac{1}{2\mu_i}Dr_i-V_i\right]\phi_l^{\,i}\left(p_i,r_i\right)=\sum_{l'}\int dp_i dr_i W_{ll'}^{\,ij}\phi_{l'}^{\,j}\left(p_j r_j\right), \qquad (15)$$

тенгламани ҳосил қиламиз, бу ерда ρ ва **p** – Якоби координаталари, $\hat{\rho},\hat{r}-\rho$ ва **p** векторларнинг бурчак қисмлари, $M_i^{-1}=m_i^{-1}+(m_j+m_k)^{-1}$, $\mu_i^{-1}=m_j^{-1}+m_k^{-1}$, m_i-массалар, E-тўла энергия, $V_i=V_{jk}$, $i\neq j\neq k$, i,j=1,2, k=3,

$$W_{ll'}^{ij}=\left(-1\right)^{l+l'}\left(4\pi\right)^{-2}\left(V_i+V_k\right)\left[\left(2l+1\right)\left(2l\ +1\right)\right]^{1/2}P_l\left(\cos\omega_i\right)P_{l'}\left(\cos\omega_j\right), \qquad (16)$$

l - орбитал момент, **ω**- ρ ва **p** орасидаги бурчак, $P_l(x)$ - Лежандр полиномлари.

Энди Штурм функциялари методидан фойдаланамиз. Φ_l^i функцияларни

$$\phi_l^{\,i}\left(p_i r_i\right)=\frac{1}{p_i}\sum_n\int{}_{nl}^{\,i}\left(p_i\right)R_{nl}^{\,i}\left(r_i\right), \qquad (17)$$

кўринишда тасаввур қиламиз. (17) ни (15) га қўйиб

$$\left[E-\overline{E}_{nl}^{\,i}+\frac{1}{2M_i}D_i\right]\oint{}_{nl}^{\,i}\left(p_i\right)=\sum_{n'l'}\int d^3\overline{r}_i dp_i\left(p_i/p_j\right)R_{nl}^{\,i}\left(r_i\right)W_{ll'}^{ij}R_{n'l'}^{j}\left(r_j\right)\oint{}_{n'l'}^{\,j}\left(p_j\right) \qquad (18)$$

тенламани ҳосил қиламиз. энди боғланган ҳолатлар учун интеграл тенгламаларга ўтамиз:

$$\oint{}_{nl}^{\,i}\left(p_i\right)=2M_i\int d^3r_i d^3p_i\left(p_i p_j\right)G_l\left(\chi_n{}^{i},p_i,p_i\right)\otimes\sum_{n'l'}R_{nl}^{\,i}\left(r_i\right)W_{ll'}^{ij}R_{n'l'}^{j}\left(r_j\right)\oint{}_{n'l'}^{\,j}\left(p_k\right). \qquad (19)$$

Бу ерда G-боғланган ҳолат учун Грин функцияси:

$$G_l\left(\chi,x,y\right)=\sqrt{xy}\begin{cases}I_{l+1/2}\left(\chi x\right)K_{l+1/2}\left(\chi y\right), & x\langle y,\\ I_{l+1/2}\left(\chi y\right)K_{l+1/2}\left(\chi x\right), & x\rangle y,\end{cases} \qquad (20)$$

$I_n(x)$, $K_n(x)$ - модификацияланган Бессел функциялари.

(19) тенгламани бир ўлчовли кўринишга келтириш учун $d^3\mathbf{r}_i d^3\mathbf{p}_i\to d^3\rho_i d^3\rho_j$ алмаштириш бажарамиз. Бу алмаштириш якобиани γ^{-3} га тенг, бу ерда

$$\gamma=1-\alpha_i\alpha_j,\quad \alpha_i=m_i/(m_i+m_3)$$

У ҳолда

$$\oint_{nl}^{i}(p_i) = M_i \int dp_i dp_j G_l(\chi_n^{\ i}, p_{\ i}, p_i) \sum_{n'l'} U_{nln'l'}^{ij}(p_i, p_j) \oint_{n'l'}^{j}(p_j), \quad (21)$$

Бу ерда

$$U_{nln'l'}^{ij}(p_i, p_j) = \gamma^{-3} p_i p_j \int_0^{\pi} R_{\ nl}^{\ i}(r_i) W_{ll'}^{ij} R_{n'l'}^{j}(r_j) \sin\chi d\chi, \quad (22)$$

χ- ρ_1 ва ρ_2 векторлар орасидаги бурчак.

Энергетик сатҳларни аниқлаш учун (21)даги биринчи интегрални Гаусс йиғиндиларига алмаштирамиз:

$$f_{nl}^{\ i}(\rho_i) = M_i \sum_{\alpha} \omega_\alpha G_l(\varkappa_n^{\ i}, \rho_i, \rho_\alpha) z_{nl\alpha}^{i} \quad (23)$$

бу ерда ρ_α - ва ω_α - лар Гаусс тугунлари ва сонлари.

$$z_{nla}^{i} = \sum_{n'l'} \int dp U_{nln'l'}^{ij}(p_a, p) \oint_{n'l'}(p) \quad (24)$$

(23) ва (24) дан

$$z_{nla}^{i} = M_j \sum \omega_{a'} \int dp U_{nln'l'}^{ij}(p_a, p) G_{l'}(\chi_{n'}^{\ j}, p, p_{a'}) z_{n'l'a'}^{j}. \quad (25)$$

ни оламиз ва

$$A_{nlan'l'a'}^{ij} = M_j \omega_{a'} \int dp U_{nln'l'}^{ij}(p_a, p) G_{l'}(\chi_{n'}^{\ j}, p, p_{a'}). \quad (26)$$

деб белгилаймиз. У ҳолда

$$z_{nla}^{i} = \sum_{n''l''a''} A_{nlan'l'a'}^{ij} z_{n'l'a'}^{j}. \quad (27)$$

Аввал айтиб ўтганимиздек, i,j=1,2. Шунинг учун бу тенгламалардан иккинчисини биринчисига қўйиб, бир жинсли алгебраик тенгламалар системасини ҳосил қиламиз. μ-молекуляр системаларнинг энергетик сатҳлари

$$\det\left(\delta_{nn'}, \delta_{ll'}, \delta_{aa'} - \sum_{n''l''a''} A_{nlan''l''a''}^{12} A_{n''l''a''n'l'a'}^{24}\right) = 0 \quad (28)$$

шарт орқали аниқланади.

Ҳисоблашларни бажаришда (17) қаторда учта хад билан кифояландик ҳамда z=-μ/2 бўлганда, μ-молекуляр системалар энергетик сатҳларининг Штурм функциялари сонига боғлиқлигини ўргандик. Ҳисоблаш натижалари 1-жадвалда келтирилган. Уйғонган ҳолатлар юлдузча билан белгиланган. Энергия оғир ядронинг асосий ҳолатидан бошлаб ҳисобланади. Таққослаш учун жадвалда вариацион ҳисоб натижалари ҳам келтирилган. Жадвалдан кўриниб турибдики, бизнинг методда яқинлашиш жуда яхши ва вариацион ҳисобга нисбатан ҳатолик бор йўғи 1 % ни ташкил этади.

1-жадвал. μ-молекуляр системалар энергетик сатҳларининг Штурм функциялари сонига боғлиқлиги (z=-μ/2)

Система	M			[18] иш натижалари
	2	3	4	
ddμ	-308,49	-320,38	-321,29	-325,073
dtμ	-303,63	-317,46	-317,95	-319,139
ttμ	-330,78	-364,66	-365,12	-362,909
ddμ·			-35,67	-35,844
dtμ·			-31,94	-34,834
ttμ·			-79,05	-83,771

z=-0,4467μ бўлганда ddμ молекуласининг асосий ҳолат энергияси тажриба натижаларига энг яқин бўлади. Шунинг учун биз z нинг шу қийматида битта Штурм функцияси билан қолган барча μ-молекуляр системаларнинг асосий ҳолат энергияларини ҳисобладик. Ҳисоблаш натижалари 2-жадвалда келтирилган. Кўриниб турибдики, бу ерда ҳам хатолик 1 % дан ошмайди.

2-жадвал. μ-молекуляр системаларнинг асосий ҳолат энергиялари

№	Система	E, эВ
1	ddμ	-325,019
2	dtμ	-320,101
3	ttμ	-365,251

Шундай қилиб, бу ишда Фаддеев-Ханн тенгламалари асосида учта зарядланган заррали системалар тадқиқ қилинди. Уч жисм масаласини ечиш учун водородсимон атомларнинг Штурм функциялари қурилди. μ-моекуляр водород атоми изотоплари мисолида Фаддеев-Ханн тенгламалари учта зарядланган зарралар системасининг боғланган ҳолатини тавсифлаш учун ишлатилди. μ-молекуляр системаларнинг тўлқин функциялари учун ярим аналитик ифодалар олинди.

Адабиётлар:

1. Зубарев А.Л. Вариационный принцип Швингера в нерелятивистской квантовой механике.- М.: Энергоатомиздат, 1981
2. Зубарев А.Л.,.Насиров М.З. // ЯФ, т.53, с.941, 1991.
3. Иргазиев Б.Ф., Насиров М.З., Рахматов Н. // УФЖ, с.538, 1991.
4. Зайнабидинов С., Насиров М., Йулчиев Ш. //ДАН РУз, №6, с.14, 2002.

Андижон давлат университети,
2012 йил 10 октябрда қабул қилинган
(Тақризчи: проф. И.Н.Каримов)