

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

С. И. Вилицкий, Л. И. Пономарев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Последовательно излагается эффективный метод решения задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Суть метода состоит в разложении волновой функции системы трех частиц по адиабатическому базису и сведения исходного уравнения Шредингера к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Сходимость адиабатического разложения обеспечивается не только малостью отношения масс частиц, но также малостью недиагональных матричных элементов от оператора кинетической энергии одноименно заряженных частиц. Возможности метода продемонстрированы на примере вычисления энергии и волновых функций всех состояний μ -мезомолекул изотопов водорода и системы $e^-e^-e^+$. Метод одинаково пригоден для расчетов как основного, так и возбужденных состояний системы трех частиц. Это особенно важно при вычислении энергии слабосвязанных состояний мезомолекул $dd\mu$ и $d\mu$, знание которых необходимо для описания процессов мюонного катализа ядерных реакций синтеза.

A consistent exposition is given for an effective method of solving the three-body problem with Coulomb interaction. The method consists in the expansion of the wave function of a three-body system over an adiabatic basis and reduction of the Schrödinger equation to a system of ordinary differential equations. Convergence of the adiabatic expansion is provided by the smallness of the particle-mass ration and also by the smallness of nondiagonal matrix elements of the kinetic-energy operator of particles of like charge. Applicability of the method is exemplified by the calculation of the energy levels and wave functions of μ -mesic molecules of the hydrogen isotopes and of the $e^-e^-e^+$ -system. The method is equally applicable for calculations of the ground and excited states of a three-particle system. This is especially important in calculating the energy levels of weakly bound states of mesomolecules $dd\mu$ and $d\mu$ which should be necessarily known to describe the muonic catalysis of nuclear fusion reactions.

ВВЕДЕНИЕ

Задача трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, относится к числу классических задач квантовой механики. Многие результаты, полученные при ее решении, можно использовать при расчете систем трех частиц с другими типами взаимодействия, а также более сложных многочастичных систем. В последние годы эта задача привлекает внимание в связи с новейшими исследованиями проблемы мюонного катализа ядерных реакций синтеза [1—3].

В атомной физике простейшими трехчастичными системами являются атом гелия, отрицательный ион водорода H^- , система $e^-e^-e^+$,

молекулярные ионы водорода H_2^+ , HD^+ и т. д. Энергии и волновые функции основного состояния этих систем с высокой точностью вычислены вариационными методами [4—7]. Возбужденные состояния молекулярных ионов достаточно хорошо описываются в приближении Борна — Оппенгеймера [8—10] благодаря наличию параметра малости $(m/M)^{1/4}$, где $m/M \approx 10^{-3}$ — отношение приведенной массы электрона m к приведенной массе ядер M .

Таблица 1. Энергия связи $-\epsilon_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) мезомолекул $pp\mu$, $pd\mu$ и $p'd\mu$ *

$pp\mu$		$pd\mu$		$p'd\mu$		Методы	
(00)	(10)	(00)	(10)	(00)	(10)		
249	—	—	—	—	—	Вариационные расчеты [7, 15—18] Kolos e. a. (1960) Flugge, Schröder (1961) Fröman, Kinsey (1961) Schröder (1963) Halpern (1964) Wessel, Philipson (1964) Frost e. a. (1964) Scherr, Machacek (1965) Kabir (1965) Carter (1966) Carter (1968) Delves, Kolotas (1968) Kolos (1968)	
211	—	—	—	—	—		
230	—	193	—	—	—		
237	—	204	—	195	—		
—	107,23	—	—	—	—		
254,3	—	—	—	—	—		
—	—	211	—	—	—		
—	106,8	—	—	—	—		
254,4	—	—	—	—	—		
252,2	—	221,2	—	212,8	—		
253	—	221,2	—	—	—		
253,14	—	—	—	—	—		
—	—	220,0	—	—	—		
241	93	—	—	—	—		Адиабатические расчеты [1, 11—14] Cohen e. a. (1958) Marschall, Schmidt (1958) Зельдович, Герштейн (1958) Беляев и др. (1959) Cohen e. a. (1960) Зельдович, Герштейн (1960) Mizuno (1961) Narumi, Matsuo (1961) Joachain, Wantiez (1962) Patterson, Becker (1967) Kolos (1970) Пономарев и др. (1973)
224	75	250	—	—	—		
252	106	—	—	—	—		
—	—	220	90	213	98		
241	70	214	90	—	—		
—	—	223	95	211	90		
241	43	—	—	—	—		
213	43	223	—	—	—		
244	—	—	—	—	—		
248,6	101,5	—	—	—	—		
200	—	195	—	—	—		
248	102	214	89,7	206	91,1		

* Таблицы 1—3 составлены по данным обзора [2], в котором численные значения ϵ_{Jv} , полученные в оригинальных работах, пересчитаны к значению $2Ry = 27,2107$ эВ при $m_\mu = 206,769 m_e$.

Для μ -мезомолекул изотопов водорода $pp\mu$, $dd\mu$, $dt\mu$ и т. д. * аналогичное отношение $m/M \approx 0,1$ (масса μ^- -мезона $m_\mu = 206,769 m_e$) и для их описания приближение Борна — Оппенгеймера уже неприменимо. С конца 50-х до начала 70-х годов были выполнены расчеты мезомолекулярных систем в рамках адиабатического [11—14] и вариационного [7, 15—18] подходов. Полный список этих работ до 1973 г. и найденные в них значения энергии связанных состояний μ -мезомолекул изотопов водорода приведены в обзоре [2], а также в табл. 1—3.

Таблица 2. Энергия связи — ϵ_{Jv} (эВ) состояния (Jv) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$

(Jv)	(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	Метод
$dd\mu$	318	—	—	—	—	Вариационные расчеты [7, 15—18] Kolos e. a. (1960) Fröman, Kinsey (1961) Schröder (1963) Halpern (1964) Scherr, Machaček (1965) Carter (1966, 1968)
	306	—	—	—	—	
	309	—	—	—	—	
	—	—	226,55	—	—	
	—	—	226,3	—	—	
	324,2	32,7	—	—	—	
$dd\mu$	322	181	223	—	82	Адиабатические расчеты [1, 11—14] Cohen e. a. (1958, 1960) Marschall, Schmidt (1958) Беляев и др. (1959) Зельдович, Герштейн (1960) Narumi, Matsuo (1961) Mizuno (1961) Joachain, Wantiez (1962) Patterson, Becker (1967) Kolos (1970) Пономарев и др. (1973)
	300	—	220	—	25	
	330	40	226	7 (?)	88	
	281	177	190	—	43	
	338	9	207	—	59	
	328	—	—	—	—	
	323,4	34,1	224,6	—	—	
	316	25	—	—	—	
	323	32,9	224	0,7	83,6	
	$dt\mu$	303	—	—	—	
317		30,4	—	—	—	
318,1		32,9	—	—	—	
$dt\mu$	319	32	232	—	102	Адиабатические расчеты [1, 11, 13, 14] Беляев и др. (1959) Зельдович, Герштейн (1960) Kolos (1970) Пономарев и др. (1973)
	323	36	234	—	103	
	312	23	—	—	—	
	317	31,7	230	—	99,3	

* Следуя традиции [1], мы называем мезомолекулами $pp\mu$, $dd\mu$, $dt\mu$ и т. д. мезомолекулярные ионы $(pp\mu)^+$, $(dd\mu)^+$, $(dt\mu)^+$ и т. д.

Таблица 3. Энергия связи $-\epsilon_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) мезомолекулы $t\bar{t}\mu$

(Jv)						Метод
(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	(30)	
348	—	—	—	—	—	Вариационные расчеты [15, 16, 18] Schröder (1963) Halpern (1964) Scherr, Machacek (1965) Carter (1966)
—	—	288,72	—	—	—	
—	—	288,8	—	—	—	
361,2	75	—	—	—	—	
367	86	288	45	170	55	Адиабатические расчеты [1, 11, 13, 14] Беляев и др. (1959) Зельдович, Герштейн (1960) Patterson, Becker (1967) Пономарев и др. (1973)
361,8	82,4	287,7	43,7	—	—	
361	81,4	288	43,1	171	36,7	

Излагаемый в данном обзоре метод решения задачи трех тел — адиабатическое представление в задаче трех тел — является последовательной реализацией идеи Борна [19], высказанной им в 1951 г. *. В отличие от метода Борна — Оппенгеймера [8] он пригоден при любых значениях отношения m/M . Кроме того, в отличие от вариационных методов он одинаково хорошо приспособлен для описания как основного, так и возбужденных состояний системы трех частиц.

Суть метода состоит в разложении волновой функции системы трех частиц по адиабатическому базису, т. е. по полному набору решений задачи двух центров квантовой механики, которые описывают движение электрона (мюона) в поле двух неподвижных ядер. Такой базис естественным образом учитывает симметрию задачи и все потенциальное взаимодействие частиц. После отделения угловых переменных, описывающих относительное движение ядер, и усреднения по координатам электрона (мюона) решение исходной задачи трех тел сводится к решению задачи Штурма — Лиувилля для бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, связь между которыми осуществляется лишь недиагональными матричными элементами от оператора кинетической энергии относительного движения ядер, которые малы по сравнению с потенциальной частью

* Во многих работах метод Борна [19] по инерции продолжают называть методом Борна — Оппенгеймера. В англоязычной литературе применительно к задаче рассеяния используют также термины *молекулярное представление* [20] и *метод возмущенных стационарных состояний ВСС* (perturbed stationary states — PSS) [21], которые, на наш взгляд, не отражают существо и особенности данного метода.

взаимодействия. Именно эта малость, а не наличие формального параметра разложения m/M обеспечивает достаточно быструю сходимость адиабатического разложения даже для таких систем, как e^-e^+ , где $m/M = 1$.

Реализация метода осуществляется в три этапа, каждый из которых имеет свою специфику и может быть рассмотрен независимо: нахождение собственных значений и волновых функций задачи двух центров квантовой механики;

вычисление эффективных потенциалов задачи трех тел в адиабатическом представлении, т. е. матричных элементов гамильтониана системы трех частиц по волновым функциям задачи двух центров; разработка численных методов решения задач на собственные значения для систем большого числа дифференциальных уравнений.

Перечисленные задачи в настоящее время решены, что позволило с заданной точностью вычислить энергии и волновые функции всех 22 состояний шести мезомолекул изотопов водорода: $pp\mu$, $pd\mu$, $p\mu\mu$, $dd\mu$, $dt\mu$ и $t\mu\mu$, а также системы e^-e^+ [22, 23]. При этом были найдены неизвестные ранее возбужденные вращательно-колебательные слабосвязанные состояния Jv мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ с квантовыми числами ($J = v = 1$), существование которых приводит к большой скорости резонансного образования $dt\mu$ -молекул [24]. Именно этот факт, с одной стороны, позволил возвратиться к идее μ -катализа, а с другой, потребовал разработки прецизионных методов вычисления энергии связи системы трех частиц. Необходимая точность вычислений определяется физикой исследуемых явлений. Для того чтобы предсказать положение резонанса в зависимости от температуры с точностью $\sim 50^\circ$, надо вычислить энергию уровня ($J = v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ с абсолютной точностью $\sim 0,005$ эВ, т. е. решить задачу трех тел с относительной точностью $\sim 10^{-6} - 10^{-5}$. (Напомним, что мезоатомная единица энергии $\epsilon_\mu = m_\mu 2 \text{ Ry} = 5626,51$ эВ [22], а глубина эффективных потенциалов ~ 600 эВ [1].)

В данном обзоре мы изложим лишь основные результаты, полученные при реализации намеченной программы, и остановимся на наиболее существенных ее пунктах, необходимых для понимания как схемы в целом, так и соотношения ее частей.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Уравнение Шредингера системы трех частиц (a , b , c) с зарядами и массами (eZ_a, M_a) , (eZ_b, M_b) и $(-e, M_c)$ имеет вид:

$$(H_t - E_t) \Psi_t(\mathbf{R}_a, \mathbf{R}_b, \mathbf{R}_c) = 0, \quad (1)$$

где гамильтониан H_t в единицах $\hbar = e = 1$ равен:

$$\begin{aligned} H_t = & -(2M_a)^{-1} \Delta_{\mathbf{R}_a} - (2M_b)^{-1} \Delta_{\mathbf{R}_b} - \\ & - (2M_c)^{-1} \Delta_{\mathbf{R}_c} - Z_a / |\mathbf{R}_c - \mathbf{R}_a| - Z_b / |\mathbf{R}_c - \mathbf{R}_b| + \\ & + Z_a Z_b / |\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a|; \end{aligned} \quad (2)$$

E_t и $\Psi_t(\mathbf{R}_a, \mathbf{R}_b, \mathbf{R}_c)$ — энергия и волновая функция системы. После введения координат (рис. 1)

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}_t &= (M_a \mathbf{R}_a + M_b \mathbf{R}_b + M_c \mathbf{R}_c) / M_t; \quad M_t = M_a + M_b + M_c; \\ \mathbf{R} &= \mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a; \quad \mathbf{r}_0 = \mathbf{R}_c - (\mathbf{R}_a + \mathbf{R}_b) / 2 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

выражение для гамильтониана H_t можно представить в виде суммы «кинетической» T и «потенциальной» W частей [19, 26]:

$$\left. \begin{aligned} H_t &= -(2M_t)^{-1} \Delta_{\mathbf{R}_t} + H; \quad H = T_0 + W_0; \\ T_0 &= -(2M_0)^{-1} (\nabla_{\mathbf{R}} + (\kappa/2) \nabla_{\mathbf{r}_0})^2; \quad M_0^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}; \\ W_0 &= h_0 + Z_a Z_b / R; \quad \kappa = (M_b - M_a) / (M_b + M_a); \\ h_0 &= -(2m_0)^{-1} \Delta_{\mathbf{r}_0} - Z_a / r_a - Z_b / r_b; \quad m_0^{-1} = M_c^{-1} + (M_a + M_b)^{-1}; \\ r_a &= |\mathbf{r}_0 - \mathbf{R} / 2|; \quad r_b = |\mathbf{r}_0 + \mathbf{R} / 2|; \quad R = |\mathbf{R}|. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

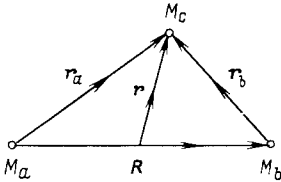


Рис. 1. Относительные координаты системы трех частиц a, b и c

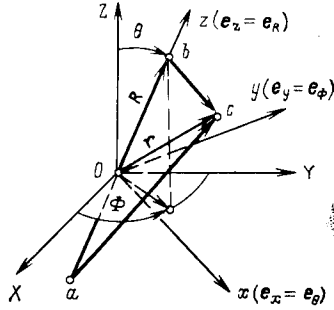


Рис. 2. Лабораторная $(XYZO)$ и вращающаяся $(xyzO)$ системы координат

Здесь гамильтониан h_0 описывает движение частицы c в поле кулоновских центров Z_a и Z_b , удаленных друг от друга на расстояние R , а T_0 представляет кинетическую энергию относительного движения частиц a и b .

Иногда используют также разбиение [23, 27]:

$$\left. \begin{aligned} H &= T_* + W_*; \quad T_* = -(2M_0)^{-1} [(\nabla_{\mathbf{R}} + (\kappa/2) \nabla_{\mathbf{r}_0})^2 - (\kappa/2)^2 \Delta_{\mathbf{r}_0}]; \\ W_* &= h_* + Z_a Z_b / R; \quad m_*^{-1} = m_0^{-1} + (2M_0)^{-1} (\kappa/2)^2; \\ h_* &= -(2m_*)^{-1} \Delta_{\mathbf{r}_0} - Z_a / r_a - Z_b / r_b. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

После отделения движения центра инерции трех частиц

$$\Psi_t(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}, \mathbf{R}_t) = \exp(i\mathbf{P}_t \mathbf{R}_t) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}) \quad (6)$$

уравнение (1) приобретает вид:

$$(H - E) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}) = 0, \quad (7)$$

где $E = E_t - \mathbf{P}_t^2/(2M_t)$ — энергия системы трех частиц; \mathbf{P}_t — импульс центра инерции системы. В дальнейшем ограничимся рассмотрением относительного движения трех частиц в системе центра инерции, т.е. положим $\mathbf{P}_t = 0$, $E = E_t$, кроме того, при $Z_a = Z_b$ положим $M_a \geq M_b$.

Движение частицы c естественно описывать не в координатах \mathbf{r}_0 относительно системы координат $(XYZO)$, в которой задан вектор \mathbf{R} , а в координатах \mathbf{r} (рис. 2) относительно системы координат $(xyzO)$, вращающейся вместе с вектором \mathbf{R} , поскольку в этом случае потенциальная энергия частицы c не зависит от ориентации вектора \mathbf{R} [28]. Система координат $(xyzO)$ с началом в центре отрезка R построена на сферических ортах вектора $\mathbf{R} = \{R\Theta\Phi\}$, причем

$$\mathbf{e}_x = \mathbf{e}_\Theta; \quad \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_\Phi; \quad \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_R, \quad (8)$$

а координаты $\mathbf{r} = \{xyz\}$ частицы c в этой системе связаны с координатами $\mathbf{r}_0 = \{x_0 y_0 z_0\}$ соотношением [26]:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \Phi & \cos \Theta \sin \Phi & -\sin \Theta \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ \sin \Theta \cos \Phi & \sin \Theta \sin \Phi & \cos \Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

В координатах (\mathbf{r}, \mathbf{R}) нерелятивистская волновая функция системы трех частиц $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ связана с волновой функцией уравнения (7) соотношением

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}). \quad (10)$$

Вместо разбиения (4) гамильтониана H в дальнейшем изложении будем использовать разбиение [23]:

$$\left. \begin{aligned} H &= T_a + W_a; \quad T_a = -(2M_0)^{-1} \{(\nabla_{\mathbf{R}} + (\kappa/2) \nabla_{\mathbf{r}_0})^2 - \\ &\quad - [(1 + \kappa)/2]^2 \Delta_{\mathbf{r}_0}\}; \\ W_a &= h_a + Z_a Z_b / R; \quad h_a = -(2m_a)^{-1} \Delta_{\mathbf{r}_0} - Z_a / r_a - Z_b / r_b; \\ m_a^{-1} &= M_c^{-1} + M_a^{-1} = m_0^{-1} + (2M_0)^{-1} [(1 + \kappa)/2]^2 = m_*^{-1} + \\ &\quad + (1 + 2\kappa)/(8M_0) \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

и систему единиц $e = \hbar = m_a = 1$. Разбиение (11) удобно тем, что масса m_a в гамильтониане h_a совпадает с массой изолированного атома (a, c) , энергию $E_{na} = -Z_a^2/(2\hbar^2)$ которого естественно принять за начало отсчета энергии ϵ_n системы трех частиц [23, 29—31]:

$$\epsilon_n = E - E_{na}, \quad (12)$$

поскольку в этом случае значение $|\epsilon_n|$ совпадает с энергией диссоциации системы на атом (a, c) и ядро b .

Уравнение Шредингера (7) для функции $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ принимает вид ($e = \hbar = m_a = 1$) [26, 32]:

$$(H - E) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0, \quad (13)$$

где

$$H = T_a + W_a; \quad (14)$$

$$T_a = (2M)^{-1} [\mathcal{P}_R^2 + (\mathbf{J}^2 + \mathcal{L}^2 - 2\mathcal{L}\mathbf{J}) R^{-2} - [(1 + \kappa)/2]^2 \mathbf{p}^2] \quad (15)$$

— оператор кинетической энергии относительного движения частиц a и b ; $M = M_0/m_a$ — их приведенная масса;

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_R^2 = & \left[-i\mathbf{e}_R \left(\nabla'_R + \frac{\kappa}{2} \nabla_R \right) \right]^2 = - \left\{ \frac{\partial'^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial'}{\partial R} + \frac{\kappa}{2} \left[\frac{\partial'}{\partial R} (ip_z) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (ip_z) \frac{\partial'}{\partial R} + \frac{2}{R} (ip_z) \right] - \left(\frac{\kappa}{2} \right)^2 \mathbf{p}^2 \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

— квадрат радиального импульса частиц a и b ; $\mathbf{p} = -i\nabla_{\mathbf{r}}$ — импульс частицы c ;

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{l})^2 = & - \left[\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} + \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} - il_z \operatorname{ctg} \Theta \right)^2 \right] + l_z^2 \end{aligned} \quad (17)$$

— квадрат полного орбитального момента системы трех частиц; $\mathbf{L} = -i[\mathbf{R} \times \nabla_{\mathbf{R}}]$ — орбитальный момент относительного движения частиц a и b ; $\mathbf{R} = R\mathbf{e}_R$;

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{R}} = & \mathbf{e}_R \frac{\partial'}{\partial R} + \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{R} \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} - il_y \right) + \\ & + \mathbf{e}_\Phi \frac{1}{R} \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} + il_x - il_z \operatorname{ctg} \Theta \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Штрих означает, что дифференцирование по \mathbf{R} осуществляется при постоянном \mathbf{r} , который задан в системе $(xyz0)$; $\mathbf{l} = -i[\mathbf{r} \times \nabla_{\mathbf{r}}]$ — орбитальный момент частицы c ;

$$\mathcal{L}^2 = \left\{ 1 - \frac{\kappa}{2} [\mathbf{R} \times \mathbf{p}] \right\}^2 = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_+ \mathcal{L}_- + \mathcal{L}_- \mathcal{L}_+) + l_z^2 \quad (19)$$

— квадрат орбитального момента частицы c относительно центра масс частиц a и b ; компоненты \mathcal{L}_\pm определены соотношением

$$\mathcal{L}_\pm = \mathbf{e}_\pm \mathcal{L} = l_\pm - \frac{\kappa}{2} R p_\pm; \quad \mathbf{e}_\pm = \mathbf{e}_\Theta \pm i\mathbf{e}_\Phi. \quad (20)$$

Оператор кориолисова взаимодействия имеет вид:

$$2\mathcal{L}\mathbf{J} = \mathcal{L}_+ J_- + \mathcal{L}_- J_+ + 2l_z^2, \quad (21)$$

где компоненты J_\pm определены соотношениями:

$$J_\pm = \mathbf{e}_\pm \mathbf{J} = \pm \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} + \operatorname{ctg} \Theta l_z; \quad (22)$$

$$W_a = h + Z_a Z_b / R - \text{«потенциальная» энергия системы трех частиц;}$$

$$h = \mathbf{p}^2 / 2 - Z_a / r_a - Z_b / r_b \tag{23}$$

— гамильтониан задачи двух центров.

В дальнейшем, если это не оговорено особо, будем считать, что вектор \mathbf{r} задан в вытянутой сфероидальной системе координат $\{\xi\eta\varphi\}$ с началом в центре отрезка R и фокусами на его концах [33]:

$$\xi = (r_a + r_b) / R; \eta = (r_a - r_b) / R; \varphi = \text{arctg } x / y.$$

В этом случае компоненты векторов \mathbf{r} , \mathbf{p} , \mathbf{l} и производная $\partial' / \partial R$ имеют вид [26]:

$$z = \frac{R}{2} \xi \eta; r_{\pm} = \pm ix - y = \pm i \frac{R}{2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \exp(\pm i\varphi); \tag{24a}$$

$$\left. \begin{aligned} p_z &= -i \frac{2}{R(\xi^2 - \eta^2)} \left[\eta(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \xi(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right]; \\ p_{\pm} &= \pm i p_x - p_y = \exp(\pm i\varphi) \left\{ \frac{2}{R} \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \times \right. \\ &\times \left. \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + i \frac{1}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}; \end{aligned} \right\} \tag{24б}$$

$$\begin{aligned} l_z &= -i \frac{\partial}{\partial \varphi}; l_{\pm} = l_x \pm il_y = \\ &= \exp(\pm i\varphi) \left\{ \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \right. \\ &\left. + i \frac{\xi \eta}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}, \end{aligned} \tag{24в}$$

$$\frac{\partial'}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{R(\xi^2 - \eta^2)} \left[\xi(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right]. \tag{24г}$$

2. АДИАБАТИЧЕСКИЙ БАЗИС

Адиабатический базис определяется как полный набор решений задачи двух центров квантовой механики [33] с гамильтонианом (23):

$$h\phi_j(\mathbf{r}; R) = E_j(R)\phi_j(\mathbf{r}; R); \tag{25a}$$

$$h\phi_c(\mathbf{r}; R) = (k^2/2)\phi_c(\mathbf{r}; R). \tag{25б}$$

Волновые функции $\phi_j(\mathbf{r}; R)$ и $\phi_c(\mathbf{r}; R)$ представляют движение частицы c в поле закрепленных кулоновских центров с зарядами Z_a и Z_b , удаленных друг от друга на расстояние R^* . Дискретному спектру задачи двух центров соответствуют функции $\phi_j(\mathbf{r}; R)$ и термы $E_j(R) < 0$, сплошному спектру — решения $\phi_c(\mathbf{r}; R) = \phi_s(\mathbf{r}; k, R)$

* В координатах $\{\xi\eta\varphi\}$ заряды Z_a и Z_b соответственно помещены в точки $(\xi = 1, \eta = -1)$ и $(\xi = 1, \eta = 1)$.

с импульсом k и энергией $E_c = k^2/2 > 0$. Они нормированы условиями

$$\int d\mathbf{r} \phi_j^*(\mathbf{r}; R) \phi_{j'}(\mathbf{r}; R) = \delta_{jj'}; \quad (26a)$$

$$\left. \begin{aligned} \int d\mathbf{r} \phi_c^*(\mathbf{r}; R) \phi_{c'}(\mathbf{r}; R) &= \delta_{ss'} \delta(k - k'); \\ \int d\mathbf{r} &= (R/2)^3 \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi (\xi^2 - \eta^2), \end{aligned} \right\} \quad (26b)$$

где j и $c \equiv \{ks\}$ — наборы квантовых чисел, характеризующие состояния $|j\rangle$ и $|c\rangle$.

Переменные в уравнениях (25) разделяются, а их решения можно представить в виде произведений:

$$\left. \begin{aligned} \phi_j(\mathbf{r}; R) &= \varphi_j(\xi, \eta; R) (2\pi)^{-1/2} \left\{ \begin{aligned} &(-)^m \exp(im\varphi); \\ &\exp(-im\varphi); \end{aligned} \right\} \\ \varphi_j(\xi, \eta; R) &= N_{n_1 q m}(R) \Pi_{m n_1}(\xi; R) \Xi_{m q}(\eta; R); \end{aligned} \right\} \quad (27a)$$

$$\left. \begin{aligned} \phi_c(\mathbf{r}; R) &= \varphi_s(\xi, \eta; k, R) (2\pi)^{-1/2} \left\{ \begin{aligned} &(-)^m \exp(im\varphi); \\ &\exp(-im\varphi); \end{aligned} \right\} \\ \varphi_s(\xi, \eta; k, R) &= N_{q m}(k, R) \Pi_m(\xi; k, R) \Xi_{m q}(\eta; k, R), \end{aligned} \right\} \quad (27b)$$

где функции $\varphi_j(\xi, \eta; R) = \varphi_{n_1 q m}(\xi, \eta; R)$ и $\varphi_s(\xi, \eta; k, R) = \varphi_{q m}(\xi, \eta; k, R)$ являются решениями уравнений:

$$h_m \varphi_j(\xi, \eta; R) = E_j(R) \varphi_j(\xi, \eta; R); \quad (28a)$$

$$h_m \varphi_s(\xi, \eta; k, R) = (k^2/2) \varphi_s(\xi, \eta; k, R) \quad (28b)$$

с гамильтонианом

$$\left. \begin{aligned} h_m &= -\frac{2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} - \right. \\ &\left. - \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} m^2 \right\} - \frac{2}{R^2} \frac{a\xi + b\eta}{\xi^2 - \eta^2}; \\ a &= R(Z_a + Z_b); \quad b = R(Z_b - Z_a). \end{aligned} \right\} \quad (28b)$$

Они нормируются условиями

$$\int d\tau \varphi_{n_1 q m}(\xi, \eta; R) \varphi_{n_1' q' m}(\xi, \eta; R) = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{q q'}; \quad (29a)$$

$$\left. \begin{aligned} \int d\tau \varphi_{q m}(\xi, \eta; k, R) \varphi_{q' m}(\xi, \eta; k, R) &= \delta_{q q'} \delta(k - k'); \\ \int d\tau &= (R/2)^3 \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \end{aligned} \right\} \quad (29b)$$

и нумеруются соответственно наборами $j = \{n_1 q m\}$ и $s = \{q m\}$ сферических квантовых чисел.

Функции $\Pi_{mn_1}(\xi; R)$ и $\Xi_{mq}(\eta; R)$, соответствующие дискретному спектру задачи двух центров, являются решениями системы уравнений:

$$\left\{ \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} + \left[-p^2 (\xi^2 - 1) + a\xi + \lambda - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \right\} \Pi_{mn_1}(\xi; R) = 0; \tag{30a}$$

$$\left\{ \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} + \left[-p^2 (1 - \eta^2) + b\eta - \lambda - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \right\} \Xi_{mq}(\eta; R) = 0, \tag{30b}$$

$$1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1$$

с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow 1} (\xi^2 - 1)^{-m/2} \Pi_{mn_1}(\xi; R) &= 1; \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} \Pi_{mn_1}(\xi; R) = 0; \\ \lim_{\eta \rightarrow 1} (1 - \eta^2)^{-m/2} \Xi_{mq}(\eta; R) &= 1, \end{aligned} \right\} \tag{31}$$

которые вместе с соотношениями (27a) и (29a) определяют нормировку $N_{n_1qm}(R)$ решений (28a).

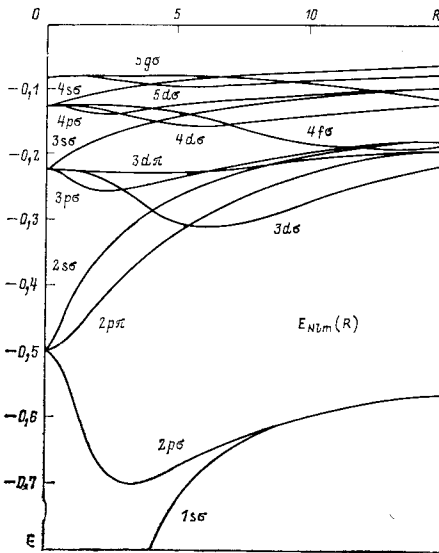
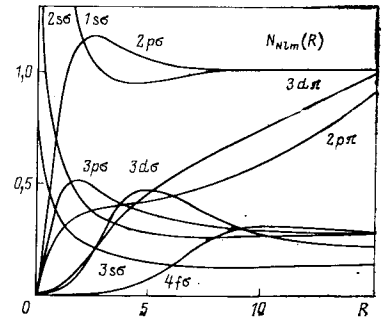


Рис. 3. Термы $E_{Nlm}(R)$ задачи двух центров. Здесь и далее $Z_a = Z_b = 1$

Рис. 4. Нормировки $N_j(R) = N_{Nlm}(R)$ волновых функций (27) задачи двух центров



Собственные значения

$$\left. \begin{aligned} p &= p_j(R) \equiv p_{n_1qm}(R) = (R/2) [-2E_{n_1qm}(R)]^{1/2}; \\ \lambda &= \lambda_j(R) \equiv \lambda_{n_1qm}(R) \end{aligned} \right\} \tag{32}$$

находятся при совместном решении системы уравнений (30), (31). Алгоритмы вычисления $p_j(R)$ и $\lambda_j(R)$, а также алгоритм вычисления функций $\Pi_{mn_1}(\xi; R)$ и $\Xi_{mq}(\eta; R)$ вместе с графиками термов $E_j(R)$

и констант разделения $\lambda_j(R)$ приведены в работах [34—37] и монографии [33]. Графики функций $E_j(R)$ и $N_j(R)$ для $Z_a = Z_b = 1$ представлены на рис. 3 и 4.

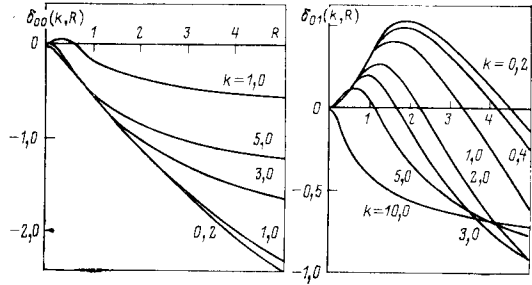
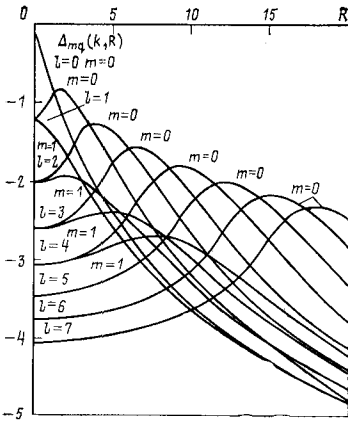


Рис. 5. Фазы $\Delta_{mq}(k, R)$ двухцентровых функций (33) при $k = 1$

Рис. 6. Фазы $\delta_{mq}(k, R) = \Delta_{mq}(k, R) - \sigma_{q+m}(k)$

Функции $\Pi_m(\xi; k, R)$ и $\Xi_{mq}(\eta; k, R)$, соответствующие сплошному спектру задачи двух центров, удовлетворяют уравнениям (30) при замене $p^2 \rightarrow -c^2$, где $c = kR/2$, с граничными условиями

$$\Pi_m(\xi; k, R) = (c\xi)^{-1} \sin \left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{q+m}{2} \pi + \Delta_{mq}(k, R) \right) + O[(c\xi)^{-2}]; \tag{33a}$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} \Xi_{mq}(\eta; k, R) = \text{const} > 0, \tag{33б}$$

которые вместе с соотношением (29б) и условием промежуточной нормировки

$$\int_{-1}^1 d\eta \Xi_{mq}^2(\eta; k, R) = 1 \tag{34}$$

определяют нормировку решений (28б):

$$N_{qm}(k, R) = k(2/\pi)^{1/2}. \tag{35}$$

Собственные значения $\lambda \equiv \lambda_{qm}(k, R)$ находятся из решения задачи Штурма—Лиувилля (30б), (33б) при $p^2 = -c^2$. Алгоритмы их вычисления, а также вычисления двухцентровых фаз рассеяния $\Delta_{mq}(k, R)$ изложены в [38, 39]. Графики этих функций для случая $Z_a = Z_b = 1$ при некоторых комбинациях m, q и k представлены на рис. 5 и 6.

В пределе объединенного атома ($R \rightarrow 0$) справедливы соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \phi_j(\mathbf{r}; 0) &= \psi_{Nlm}(\mathbf{r}); \quad \phi_c(\mathbf{r}; 0) = \psi_{lm}(\mathbf{r}, k); \\ \mathbf{r} &= (r\vartheta\varphi); \quad r = \lim_{R \rightarrow 0} \xi R/2; \quad \cos \vartheta = \lim_{R \rightarrow 0} \eta, \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

где $\psi_{Nlm}(\mathbf{r})$ и $\psi_{lm}(\mathbf{r}, k)$ — нормированные волновые функции водородоподобного атома с зарядом $Z = Z_a + Z_b$ в состояниях $|j\rangle$ и $|c\rangle$, которые характеризуются наборами сферических квантовых чисел $j = (Nlm)$ и $c = (klm)$:

$$N = n_1 + l + 1; \quad l = q + m. \quad (37)$$

При $R \ll 1$ имеем [33]:

$$\left. \begin{aligned} E_{Nlm}(R) &= -\frac{Z^2}{2N^2} - 2R^2 \frac{Z_a Z_b Z^2}{N^3 (2l-1)(2l+1)(2l+3)} \times \\ &\times \left[1 - \frac{3m^2}{l(l+1)} \right] + O[(ZR^3)]; \\ \Delta_{mq}(k, R) &= \sigma_l(k) + O(c^2); \quad \sigma_l(k) = \arg \Gamma(l+1 - iZ/k), \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

где $\sigma_l(k)$ — кулоновская фаза рассеяния на притягивающем потенциале $-Z/r$.

В другом предельном случае разведенных атомов ($R \rightarrow \infty$) функции $\phi_j(\mathbf{r}; R)$ и $\phi_c(\mathbf{r}; R)$ переходят соответственно в волновые функции атомов (a, c) и (b, c) в параболических координатах [33]:

$$\phi_j(\mathbf{r}; R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{cases} \Psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_a); \\ \Psi_{n'_1 n'_2 m}(\mathbf{r}_b), \end{cases} \quad (39a)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_a &= (\mu\nu_+\varphi); \quad \mathbf{r}_b = (\mu\nu_-\varphi); \\ \mu &= R(\xi - 1); \quad \nu_{\pm} = R(1 \pm \eta). \end{aligned}$$

Оператор $e_R \nabla'_R$ действует на эти функции следующим образом:

$$e_R \nabla'_R \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_a}; \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z_b}, \end{cases} \quad (39b)$$

где $z_{a,b} = (\mu \mp \nu)/2$; $z_{a,b} = R\xi\eta/2$.

Набор $j = [n_1 n_2 m]$ параболических квантовых чисел связан с набором $j = \{n_1 q m\}$ сфероидальных квантовых чисел при $Z_b > Z_a$ для eZ_a -термов соотношениями [33]:

$$q = \begin{cases} 2n_2 + n \frac{Z_b - Z_a}{Z_a} & \text{при } n \frac{Z_b}{Z_a} = \text{целому числу;} \\ 2n_2 + 1 + \text{Ent} \left(n \frac{Z_b - Z_a}{Z_a} \right) & \text{при } n \frac{Z_b}{Z_a} \neq \text{целому числу;} \end{cases} \quad (40)$$

$$n = n_1 + n_2 + m + 1.$$

При $R \gg 1$ для атома (a, c) имеем $(\Delta = n_1 - n_2)$:

$$E_{n_1 n_2 m}(R) = -\frac{Z_a^3}{2n^2} - \frac{Z_b}{R} + \frac{3Z_b n \Delta}{2R^2 Z_a} - \frac{Z_b n^2}{2R^3 Z_a^2} (6\Delta^2 - n^2 + 1) + \\ + \frac{Z_b n^3}{16R^4 Z_a^3} \{Z_a \Delta (109\Delta^2 - 39n^2 - 9m^2 + 59) - \\ - Z_b n (17n^2 - 3\Delta^2 - 9m^2 + 19)\} + O(R^{-5}). \quad (41a)$$

Соответствующая асимптотика волновых функций $\phi_j(\mathbf{r}; R)$ с точностью $O(R^{-2})$ построена в [40, 41]. Асимптотика двухцентровых фаз при $c = kR/2 \gg 1$ определяется соотношением [39]:

$$\Delta_{mq}(k, R) = -\frac{Z}{k} \ln \frac{kR}{2} + (kR)^{-1} \left[\frac{Z}{k} (2q + 1) - \frac{2\pi Z_a Z_b}{k^2} \right] + O(c^{-2}). \quad (41b)$$

В случае $Z_a = Z_b$ имеет место дополнительная симметрия волновых функций при инверсии $P: \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, которая характеризуется дополнительным квантовым числом $p = (-1)^l$:

$$P\phi_{jp}(\mathbf{r}; R) = \phi_{jp}(-\mathbf{r}; R) = p\phi_{jp}(\mathbf{r}; R); \quad (42)$$

$p \equiv g$ (при l четном) и $p \equiv u$ (при l нечетном):

$$jp = (Nlmp); \quad jp = [n_1 n_2 mp] \quad (43a)$$

и аналогично для волновых функций сплошного спектра

$$cp = (klmp); \quad sp = (lmp); \quad cp = [kn_2 mp]; \quad sp = [n_2 mp]. \quad (43b)$$

При $R \rightarrow \infty$ справедливы соотношения:

$$\phi_{jp}(\mathbf{r}, R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}} [(-1)^l \psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_a) + \psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_b)], \quad (44)$$

а термы $E_{jp}(R)$ состояний $jp = [n_1 n_2 mp]$, различающихся лишь четностью p , совпадают с экспоненциальной точностью [33]:

$$E_{n_1 n_2 mg}(R) - E_{n_1 n_2 mu}(R) = -(-1)^m \frac{2(2R/n)^{n-\Delta}}{n^3 n_2! (n_2 + m)!} \exp[-(R/n + n)] \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{n}{4R} (3n^2 + 8n\Delta - 3\Delta^2 - 1 + m^2) + O(R^{-2}) \right\}. \quad (45)$$

Волновые функции $\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_a)$ и $\psi_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_b)$ соответствуют состояниям $j = [n_1 n_2 m]$ атомов (a, c) и (b, c) с энергией $E_n = -Z_a^2/2n^2$ и главным квантовым числом $n = n_1 + n_2 + m + 1$, где n_2 определяется соотношением

$$n_2 = \{q + [(-1)^q - 1]/2\}/2. \quad (46)$$

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПОЛНОГО МОМЕНТА

С гамильтонианом H (14) коммутируют три оператора: квадрат полного орбитального момента J^2 (17), его проекция на ось Z лабораторной системы координат $J_Z = -i\partial/\partial\Phi$ (см. рис. 2) и оператор

P_{tot} полной инверсии координат

$$P_{\text{tot}} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \\ \mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \rightarrow -x & y \rightarrow y & z \rightarrow z \\ \xi \rightarrow \xi & \eta \rightarrow \eta & \varphi \rightarrow \pi - \varphi \\ R \rightarrow R & \Theta \rightarrow \pi - \Theta & \Phi \rightarrow \pi + \Phi \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Собственными функциями операторов \mathbf{J}^2 , J_z , P_{tot} являются симметризованные D -функции Вигнера:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{J}^2 \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda} &= J(J+1) \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda}; & J_z \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda} &= m_J \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda}; \\ P_{\text{tot}} \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda} &= \lambda \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda}; & \lambda &= \pm (-1)^J, \end{aligned} \right\} \quad (48)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda} \equiv \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda}(\Phi, \Theta, \varphi) &= \left[\frac{2J+1}{16\pi^2(1+\delta_{m_0})} \right]^{1/2} \times \\ &\times [(-1)^m D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) \exp(im\varphi) + \\ &+ (-1)^J \lambda D_{-mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) \exp(-im\varphi)]. \end{aligned} \quad (49)$$

Здесь $D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0)$ — функции Вигнера, определенные в [26, 42, 43], причем $J_z D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, \varphi) = m D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, \varphi)$, где $J_z = = l_z = -i\partial/\partial\varphi$ — проекция \mathbf{J} на ось z вращающейся системы координат.

Волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ (10) в представлении полного момента характеризуется квантовыми числами полного момента J , его проекции m_J и полной четности λ :

$$\Psi_{m_J}^{J\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{m=0}^J \mathcal{D}_{mm_J}^{J\lambda}(\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{J\lambda}(\xi, \eta, R). \quad (50)$$

Для идентичных частиц a и b оператор P инверсии координат \mathbf{r} частицы c :

$$P \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \\ \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \rightarrow -x & y \rightarrow -y & z \rightarrow -z \\ \xi \rightarrow \xi & \eta \rightarrow -\eta & \varphi \rightarrow \pi + \varphi \\ R \rightarrow R & \Theta \rightarrow \Theta & \Phi \rightarrow \Phi \end{pmatrix} \quad (51)$$

также коммутирует с гамильтонианом H и волновая функция (50) аналогично (42) характеризуется собственными значениями $p \equiv \equiv (g, u) = \pm 1$ этого оператора

$$P \Psi_{m_J p}^{J\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = p \Psi_{m_J p}^{J\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (52)$$

причем значения $p \equiv g = +1$ соответствуют четным, а $p \equiv u = = -1$ — нечетным состояниям.

Операторы P_{tot} и P связаны с оператором P_n инверсии координат частиц a и b :

$$P_n \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} \\ \mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x \rightarrow x & y \rightarrow -y & z \rightarrow -z \\ \xi \rightarrow \xi & \eta \rightarrow -\eta & \varphi \rightarrow -\varphi \\ R \rightarrow R & \Theta \rightarrow \pi - \Theta & \Phi \rightarrow \pi + \Phi \end{pmatrix} \quad (53)$$

соотношением

$$P_{\text{tot}} = PP_n. \quad (54a)$$

Собственные значения $p_n \equiv (s, a) = \pm 1$ оператора P_n :

$$P_n \Psi_{m_j p}^{J\lambda}(\mathbf{r}, R) = p_n \Psi_{m_j p}^{J\lambda}(\mathbf{r}, R) \quad (55)$$

связаны соотношением

$$p_n = \lambda p, \quad (54b)$$

причем значения $p_n \equiv s = +1$ соответствуют симметричным, а $p_n \equiv a = -1$ антисимметричным состояниям. С учетом принципа Паули $p_n = (-1)^I$ [44], где I — суммарный спин частиц a и b , что накладывает ограничения на возможные комбинации (54б) квантовых чисел λ и p [45].

Подстановка разложения (50) в уравнение (13) и усреднение по функциям (49) приводит к системе уравнений в представлении полного момента ($m = 0, \dots, J$):

$$\sum_{m'=0}^J (H_{mm'}^{J\lambda} - E\delta_{mm'}) F_{m'}^{J\lambda}(\xi, \eta, R) = 0, \quad (56a)$$

где

$$H_{mm} \equiv H_{mm}^{J\lambda} = \gamma_m^{J\lambda} \{ (2M)^{-1} [\langle m | \mathcal{F}_R^2 + \mathcal{L}^2 R^{-2} - [(1 + \chi)/2]^2 p^2 | m \rangle + [J(J+1) - 2m^2] R^{-2}] + \langle m | h | m \rangle + Z_a Z_b / R \};$$

$$\gamma_m^{J\lambda} = \frac{1}{2} [1 + \delta_{m0} \lambda (-1)^J]; \quad \langle m | h | m \rangle \equiv h_m;$$

$$H_{mm'} \equiv H_{mm'}^{J\lambda} \delta_{m'm \mp 1} = (2MR^2)^{-1} \langle m | \mathcal{L}_{\pm} | m \mp 1 \rangle \gamma_{mm \mp 1}^J;$$

$$\gamma_{mm'}^{J\lambda} = -\frac{1}{2} [1 + (\delta_{m0} + \delta_{m'0}) \lambda (-1)^J] (1 + \delta_{m0} \delta_{m'1} + \delta_{m'0} \delta_{m1})^{1/2} \times \\ \times \{ [(J - m + 1)(J + m)]^{1/2} \delta_{m'm-1} + [(J + m + 1)(J - m)]^{1/2} \delta_{m'm+1} \}. \quad (56b)$$

Таким образом, исходное уравнение (13) сведено к системе уравнений (56) в трехмерном пространстве $1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta \leq 1$,

$0 \leq R < \infty$, где операторы $\mathcal{D}_R^2 + \mathcal{L}^2 R^{-2}$, \mathbf{p}^2 , \mathcal{L}_\pm и h определены соотношениями (16), (19), (20), (23) и (24в), а соответствующие им матричные элементы

$$H_{mm'} = \langle m | H | m' \rangle = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(-im\varphi) H \exp(im'\varphi)$$

в координатах $\{\xi\eta R\}$ приведены в приложении; h_m определен выражением (28в).

Волновая функция (10), (50) связанного состояния системы трех частиц с набором $\{n\tau\lambda\}$ квантовых чисел, где λ — полная четность системы (48); $n = (Nlm)$ — набор квантовых чисел (37), характеризующий движение частицы c в поле зарядов частиц Z_a и Z_b , а набор $\tau = (Jm_Jv)$ характеризует относительное движение частиц a и b в колебательном состоянии v с полным моментом J и его проекций m_J (48), нормирована условием

$$\int d\mathbf{r} d\mathbf{R} \Psi_{n\tau}^{\lambda*}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Psi_{n'\tau'}^{\lambda'}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{nn'} \delta_{\tau\tau'}. \quad (57a)$$

В дальнейшем будем рассматривать лишь состояния $n = (100)$ с четностью $\lambda = +(-1)^J$ и опускать индексы n , m_J и λ , т. е.

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Psi_{m_J}^{J\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Psi_{n\tau}^{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Psi_{Jv}(\mathbf{r}, \mathbf{R});$$

$$E = E_{Jv}; \quad \varepsilon_n = \varepsilon_{Jv}. \quad (57b)$$

Из соотношений (50) и (57a) следует условие нормировки

$$\sum_{m=0}^J \int_0^\infty R^2 dR \int d\tau F_m^{Jv}(\xi, \eta, R) F_m^{Jv'}(\xi, \eta, R) = \delta_{vv'}. \quad (57в)$$

Широко распространенными способами решения задачи на собственные значения для системы уравнений (56) являются вариационный метод [46] и метод конечных элементов [47], с помощью которых энергия E и функция $F_m^{J\lambda}(\xi, \eta, R) = F_m^{Jv}(\xi, \eta, R)$ вычисляются из условия минимума функционала

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (58)$$

Матричные элементы гамильтониана H , необходимые для минимизации этого функционала, получаются из выражений (56) интегри-

раванием по частям и в единицах $e = \hbar = m_a = 1$ имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \langle F_m^J | H_{mm} | F_m^J \rangle &= \int dR d\xi d\eta \left\{ \frac{R^3}{4} (1 + (4M)^{-1} \times \right. \\
 &\quad \times [\xi^2 + \eta^2 - 2 - 2\kappa(\xi\eta + 1)]) \times \\
 &\quad \times \left[(\xi^2 - 1) \left(\frac{\partial F_m^J}{\partial \xi} \right)^2 + (1 - \eta^2) \left(\frac{\partial F_m^J}{\partial \eta} \right)^2 + \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{m^2 (\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} (F_m^J)^2 \right] + (4M)^{-1} \frac{R^5}{4} (\xi^2 - \eta^2) \left(\frac{\partial F_m^J}{\partial R} \right)^2 - \right. \\
 &\quad - (4M)^{-1} \frac{R^4}{2} \left[(\xi^2 - 1) (\xi - \kappa\eta) \frac{\partial F_m^J}{\partial \xi} \frac{\partial F_m^J}{\partial R} + \right. \\
 &\quad \left. + (1 - \eta^2) (\eta - \kappa\xi) \frac{\partial F_m^J}{\partial \eta} \frac{\partial F_m^J}{\partial R} \right] + \left[\frac{R^4}{8} (\xi^2 - \eta^2) Z_a Z_b - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{R^4}{4} [(Z_a + Z_b) \xi + (Z_b - Z_a) \eta] \right] (F_m^J)^2 \Big\} + \quad (59) \\
 &\quad + \frac{J(J+1) - 2m^2}{2MR^2} \langle F_m^J | F_m^J \rangle; \\
 \langle F_m^J | H_{mm'}^J | F_{m'}^J \rangle &= (4M)^{-1} \int dR d\xi d\eta \times \\
 &\quad \times \frac{R^3}{4} F_m^J \left\{ \mp [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \times \right. \\
 &\quad \times \left[(\eta - \kappa\xi) \frac{\partial F_{m'}^J}{\partial \xi} + (\xi - \kappa\eta) \frac{\partial F_{m'}^J}{\partial \eta} \right] + \\
 &\quad \left. + m' \frac{(\xi^2 - \eta^2)(\xi\eta - \kappa)}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}} F_{m'}^J \right\} \delta_{m'm \mp 1}; \\
 \langle F_m^J | F_m^J \rangle &= \int dR d\xi d\eta \frac{R^5}{8} (\xi^2 - \eta^2) (F_m^J)^2.
 \end{aligned}$$

Для вычисления функционала (58) можно использовать разложения $F_m^J(\xi, \eta, R) = F_m^{Jv}(\xi, \eta, R)$ по различным базисным функциям (см., например, [16]), в том числе и разложения по адиабатическому базису [10].

4. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Адиабатическое представление в задаче трех тел можно рассматривать как одну из реализаций метода приведения многомерных краевых задач к обыкновенным дифференциальным уравнениям, исследованного Л. В. Канторовичем [48, 49]. Решения $F_m^{Jv}(\xi, \eta, R)$

системы (56) разлагаются по адиабатическому базису (28а), (28б):

$$F_m^{Jv}(\xi, \eta, R) = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{N-1} \varphi_{Nlm}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{Nlm}^{Jv}(R) + \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk \varphi_{lm}(\xi, \eta; k, R) R^{-1} \chi_{lm}^{Jv}(k, R), \quad (60)$$

где $\varphi_{Nlm}(\xi, \eta; R)$ и $\varphi_{lm}(\xi, \eta; k, R)$ — собственные функции оператора \hat{h}_m (28в). При подстановке разложения (60) в систему уравнений (56) и усреднения по координатам ξ, η приходим к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений ($e = \hbar = m_a = 1$) [22]:

$$\left. \begin{aligned} & \left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv} - U_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) = \\ & = \sum_{j \neq i} U_{ij}(R) \chi_j(R) + \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk U_{is}(k, R) \chi_s(k, R); \\ & \left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv} - U_{ss}^J(k, R) \right\} \chi_s(k, R) = \sum_{j=1}^{\infty} U_{sj}(k, R) \chi_j(R) + \\ & + \sum_{s' \neq s}^{\infty} \int_0^{\infty} dk' U_{ss'}(k, k', R) \chi_s(k', R), \end{aligned} \right\} \quad (61a)$$

где ε_{Jv} — энергия системы трех частиц (12), (57б) в состоянии (Jv) с полным моментом J , колебательным квантовым числом v и приведенной массой (15):

$$M = M_0/m_a = M_b (M_c + M_a)/M_c (M_a + M_b).$$

Бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений (61) эквивалентна исходному уравнению (13) в шестимерном пространстве (\mathbf{r}, \mathbf{R}) и получена из него без каких-либо приближений. Решение этой системы с граничными условиями:

$$\chi_j(0) = \chi_s(k, 0) = 0; \quad \chi_j(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0; \quad \chi_s(k, R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0 \quad (61b)$$

и условием нормировки, которое следует из (29), (57в) и (60):

$$\sum_{m=0}^J \left\{ \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{N-1} \int_0^{\infty} dR \chi_{Nlm}^{Jv}(R) \chi_{Nlm}^{Jv'}(R) + \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} dR \chi_{lm}^{Jv}(k, R) \chi_{lm}^{Jv'}(k, R) \right\} = \delta_{vv'} \quad (62)$$

позволяет находить энергию и волновые функции (60) системы трех тел с заданной точностью. Здесь мы ввели сокращенные обозначения $i, j \equiv (Nlm), s \equiv (lm)$:

$$\left. \begin{aligned} \chi_j(R) &\equiv \chi_{Nlm}^{jv}(R); \quad \chi_s(k, R) \equiv \chi_{lm}^{jv}(k, R); \\ U_{ii}^J(R) &= R^{-2} [J(J+1) - 2m^2] + 2MZ_a Z_b R^{-1} + U_{ii}(R); \\ U_{ss}^J(k, R) &= R^{-2} [J(J+1) - 2m^2] + 2MZ_a Z_b R^{-1} + U_{ss}(k, R). \end{aligned} \right\} \quad (63)$$

Потенциалы $U_{ij}(R), U_{sj}(k, R), U_{is}(k, R), U_{ss}(k, k', R)$ являются матричными элементами

$$\langle im | H_{mm}^J | jm' \rangle = \int d\tau \varphi_{im}(\xi, \eta; R) H_{mm}^J(\xi, \eta, R) \varphi_{jm'}(\xi, \eta; R) \quad (64)$$

оператора (56) по адиабатическому базису (28), (29) $|i\rangle \equiv |im\rangle \equiv |Nlm\rangle$ и $|c\rangle \equiv |ks\rangle \equiv |klm\rangle$.

Их удобно представить в виде *:

$$\begin{aligned} U_{ij}(R) &= 2M(E_i(R) - E_{na})\delta_{ij} + H_{ij}(R) + \\ &+ \frac{d}{dR} Q_{ij}(R) + 2Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} + B_{ij}(R), \end{aligned} \quad (65)$$

где

$$\left. \begin{aligned} H_{ij}(R) + \frac{d}{dR} Q_{ij}(R) &= \langle im | \mathcal{P}_R^2 + \mathcal{L}^2 R^{-2} - [(1+\kappa)/2]^2 p^2 | jm \rangle \\ Q_{ij}(R) &= -i \langle im | \mathcal{P}_R | jm \rangle; \quad B_{ij}(R) = \gamma_{mm'}^J b_{im, jm'}(R); \\ \gamma_{mm'}^J &= -(1 + \delta_{m0}\delta_{m'+1} + \delta_{m'+0}\delta_{m1})^{1/2} \times \\ &\times \{ [(J-m+1)(J+m)]^{1/2} \delta_{m'm-1} + \\ &+ [(J+m+1)(J-m)]^{1/2} \delta_{m'm+1} \}; \\ b_{im, jm\mp 1} &= R^{-2} \langle im | \mathcal{L}_{\pm} | jm \mp 1 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (66)$$

Выражения для матричных элементов:

$$\left. \begin{aligned} H_{im, jm}(R) &= H_{im, jm}^{(+)}(R) - H_{im, jm}^{(*)}(R) + \\ &+ \kappa [H_{im, jm}^{(-)}(R) - 2H_{im, jm}^{(*)}(R)]; \\ Q_{im, jm}(R) &= Q_{im, jm}^{(+)}(R) + \kappa Q_{im, jm}^{(-)}(R); \\ b_{im, jm'}(R) &= b_{im, jm'}^{(+)}(R) + \kappa b_{im, jm'}^{(-)}(R); \\ H_{im, jm}(R) &= H_{jm, im}(R); \quad Q_{im, jm}(R) = \\ &= -Q_{jm, im}(R); \quad B_{im, jm'}(R) = B_{jm', im}(R) \end{aligned} \right\} \quad (67)$$

* При таком определении $U_{ij}(R)$ энергия ϵ_{jv} отсчитывается от значения $E_{na} = -Z_a^2/(2n^2)$ энергии изолированного атома (a, c) в состоянии $|n\rangle$.

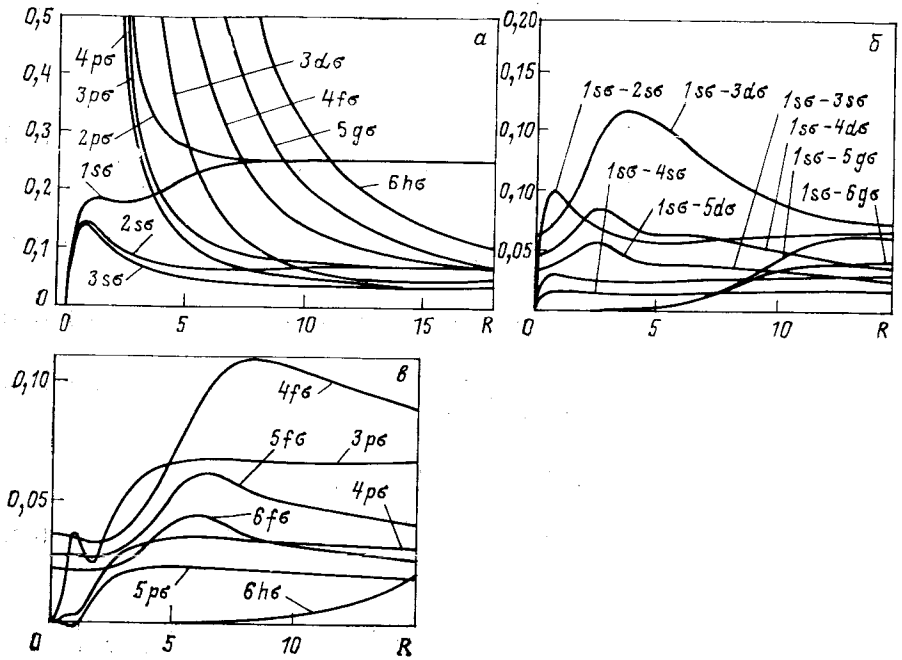


Рис. 7. Диагональные (а) $H_{Nl\sigma}^{(+)} = H_{Nl\sigma, Nl\sigma}^{(+)}(R)$ и недиагональные матричные элементы $H_{1s\sigma, Nl\sigma}^{(+)}(R)$ (б) и $H_{2p\sigma, Nl\sigma}^{(+)}(R)$ (в)

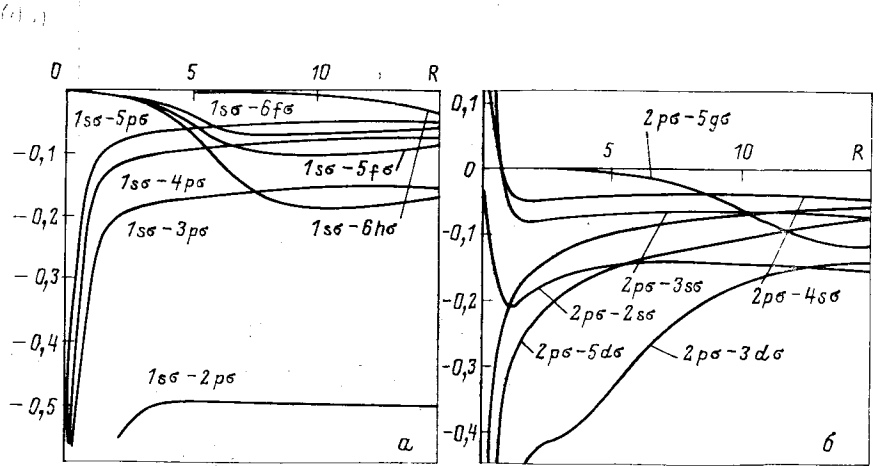


Рис. 8. Недиагональные матричные элементы $H_{1s\sigma, Nl\sigma}^{(-)}(R)$ (а) и $H_{2p\sigma, Nl\sigma}^{(-)}(R)$ (б)

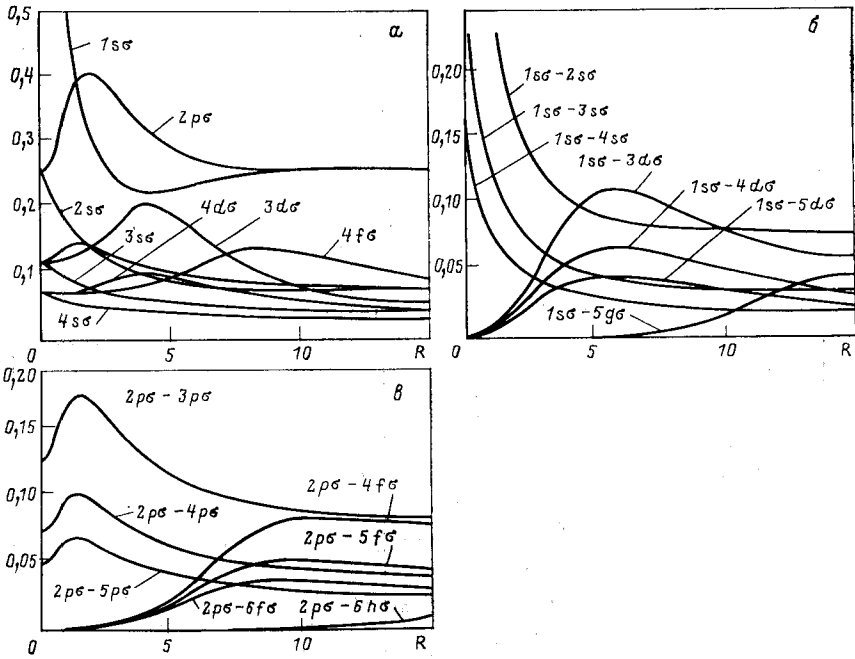


Рис. 9. Диагональные (а) $H_{Nl\sigma}^{(*)} = H_{Nl\sigma, Nl\sigma}^{(*)}(R)$ и недиагональные матричные элементы $H_{1s\sigma, Nl\sigma}^{(*)}(R)$ (б) и $H_{2p\sigma, Nl\sigma}^{(*)}(R)$ (в)

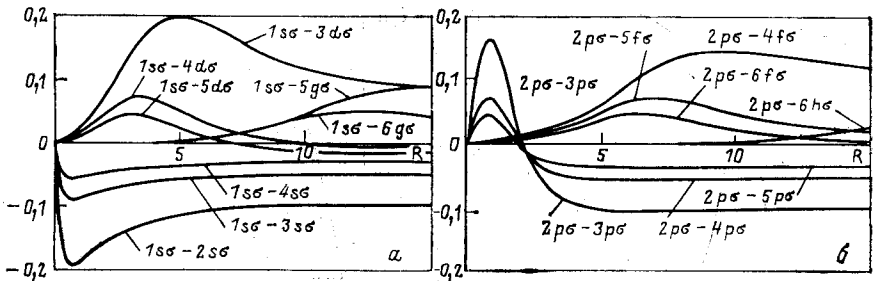


Рис. 10. Матричные элементы $Q_{1s\sigma, Nl\sigma}^{(+)}(R)$ (а) и $Q_{2p\sigma, Nl\sigma}^{(+)}(R)$ (б)

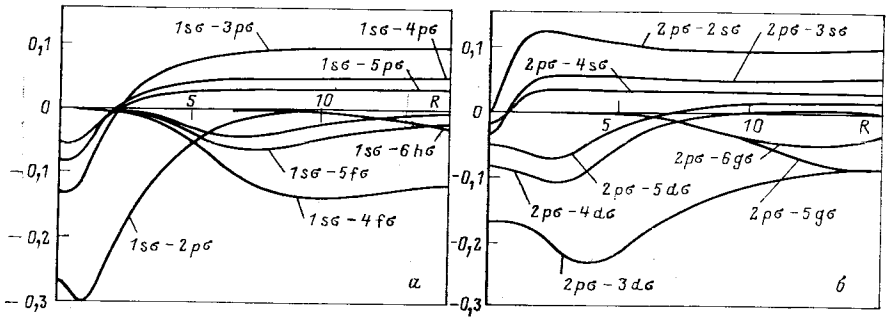


Рис. 11. Матричные элементы $Q_{1s\sigma, N l \sigma}^{(-)}(R)$ (a) и $Q_{2p\sigma, N l \sigma}^{(-)}(R)$

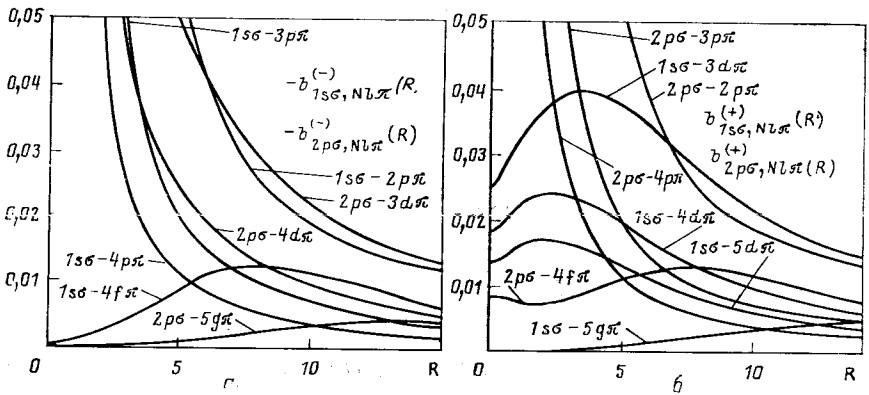


Рис. 12. Матричные элементы $b_{1s\sigma, N l \pi}^{(+)}(R)$ и $b_{2p\sigma, N l \pi}^{(+)}(R)$ (б) и матричные элементы $b_{1s\sigma, N l \pi}^{(-)}(R)$ и $b_{2p\sigma, N l \pi}^{(-)}(R)$ (a)

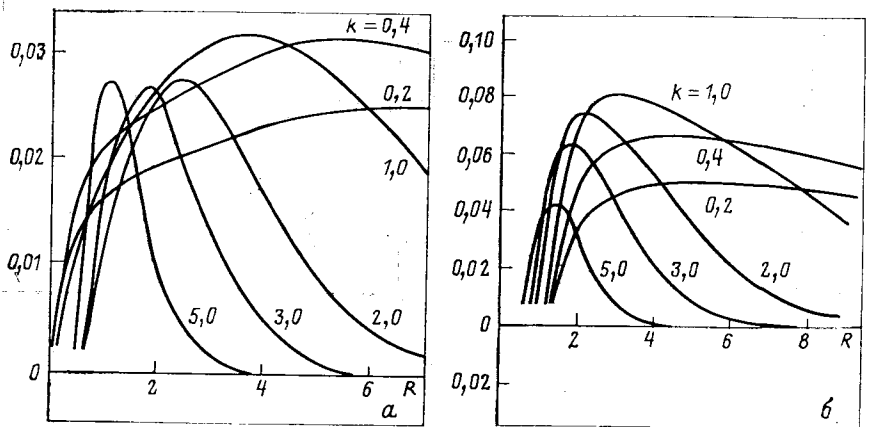


Рис. 13. Матричные элементы $H_{00, 1s\sigma}^{(+)}(k, R)$ (a) и $H_{10, 2p\sigma}^{(+)}(k, R)$ (б)

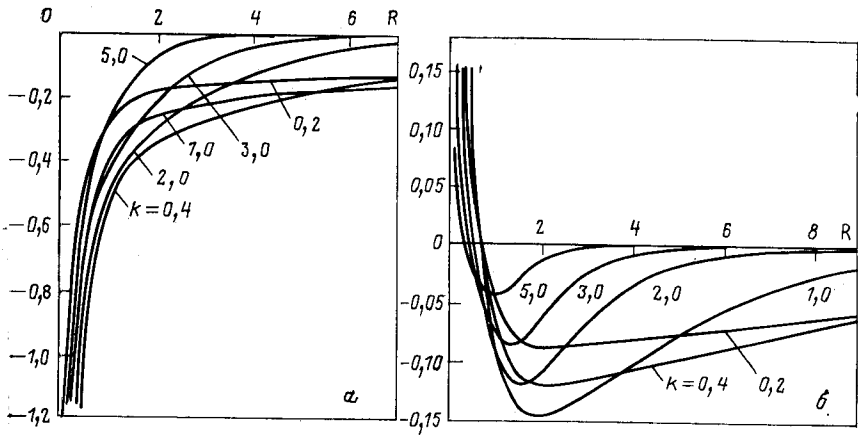


Рис. 14. Матричные элементы $H_{10,1s\sigma}^{(-)}(k, R)$ (а) и $H_{00,2p\sigma}^{(-)}(k, R)$ (б).

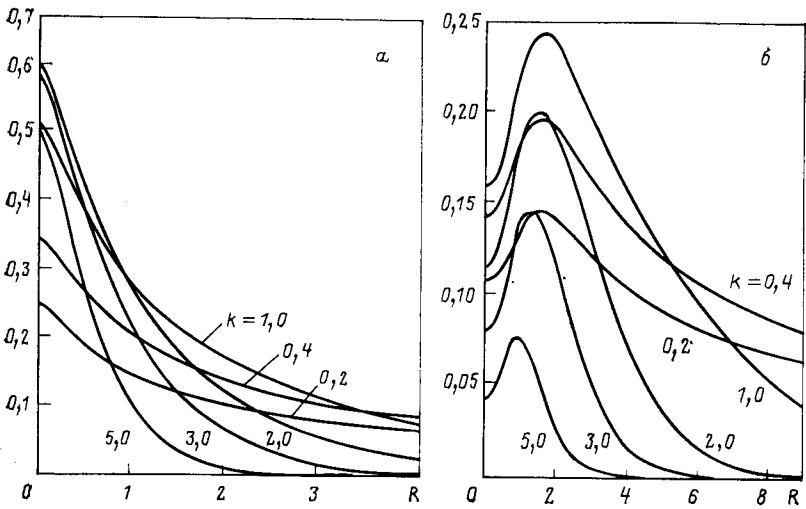


Рис. 15. Матричные элементы $H_{00,1s\sigma}^{(*)}(k, R)$ (а) и $H_{10,2p\sigma}^{(*)}(k, R)$ (б).

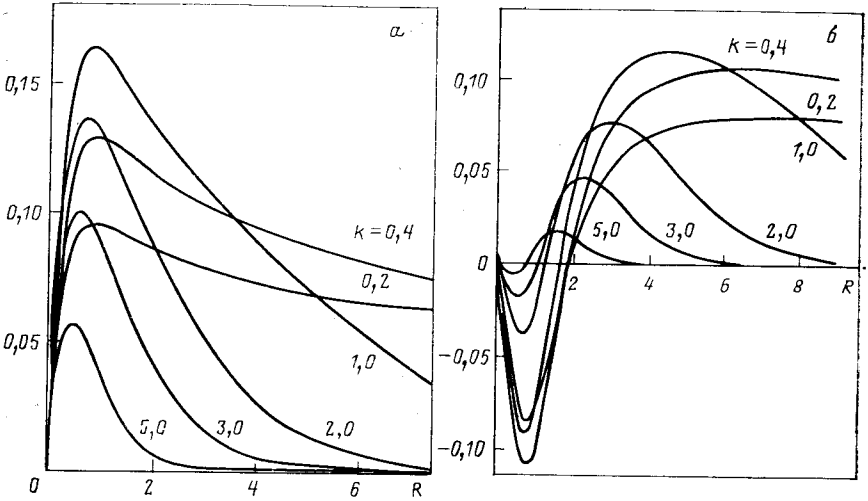


Рис. 16. Матричные элементы $Q_{00,1\sigma}^{(+)}(k, R)$ (а) и $Q_{10,2\rho\sigma}^{(+)}(k, R)$ (б)

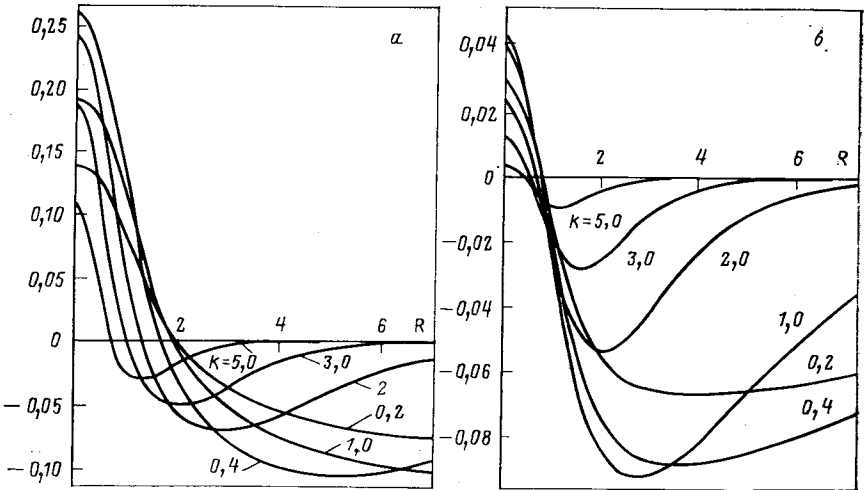


Рис. 17. Матричные элементы $Q_{10,1\sigma}^{(-)}(k, R)$ (а) и $Q_{00,2\rho\sigma}^{(-)}(k, R)$ (б)

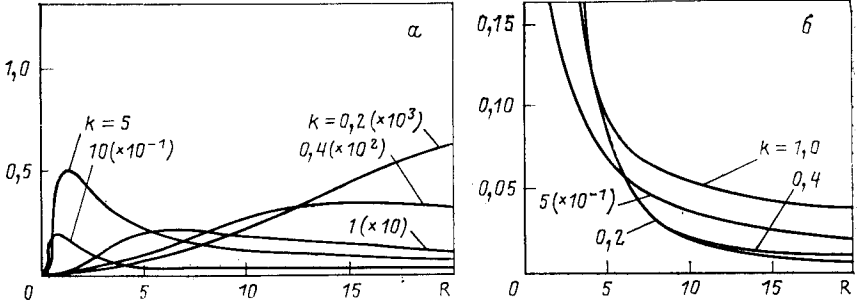


Рис. 18. Матричные элементы $H_{00,00}^{(+)}(k, R)$ (а) и $H_{10,10}^{(+)}(k, R)$ (б)

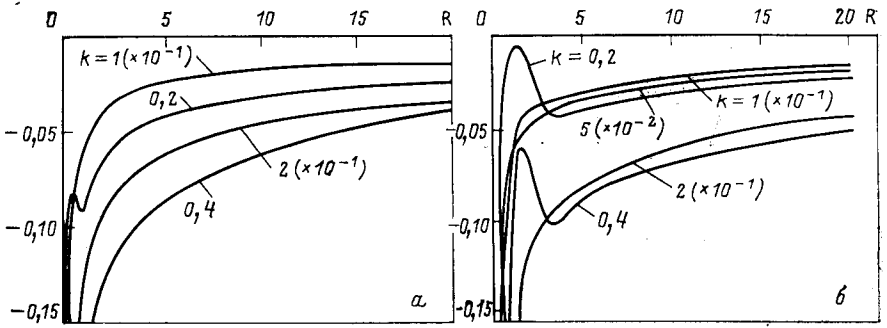


Рис. 19. Матричные элементы $H_{00,10}^{(-)}(k, R)$ (а) и $H_{10,20}^{(-)}(k, R)$ (б)

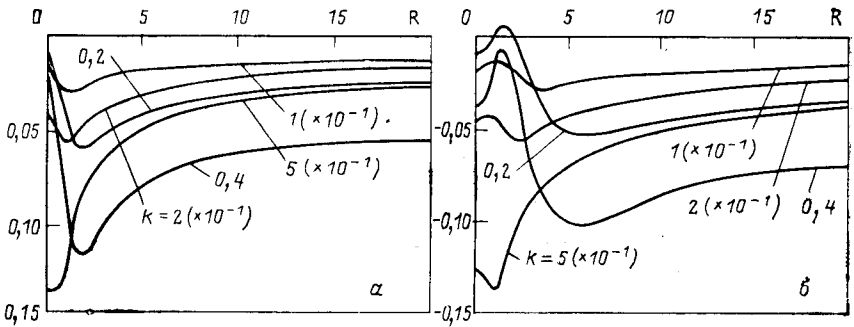


Рис. 20. Матричные элементы $Q_{00,10}^{(-)}(k, R)$ (а) и $Q_{10,20}^{(-)}(k, R)$ (б)

в сфероидальных координатах ξ, η приведены в приложении. Их графики [50] для $Z_a = Z_b = 1$ приведены на рис. 7—12, а алгоритмы их вычисления даны в [34, 35, 51, 52]. Аналогичные потенциалы $U_{is}(k, R)$, $U_{sj}(k, R)$ и $U_{ss'}(k, R) \equiv U_{ss'}(k, k, R)$, связывающие различные состояния дискретного и сплошного спектров задачи двух центров, вычисляются по формулам (65) — (67) после замены индексов $i, j = \{n_1 q\} \rightarrow q$. Их графики представлены на рис. 13—20.

В настоящее время известно несколько алгоритмов и пакетов программ, позволяющих вычислять потенциалы $U_{ij}(R)$ [34, 35, 51, 52, 56], $U_{is}(k, R)$ [53] и $U_{ss'}(k, R)$ [54], которые связывают состояния дискретного и сплошного спектров задачи двух центров (28) при различных значениях Z_a, Z_b, R .

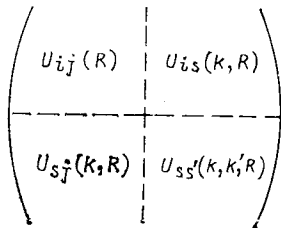


Рис. 21. Общая структура матрицы потенциалов $U(R)$ системы уравнений (76)

Матрицу $U(R) = \{U_{ij}(R), U_{is}(k, R), U_{sj}(k, R), U_{ss'}(k, k', R)\}$ потенциалов системы уравнений (61) можно представить схематично в блочном виде (рис. 21), где блок $U_{ij}(R)$ связывает состояния дискретного спектра задачи двух центров, блоки $U_{is}(k, R), U_{sj}(k, R)$ — состояния дискретного и сплошного спектров и, наконец, блок $U_{ss'}(k, k', R)$ — состояния сплошного спектра задачи двух центров.

В случае $Z_a = Z_b$ ввиду наличия дополнительной симметрии (42) двухцентровых волновых функций вместо разложения (60) для функции $F_m^{Jv}(\xi, \eta, R)$ целесообразно использовать разложение, в котором эта симметрия явно учтена:

$$\begin{aligned}
 F_m^{Jv}(\xi, \eta, R) &= \sum_{jp} \varphi_{jp}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{jp}^{Jv}(R) + \\
 &+ \sum_{sp} \int_0^\infty dk \varphi_{sp}(\xi, \eta; k, R) R^{-1} \chi_{sp}^{Jv}(k, R) = \\
 &= \sum_{p=g, u} \left\{ \sum_{n_1=0}^\infty \sum_{n_2=0}^\infty \varphi_{n_1 n_2 mp}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{n_1 n_2 mp}^{Jv}(R) + \right. \\
 &\left. + \sum_{n_2=0}^\infty \int_0^\infty dk \varphi_{n_2 mp}(\xi, \eta; k, R) R^{-1} \chi_{n_2 mp}^{Jv}(k, R) \right\}. \tag{68}
 \end{aligned}$$

Использование разложения (68) вместо (60) приводит к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, аналогичной (61):

$$\left. \begin{aligned} & \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{Jv} \right) - \hat{U}_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) = \\ & = \sum_{j \neq i}^{\infty} \hat{U}_{ij}(R) \chi_j(R) + \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk \hat{U}_{is}(k, R) \chi_s(k, R); \\ & \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{Jv} \right) - \hat{U}_{ss}^J(k, R) \right\} \chi_s(k, R) = \\ & = \sum_{j=1}^{\infty} \hat{U}_{sj}(k, R) \chi_j(R) + \sum_{s' \neq s}^{\infty} \int_0^{\infty} dk' \hat{U}_{ss'}(k, k', R) \chi_{s'}(k, R), \end{aligned} \right\} \quad (69)$$

где $\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ с той, однако, разницей, что теперь $\chi_i(R)$ и $\chi_s(k, R)$ следует понимать как двухкомпонентные столбцы решений:

$$\chi_i(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ig} \\ \chi_{iu} \end{pmatrix}; \quad \chi_s(k, R) = \begin{pmatrix} \chi_{sg} \\ \chi_{su} \end{pmatrix}, \quad (70)$$

а потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$, $\hat{U}_{is}(k, R)$ и т. д. — как матрицы размерностью 2×2 , например:

$$\hat{U}_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ig, jg} & U_{ig, ju} \\ U_{iu, jg} & U_{iu, ju} \end{pmatrix} \text{ и т. д.} \quad (71)$$

При исследовании асимптотики волновой функции (10) удобно вместо базисных функций (42)–(44) использовать их линейные комбинации:

$$\left. \begin{aligned} \phi_{ia}(\mathbf{r}; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{ig}(\mathbf{r}; R) - \phi_{iu}(\mathbf{r}; R)] \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \psi_i(\mathbf{r}_a); \\ \phi_{ib}(\mathbf{r}; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{ig}(\mathbf{r}; R) + \phi_{iu}(\mathbf{r}; R)] \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \psi_i(\mathbf{r}_b), \end{aligned} \right\} \quad (72)$$

т. е.

$$\begin{pmatrix} \phi_{ia} \\ \phi_{ib} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \phi_{ig} \\ \phi_{iu} \end{pmatrix}; \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (73)$$

В этом случае разложение (68) и определение (70) сохраняют свой вид с заменой смысла индексов: $g \rightarrow a$, $u \rightarrow b$:

$$\begin{aligned} F_m^{Jv}(\xi, \eta, R) &= \sum_i \{ \varphi_{ia}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{ia}^{Jv}(R) + \varphi_{ib}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{ib}^{Jv}(R) \} + \\ &+ \sum_s \int_0^{\infty} dk \{ \varphi_{sa}(\xi, \eta; k, R) R^{-1} \chi_{sa}^{Jv}(k, R) + \\ &+ \varphi_{sb}(\xi, \eta, k, R) R^{-1} \chi_{sb}^{Jv}(k, R) \}, \end{aligned} \quad (74a)$$

а в системе уравнений (69) под функциями $\chi_i(R)$ и матрицами $\hat{U}_{ij}(R)$ и т. д. следует понимать

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \chi_{ia} \\ \chi_{ib} \end{pmatrix} &= A \begin{pmatrix} \chi_{ig} \\ \chi_{iu} \end{pmatrix}; \quad \hat{U}_{ij}^*(R) = \begin{pmatrix} U_{ia, ja} & U_{ia, jb} \\ U_{ib, ja} & U_{ib, jb} \end{pmatrix} = \\ &= A \begin{pmatrix} U_{ig, jg} & U_{ig, ju} \\ U_{iu, jg} & U_{iu, ju} \end{pmatrix} A^{-1}; \end{aligned} \quad (746)$$

$$\left. \begin{aligned} U_{ia, ja} &= \frac{1}{2} [(U_{ig, jg} + U_{iu, ju}) - (U_{ig, ju} + U_{iu, jg})] - 2ME_{na}\delta_{ij}; \\ U_{ia, jb} &= \frac{1}{2} [(U_{ig, jg} - U_{iu, ju}) + (U_{ig, ju} - U_{iu, jg})]; \\ U_{ib, ja} &= \frac{1}{2} [(U_{ig, jg} - U_{iu, ju}) - (U_{ig, ju} - U_{iu, jg})]; \\ U_{ib, jb} &= \frac{1}{2} [(U_{ig, jg} + U_{iu, ju}) + (U_{ig, ju} + U_{iu, jg})] - 2ME_{na}\delta_{ij}. \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

5. ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ μ -МЕЗОМОЛЕКУЛ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА И СИСТЕМЫ e^-e^+

Для вычисления энергий ϵ_{Jv} и функций $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$ бесконечная система дифференциальных уравнений (69) на луче $0 \leq R < < \infty$ аппроксимируется конечной системой уравнений размерности N_m на конечном интервале $0 \leq R \leq R_m$ [22]

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{Jv} \right) - \hat{U}_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) &= \sum_{j \neq i}^{N_i} \hat{U}_{ij}(R) \chi_j(R) + \\ &+ \sum_{s=1}^{N_s} \int_{k_0}^{k_m} dk \hat{U}_{is}(k, R) \chi_s(k, R); \\ \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{Jv} \right) - \hat{U}_{ss}^J(k, R) \right\} \chi_s(k, R) &= \\ &= \sum_{j \neq 1}^{N_i} \hat{U}_{sj}(k, R) \chi_j(R) + \\ &+ \sum_{s'=1}^{N_s} \int_{k_0}^{k_m} dk' \hat{U}_{ss'}(k, k', R) \chi_{s'}(k', R) \end{aligned} \right\} \quad (76a)$$

с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} \chi_j(0) &= 0; \quad a_j \chi'_j(R_m) + b_j \chi_j(R_m) = 0, \quad 1 \leq j \leq N_i; \\ \chi_s(k, 0) &= 0; \quad \chi_s(k, R_m) = 0, \quad 1 \leq s \leq N_s, \quad k_0 \leq k \leq k_m \end{aligned} \right\} \quad (76b)$$

и условием нормировки

$$\sum_{p=a, b} \left\{ \sum_{j=1}^{N_i} \int_0^{R_m} dR \chi_{jp}^2(R) + \sum_{s=1}^{N_s} \int_{k_0}^{k_m} dk \int_0^{R_m} dR \chi_{sp}^2(k, R) \right\} = 1. \quad (76в)$$

Интервал интегрирования $k_0 \leq k \leq k_m$ для каждого состояния $|ks\rangle$ разбивается $N_k^{(s)}$ узловыми точками k_α ($\alpha = 1, \dots, N_k^{(s)}$) с шагом Δk_α и все интегралы по k заменяются суммами вида:

$$\int_{k_0}^{k_m} f(k) dk = \sum_{\alpha=1}^{N_k^{(s)}} f(k_\alpha) \varphi(k_\alpha) \Delta k_\alpha, \quad (77)$$

где $\varphi(k_\alpha) \Delta k_\alpha$ — вес квадратурной формулы Симпсона.

При такой дискретизации сплошного спектра общее число уравнений в системе (76а) равно $N_m = 2(N_i + N_c)$, где $N_c = \sum_{s=1}^{N_s} N_k^{(s)}$

[множитель 2 является следствием матричной структуры (74) потенциалов системы (76а)]. Вычисление энергии и волновых функций всех состояний μ -мезомолекул изотопов водорода и системы $e^-e^-e^+$ проведено в [22, 23], где были использованы следующие значения параметров: $N_i = 13$, $N_s = 6$, $R_m = 20$ и $R_m = 60$; $k_0 = 0$, $k_m = 10$ для состояний $|sp\rangle = |00p\rangle, |10p\rangle, |20p\rangle, |01p\rangle, |11p\rangle$ и $k_m = 5$ для пары $|30p\rangle$; $a_j = 0$; $b_j = 1$; $N_c = 119$, $N_m = 264$. Потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$, связывающие состояния $|i\rangle = |n_1 n_2 m\rangle, |j\rangle = |n'_1 n'_2 m'\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров с наборами квантовых чисел $n = n_1 + n_2 + m + 1 \leq 3, n' = n'_1 + n'_2 + m' + 1 \leq 3$, а также потенциалы $\hat{U}_{ij}(R), \hat{U}_{i1}(R)$ и $\hat{U}_{ii}(R)$, связывающие (g, u) -пару состояний $|1g\rangle = |000g\rangle$ и $|1u\rangle = |000u\rangle$ с тремя парами состояний: $|jp\rangle = |300p\rangle, |210p\rangle, |120p\rangle$ из оболочки $n = 4$, вычислены с помощью программ, реализующих алгоритмы [35, 51, 52], на интервале изменения $R = 0,1(0,1)20(1,1)100$ с абсолютной точностью $\sim 10^{-7}$. Общее количество использованных потенциалов $U_{ip}, U_{jp'}(R)$, связывающих состояния $|ip\rangle$ и $|ip'\rangle$ дискретного спектра, равно 436.

В настоящее время вычислены также потенциалы $\hat{U}_{ij}(R), \hat{U}_{i1}(R), \hat{U}_{ii}(R)$, связывающие (g, u) -пару состояний $|1\rangle = |000\rangle$ еще с 11 парами состояний дискретного спектра задачи двух центров, принадлежащим оболочкам: $n = 4$ ($|j\rangle = |030\rangle, |201\rangle, |111\rangle$), $n = 5$ ($|j\rangle = |400\rangle, |310\rangle, |220\rangle, |301\rangle$), $n = 6$ ($|j\rangle = |500\rangle, |410\rangle, |320\rangle, |401\rangle$), на интервале изменения $R = 0,1(0,1)20(0,5)100$ с абсолютной точностью $\sim 10^{-7}$ с помощью программы, реализующей алгоритмы [51, 52],

Потенциалы $\hat{U}_{1s}(k, R), \hat{U}_{s1}(k, R)$, связывающие пару $|000g\rangle$ и $|000u\rangle$ состояний с парами $|ksg\rangle$ и $|ksu\rangle$ состояний сплошного

спектра задачи двух центров, вычислены с абсолютной точностью $\sim 10^{-5}$ на интервале изменения $R = 0,1(0,1)5(0,2)11(0,5)20$ с помощью программ, реализующих алгоритм [53]. Для состояний $s \equiv [n_2 m] = 1 \equiv [00]$ потенциалы $\hat{U}_{1s}(k, R)$, $\hat{U}_{s1}(k, R)$ вычислены при $k = 0,2(0,1)1(1)10$ ($N_k^{(1)} = 18$), для состояний $2 \equiv [10]$, $3 \equiv [20]$, $5 \equiv [01]$ и $6 \equiv [11]$ — при $k = 0,2(0,1)1(0,2)2(1)10$ ($N_k^{(2)} = N_k^{(3)} = N_k^{(5)} = N_k^{(6)} = 22$), а для состояний $4 \equiv [30]$ при $k = 0,2(0,2)2(1)5$ ($N_k^{(4)} = 13$). Общее число используемых потенциалов $U_{1p, sp'}(k, R)$ и $U_{sp, 1p'}(k, R)$ равно 476.

В настоящее время вычислены [54] также диагональные потенциалы $U_{sg, sg}(k, R)$, $U_{sg, su}(k, R)$ и $U_{su, su}(k, R)$, связывающие пары состояний $|c\rangle = |ksg\rangle$ и $|c'\rangle = |ksu\rangle$ сплошного спектра задачи двух центров, с абсолютной точностью $\sim 10^{-5}$ для тех же наборов $s = 1, \dots, 6$ и на том же интервале изменения R , что и для матричных элементов $\hat{U}_{1s}(k, R)$ и $\hat{U}_{s1}(k, R)$ при значениях $k = 0,2(0,1)1(0,2)2(1)10$. Общий вид матрицы потенциалов $\hat{U}(R)$, вычисленных в настоящее время, представлен на рис. 22.

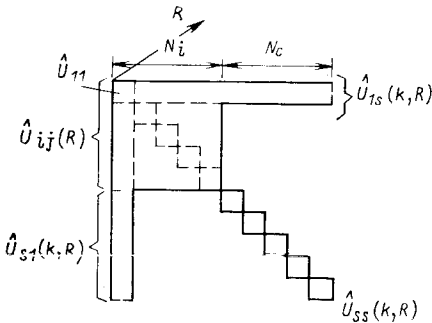


Рис. 22. Матрицы потенциалов $U(R)$, используемые в программах ITER (сплошные линии) и ВААР (пунктир)

Для численного решения задачи Штурма — Лиувилля (76) использованы алгоритмы SISTEM [57], ITER [58] и ВААР [59], построенные на основе непрерывного аналога метода Ньютона [60] и его модификаций [61]. Вычисления искомых значений ϵ_{Jv} , $\chi_i(R)$ и $\chi_s(k, R)$ проводились с помощью пакетов программы ITER и ВААР.

Программа SISTEM позволяет решать частичную задачу Штурма — Лиувилля для системы ~ 40 обыкновенных дифференциальных уравнений. С ее помощью были вычислены начальные приближения ϵ_{Jv} и $\chi_i(R)$ (начальные приближения для $\chi_s(k, R)$ выбирались равными нулю), необходимые для работы программ ITER и ВААР.

Программа ITER позволяет решать частичную задачу Штурма — Лиувилля (76) для системы обыкновенных дифференциальных уравнений размерности $N_m \approx 300$ с матрицей потенциалов, изображенной для рис. 22. [Напомним, что система интегродифференциальных уравнений после дискретизации сплошного спектра (77) свелась к системе обыкновенных дифференциальных уравнений.]

Программа ВААР построена на основе программы ITER для решения задачи (76) с матрицей потенциалов специального вида, в ней присутствуют лишь потенциалы $\hat{U}_{1j}(R)$, $\hat{U}_{1s}(k, R)$, $\hat{U}_{i1}(R)$:

$\hat{U}_{s1}(k, R)$; $\hat{U}_{ii}(R)$, $\hat{U}_{ss}(k, R)$ (на рис. 22 эта матрица выделена пунктиром). Время вычислений по программе ВААР на порядок меньше времени вычислений по программе ИТЕР.

При выбранном способе разбиения интервала $0 \leq R \leq R_m$ узловыми точками R_α , в которых заданы потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$, $\hat{U}_{1s}(k, R)$ и т. д., и указанных значениях $N_i, N_s, N_i^{(s)}, R_m$ относительная точность решения задачи Штурма — Лиувилля (76) с помощью программ ИТЕР и ВААР составляет 10^{-3} — 10^{-4} . Отметим, что нижний предел в интегралах типа (77) в системе уравнений (76а) полагался равным $k_0 = 0$, причем $\chi_s(0, R) = 0, s = 1, \dots, 6, R \in [0, R_m]$.

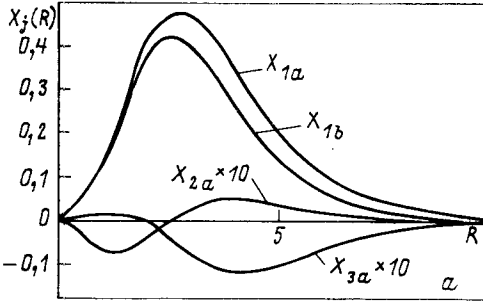
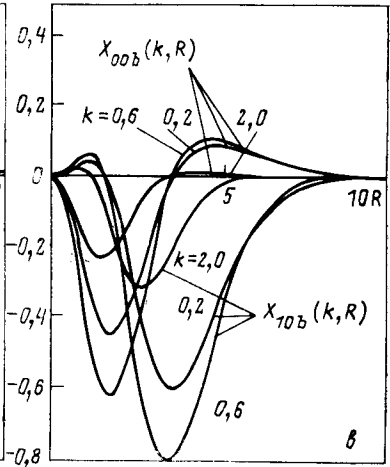
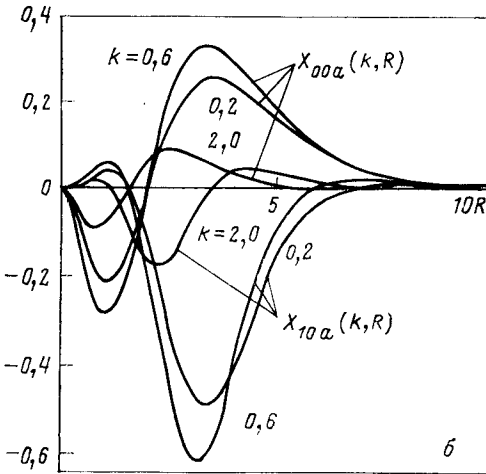


Рис. 23. Радиальные волновые функции $\chi_{n_1 n_2 m a}(R)$ и $\chi_{n_1 n_2 m b}(R)$ (а), $\chi_{n_2 m a}(k, R)$ (б) и $\chi_{n_2 m b}(k, R)$ (в) состояния ($J = v = 0$) мезомолекулы $p \mu$



На рис. 23 и 24 приведены графики функций $\chi_{ia}(R)$, $\chi_{ib}(R)$, $\chi_{sa}(k, R)$ и $\chi_{sb}(k, R)$ состояния ($J = 0, v = 0$) мезомолекулы $p \mu$ и состояния ($J = v = 1$) мезомолекулы $d t \mu$ *.

* Мы работаем в единицах $e = \hbar = m_a = 1$, в которых единица энергии $\epsilon_a = (m_a/m_\mu) 5626,33$ эВ, $m_a = m_\mu M_a / (m_\mu + M_a)$.

Результаты вычислений энергий связи $-\epsilon_{Jv}$ всех состояний (Jv) мезомолекул изотопов водорода и системы $e^-e^-e^+$ представлены в табл. 4—6. В первой строке приведены результаты наилучших вариационных расчетов [7, 16—18]. Во второй строке таблицы приведены значения $\epsilon_{Jv} = \epsilon_{Jv}^{(0)}$, вычисленные нами в двухуровневом приближении ($N_i = 1, N_s = 0$) адиабатического представления [14,

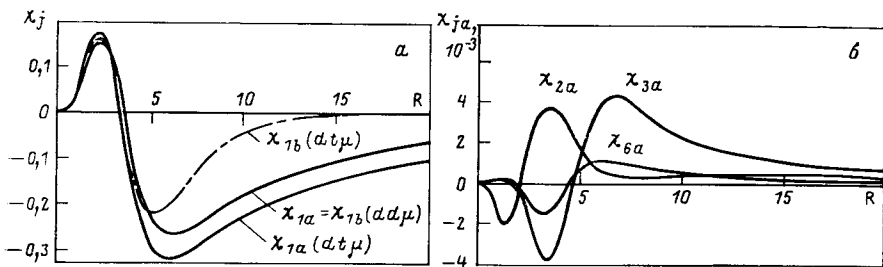


Рис. 24. Радиальные волновые функции $\chi_{n_1 n_2 m a}(R)$ (а) и $\chi_{n_1 n_2 m b}(R)$ (б) состояния ($J = v = 1$) мезомолекулы $dt\mu$. Для сравнения приведена функция $\chi_{000a}(R) = \chi_{000b}(R)$ того же состояния мезомолекулы $dd\mu$

22] с помощью программы СИСТЕМ. В этом приближении матрица потенциалов $\hat{U}(R)$ состоит только из одного блока $\hat{U}_{11}(R)$ (см. рис. 22) размерности 2×2 , точность вычислений $\epsilon_{Jv}^{(0)}$ для глубоких

Таблица 4. Энергия связи $-\epsilon_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) системы $e^-e^-e^+$ и мезомолекул $pp\mu$, $pd\mu$ и $pt\mu$

$e^-e^-e^+$	$pp\mu$		$pd\mu$		$pt\mu$		Метод
	(00)	(10)	(00)	(10)	(00)	(10)	
0,5	0,10121		0,07996		0,07239		(2M) ⁻¹
(00)	(00)	(10)	(00)	(10)	(00)	(10)	(Jv)
0,326	253,09	107,23	221,28	—	213,0	—	Вариационные расчеты [7, 16—18] Двухуровневое приближение [22] Теория возмущений [22, 23] ITER [22] ВААР [22] Эффективное двухуровневое приближение [62] Простой подход [63]
0,186	247,31	101,47	215,68	91,35	207,28	92,21	
0,295	253,55	107,33	221,49	98,79	213,85	101,30	
—	252,89	106,95	221,52	97,36	213,96	99,06	
0,323	252,95	106,96	221,52	97,40	213,97	99,01	
0,301	253,00	—	221,69	—	214,23	—	
—	252,45	111,16	220,54	97,18	213,55	98,31	

Таблица 5. Энергия связи $-e_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$

(Jv)	(00)	(01)	(10)	(11)	(20)	Метод
$dd\mu$ ($2M$) ⁻¹ = =0,05333	324,27	32,76	226,55	—	—	Вариационные расчеты [16, 17] Двухуровневое приближение [22]
	322,69	33,14	224,08	0,64	83,56	
	324,99	35,66	226,74	1,83	85,34	Теория возмущений [22] ITER * [22]
	325,05	35,81	226,61	1,39	86,31	
	325,04	35,80	226,61	1,91 **	86,32	ВААР [22] Эффективное двухуровневое приближение [62] Простой подход [63]
	325,00	35,71	—	—	—	
	325,08	36,06	228,49	2,33	89,66	
$dt\mu$ ($2M$) ⁻¹ = =0,04527	318,07	32,95	—	—	—	Вариационный расчет [17] Двухуровневое приближение [22]
	317,04	32,21	230,10	-0,47	99,90	
	319,09	34,70	232,61	0,63	103,16	Теория возмущений [22] ITER * [22]
	319,15	34,87	232,43	0,17	102,52	
	319,15	34,87	232,44	0,64 **	102,54	ВААР [22] Эффективное двухуровневое приближение [62] Простой подход [63]
	319,13	34,90	—	—	—	
	318,73	34,22	232,77	0,58	103,51	

* Вычисления по программе ITER выполнены при $R_m = 20$.

** Значения, полученные по программе ВААР при $R_m = 60$. При $R_m = 20 - \epsilon_{11}(dd\mu) = 1,39$ эВ и $-\epsilon_{11}(dt\mu) = 0,17$ эВ т. е. с точностью $\sim 10^{-3}$ эВ совпадают с результатами, полученными по программе ITER.

Таблица 6. Энергия связи $-e_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) мезомолекулы $tt\mu$ ($2M$)⁻¹ = 0,03625

(Jv) = (00)	(01)	(10)	(11)	(20)	(30)	Метод
361,4	75,2	288,72	—	—	—	Вариационные расчеты [16, 18] Двухуровневое приближение [22]
361,55	81,61	287,65	43,23	170,95	46,81	
362,89	83,68	289,19	45,15	172,79	48,90	Теория возмущений [22] ITER [22]
362,95	83,87	289,15	45,24	172,64	48,69	
362,95	83,58	289,15	45,24	172,65	48,70	ВААР [23] Эффективное двухуровневое приближение [22] Простой подход [63]
362,91	83,76	—	—	—	—	
363,03	84,07	290,22	45,93	174,80	51,28	

уровней мезомолекул составляет 1—5 эВ *. В двухуровневом приближении [14] состояние ($J = 1, v = 1$) мезомолекулы $dd\mu$ имеет энергию $\varepsilon_{11}^{(0)}(dd\mu) = -0,64$ эВ, состояние ($J = 1, v = 1$) мезомолекулы $d\mu$ отсутствует, а вместо него появляется квазистационарное состояние с энергией $\varepsilon_{11}^{(0)}(d\mu) = +0,47$ эВ и шириной $\Gamma = 0,2$ эВ [22, 65]. При увеличении числа N_m уравнений в системе (76а) этот квазистационарный уровень движется к границе континуума и при $N_i = 4, N_s = 0$ квазистационарное состояние становится стационарным.

В третьей строке табл. 4—6 приведены значения $\varepsilon_{Jv} = \varepsilon_{Jv}^d + \varepsilon_{Jv}^c$ вычисленные по теории возмущений в [22] согласно алгоритму работы [64]. Вклад дискретного спектра ε_{Jv}^d вычислялся по программе SISTEM при $N_i = 13, N_s = 0$, а первые функции $\chi_{1a}(R)$ и $\chi_{1b}(R)$, найденные при решении этой системы, использовались для вычисления функций $\chi_{sa}(k, R)$ и $\chi_{sb}(k, R)$ из уравнений:

$$\left. \begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv}^d - U_{sa, sa}^J(k, R) \right] \chi_{sa}(k, R) - \\ & - U_{sa, sb}(k, R) \chi_{sb}(k, R) = F_{sa}(k, R); \\ & F_{sa}(k, R) = U_{sa, 1a}(k, R) \chi_{1a}(R) + U_{sa, 1b}(k, R) \chi_{1b}(R); \\ & \left[\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv}^d - U_{sb, sb}^J(k, R) \right] \chi_{sb}(k, R) - \\ & - U_{sb, sa}(k, R) \chi_{sa}(k, R) = F_{sb}(k, R); \end{aligned} \right\} \quad (78a)$$

$$\left. \begin{aligned} & F_{sb}(k, R) = U_{sb, 1a}(k, R) \chi_{1b}(R) + U_{sb, 1b}(k, R) \chi_{1a}(R); \\ & \chi_{sa}(k, 0) = \chi_{sb}(k, 0) = 0; \chi_{sa}(k, R_m) = \chi_{sb}(k, R_m) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (78b)$$

Вклад сплошного спектра ε_{Jv}^c в энергию ε_{Jv} от состояний $|c\rangle = |ks\rangle$ вычисляется по формуле

$$\varepsilon_{Jv}^c = (2M)^{-1} \sum_{s=1}^{N_s} \int_{k_0}^{km} dk \int_0^{Rm} dR [\chi_{sa}(k, R) F_{sa}(k, R) + \chi_{sb}(k, R) F_{sb}(k, R)], \quad (79)$$

которая представляет вклад второго порядка теории возмущений Шредингера.

Четвертая строка содержит результаты вычислений ε_{Jv} по программе ITER с матрицей потенциалов $\hat{U}(R)$, которая схематично изображена на рис. 22.

* Именно в двухуровневом приближении выполнены ранние адиабатические расчеты, обзор которых дан в [1, 2]. Слабосвязанные состояния ($J = v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $d\mu$ в этих расчетах обнаружены не были точно так же, как и в вариационных, хотя предположение о существовании состояния ($J = v = 1$) $dd\mu$ -молекулы высказывалось давно [1, 66]; впервые это состояние было найдено в [14] (см. табл. 2).

Пятая строка содержит результаты вычислений ϵ_{Jv} по программе ВААР с частью матрицы потенциалов $\hat{U}(R)$, выделенной на рис. 22 пунктиром.

Во всех перечисленных случаях для построения потенциалов $\hat{U}_{ss'}(k, k', R)$ использованы лишь диагональные матричные элементы (67), связывающие соотношения $|ks\rangle$ сплошного спектра, т. е. эта часть потенциалов в уравнениях (76а) имеет вид $\hat{U}_{ss'}(k, k', R) = \hat{U}_{ss}(k, R) \delta_{ss'} \delta(k - k')$, причем в потенциалах учтен лишь ведущий член

$$\hat{U}_{ss}(k, R) = \hat{I} M k^2. \quad (80)$$

В проведенных вычислениях использованы следующие значения масс частиц (в единицах массы электрона m_e) и значение Ry [25]: $m_\mu = 206,769$; $M_p = 1836,152$; $M_d = 3670,481$; $M_t = 5496,918$; $Ry = 13,6058$ эВ.

Из табл. 4—6 видно, что значения ϵ_{Jv} , вычисленные по теории возмущений, весьма близки к значениям, вычисленным по программам ITER и ВААР. Значения ϵ_{Jv} , найденные по программам ITER и ВААР, совпадают между собой с большой точностью: $\sim 10^{-2}$ эВ для сильносвязанных и $\sim 10^{-3}$ эВ для слабосвязанных состояний мезомолекул. Это означает, что при вычислениях с указанной точностью вкладом потенциалов $\hat{U}_{ij}(R)$ и $i \neq j \neq 1$ и $\hat{U}_{ss'}(k, k', R)$ при $s \neq s'$ и $k \neq k'$ можно пренебречь. Как правило, результаты расчетов ϵ_{Jv} с однородными граничными условиями (76б) ($a_i = 0$, $b = 1$) при $R_m = 60$ и 20 не различаются между собой с точностью $\sim 10^{-2}$ эВ, поэтому вычисления по программе ITER были выполнены при $R_m = 20$. Исключение составляют слабосвязанные состояния ($J = 1, v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, для которых значения ϵ_{Jv} , полученные при $R_m = 20$ и 60 , заметно различаются (табл. 5), поэтому значения ϵ_{Jv} , полученные по программе ITER при $R_m = 20$ для состояния ($J = 1, v = 1$) молекул $dd\mu$ и $dt\mu$, можно использовать лишь для контроля точности вычислений и для оценки вклада потенциалов $\hat{U}_{ij}(R)$ при $i \neq j \neq 1$. Контрольные расчеты, выполненные для этих состояний при $R_m = 100$ с однородными и неоднородными граничными условиями (76б), показали, что погрешность вычислений ϵ_{Jv} , обусловленная выбором однородных граничных условий при $R_m = 60$, не превышает $\sim 10^{-3}$ эВ.

Вычислив функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$, можно найти вклад, который вносит в ϵ_{Jv} каждая пара состояний $|jp\rangle = |n_1 n_2 m p\rangle$ и $|sp\rangle = |kn_2 m p\rangle$ задачи двух центров. Это позволяет численно исследовать скорость сходимости разложения (60) и определить минимальное число членов в этом разложении, необходимое для вычисления ϵ_{Jv} с заданной точностью.

Домножая первую пару уравнений системы (76а) на $\chi_1(R)$ и интегрируя их по R , энергию ϵ_{Jv} состояния (Jv) с точностью $(2M)^{-3}$

можно представить в виде суммы [22]

$$\varepsilon_{Jv} = \varepsilon_{Jv}^{(0)} + \varepsilon_{Jv}^{(2)}, \tag{81a}$$

где

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{Jv}^{(0)} &= (2M)^{-1} \int_0^{Rm} dR \chi_1(R) \left\{ -\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + \hat{U}_{11}^J(R) \right\} \chi_1(R); \\ \varepsilon_{Jv}^{(2)} &= \varepsilon_d^{(2)} + \varepsilon_c^{(2)}; \\ \varepsilon_d^{(2)} &= \sum_{n_1=0}^{N_1} \sum_{n_2=0}^{N_2} \sum_{m=0}^{N_m} \varepsilon_{Jv}^{(2)} [n_1 n_2 m] = \\ &= \sum_{j=2}^{N_j} \varepsilon_{Jv}^{(2)} [j] \text{ при } [n_1 n_2 m] \neq [000]; \\ \varepsilon_c^{(2)} &= \sum_{n_2=0}^{N_2} \sum_{m=0}^{N_m} \int_{k_0}^{km} dk \varepsilon_{Jv}^{(2)} [kn_2 m] = \sum_{s=1}^{N_s} \int_{k_0}^{km} dk \varepsilon_{Jv}^{(2)} [ks]; \\ \varepsilon_{Jv}^{(2)} [j] &= (2M)^{-1} \int_0^{Rm} dR \chi_1(R) \hat{U}_{1j}(R) \chi_j(R); \\ \varepsilon_{Jv}^{(2)} [ks] &= (2M)^{-1} \int_0^{Rm} dR \chi_1(R) \hat{U}_{1s}(k, R) \chi_s(k, R). \end{aligned} \right\} \tag{81b}$$

При этом функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$ нормированы условием (76в). Суммы в правых частях равенств (81б) следует принимать в соответствии с определениями (74), (75), например:

$$\begin{aligned} \chi_1 \hat{U}_{1j} \chi_j &= \chi_{1a} U_{1a, ja} \chi_{ja} + \chi_{1a} U_{1a, jb} \chi_{jb} + \\ &+ \chi_{1b} U_{1b, ja} \chi_{ja} + \chi_{1b} U_{1b, jb} \chi_{jb} \text{ и т. д.} \end{aligned} \tag{81в}$$

Отметим, что величины $\varepsilon_{Jv}^{(0)}$ и $\varepsilon_{Jv}^{(2)}$, вычисленные по формулам (81), лишь приближенно совпадают с аналогичными величинами, вычисленными по теории возмущений [23, 64], поскольку используемые при этом функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$ точнее функций, построенных по теории возмущений, и отличаются от них членами $\sim (2M)^{-2}$.

В табл. 7 приведены вклады $-\varepsilon_{Jv}^{(2)} [n_1 n_2 m]$ (g, u)-пар состояний $|jp\rangle = |n_1 n_2 mp\rangle$, $p = (g, u)$ дискретного спектра задачи двух центров в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$. Видно, что приведенные значения с точностью $\sim 0,4$ эВ исчерпывают вклад состояний $|j\rangle$ дискретного спектра, т. е. для вычисления ε_{Jv} с такой точностью используемого нами набора потенциалов $\hat{U}_{ij}(R)$ достаточно.

В табл. 8 приведены величины

$$-\varepsilon_c^{(2)} [n_2 m] = - \int_{k_0}^{km} dk \varepsilon_{Jv}^{(2)} [kn_2 m], \tag{82}$$

которые представляют вклад (g, u) -пар состояний $|cp\rangle = |kn_2mp\rangle$, $p = (g, u)$ сплошного спектра задачи двух центров для различных наборов квантовых чисел $s = [n_2m]$.

Таблица 7. Вклады (81) $-\epsilon_{Jv}^{(2)}(j)$ (эВ) от пар состояний $|j\rangle \equiv |n_1n_2m\rangle$ в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$

n	$[n_1n_2m]$	pp μ		pd μ		dd μ	dt μ
		$(Jv) = (00)$	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)
2	[100]	1,591	1,114	1,213	0,946	0,310	0,282
	[010]	1,779	1,639	1,725	1,797	0,409	0,395
	[001]	—	0,465	—	0,321	0,104	0,067
3	[200]	0,332	0,229	0,232	0,181	0,059	0,053
	[110]	0,221	0,138	0,284	0,245	0,048	0,051
	[020]	0,001	0,003	0,000	0,001	0,008	0,003
	[101]	—	0,130	—	0,099	0,021	0,015
	[011]	—	0,000	—	0,000	0,001	0,001
4	[300]	0,128	0,088	0,088	0,069	0,022	0,019
	[210]	0,075	0,041	0,106	0,087	0,017	0,018
	[120]	0,001	0,002	0,000	0,001	0,003	0,002
$-\epsilon_d^{(2)}$		4,128	3,849	3,648	3,747	1,002	0,906

Таблица 8. Вклады (82) $-\epsilon_c^{(2)}[n_2m]$ (эВ) от пар состояний $|c\rangle \equiv |kn_2m\rangle = |kn_2mp\rangle$ в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$

$[n_2m]$	pp μ		pd μ		dd μ	dt μ	
	$(Jv) = (00)$	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)	
[00]	0,892	0,519	0,831	0,598	0,120	0,117	
[10]	0,407	0,229	1,085	0,834	0,092	0,122	
[01]	—	0,694	—	0,500	0,057	0,046	
[20]	0,172	0,191	0,262	0,301	0,043	0,061	
[11]	—	0,065	—	0,043	0,025	0,014	
[30]	0,017	0,025	0,032	0,045	0,012	0,014	
$-\epsilon_c^{(2)}$		1,488	1,723	2,209	2,231	0,349	0,374

На рис. 25 для состояния ($J = 1, v = 1$) мезомолекулы $dt\mu$ представлены функции $-\varepsilon_{11} [kn_2m]$ при нескольких фиксированных наборах $s = [n_2m]$ и функция

$$-\varepsilon_{11}^{(2)}(k) = -\sum_{n_2m} \varepsilon_{11}^{(2)} [kn_2m]. \quad (83)$$

Видно, что существенный вклад в $\varepsilon_c^{(2)}$ вносит лишь область значений $0 \leq k \leq 3$. Часть функции $-\varepsilon_{11}^{(2)}(k)$, изображенная пунктиром, определяет вклад $-\delta\varepsilon_{11}^c$ в $-\varepsilon_{11}(dt\mu)$ состояний сплошного спектра задачи двух центров на интервале $0 \leq k \leq 0,2$.

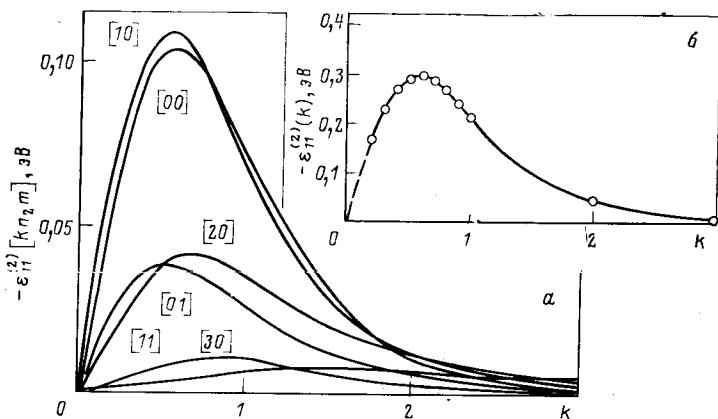


Рис. 25. Вклады (g, u)-пар состояний $[n_2m] = [n_2mp]$ сплошного спектра задачи двух центров в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$ состояния ($J = v = 1$) мезомолекулы $dt\mu$ при различных значениях k (а) и суммарный вклад $-\varepsilon(k)$ (g, u)-пар состояний $[ksp]$ как функция импульса k задачи двух центров (б)

В табл. 9 представлены относительные вклады дискретного и сплошного спектров задачи двух центров в $-\varepsilon_{Jv}$. Видно, что для сильносвязанных состояний определяющий вклад в ε_{Jv} вносит $\varepsilon_{Jv}^{(0)}$, т. е. пара $|1p\rangle = |000g\rangle, |000u\rangle$, а вклад $\varepsilon_{Jv}^{(2)}$ составляет $\sim 5\%$ ε_{Jv} . Для состояния ($J = v = 1$) мезомолекулы $dd\mu$ вклад $\varepsilon_{11}^{(2)}$ в два раза превышает вклад $\varepsilon_{11}^{(0)}$, а состояние ($J = v = 1$) мезомолекулы $dt\mu$ нельзя обнаружить, если не учитывать вклада $\varepsilon_{11}^{(2)}$ возбужденных состояний задачи двух центров.

Из анализа полученных результатов следует, что относительная точность $\Delta\varepsilon/\varepsilon$ вычислений ε_{Jv} при решении системы уравнений (76) с матрицей потенциалов $\hat{U}(R)$, используемой нами, составляет $\sim 10^{-3}$ для сильносвязанных и $\sim 10^{-2}$ для слабосвязанных состояний n -мезомолекул.

Т а б л и ц а 9. Вклады состояний дискретного и сплошного спектров задачи двух центров в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$ (эВ)

Мезомолекулы	$p\rho\mu$		$p\mu$		$d\mu$	$dt\mu$
	$(Jv) = (00)$	(10)	(00)	(10)	(11)	(11)
$-E_{1a}$	2528,52		2663,23		2663,23	2711,27
$-\epsilon_{Jv}^{(0)}$	246,947	101,236	215,401	91,144	0,558 *	-0,645 *
$-\epsilon_d^{(2)}$	4,127	3,849	3,604	3,747	1,002	0,906
$-\epsilon_c^{(2)}$	1,488	1,723	2,199	2,321	0,349	0,374
$-\epsilon_{Jv}^{(2)}$	5,615	5,572	5,803	6,068	1,351	1,280
$-\epsilon_{Jv}^{(0)} - \epsilon_{Jv}^{(2)}$	252,562	106,808	221,204	97,203	1,909	0,635
$-\epsilon_{Jv}$	252,954	106,982	221,543	97,399	1,907	0,636

* Значения получены по формуле (81б). В двухуровневом приближении системы (76а) вместо приведенных здесь значений имеем $\epsilon_{11}^{(0)}(d\mu) = -0,640$ эВ и $\epsilon_{11}^{(0)}(dt\mu) = -0,474$ эВ (см. табл. 5).

6. СХОДИМОСТЬ АДИАБАТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

Исследование, выполненное в предыдущем разделе, показывает, что для вычисления энергий ϵ_{Jv} системы трех частиц с указанной относительной точностью достаточно использовать ~ 40 базисных функций (28) состояний $|j\rangle = |Nlm\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров и ~ 10 состояний $|s\rangle = |lm\rangle$ сплошного спектра при значениях $0,2 \leq k \leq 5$. Изложим теперь способ [67] вычисления вкладов $\delta\epsilon_{Jv}^d$ и $\delta\epsilon_{Jv}^c$ высших состояний $|j\rangle = |Nlm\rangle$ и $|c\rangle = |klm\rangle$ и тем самым конструктивно решим вопрос о сходимости адиабатического разложения. Эффективность излагаемого алгоритма мы продемонстрируем на примере вычисления энергии системы $e^-e^+e^+$, для которой формальный параметр $(2M)^{-1} = 1/2$, состояния $(Jv) = (00)$ мезомолекулы $p\mu$ и состояний (10) и (11) мезомолекул $d\mu$ и $dt\mu$.

В дальнейшем используем матрицу потенциалов $\hat{U}(R)$ с $N_i = 23$, заданную на сетке узлов $R = 0,1(0,1)20(1)100$, и неоднородные граничные условия (76б) при $R_m = 100$. Пределы интегрирования в (77) по переменной k соответственно равны $k_0 = 0,2$ и $k_m = 5$ для состояний $|s\rangle \equiv |4\rangle = |30\rangle$, $k_0 = 0,2$ и $k_m = 10$ для состояний $|s\rangle \equiv |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |5\rangle, |6\rangle$. В соответствии с этим изменяются веса квадратурной формулы (77) по сравнению с выбором $k_0 = 0$, используемым в разд. 5. В отличие от определения (80) диагональные

потенциалы $\hat{U}_{ss}(k, R)$ выбраны так

$$\hat{U}_{ss}(k, R) = \hat{I} \{Mk^2 - k^2/2\}, \quad (84)$$

что частично учитывают поправку от матричных элементов $H_{ss}^*(k, R) = k^2/2$ [54] (см. разд. 7) в соответствии с определениями (65), (67). Значения ϵ_{Jv} , полученные при указанном наборе параметров с помощью программы ВААР, приведены в первой строке табл. 10

Таблица 10. Энергии ϵ_{Jv} (эВ) и поправки $\delta\epsilon_{Jv}$ и $\delta\epsilon_{Jv}^h$

Система	$e^-e^-e^+$	$p\mu$	$d\mu$	$d\mu$	$d\mu$	$d\mu$
(Jv)	(00)	(00)	(10)	(10)	(11)	(11)
ϵ_{Jv}	-0,3336	-221,691	-226,683	-232,512	-1,9420	-0,6845
$\delta\epsilon_{Jv}$	-0,0056	-0,221	-0,104	-0,095	-0,0585	-0,0544
$\delta\epsilon_{Jv}^h$	0,0106	0,143	0,103	0,108	0,0466	0,0596

(в отличие от табл. 4—6 вклад $\delta\epsilon_{Jv}^c$ состояний $|c\rangle = |klm\rangle$ сплошного спектра в интервале $0 \leq k \leq 0,2$ в значение ϵ_{Jv} не включен).

При вычислении поправки

$$\delta\epsilon_{Jv} = \delta\epsilon_{Jv}^d + \delta\epsilon_{Jv}^c \quad (85)$$

от высших состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ задачи двух центров прежде всего учтем то обстоятельство, что функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$ экспоненциально затухают в области $R \geq 3$ (для сильносвязанных состояний) и в области $R \geq 6$ (для слабосвязанных состояний, см. рис. 23 и 24). Это означает, как видно из формул (81), что для вычисления ϵ_{Jv} потенциалы $\hat{U}_{1j}(R)$ и $\hat{U}_{1s}(k, R)$ достаточно знать лишь в ограниченной области изменения $R \leq 6$. В этой области двухцентровые функции $\varphi_j(\mathbf{r}; R)$ и $\varphi_s(\mathbf{r}; k, R)$ (25) с хорошей точностью аппроксимируются функциями водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = Z_a + Z_b$ при выполнении условий [33]:

$$p_i = \frac{R}{2} \{-2E_i(R)\}^{1/2} \approx RZ/2N \ll 1; \quad c = kR/2 \ll 1, \quad (86)$$

т. е. при $N \geq 6$ и $k \leq 0,3$.

Известно, что волновые функции дискретного и сплошного спектров водородоподобного атома на границе сплошного спектра переходят друг в друга при замене $Z/N \leftrightarrow ik$ [68, 69]. Поэтому при исследовании зависимости энергии ϵ_{Jv} системы трех частиц от числа N_i и N_c уравнений системы (76а), т. е. от числа использованных базисных функций, для классификации состояний $|i\rangle$ и $|c\rangle$ задачи двух

Таблица 11. Классификация состояний $|j\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров по квантовым числам объединенного и разъединенных атомов

j	Объединенный атом		Разъединенные атомы			
	$l = 2n_2 + m$	$l = 2n_2 + m + 1$	n_1	n_2	m	n
1	$1s\sigma_g$	$2p\sigma_u$	0	0	0	1
2	$2s\sigma_g$	$3p\sigma_u$	1	0	0	2
3	$3d\sigma_g$	$4f\sigma_u$	0	1	0	2
4	$2p\pi_u$	$3d\pi_g$	0	0	1	2
5	$3s\sigma_g$	$4p\sigma_u$	2	0	0	3
6	$4d\sigma_g$	$5f\sigma_u$	1	1	0	3
7	$5g\sigma_g$	$6h\sigma_u$	0	2	0	3
8	$3p\pi_u$	$4d\pi_g$	1	0	1	3
9	$4f\pi_u$	$5g\pi_g$	0	1	1	3
10	$3d\delta_g$	$4f\delta_u$	0	0	2	3

центров удобнее использовать сферические квантовые числа $|j\rangle = |Nlm\rangle$ и $|c\rangle = |klm\rangle$ и, следовательно, систему уравнений*:

$$\left. \begin{aligned}
 & \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv} \right) - U_{Nlm, Nlm}^J(R) \right\} \chi_{Nlm}(R) = \\
 & = \sum_{N'=0}^{N_0} \sum_{l'=0}^{l_N} \sum_{m'=0}^{\xi_{l'}} U_{Nlm, N'l'm'}(R) \chi_{N'l'm'}(R) + \\
 & + \sum_{l_c} \sum_{l'=0}^{\xi_{l'}} \int_{m'=0}^{k_m} dk U_{Nlm, l'm'}(k, R) \chi_{l'm'}(k, R); \\
 & \left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2M\varepsilon_{Jv} \right) - U_{lm, lm}^J(k, R) \right\} \chi_{lm}(k, R) = \\
 & = \sum_{N'=0}^{N_0} \sum_{l'=0}^{l_N} \sum_{m'=0}^{\xi_{l'}} U_{lm, N'l'm'}(k, R) \chi_{l'm'}(k, R) + \\
 & + \sum_{l_c} \sum_{l'=0}^{\xi_{l'}} \int_{m'=0}^{k_m} dk U_{lm, l'm'}(k, k', R) \chi_{N'l'm'}(R); \\
 & \left. \begin{aligned}
 & \chi_{Nlm}(0) = 0; \quad a_{Nlm} \chi'_{Nlm}(R_m) + b_{Nlm} \chi_{Nlm}(R_m) = 0; \\
 & \chi_{lm}(k, 0) = 0, \quad \chi_{lm}(k, R_m) = 0;
 \end{aligned} \right\} \quad (86b)
 \end{aligned} \right\} \quad (86a)$$

* Соответствие между наборами $j = (Nlm)$ и $j = [n_1 n_2 m p]$ сферических и параболических квантовых чисел дается формулами (46) и (37), см. также табл. 11.

$$\left. \begin{aligned} & \sum_{N=0}^{N_0} \sum_{l=0}^{l_N} \sum_{m=0}^{\zeta_l} \int_0^{Rm} dR \chi_{Nlm}^2(R) + \sum_{l=0}^{l_c} \sum_{m=0}^{\zeta_l} \int_{k_0}^{km} dk \int_0^{Rm} dR \chi_{lm}^2(k, R) = 1; \\ & N_m = 2(N_i + N_c), \quad 2N_i = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_{l=0}^{l_N} \sum_{m=0}^{\zeta_l}, \quad 2N_c = \sum_{l=0}^{l_c} \sum_{m=0}^{\zeta_l} N_h^{(lm)}; \\ & l_N \leq N - 1; \quad \zeta_l = \min(l, J); \quad N_h^{(lm)} = N_h^{(s)}; \end{aligned} \right\} \quad (86b)$$

узловые точки $N_h^{(s)}$ определены формулой (77) при $k_0 = 0, 2$.

Домножая слева первые два уравнения системы (86а) для функций $\chi_{100}(R)$ и $\chi_{210}(R)$ соответственно на $\chi_{100}(R)$ и $\chi_{210}(R)$, складывая их и интегрируя в пределах $0 \leq R \leq R_m$, приходим к соотношениям [67]:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{Jv} = \varepsilon_{Jv}^d + \varepsilon_{Jv}^c; \quad \varepsilon_{Jv}^d = \sum_{N=1}^{N_0} \varepsilon_N; \quad \varepsilon_N = \sum_{l=0}^{l_N} \sum_{m=0}^{\zeta_l} \varepsilon_{Nlm}, \end{aligned} \right\} \quad (87a)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{100} &= (2MC)^{-1} \int_0^{Rm} dR \left\{ \chi_{100}(R) \left[-\frac{d^2}{dR^2} + U_{100, 100}^J(R) \right] \times \right. \\ & \times \chi_{100}(R) + \chi_{210}(R) U_{210, 100}(R) \chi_{100}(R) \left. \right\}; \\ \varepsilon_{210} &= (2MC)^{-1} \int_0^{Rm} dR \left\{ \chi_{210}(R) \left[-\frac{d^2}{dR^2} + U_{210, 210}^J(R) \right] \times \right. \\ & \times \chi_{210}(R) + \chi_{100}(R) U_{100, 210}(R) \chi_{210}(R) \left. \right\}; \\ \varepsilon_{Nlm} &= (2MC)^{-1} \int_0^{Rm} dR [\chi_{100}(R) U_{100, Nlm}(R) + \\ & + \chi_{210}(R) U_{210, Nlm}(R)] \chi_{Nlm}(R) \text{ при } (Nlm) \neq (100), (200); \\ \varepsilon_{Jv}^c &= \int_{k_0}^{km} dk \varepsilon(k), \quad \varepsilon(k) = \sum_{l=0}^{l_c} \sum_{m=0}^{\zeta_l} \varepsilon_{lm}(k); \\ \varepsilon_{lm}(k) &= (2MC)^{-1} \int_0^{Rm} dR [\chi_{100}(R) U_{100, lm}(k, R) + \\ & + \chi_{210}(R) U_{210, lm}(k, R)] \chi_{lm}(k, R); \\ C &= \int_0^{Rm} dR [\chi_{100}^2(R) + \chi_{210}^2(R)]; \end{aligned} \right\} \quad (87b)$$

функции $\chi_i(R)$ и $\chi_s(k, R)$ нормированы условием (86в) полной нормировки.

Соотношения (87) в отличие от используемых ранее соотношений (81) являются точным следствием первых двух уравнений системы (86а) с матрицей $U(R)$, используемой в программе ВААР (см. рис. 22) [Напомним, что значения ϵ_{Jv} , найденные по программам ИТЕР и ВААР с точностью $\sim 10^{-2}$ эВ для сильносвязанных и $\sim 10^{-3}$ эВ для слабосвязанных состояний мезомолекул, совпадают между собой (см. табл. 4—6), поэтому в пределах указанной точности достаточно ограничиться программой ВААР.]

В табл. 12 приведены вклады $-\epsilon_N$ и $-\epsilon_{Jv}^d$ в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$ состояний $|Jv\rangle$ системы $e^-e^+e^+$ и мезомолекул $pd\mu$, $dd\mu$ и $dt\mu$. При вычислении вклада $-\epsilon_N$ от оболочек $N = 7, 8, 9$ была учтена лишь часть состояний $j = |Nlm\rangle$ с различными l и m , в таблице приведен их суммарный вклад.

В табл. 13 и 14 представлены вклады $-\epsilon_{Nlm}$ в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$ состояния ($J = 1, v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$, которые позволяют проследить скорость сходимости разложения (60) при вычислении вклада $-\epsilon_{Jv}^d$. Прочерком отмечены состояния оболочек $N = 7-9$, которые не учитывались в данных расчетах (вклад каждого из них $< 0,002$ эВ).

В табл. 15—17 приведены вклады $-\epsilon(k)$ и $-\epsilon_{lm}(k)$ в $-\epsilon_{Jv}^c$ от состояний $|klm\rangle$ сплошного спектра задачи двух центров, аналогичные вкладам $-\epsilon_N$ и $-\epsilon_{Nlm}$ от состояний $|Nlm\rangle$ дискретного спектра, приведенным в табл. 12—14. При вычислении ϵ_{Jv}^c были учтены все вклады $\epsilon_{lm}(k)$ с $m = 0, l = 0, \dots, 7$ и $m = 1, l = 1, 2, 3, 4$. Неучтенные вклады

$$\epsilon_{lm} = \int_0^{k_0} dk \epsilon_{lm}(k) \tag{87г}$$

от более высоких l не превышают 0,01 эВ [22]. По данным табл. 8, 16, 17 можно оценить вклад состояний $|klm\rangle$ с $l \geq 8$.

Из формул (87) видно, что поправки $\delta\epsilon_{Jv}^d$ от высших состояний $N > N_0$ дискретного спектра и $\delta\epsilon_{Jv}^c$ от области $0 \leq k \leq k_0$ сплошного спектра задачи двух центров соответственно равны:

$$\delta\epsilon_{Jv}^d = \sum_{N=N_0+1}^{\infty} \epsilon_N; \delta\epsilon_{Jv}^c = \int_0^{k_0} \epsilon(k) dk, \tag{88}$$

где ϵ_N и $\epsilon(k)$ определены соотношениями (87) при $N > N_0$ и $k < k_0$. При $N_0 \gg 1$ и $k_0 \ll 1$, т. е. при выполнении условия (86), выражения (88) можно представить в виде [67]

$$\left. \begin{aligned} \delta\epsilon_{Jv}^d &= \int_{N_1=N_0+1}^{\infty} \epsilon_N dN = \int_{N_1}^{\infty} \frac{N^3}{Z^2} \epsilon_N d \left(-\frac{Z^2}{2N^2} \right) = \int_{E_1}^0 f_d(E) dE; \\ \delta\epsilon_{Jv}^c &= \int_0^{k_0} \frac{\epsilon(k)}{k} d \left(\frac{k^2}{2} \right) = \int_0^{E_0} f_c(E) dE, \end{aligned} \right\} \tag{89}$$

Т а б л и ц а 12. Вклады $-\varepsilon_N$ (эВ) в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$

N	$e^-e^-e^+$	$p d\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$
	$(Jv) = (00)$	(00)	(10)	(10)	(11)	(11)
1	0,1750	213,685	224,098	229,876	0,5509	-0,8497
2	0,0352	2,998	0,605	0,736	0,3107	0,4652
3	0,0606	2,087	0,922	0,842	0,5730	0,5291
4	0,0070	0,402	0,171	0,167	0,0914	0,0928
5	0,0031	0,162	0,070	0,068	0,0449	0,0396
6	0,0017	0,683	0,036	0,035	0,0224	0,0205
9						
$-\sum_{N=7}^9 \varepsilon_N$	0,0005	0,038	0,014	0,015	0,0101	0,0099
$-\varepsilon_{Jv}^d = -\sum_{N=1}^9 \varepsilon_N$	0,2831	219,455	255,916	231,740	1,6033	0,3073

Т а б л и ц а 13. Вклады $-\varepsilon_{Nlm}$ (эВ) в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$ состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dd\mu$

(lm)	N = 1	2	3	4	5	6	7	8	9	$-\sum_{N=1}^9 \varepsilon_{Nlm}$
(00)	0,5509	0,3107	0,0591	0,0219	0,0107	0,0061	—	—	—	0,9594
(20)		0,4096	0,0485	0,0170	0,0083		0,0047	—	—	0,4881
(21)		0,1043	0,0210	0,0082	0,0041		0,0024	—	—	0,1400
(40)				0,0081	0,0033		0,0018	0,0011	—	0,0143
(41)				0,0009	0,0006		—	—	—	0,0015
(60)							0,0001	—	—	0,0001
$-\varepsilon_N$	0,5509	0,3107	0,0591	0,0219	0,0107	0,0061	0,0090	0,0011	—	$-\varepsilon_{11}^d = 1,6033$
$-f_d(E)$	0,1377	0,6214	3,8676	1,4619	1,4019	1,2075				

Таблица 14. Вклады $-\varepsilon_{Nlm}$ (эВ) в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$ состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы dH

(<i>lm</i>)	<i>N</i> = 1	2	3	4	5	6	7	8	9	$-\sum_{N=1}^9 \varepsilon_{Nlm}$
(00)	-0,8497	0,2818	0,0519	0,0191	0,0093	0,0053	—	—	—	-0,4823
(10)		0,1749	0,0097	0,0024	0,0010	0,0005	0,0003	—	—	0,1888
(11)		0,0085	0,0011	0,0003	0,0002	0,0001	—	—	—	0,0102
(20)		—	0,4020	0,0505	0,0176	0,0085	0,0048	—	—	0,4834
(21)			0,0644	0,0140	0,0056	0,0029	0,0017	—	—	0,0886
(30)				0,0059	0,0021	0,0011	0,0006	0,0004	—	0,0101
(31)				0,0006	0,0003	—	—	—	—	0,0009
(40)					0,0034	0,0019	0,0011	0,0008	—	0,0072
(41)					0,0003	0,0002	—	—	—	0,0005
(50)						0,0002	0,0001	0,0000	0,0000	0,0003
(60)							0,0000	—	—	0,0000
(70)							—	0,0000	—	0,0000
$-\varepsilon_N$	-0,8497	0,4652	0,5290	0,0928	0,0396	0,0205	0,0087	0,0012	0,0000	$-\varepsilon_1^d = 0,3073$
$-f_d(E)$	-0,2124	0,9303	3,5701	1,4842	1,2385	1,4070				

Таблица 15. Вклады $-\varepsilon(k)$ (эВ) состояний $|ks\rangle$ сплошного спектра в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$

k	$e^-e^-e^+$	$p d\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$
	$(Jv) = (00)$	(00)	(10)	(10)	(11)	(11)
0,2	0,0182	0,697	0,325	0,297	0,1846	0,1702
0,4	0,0312	1,178	0,535	0,494	0,2943	0,2789
0,6	0,0368	1,375	0,597	0,560	0,3125	0,3086
0,8	0,0360	1,340	0,554	0,527	0,2652	0,2770
1,0	0,0314	1,192	0,463	0,448	0,2014	0,2224
2,0	0,0082	0,439	0,116	0,128	0,0373	0,0500
5,0	0,0001	0,031	0,002	0,005	0,0006	0,0012
10,0	0,0000	0,001	0,000	0,000	0,0000	0,0000
$-\varepsilon_{Jv}^c$	0,0505	2,236	0,767	0,872	0,3387	0,3773

Таблица 16. Вклады $-\varepsilon_{lm}(k)$ (87в) и $-\varepsilon_{lm}$ (87г) в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$ (эВ) состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dd\mu$

(lm)	$k=0,2$	0,3	0,4	0,5	1,0	2,0	5,0	$-\varepsilon_{lm}$
(00)	0,0665	0,0899	0,1046	0,1109	0,0741	0,0094	0,0000	0,1167
(20)	0,0585	0,0796	0,0925	0,0969	0,0496	0,0058	0,0001	0,0881
(21)	0,0321	0,0429	0,0490	0,0508	0,0309	0,0066	0,0001	0,0550
(40)	0,0191	0,0259	0,0299	0,0312	0,0190	0,0101	0,0001	0,0419
(41)	0,0065	0,0010	0,0134	0,0163	0,0182	0,0032	0,0001	0,0246
(60)	0,0010	0,0023	0,0037	0,0054	0,0087	0,0020	0,0001	0,0123
$-\varepsilon(k)$	0,1838	0,2506	0,2930	0,3115	0,2006	0,0371	0,0006	$-\varepsilon_{11}^c = 0,3387$
$-f_c(E)$	0,9190	0,8354	0,7326	0,6229	0,2006	0,0186	0,0001	

Таблица 17. Вклады $-\varepsilon_{lm}(k)$ и $-\varepsilon_{lm}$ в энергию связи $-\varepsilon_{Jv}$ состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $d\mu$

(lm)	$k=0,2$	0,3	0,4	0,5	1,0	2,0	5,0	$-\varepsilon_{lm}$
(00)	0,0479	0,0792	0,0933	0,1000	0,0686	0,0089	0,0000	0,1071
(10)	0,0044	0,0060	0,0070	0,0075	0,0058	0,0016	0,0000	0,0102
(11)	0,0008	0,0010	0,0012	0,0013	0,0011	0,0002	0,0000	0,0016
(20)	0,0577	0,0779	0,0902	0,0947	0,0572	0,0099	0,0001	0,0982
(24)	0,0230	0,0312	0,0362	0,0384	0,0259	0,0057	0,0001	0,0445
(30)	0,0084	0,0102	0,0150	0,0171	0,0152	0,0031	0,0001	0,0232
(31)	0,0008	0,0010	0,0011	0,0011	0,0004	0,0001	0,0000	0,0009
(40)	0,0171	0,0253	0,0326	0,0383	0,0348	0,0091	0,0003	0,0556
(41)	0,0024	0,0039	0,0053	0,0068	0,0097	0,0025	0,0001	0,0136
(50)	0,0004	0,0005	0,0005	0,0005	0,0018	0,0037	0,0001	0,0073
(60)	0,0003	0,0006	0,0010	0,0015	0,0055	0,0051	0,0003	0,0128
(70)	0,0000	0,0000	0,0001	0,0002	0,0002	0,0007	0,0001	0,0024
$-\varepsilon(k)$	0,1731	0,2386	0,2836	0,3074	0,2261	0,0508	0,0012	$-\varepsilon_{11}^c = 0,3772$
$-f_c(E)$	0,8654	0,7953	0,7089	0,6149	0,2261	0,0254	0,0003	

где $E = -Z^2/2N^2$ и $E = k^2/2$ — энергии дискретного и сплошного спектров водородоподобного атома соответственно, а функции

$$f_d(E) = (N^3/Z^2) \varepsilon_N \text{ и } f_c(E) = \varepsilon(k)/k \quad (90a)$$

совпадают между собой в пределе $N \rightarrow \infty$ и $k \rightarrow 0$

$$f_d(0) = f_c(0) = A, \quad (90b)$$

что является следствием известных свойств волновых функций водородоподобного атома на границе сплошного спектра [68, 69].

На рис. 26 приведены значения функций $-f_d(E)$ и $-f_c(E)$, вычисленные по формулам (90a) в точках $N = 4, 5, 6$ и $k = 0,2$;

0,3; 0,4, а также интерполирующая функция $-f(E)$ на интервале $E_1 \leq E \leq E_0$. Функция $f(E)$ выбрана в виде

$$f(E) = A + BE + CE^2 \tag{91}$$

ес коэффициенты, определенные по значениям функций $f_d(E)$ и $f_c(E)$ в точках $N = 5$ и 6 и $k = 0,2$ и $0,3$, представлены в табл. 18*.

Поправки $\delta\epsilon_{Jv}^d$ и $\delta\epsilon_{Jv}^c$ вычисляются по формулам:

$$\left. \begin{aligned} \delta\epsilon_{Jv}^d &= \sum_{N=N_1}^{N_2} \frac{4}{N^3} \left(A - B \frac{2}{N^2} + C \frac{4}{N^4} \right) + \frac{2A}{N^2} - \sum_{N=7}^9 \epsilon_N; \\ \delta\epsilon_{Jv}^c &= AE + BE^2/2 + CE^3/3 \end{aligned} \right\} \tag{92}$$

при $E = 0,02$, $N_1 = 7$, $N_2 = 40$, которые следуют из определений (88) и (91) в соответствии с рис. 26.

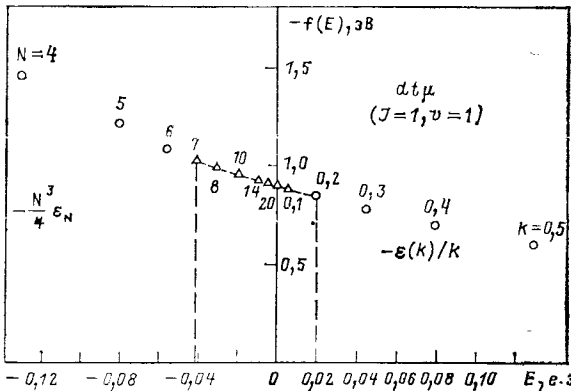


Рис. 26. Вычисление вкладов $\delta\epsilon_{Jv}^d$ и $\delta\epsilon_{Jv}^c$ от высших состояний задачи двух центров в энергию ϵ_{Jv} состояния ($J = v = 1$) мезомолекулы $dt\mu$

Значения $\delta\epsilon_{Jv}$ для сильносвязанных состояний мезомолекул составляют $\sim 0,1$ эВ, а для слабосвязанных состояний ($J = 1$, $v = 1$) мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$ не превышают $\sim 0,05$ эВ.

Погрешности $\Delta(\delta\epsilon_{Jv})$ вычисления поправок $\delta\epsilon_{Jv}$ от высших состояний $|i\rangle$ и $|k\rangle$ определяются точностью вычисления коэффициентов A , B и C и точностью численного интегрирования при вычислении ϵ_N и $\epsilon(k)$ по формулам (87). Эти погрешности не превышают $\sim 0,005$ эВ для сильносвязанных и $\sim 0,001$ эВ для слабосвязанных ($J = 1$, $v = 1$) состояний мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$.

* При вычислении ϵ_{Jv} использована только часть состояний $|Nlm\rangle$ из оболочек $N = 7, 8, 9$: 7 состояний из 13 при $N = 7$; 4 из 15 при $N = 8$; 1 из 17 при $N = 9$. Поэтому для построения $f(E)$ значения $f_d(E)$ при $N = 7, 8, 9$ не использовались. В определениях (92) учтено, что вклады ϵ_N для $N = 7, 8, 9$ уже включены в ϵ_{Jv} .

Таблица 18. Коэффициенты разложения функции $f(E)$, значения поправок $\delta\epsilon_{Jv}^d$, $\delta\epsilon_{Jv}^c$ и $\delta\epsilon_{Jv}$ к энергии ϵ_{Jv} (эВ) и погрешности $\Delta(\delta\epsilon_{Jv})$ (эВ) вычисления поправок $\delta\epsilon_{Jv}$

Коэффициенты $f(E)$	e^-e^+	$pd\mu$	$dd\mu$
	$(Jv) = (00)$	(00)	(10)
$A \pm \Delta A$	$-0,095 \pm 0,006$	$-3,69 \pm 0,06$	$-1,70 \pm 0,05$
$B \pm \Delta B$	$0,02 \pm 0,2$	11 ± 2	$3,8 \pm 1,7$
$C \pm \Delta C$	$-0,4 \pm 5$	-63 ± 50	-17 ± 49
$\delta\epsilon_{Jv}^d$	$-0,0037$	$-0,149$	$-0,071$
$\delta\epsilon_{Jv}^c$	$-0,0018$	$-0,072$	$-0,033$
$\delta\epsilon_{Jv} \pm \Delta(\delta\epsilon_{Jv})$	$-0,0056 \pm 0,0019$	$-0,221 \pm 0,004$	$-0,104 \pm 0,003$

Коэффициенты $f(E)$	$dt\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$
	(10)	(11)	(11)
$A \pm \Delta A$	$-1,57 \pm 0,03$	$-0,969 \pm 0,039$	$-0,915 \pm 0,020$
$B \pm \Delta B$	$4,6 \pm 0,9$	$3 \pm 1,3$	$2,7 \pm 0,6$
$C \pm \Delta C$	-23 ± 26	-23 ± 36	-13 ± 18
$\delta\epsilon_{Jv}^d$	$-0,064$	$-0,0396$	$-0,0366$
$\delta\epsilon_{Jv}^c$	$-0,031$	$-0,0189$	$-0,0178$
$\delta\epsilon_{Jv} \pm \Delta(\delta\epsilon_{Jv})$	$-0,095 \pm 0,002$	$-0,0585 \pm 0,0026$	$-0,0544 \pm 0,0012$

Выполненное исследование позволяет вычислить вклады $\delta\epsilon_{Jv}$ в энергию ϵ_{Jv} мезомолекул от высших состояний $|Nlm\rangle$ и $|klm\rangle$ задачи двух центров при $N \rightarrow \infty$ и $k \rightarrow 0$. Оно показывает, что использование ограниченного набора базисных двухцентровых функций в разложении (60) волновой функции системы трех частиц при вычислении энергии ϵ_{Jv} состояний (Jv) мезомолекул не является препятствием для нахождения ϵ_{Jv} с высокой точностью. Полученный результат слабо зависит от малости формального параметра разложения $(2M)^{-1}$, который для μ -мезомолекул равен $\sim 0,1$, поэтому изложенный метод можно использовать также для вычисления энергии связи таких систем, как e^-e^+ и H^- , для которых $(2M)^{-1} = 1/2$ и ≈ 1 соответственно.

Все предыдущие исследования сходимости адиабатического разложения были выполнены с матрицей $U(R)$ эффективных потенциалов, заданной на сетке узлов $R = 0,1(0,1)20(1)100$, т. е. с шагом $h_1 = 0,1$ в области действия потенциалов и с шагом $h_2 = 1$ в асимптотической области. В этом случае разностные схемы второго порядка [57—59], использованные для решения краевых задач (76) и (86), позволяют вычислять энергии ϵ_{Jv} с точностью $\sim 0,1$ эВ для сильно-связанных и $0,05$ эВ для слабосвязанных состояний мезомолекул [70, 71].

Для повышения точности вычислений в [70] для решения задач (76) и (86) использована разностная схема четвертого порядка, в [71] значения ϵ_{Jv} вычислены по программе ВААР на трех сгущающихся сетках $R = h_1 (h_1) 20 (h_2) R_m$:

$$R = 0,1(0,1)20(1) R_m; R = 0,05(0,05)20(0,5) R_m;$$

$$R = 0,025(0,025)20 (0,25) R_m$$

($R_m = 20$ для сильносвязанных и $R_m = 100$ — слабосвязанных состояний) и найдено значение энергии ϵ_{Jv}^* как предел ϵ_{Jv} при $h_1 \rightarrow 0$, $h_2 \rightarrow 0$. Поправки $\delta\epsilon_{Jv}^h = \epsilon_{Jv}^* - \epsilon_{Jv}$ к значению ϵ_{Jv} приведены в третьей строке табл. 10. Из этой таблицы следует, что поправки $\delta\epsilon_{Jv}$ и $\delta\epsilon_{Jv}^h$ противоположны по знаку и примерно равны по абсолютной величине, т. е. в пределах принятой точности учет этих поправок не изменяет значений ϵ_{Jv} , приведенных в пятой строке табл. 4—6.

В табл. 19 приведены значения энергий связи $-\epsilon_{Jv}$ всех состояний (Jv) мезомолекул водорода, вычисленные в [22] по программе ВААР [59] *. В настоящее время приведенные значения следует считать наиболее точными. Для уточнения этих значений необходимо в матрице потенциалов $U(R)$ учесть потенциалы $U_{ss}(k, R)$, дополнить потенциалы $U_{1s}(k, R)$ значениями в интервале $20 \leq R \leq 100$, исследовать более тщательно влияние потенциалов $U_{ij}(R)$ при

Т а б л и ц а 19. Энергия связи $-\epsilon_{Jv}$ (эВ) состояний (Jv) мезомолекул изотопов водорода *

Мезомоле- кула	$J = 0$		$J = 1$		$J = 2$	$J = 3$
	$v = 0$	$v = 1$	$v = 0$	$v = 1$	$v = 0$	$v = 0$
$pp\mu$	253,0	—	107,0	—	—	—
$pd\mu$	221,5	—	97,4	—	—	—
$pt\mu$	214,0	—	99,0	—	—	—
$dd\mu$	325,0	35,8	226,6	1,94**	86,3	—
$dt\mu$	319,2	34,9	232,4	0,68**	102,5	—
$tt\mu$	363,0	83,9	289,2	45,2	172,7	48,7

* Вычисления выполнены по программе ВААР [22]. ** Данные работы [71].

* Во всех предыдущих таблицах мы сохраняли большее число знаков, поскольку в противном случае вклад высших состояний задачи двух центров в ϵ_{Jv} проследить не удастся. Кроме того, относительная величина этих вкладов при повышении точности вычислений остается практически без изменений, что позволяет эффективно использовать приведенные значения для исследования сходимости адиабатического разложения.

Выражения для матричных элементов, связывающих состояния дискретного и сплошного спектров задачи двух центров, получаются из (93) заменами $N' \rightarrow k$, $E_{N'} \rightarrow k^2/2$.

Численные значения асимптотических коэффициентов разложений (93) при $Z_a = Z_b = 1$ и аналитические выражения для матричных элементов $\langle \psi_{N'lm} | r \cos \vartheta | \psi_{N'l\pm 1m} \rangle$, $\langle \psi_{N'lm} | Z/r | \psi_{N'lm} \rangle$ и $\langle \psi_{N'lm} | r \sin \vartheta | \psi_{N'l\pm 1, m\pm 1} \rangle$ при произвольных Z_a и Z_b приведены в [40].

Ведущие коэффициенты матричных элементов, связывающие состояния $|ks\rangle$ и $|ks'\rangle$ сплошного спектра, при $R \ll 1$ имеют вид [54]:

$$\left. \begin{aligned} H_{ss}^{(+)}(k, R) &= [R^{-2}H_{-2}^{(+)} + H_0^{(+)} + k^2O(c^2)] \delta_{ll'}\delta_{mm'}; \\ H_{-2}^{(+)} &= l(l+1); H_0^{(+)} = \frac{k^2m^2}{2(2l-1)(2l+3)}; \\ H_{ss'}^{(*)}(k, R) &= \frac{k^2}{2} \delta_{ll'}\delta_{mm'}; Q_{ss'}^{(+)}(k, R) = 0; \\ H_{ss'}^{(-)}(k, R) &= [H_{-1}^{(-)}R^{-1} + k^2O(c^2)] \delta_{l'l\pm 1}\delta_{mm'}; \\ H_{-1}^{(-)} &= 2(l+1)Q_0^{(-)}; Q_{ss'}^{(-)}(k, R) = \\ &= [Q_0^{(-)} + kO(c^2)] \delta_{l'l\pm 1}\delta_{mm'}; \\ Q_0^{(-)} &= -\frac{1}{2}k \cos(\delta_l - \delta_{l+1}) \times \\ &\times \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} \delta_{l'l\pm 1}\delta_{mm'}. \end{aligned} \right\} \quad (94)$$

Здесь $\sigma_l(k) = \arg \Gamma(l+1 - iZ/k)$ — кулоновская фаза для потенциала притяжения с зарядом $Z = Z_a + Z_b$.

В пределе $R \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение матричных элементов $U_{ij}(R)$ и $U_{is}(k, R)$, $U_{ss'}(k, R)$ совершенно различно. Это обусловлено разным поведением двухцентровых волновых функций $\varphi_i(\xi, \eta; R)$ и $\varphi_s(\xi, \eta; k, R)$ в этом пределе, а именно: при $R \rightarrow \infty$ функции $\varphi_i(\xi, \eta; R)$ дискретного спектра задачи двух центров отличны от нуля лишь в малой окрестности значений $\eta = \pm 1$, в то время как функции $\varphi_s(\xi, \eta; k, R)$ непрерывного спектра сосредоточены в окрестности $\eta \approx 0$ [33].

Алгоритм вычисления коэффициентов F_k разложения ($R \gg 1$)

$$F(R) = F_0 + F_1R^{-1} + F_2R^{-2} + \dots \quad (95)$$

матричных элементов $F(R) = \{H_{ij}^{(\pm)}(R), H_{ij}^{(*)}(R), Q_{ij}^{(\pm)}(R), B_{ij}^{(\pm)}(R)\}$, связывающих пары $(i, j) = (ip, jp')$ состояний дискретного спектра, приведен в [40]. Для коэффициентов $H_k^{(+)}$, $H_k^{(*)}$, $Q_k^{(+)}$ и $b_k^{(+)}$ справедливы соотношения:

$$F_k(ig, jg) = F_k(iu, ju); \quad (96a)$$

для коэффициентов $H_k^{(-)}$, $Q_k^{(-)}$ и $b_k^{(-)}$

$$F_k(ig, ju) = F_k(iu, jg). \tag{96}$$

Кроме того, коэффициенты асимптотических разложений (95) удовлетворяют соотношениям *:

$$\left. \begin{aligned} H_0^{(+)} &= H_0^{(*)}; H_0^{(-)} = -2H_0^{(*)}; Q_0^{(+)} = -Q_0^{(-)}; \\ b_1^{(+)} &= -b_1^{(-)}; H_1^{(+)} - H_1^{(*)} = -H_1^{(-)} - 2H_1^{(*)}; \\ \sum_{ij} \{Q_0^{(\pm)}\}_{ij} &= \sum_{ij} \{H_1^{(\pm)}\}_{ij} = \sum_{i,j} \{H_1^{(*)}\}_{ij} = \\ &= \sum_{i,j} \{b_2^{(\pm)}\}_{ij} = 0. \end{aligned} \right\} \tag{97}$$

Для пары состояний (1, n) при $Z_a = Z_b = 1$ найдены также аналитические выражения с точностью $O(R^{-2})$ ($\Delta = n_1 - n_2$) [40]:

$$\left. \begin{aligned} H_{1n}^{(+)}(R) &= \frac{2}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \times \\ &\times \left[1 + \frac{n}{2} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 12n^2\Delta - 2n^2 + 10\Delta + 1}{(n^2-1)^2} R^{-1} + O(R^{-2})\right]; \\ H_{1n}^{(-)}(R) &= -\frac{4}{n^2+1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \times \\ &\times \left[1 + \frac{n}{2} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 8n^2\Delta - 2n^2 + 6\Delta + 1}{(n^2-1)^2} R^{-1} + O(R^{-2})\right]; \\ H_{1n}^{(*)}(R) &= \frac{2}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \times \\ &\times \left[1 + \frac{n}{2} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 4n^2\Delta - 2n^2 + 2\Delta + 1}{(n^2-1)^2} R^{-1} + O(R^{-2})\right]; \\ Q_{1n}^{(+)}(R) &= -Q_{1n}^{(-)}(R) = -\frac{4n}{(n^2-1)^2} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \times \\ &\times \left[\Delta - \frac{n}{2}(n^2 - 2\Delta^2 - 1) R^{-1} + O(R^{-2})\right]. \end{aligned} \right\} \tag{98}$$

Для пары состояний (1,3) (см. табл. 11) соответствующая асимптотика найдена с точностью $O(R^{-3})$

$$\left. \begin{aligned} H_{13}^{(+)}(R) &= \frac{2}{27} \left(1 + \frac{5}{3} R^{-1} - \frac{133}{18} R^{-2}\right) + O(R^{-3}); \\ H_{13}^{(-)}(R) &= -\frac{4}{27} \left(1 + \frac{1}{3} R^{-1} - \frac{145}{18} R^{-2}\right) + O(R^{-3}); \\ H_{13}^{(*)}(R) &= \frac{2}{27} \left(1 - R^{-1} - \frac{157}{18} R^{-2}\right) + O(R^{-3}); \\ Q_{13}^{(+)}(R) &= \frac{8}{81} \left(1 + R^{-1} - \frac{33}{2} R^{-2}\right) + O(R^{-3}) = -Q_{13}^{(-)}(R). \end{aligned} \right\} \tag{99}$$

* Соотношения (97) получены при условии нормировки (31) для функций $\Xi_{mq}(\eta; R)$, т. е. положительных при $\eta = 1$, в точке нахождения заряда Z_b . При нормировке в точке $\eta = -1$, вместо (97) справедливы соотношения: $Q_0^{(+)} = Q_0^{(-)}$, $H_0^{(-)} = 2H_0^{(*)}$, $H_1^{(+)} - H_1^{(*)} = H_1^{(-)} - 2H_1^{(*)}$, $b_1^{(+)} = b_1^{(-)}$.

Для $Z_a = Z_b = 1$ наиболее точные разложения с учетом обменных членов при $R \gg 1$ получены для матричных элементов, связывающих состояния $g \equiv 1s\sigma_g$ и $u \equiv 2p\sigma_u$:

$$\left. \begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned}
 H_{gg}^{(+)}(R) \\
 H_{uu}^{(-)}(R)
 \end{aligned} \right\} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{27}{4} R^{-4} + 174R^{-6} \right) \mp 2R \exp(-R - 1); \\
 & H_{gu}^{(-)}(R) = H_{ug}^{(-)}(R) = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{27}{2} R^{-4} - 15R^{-6} \right); \\
 & \left. \begin{aligned}
 H_{gg}^{(*)}(R) \\
 H_{uu}^{(*)}(R)
 \end{aligned} \right\} = \\
 & = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{27}{4} R^{-4} - 75R^{-6} \right) \mp R^2 \left(1 - \frac{3}{2} R^{-1} \right) \exp(-R - 1); \\
 & Q_{gg}^{(+)}(R) = Q_{uu}^{(+)}(R) = 0; \quad Q_{gu}^{(-)}(R) = -Q_{ug}^{(-)}(R) = \\
 & = -R^2 \left(1 + \frac{1}{2} R^{-1} - \frac{25}{8} R^{-2} - \frac{563}{48} R^{-3} \right) \exp(-R - 1).
 \end{aligned} \right\} \quad (100)$$

В табл. 20 сравниваются значения матричных элементов, вычисленные по этим формулам с численными значениями [50]. Наблюдаемое согласие свидетельствует как о правильности формул (100), так и о корректности алгоритмов численного нахождения соответствующих матричных элементов.

Таблица 20. Сравнение численных [50] и асимптотических (100) значений матричных элементов (67)

R	H(+)		H(-)
	Численный расчет	Асимптотика	Численный расчет
10	0,249356482	0,249371966	-0,499279054
15	0,249933381	0,249933776	-0,499864200
20	0,249979508	0,249979556	-0,499957471
30	0,249995889	0,249995893	-0,499991644
40	0,249998692	0,249998692	-0,499997361

R	H(-)	Q(-)	
	Асимптотика	Численный расчет	Асимптотика
10	-0,499317500	-0,001678398	-0,001681896
15	-0,499866008	-0,000024716	-0,000025725
20	-0,499957695	-0,000000308	-0,000000308
30	-0,499991656	-0,2 · 10 ⁻¹⁰	-0,2 · 10 ⁻¹⁰
40	-0,499997361	0	-0,2 · 10 ⁻¹⁴

Асимптотика матричных элементов $F_{s1}(k, R)$, связывающих состояния $|1g\rangle$ и $|1u\rangle$ дискретного спектра с состояниями $|ksg\rangle$ и $|ksu\rangle$ сплошного спектра, при $R \gg 1$ имеет экспоненциально затухающий характер и для систем с $Z_a = Z_b = Z$ получена в [76]

$$\left. \begin{aligned} H_{s1}^{(+)}(k, R) &= 2kI(k, R)(1 + O(R^{-1})); \\ H_{s1}^{(-)}(k, R) &= -\frac{1}{2}kI(k, R)(1 + O(R^{-1})); \\ H_{s1}^{(*)}(k, R) &= [2(k^2 + Z^2)/k^2R] I(k, R)(1 + O(R^{-1})); \\ Q_{s1}^{(+)}(k, R) &= -Q_{s1}^{(-)}(k, R) = I(k, R)(1 + O(R^{-1})); \\ I(k, R) &= \frac{\pi^{1/4}}{(q!)^{1/2}} 2q^{3/1} \frac{kq^{2+13/4}Z^{5/2}}{(k^2 + Z^2)^2} \times \\ &\times R^{3/2+5/4} \exp[-kR/2 - (2Z/k) \arctg(k/Z)]; \quad q = l - m. \end{aligned} \right\} (101)$$

Асимптотика матричных элементов $F_{ss'}(k, R)$ при $R \gg 1$ имеет корневой характер и для системы с $Z_a = Z_b = 1$ найдена в [54] в виде:

$$\left. \begin{aligned} H_{ss}^{(+)}(k, R) &= \frac{k}{4R}(2q + 1) - \frac{3}{32R^2} [(2q + 1)^2 + 5] + k^2O(c^{-3}); \\ H_{ss}^{(-)}(k, R) &= kQ_{ss}^{(-)}(k, R) + k^2O(c^{-3/2}); \\ Q_{ss}^{(-)}(k, R) &= -\frac{1}{2} \left(\frac{k(q+1)}{R} \right)^{1/2} + kO(c^{-3/2}); \\ H_{ss}^{(*)}(k, R) &= k^2/2; \quad Q_{ss}^{(+)}(k, R) = 0, \end{aligned} \right\} (102)$$

причем последние два соотношения справедливы при всех R .

8. АСИМПТОТИКА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ПРЕДЕЛЕ ОБЪЕДИНЕННОГО АТОМА

В пределе $R \rightarrow 0$ справедливо соотношение [77]

$$\lim_{R \rightarrow 0} U_{jj'}^J(R) = R^{-2} \{ [J(J+1) - 2m^2 + (H_{-2}^{(+)})_{Nlm, Nlm}] \delta_{mm'} + \gamma_{mm'}^J (b_{-2}^{(+)})_{Nlm, Nlm'} \delta_{m'm \pm 1} \} = R^{-2} \langle lmJm_J | (J-1)^2 | lm'Jm_J \rangle, \quad (103)$$

которое следует из формул (17), (21), (22), (24в), (63)–(67) и асимптотических разложений (93), где оставлены только ведущие члены $\sim R^{-2}$. Здесь

$$\langle \vartheta\Phi\Theta | lmJm_J \rangle = \Psi_{mm_J}^{lJ}(\vartheta, \Phi, \Theta, \Phi) = \left[\frac{2J+1}{8\pi(1+\delta_{m0})} \right]^{1/2} \times \\ \times \{ Y_{lm}(\vartheta, \Phi) D_{mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) + Y_{l-m}(\vartheta, \Phi) D_{-mm_J}^J(\Phi, \Theta, 0) \} \quad (104)$$

— угловая часть волновых функций (10), (50) системы трех частиц в пределе объединенного атома $R \rightarrow 0$, $r \gg R$

(рис. 27, сферические функции $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ определены с положительной фазой Кондона — Шортли [79]):

$$\Psi_{m_J}^J(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{l=0}^{\zeta} \sum_{m=0}^l \Psi_{mm_J}^{lJ}(\vartheta, \varphi, \Theta, \Phi) \times \\ \times \left\{ \sum_{N=1} R_{Nl}(r) R^{-1} \chi_{Nlm}^J(R) + \int_0^{\infty} dk R_l(k, r) R^{-1} \chi_{lm}^J(k, R) \right\}, \\ \zeta = \min(l, J), \tag{105}$$

где $R_{Nl}(r)$ и $R_l(k, r)$ — радиальные функции водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = Z_a + Z_b$.

В этом пределе функции $\chi_{Nlm}^J(R)$ и $\chi_{lm}^J(k, R)$ при каждом Nl и kl удовлетворяют системе уравнений, которая следует из (86) и

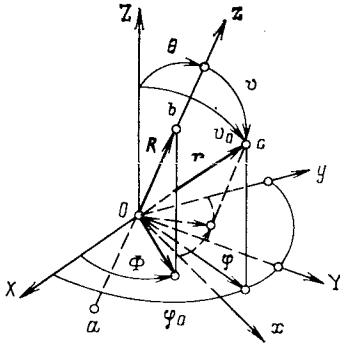


Рис. 27. Координаты $\{r\vartheta_0\varphi_0\}$ и $\{r\vartheta\varphi\}$ вектора \mathbf{r} в лабораторной $(XYZO)$ и вращающейся $(xyzO)$ системах координат

(103) [аналогичные выражения для функций $\chi_{lm}^J(k, R)$ в дальнейшем для простоты приводить не будем]:

$$\sum_{m'=-m-1}^{m'=-m+1} \left\{ \delta_{mm'} \frac{d^2}{dR^2} - \langle lmJm_J | (\mathbf{J}-\mathbf{1})^2 | lm'Jm_J \rangle \right\} \chi_{Nlm'}^J(R) = 0, \\ m = 0, 1, \dots, \zeta. \tag{106}$$

Согласно [78] матричные элементы оператора орбитального момента относительного движения ядер $\mathbf{L}^2 = (\mathbf{J} - \mathbf{1})^2$, заданные на функциях (104) выражением (103), имеют вид:

$$\langle lmJm_J | (\mathbf{J}-\mathbf{1})^2 | lm'Jm_J \rangle \equiv \sum_{L=|J-l|}^{J+l} G_{mL}^{lJ} L(L+1) G_{m'L}^{lJ}, \tag{107a}$$

где

$$G_{mL}^{lJ} = (-1)^{l+m} \frac{1 + (-1)^{J-l-L}}{[2(1 + \delta_{m0})]^{1/2}} C_{lmJ-m}^{L0}; \tag{107б}$$

C_{lmJ-m}^{L0} — коэффициенты Клебша — Гордана [80].

Решение системы уравнений (106) ищем в виде

$$\chi_{Nlm}^{J\alpha}(R) = \sum_{\alpha} G_{m\alpha}^{lJ} R^{\alpha+1} A_{Nl}^{\alpha J}, \tag{108}$$

где $A_{Nl}^{\alpha J}$ — столбец произвольных коэффициентов. После подстановки (108) в (106) получим систему линейных алгебраических уравнений для определения собственных значений α ($\alpha + 1$), соответствующих векторам $G_{m\alpha}^{lJ}$:

$$\sum_{\alpha} \{\alpha(\alpha + 1) \delta_{mm'} - \langle lmJm_J | (J - 1)^2 | lm'Jm_J \rangle\} G_{m\alpha}^{lJ} = 0, \tag{109}$$

$$0 \leq m, \quad m' \leq \zeta.$$

Используя соотношение (107) и свойства ортогональности преобразования (1076)

$$\sum_{m=0}^{\zeta} \bar{G}_{mL}^{lJ} G_{mL'}^{lJ} = \delta_{LL'}; \quad \sum_{L=|J-l|}^{J+l} \bar{C}_{mL}^{lJ} G_{m'L}^{lJ} = \delta_{mm'}, \tag{110}$$

получаем:

$$G_{mL}^{lJ} \{\alpha(\alpha + 1) - L(L + 1)\} = 0, \tag{111}$$

т. е. вектор G_{mL}^{lJ} размерности ζ при фиксированном L является собственным вектором системы (109), которому соответствует собственное значение $\alpha(\alpha + 1) = L(L + 1)$, откуда

$$\begin{cases} \alpha = L & \text{для регулярного решения;} \\ \alpha = -(L + 1) & \text{для нерегулярного решения.} \end{cases}$$

Для каждой пары l и J всевозможные значения L находятся по правилу треугольника $|J - l| \leq L \leq J + l$ с учетом условия $1 + (-1)^{J-l-L} \neq 0$ [см. (1076)].

Общее решение системы уравнений (106) можно представить в виде

$$\chi_{Nlm}^J(R) = \sum_{L=|J-l|}^{J+l} G_{mL}^{lJ} R^{L+1} A_{Nl}^{LJ} + \sum_{L=|J-l|}^{J+l} G_{mL}^{lJ} R^{-L} A_{Nl}^{-(L+1)J}. \tag{112}$$

Для регулярного решения $A_{Nl}^{-(L+1)J} = 0$, а ведущий коэффициент находится из соотношения (112) при $L = |J - l|$ по известным значениям $\chi_{Nlm}^J(R)$, полученным при численном решении системы уравнений (86) с условием нормировки (87):

$$\bar{A}_{Nl}^{LJ} = (G_{ml}^{lJ})^{-1} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-(L+1)} \chi_{Nlm}^J(R) = (G_{0L}^{lJ})^{-1} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-(L+1)} \chi_{Nl0}^{Jl}(R). \tag{113}$$

Аналогичное соотношение имеет место и для функций $\chi_{lm}^J(k, R)$.

Сделаем несколько замечаний по поводу полученных результатов. Прежде всего, асимптотическое поведение функций $\chi_{Nlm}^J(R)$ и

$\chi_{lm}^J(k, R)$ определяется значением L орбитального момента относительного движения частиц a и b , а не полным моментом J , несмотря на то что система (86) записана в представлении полного момента.

Как видно из равенств (113), для нахождения коэффициентов A_{Nl}^{LJ} достаточно знать лишь решения $\chi_{Nlm}^J(R)$ и $\chi_{lm}^J(k, R)$ с $m = 0$. Однако, чтобы найти их правильную асимптотику при $R \rightarrow 0$, необходимо в систему уравнений (86) включить состояния с $m = 0, \dots, \zeta$. Для нахождения асимптотики функций $\chi_{Nlm}^J(R)$ с квантовыми числами $N = 1, l = 0$ и любых J при вычислении констант A_{Nl}^{LJ} достаточно использовать систему (86) двух уравнений, которым удовлетворяют функции $\chi_{1s\sigma}(R)$ и $\chi_{2p\sigma}(R)$ (в случае $M_a \neq M_b$) или одно уравнение для $\chi_{1s\sigma}(R)$ (при $M_a = M_b$). Для функций $\chi_{Nlm}^J(R)$ с $N = 2, l = 1$ при $J \neq 0$ необходимо увеличить число уравнений Nlm системы (86), включив в рассмотрение функции $\chi_{2p\pi}(R), \chi_{3d\pi}(R)$. Для $N = 3, l = 1$ и $J = 1$ нужно решать систему шести уравнений, т. е. учитывать связь функций $\chi_{1s\sigma}(R), \chi_{2p\sigma}(R), \chi_{2s\sigma}(R), \chi_{3p\sigma}(R), \chi_{3p\pi}(R)$ и $\chi_{3d\pi}(R)$. Для $N = 3, l = 2$ и $J = 1$ необходимо также решать систему шести уравнений для функций $\chi_{1s\sigma}(R), \chi_{2p\sigma}(R), \chi_{3d\sigma}(R), \chi_{4f\sigma}(R), \chi_{3d\pi}(R), \chi_{4f\pi}(R)$, а для $N = 3, l = 2, J = 2$ к указанным шести функциям следует добавить также функции $\chi_{3d\delta}(R)$ и $\chi_{4f\delta}(R)$, т. е. решать систему восьми уравнений, и т. д. В каждом конкретном случае при заданном J и выбранных N и l минимальная размерность системы (86) определяется без всякого произвола. Поскольку потенциалы при $R = 0$ диагональны по квантовым числам N и l , дальнейшее увеличение размерности системы уравнений (86) не приводит к изменению ведущего члена асимптотики (112) для каждого набора $\{NlJ\}$.

Графики функций $R^{-1}\chi_{Nlm}^J(R)$ основного ($J = 0, v = 0$) и возбужденного вращательного ($J = 1, v = 0$) состояний мезомолекулы $dt\mu$ [74], найденные при численном решении системы уравнений (86) при $N_m = 2$ [$\chi_{1s\sigma}(R)$ и $\chi_{2p\sigma}(R)$] и $N_m = 8$ [$\chi_{1s\sigma}(R), \chi_{2p\sigma}(R), \chi_{2s\sigma}(R), \chi_{3p\sigma}(R), \chi_{3d\sigma}(R), \chi_{4f\sigma}(R), \chi_{2p\pi}(R), \chi_{3d\pi}(R)$], приведены на рис. 28.

Рис. 28. Изменение поведения радиальных волновых функций $R^{-1}\chi_{Nlm}^{Jv}(R)$ состояний $v = 1, J = 0$; 1 мезомолекулы $dt\mu$ при малых межъядерных расстояниях ($R \ll 1$) в зависимости от числа решаемых уравнений в системе (86)

Из рисунка видно, что при $R \rightarrow 0$ для состояний с $J = 0$ поведение волновых функций описывается формулой (112) уже при $N_m = 2$, а для состояний с $J = 1$ лишь при $N_m = 8$, причем значения $\chi_{2p\sigma}^{J=1}(R)$, вычисленные при $N_m = 2$ и 8, различаются на несколько порядков величины.

Для контроля точности численных расчетов можно использовать соотношения, которые следуют из явного вида матриц G_{mL}^{IJ} [77] ($J = 1$):

$$\left. \begin{aligned} \lim_{R \rightarrow 0} [\chi_{2p\pi}^J(R)/\chi_{2p\sigma}^J(R)]^2 &= (G_{10}^{11}/G_{00}^{11})^2 = 2; \\ \lim_{R \rightarrow 0} [\chi_{3d\pi}^J(R)/\chi_{3d\sigma}^J(R)]^2 &= (G_{11}^{21}/G_{01}^{21})^2 = 3/2. \end{aligned} \right\} \quad (114)$$

В рассмотренном примере эти соотношения начинают выполняться с точностью $\sim 10^{-3}$ при $R \ll 0,02$.

Соотношения (105), (112) и (113) позволяют построить асимптотику волновых функций $\Psi_{m_J}^J(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ системы трех частиц в пределе объединенного атома по известным значениям функций $\chi_{Nlm}^J(R)$ и $\chi_{lm}^J(k, R)$, найденным при решении системы уравнений (86). В этом пределе получим:

$$\Psi_{m_J}^J(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \underset{\substack{R \rightarrow 0 \\ r \gg R}}{=} \sum_{Nl} R_{Nl}(r) \sum_{m=0}^{\xi} \Psi_{mm_J}^{IJ}(\vartheta, \varphi, \Theta, \Phi) \sum_{L=|J-l|}^{J+l} G_{mL}^{IJ} R^L A_{Nl}^{LJ}. \quad (115)$$

угловая часть этой функции связана с угловой частью волновой функции (7):

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^{(lL)J}(\vartheta_0, \varphi_0, \Theta, \Phi) = \sum_{m_l=-l}^l C_{lm_l L m_L}^{J m_J} Y_{lm_l}(\vartheta_0, \varphi_0) Y_{L m_L}(\Theta, \Phi) \quad (116)$$

преобразованием Чэнга — Фано (1076) [78]:

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^{(lL)J}(\vartheta_0, \varphi_0, \Theta, \Phi) = \sum_{m=0}^{\xi} \Psi_{mm_J}^{IJ}(\vartheta, \varphi, \Theta, \Phi) G_{mL}^{IJ}. \quad (117)$$

С учетом (117) из (115) следует асимптотика волновой функции (10)

$$\begin{aligned} &\Psi_{m_J}^J(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \\ &= \tilde{\Psi}_{m_J}^J(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}) \underset{\substack{R \rightarrow 0 \\ r \gg R}}{=} \sum_{Nl} R_{Nl}(r) \sum_{L=|J-l|}^{J+l} \tilde{\Psi}_{m_J}^{(lL)J}(\vartheta_0, \varphi_0, \Theta, \Phi) R^L A_{Nl}^{LJ}. \end{aligned} \quad (118)$$

Поясним физический смысл полученных формул. В пределе $R \rightarrow 0$ ось z вращающейся системы координат, в которой задан вектор $\mathbf{r} = (r, \vartheta, \varphi)$ и определен адиабатический базис (36), исчезает и за ось квантования орбитального момента \mathbf{l} частицы с естественно выбрать ось Z лабораторной системы координат, в которой векторы \mathbf{R} и \mathbf{r} заданы координатами $\mathbf{R} = (R, \Theta, \Phi)$ и $\mathbf{r}_0 = (r, \vartheta_0, \varphi_0)$. В лабораторной системе координат кориолисово взаимодействие моментов \mathbf{l} и \mathbf{L} отсутствует и операторы \mathbf{l}^2 и \mathbf{L}^2 на функциях (116) диагональны; откуда следует соотношение (107).

При $R = 0$ неисчезающий член в сумме (118) имеет квантовые числа $L = 0, m = 0$. С учетом (116) и равенства $C_{lm_l 00}^{Jm_J} = \delta_{lJ} \delta_{m_l m_J}$ для главного члена асимптотики волновой функции системы трех частиц (7) получим:

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^J(\mathbf{r}_0, 0) = \sum_N R_{NJ}(r) Y_{Jm_J}(\vartheta_0, \varphi_0) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} A_{NJ}^{0J}, \quad (119a)$$

где

$$A_{NJ}^{0J} = (G_{00}^{JJ})^{-1} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-1} \chi_{NJ0}^J(R) = (2J + 1)^{1/2} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-1} \chi_{NJ0}^J(R). \quad (119b)$$

Для системы трех частиц с одинаковыми частицами a и b разложение (118) содержит лишь четные значения l . Поэтому при нечетных значениях J главный член асимптотики определяется членом с $L = 1$:

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^J(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}) = \sum_{Nl} R_{Nl}(r) \sum_{m_l=-l}^l C_{lm_l 1m_L}^{Jm_J} Y_{lm_l}(\vartheta_0, \varphi_0) Y_{1m_L} R A_{Nl}^{1J}. \quad (120a)$$

В важном частном случае мезомолекулы $dd\mu$ в состоянии с полным моментом $J = 1$ ведущий член асимптотики имеет вид:

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^1(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_N R_{N0}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Y_{1m_J}(\Theta, \Phi) R A_{N0}^{11}. \quad (120b)$$

где

$$A_{N0}^{11} = \lim_{R \rightarrow 0} R^{-2} \chi_{N00}^1(R). \quad (120b)$$

Соотношения (119) и (120) были использованы для вычисления скоростей ядерной реакции синтеза $dt\mu \rightarrow {}^4\text{He} + n + \mu^-$ из всех состояний ($J\nu$) мезомолекулы $dt\mu$ [74, 81], а также для вычисления поправок на конечные размеры ядер [72] и на их сильное взаимодействие [74].

9. АСИМПТОТИКА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ПРЕДЕЛЕ РАЗЪЕДИНЕННЫХ АТОМОВ

В пределе $R \rightarrow \infty$ система трех частиц (a, b, c) распадается на подсистемы

$$(a, b, c) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{cases} (a, c) + b \\ (b, c) + a \end{cases} \quad (124)$$

с волновыми функциями (57)

$$\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{cases} \Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_a, \mathbf{R}_a), & r_a \ll R_a; \\ \Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_b, \mathbf{R}_b), & r_b \ll R_b. \end{cases} \quad (122a)$$

$$(122b)$$

В координатах Якоби (рис. 29):

$$\left. \begin{aligned} (a, b) + c, \quad (\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad M_0^{-1} = M_b^{-1} + M_a^{-1}, \\ m_0^{-1} = (M_a + M_b)^{-1} + M_c^{-1}; \\ (a, c) + b, \quad (\mathbf{r}_a, \mathbf{R}_a), \quad m_a^{-1} = M_c^{-1} + M_b^{-1}, \\ \mu_a^{-1} = (M_c + M_a)^{-1} + M_b^{-1}; \\ (b, c) + a, \quad (\mathbf{r}_b, \mathbf{R}_b), \quad m_b^{-1} = M_c^{-1} + M_a^{-1}, \\ \mu_b^{-1} = (M_c + M_b)^{-1} + M_a^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (123a)$$

где m_a и m_b — приведенные массы изолированных атомов (a, c) и (b, c) соответственно, μ_a и μ_b — приведенные массы систем $(a, c) +$

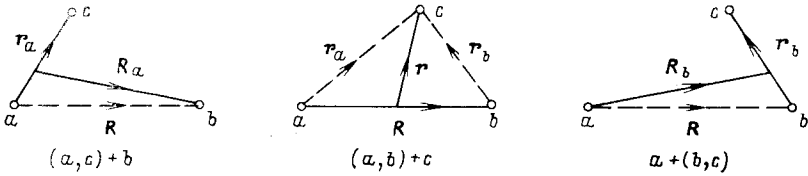


Рис. 29. Координаты Якоби системы трех частиц

$+ b$ и $(b, c) + a$, в выбранной системе единиц $e = \hbar = m_a = 1$ определим также безразмерные величины

$$M = M_0/m_a, \quad \mathcal{M}_a = \mu_a/m_a, \quad \mathcal{M}_b = \mu_b/m_a. \quad (123б)$$

В пределе $R \rightarrow \infty$ волновую функцию (122) можно представить в виде:

$$\Psi_{nr}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \underset{\substack{R \rightarrow \infty \\ r \ll R}}{=} \sum_j \{ \Psi_j^{(a)}(m_a \mathbf{r}_a, \Theta, \Phi) R^{-1} \chi_{ja}(R) + \\ + \Psi_j^{(b)}(m_a \mathbf{r}_b, \Theta, \Phi) R^{-1} \chi_{jb}(R) \}, \quad (124)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \Psi_j^{(a)}(m_a \mathbf{r}_a, \Theta, \Phi) &\equiv \Psi_{j m}^{(a)}(m_a \mathbf{r}_a, \Theta, \Phi) = \\ &= \left[\frac{2J+1}{8\pi(1+\delta_{m0})} \right]^{1/2} \{ \psi_{jm}(m_a \mathbf{r}_a) D_{mm_j}^J(\Phi, \Theta, 0) + \\ &+ \psi_{j-m}(m_a \mathbf{r}_a) D_{-mm_j}^J(\Phi, \Theta, 0) \}; \\ \Psi_j^{(b)}(m_a \mathbf{r}_b, \Theta, \Phi) &\equiv \Psi_{j m}^{(b)}(m_a \mathbf{r}_b, \Theta, \Phi) = \\ &= \left[\frac{2J+1}{8\pi(1+\delta_{m0})} \right]^{1/2} \{ \psi_{jm}(m_a \mathbf{r}_b) D_{mm_j}^J(\Phi, \Theta, 0) + \\ &+ \psi_{j-m}(m_a \mathbf{r}_b) D_{-mm_j}^J(\Phi, \Theta, 0) \}. \end{aligned} \right\} \quad (125)$$

Здесь

$$\Psi_{jm}(m_a \mathbf{r}_a) = \langle m_a \mathbf{r}_a | ja \rangle = \lim_{R \rightarrow \infty} \varphi_{ja}(\mathbf{r}; R); \quad (126a)$$

$$\Psi_{jm}(m_a \mathbf{r}_b) = \langle m_a \mathbf{r}_b | jb \rangle = \lim_{R \rightarrow \infty} \varphi_{jb}(\mathbf{r}; R). \quad (126b)$$

Отметим, что в пределе $R \rightarrow \infty$ двухцентровая функция $\phi_{jb}(\mathbf{r}; R)$ (72) хотя и переходит в атомную $\psi_j(\mathbf{r}_b)$, но описывает атом с приведенной массой m_a , а не m_b *. Функции $\chi_{ja}(R)$ и $\chi_{jb}(R)$ являются решениями системы уравнений (76), которые при $R \rightarrow \infty$ описывают относительное движение подсистем $(a, c) + b$ и $(b, c) + a$ по координате R с соответствующей ей приведенной массой M . Такое рассмотрение не является, однако, естественным, поскольку при $R \rightarrow \infty$ для описания относительного движения подсистем $(a, c) + b$ и $(b, c) + a$ вместо R и M следует использовать пары R_a и M_a , R_b и M_b .

Долгое время предельный переход (122) не удавалось осуществить последовательно в рамках адиабатического подхода, и это послужило одной из причин падения к нему интереса [21] вплоть до утверждений о его неэффективности [82]. Покажем, что предельный переход (122), (123) следует из асимптотики решений системы уравнений (76) без каких-либо дополнительных предположений. Для этого найдем ведущий член асимптотики решений $\chi_{ja}(R)$ и $\chi_{jb}(R)$ в пределе $R \rightarrow \infty$. Ограничимся в дальнейшем случаем $Z_a = Z_b = 1$ и во всех суммах типа (124) вместе с суммированием по дискретному спектру будем подразумевать также интегрирование по сплошному спектру задачи двух центров.

В (a, b) -представлении (72) — (74), как следует из асимптотических свойств (97) потенциалов $U_{ip, jp'}(R)$ (75), справедливы соотношения:

$$U_{ia, jb}(\infty) = U_{ib, ja}(\infty) = 0, \quad (127)$$

т. е. в пределе $R \rightarrow \infty$ при фиксированных индексах i и j матрица потенциалов $\hat{U}(R)$ имеет диагональный вид

$$\hat{U}_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ia, ja}(R) & 0 \\ 0 & U_{ib, jb}(R) \end{pmatrix}. \quad (128)$$

Ведущий член асимптотики потенциалов (128) имеет вид (см. разд. § 5):

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \hat{U}_{ij}(R) = \hat{U}_{ij}^{(0)} = 2M(E_i^{(0)} - E_{na}) \hat{I} \delta_{ij} + \hat{H}_{ij}^{(0)} + 2\hat{Q}_j^{(0)} \frac{d}{dR}, \quad (129)$$

* Напомним, что мы работаем в единицах $e = \hbar = m_a = 1$, которые соответствуют разбиению гамильтониана (11), в то время как обычно работают в единицах $e = \hbar = m_b = 1$ [разбиение (4)]. В последнем случае аналогичные проблемы возникают и для функции $\varphi_{ja}(\mathbf{r}; R)$.

где двумерные диагональные по a и b матрицы $\hat{H}_{ij}^{(0)}$ и $\hat{Q}_{ij}^{(0)}$ (128) определены коэффициентами $H_0^{(\pm)}$, $H_0^{(*)}$ и $Q_0^{(\pm)}$ асимптотических разложений (95) — (97):

$$\left. \begin{aligned} H_{ia, ja}^{(0)} &= H_0^{(+)} - H_0^{(*)} - \kappa (H_0^{(-)} + 2H_0^{(*)}) = 0; \\ Q_{ia, ja}^{(0)} &= Q_0^{(+)} - \kappa Q_0^{(-)}; \end{aligned} \right\} \quad (130a)$$

$$\left. \begin{aligned} H_{ib, jb}^{(0)} &= H_0^{(+)} - H_0^{(*)} + \kappa (H_0^{(-)} - 2H_0^{(*)}) = -4\kappa H_0^{(*)}; \\ Q_{ib, jb}^{(0)} &= Q_0^{(+)} + \kappa Q_0^{(-)}. \end{aligned} \right\} \quad (130b)$$

В силу соотношений (396) и (97) имеем:

$$\hat{H}_{ij}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4\kappa \end{pmatrix} h_{ij}^{(*)}; \quad \hat{Q}_{ij}^{(0)} = \begin{pmatrix} (1 + \kappa) q_{ij}^{(a)} & 0 \\ 0 & -(1 - \kappa) q_{ij}^{(b)} \end{pmatrix}. \quad (131a)$$

Здесь матричные элементы вычисляются по функциям (126)

$$\left. \begin{aligned} h_{ij}^{(*)} &= \frac{1}{2} \langle ib | -\frac{1}{2} \Delta_{r_b} | ja \rangle; & h_{ii}^{(*)} &= -\frac{1}{2} E_i; & E_i^{(0)} &= E_i = -\frac{1}{2n^2}; \\ q_{ij}^{(a)} &= \frac{1}{2} \langle ia | -\frac{\partial}{\partial z_a} | ja \rangle = \frac{1}{2} (E_i - E_j) \langle ia | z_a | ja \rangle; \\ q_{ij}^{(b)} &= \frac{1}{2} \langle ib | -\frac{\partial}{\partial z_b} | jb \rangle = \frac{1}{2} (E_i - E_j) \langle ib | z_b | jb \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (131b)$$

С учетом соотношений (129)—(131) система уравнений (76) при $R \gg 1$ принимает вид [83]:

$$\left(\hat{I} \frac{d^2}{dR^2} - \tilde{p}_i^2 \right) \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} \left(\hat{H}_{ij}^{(0)} + 2\hat{Q}_{ij}^{(0)} \frac{d}{dR} \right) \chi_j(R), \quad (132)$$

где диагональная часть матрицы $\hat{H}_{ij}^{(0)}$ включена в \tilde{p}_i^2 :

$$\left. \begin{aligned} \tilde{p}_{ia}^2 &= -2M (E_{n\tau} - E_i) = -2M (E_{n\tau} - E_{ia}) = -2M \varepsilon_{ia}; \\ \tilde{p}_i^2 &= \begin{pmatrix} \tilde{p}_{ia}^2 & 0 \\ 0 & \tilde{p}_{ib}^2 \end{pmatrix}; & \tilde{p}_{ib}^2 &= -2M (E_{n\tau} - E_i) - 4\kappa h_{ii}^{(*)} = \\ & & &= 2M (E_{n\tau} - \tilde{E}_{ib}); \\ \tilde{E}_{ib} &= (1 + \kappa/M) E_i = \tilde{\gamma} E_{ia}. \end{aligned} \right\} \quad (133)$$

При $p_i^2 > 0$ ведущий член асимптотики решений системы уравнений (132) при $R \gg 1$ имеет вид [84]:

$$\chi_i(R) = \sum_{s \geq 1} \chi_i^{(s)}(R) A_s = \sum_s \hat{C}_{is} \exp(-\hat{p}_s R) A_s, \quad (134)$$

где A_s — вектор-столбец постоянных коэффициентов *. Подставляя (134) в (132), придем к системе уравнений

$$\sum_j \{(\hat{p}_s^2 - \tilde{p}_j^2) \delta_{ij} - \hat{H}_{ij}^{(0)} + 2\hat{p}_s \hat{Q}_{ij}^{(0)}\} \hat{C}_{js} = 0, \tag{135}$$

которая имеет нетривиальное решение лишь при условии равенства нулю детерминанта

$$\det |(\hat{p}_s^2 - \tilde{p}_j^2) \delta_{ij} - \hat{H}_{ij}^{(0)} + 2\hat{p}_s \hat{Q}_{ij}^{(0)}| = 0. \tag{136}$$

Здесь, как и ранее, знак \sim означает, что соответствующие величины являются двумерными диагональными матрицами. Из уравнения (136) найдем последовательность корней:

$$\hat{p}_1^2 < \hat{p}_2^2 < \dots < \hat{p}_s^2 < \dots < \hat{p}_N^2. \tag{137}$$

Для нахождения \hat{p}_s^2 с точностью $\sim (2M)^{-3}$ достаточно использовать усеченную матрицу потенциалов $\hat{U}_{ij}(R)$, в которой при каждом фиксированном s отличны от нуля лишь строка $\hat{U}_{ij}(R)$, столбец $\hat{U}_{is}(R)$ и диагональ $\hat{U}_{ii}(R)$ (см. рис. 22). При каждом фиксированном s система уравнений (135) для коэффициентов C_{is} имеет вид:

$$\left(\begin{array}{cccccccc} \hat{p}_s^2 - \tilde{p}_1^2 & 0 & 0 \dots 0 & 2\hat{p}_s \hat{Q}_{1s}^{(0)} - \hat{H}_{1s}^{(0)} & 0 \dots 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{p}_s^2 - \tilde{p}_2^2 & 0 \dots 0 & 2\hat{p}_s \hat{Q}_{2s}^{(0)} - \hat{H}_{2s}^{(0)} & 0 \dots 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 2\hat{p}_s \hat{Q}_{s1}^{(0)} - \hat{H}_{s1}^{(0)} & 2\hat{p}_s \hat{Q}_{s2}^{(0)} - \hat{H}_{s2}^{(0)} & \dots & \hat{p}_s^2 - \tilde{p}_s^2 \dots & \dots & 2\hat{p}_s \hat{Q}_{sN}^{(0)} - \hat{H}_{sN}^{(0)} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots 0 & 2\hat{p}_s \hat{Q}_{Ns}^{(0)} - \hat{H}_{Ns}^{(0)} & 0 \dots \hat{p}_s^2 - \tilde{p}_N^2 & \dots & \dots \end{array} \right) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \hat{C}_{1s} \\ \hat{C}_{2s} \\ \dots \\ \hat{C}_{ss} \\ \dots \\ \hat{C}_{Ns} \end{pmatrix} = 0. \tag{138}$$

Нахождение корней \hat{p}_s^2 детерминанта матрицы (138) сводится к решению трансцендентного уравнения [83, 85]:

$$\hat{p}_s^2 - \tilde{p}_s^2 - 4\hat{p}_s^2 \sum_i \frac{\hat{Q}_{si}^{(0)} \hat{Q}_{is}^{(0)}}{\hat{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2} - \sum_i \frac{\hat{H}_{si}^{(0)} \hat{H}_{is}^{(0)}}{\hat{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2} = 0. \tag{139}$$

* Во всем дальнейшем изложении индекс s будем использовать для нумерации линейно-независимых решений. Его не следует путать с набором $s = [n_2 m]$ параболических квантовых чисел сплошного спектра задачи двух центров.

[При выводе этого соотношения использованы свойства симметрии (67) матричных элементов $\hat{H}_{ij}^{(0)} = \hat{H}_{ji}^{(0)}$, $\hat{Q}_{ij}^{(0)} = -\hat{Q}_{ji}^{(0)}$.] Решая уравнение методом последовательных приближений, найдем с точностью $\sim (2M)^{-3}$:

$$\hat{p}_s^2 = (\tilde{p}_s^2 + \hat{\beta}_s) / (\hat{I} - \hat{\alpha}_s); \quad \hat{p}_s^2 = \begin{pmatrix} p_{sa}^2 & 0 \\ 0 & p_{sb}^2 \end{pmatrix}, \quad (140a)$$

где

$$\hat{\alpha}_s = 4 \sum_i \hat{Q}_{si}^{(0)} \hat{Q}_{si}^{(0)} (\tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2)^{-1};$$

$$\hat{\beta}_s = \sum_i \hat{H}_{si}^{(0)} \hat{H}_{is}^{(0)} (\tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2)^{-1}. \quad (140b)$$

При подстановке (140) в уравнение (138) найдем также

$$\hat{C}_{is} = \left(\hat{I} \delta_{is} + \frac{2\hat{p}_s \hat{Q}_{is}^{(0)} - \hat{H}_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_i^2 - \tilde{p}_s^2} \right). \quad (141)$$

Полагая в знаменателе (141) $\hat{p}_s^2 = \tilde{p}_s^2$, получаем асимптотику (134) решений $\chi_i(R)$ с точностью $\sim (2M)^{-1}$:

$$\chi_i(R) = \sum_{R \gg 1} \sum_s \chi_i^{(s)}(\tilde{p}_s, R) A_s =$$

$$= \sum_s \left\{ \hat{I} \delta_{is} + \frac{2\hat{p}_s \hat{Q}_{is}^{(0)} - \hat{H}_{is}^{(0)}}{\tilde{p}_i^2 - \tilde{p}_s^2} \right\} \exp(-\tilde{p}_s R) A_s. \quad (142)$$

Покажем теперь, что найденная асимптотика $\chi_i(R)$ приводит к правильной физической асимптотике (122) волновых функций $\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Используя равенство

$$\tilde{p}_s^2 - \tilde{p}_i^2 = 2M(E_s - E_i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{\gamma} \end{pmatrix}; \quad \tilde{\gamma} = 1 + \kappa/M, \quad (143)$$

которое следует из определения (133), и правил сумм [83, 86]

$$4 \sum_j q_{ij} q_{ji} (E_i - E_j)^{-1} = 1/2; \quad \sum_j h_{ij}^{(*)} h_{ji}^{(*)} (E_i - E_j)^{-1} = E_i/4, \quad (144)$$

из соотношений (140) и (131) находим:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\alpha}_s &= M \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & \tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b}^2 \end{pmatrix}; \quad \hat{\beta}_s = (2M)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4\kappa^2 \tilde{\gamma}^{-1} \end{pmatrix} E_s; \\ a &= (1 + \kappa)/2M = M_c / (M_c + M_a) = m_a / M_a; \quad \tilde{b} = (1 - \kappa)/2M; \\ \hat{p}_s^2 &= \begin{pmatrix} p_{sa}^2 & 0 \\ 0 & p_{sb}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2\mathcal{M}_a \varepsilon_{sa} & 0 \\ 0 & -2\mathcal{M}_b \varepsilon_{sb} \end{pmatrix}; \\ \mathcal{M}_a &= M(1 - Ma^2)^{-1}; \quad \varepsilon_{sa} = E_{n\tau} - E_s; \\ \mathcal{M}_b &= M(1 - M\tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b}^2)^{-1}; \quad \varepsilon_{sb} = E_{n\tau} - E_s [\tilde{\gamma} + (\kappa/M)^2 \tilde{\gamma}^{-1}]. \end{aligned} \right\} \quad (145)$$

Принимая во внимание равенства

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{M}_b &= M(1 - M\gamma^{-1}b^2)^{-1}; \\ E_{sb} &= \gamma E_{sa}; \quad \gamma = (1 - \kappa/M)^{-1} = m_b/m_a; \\ b &= \gamma \tilde{b} = M_c / (M_c + M_b) = m_b / M_b, \end{aligned} \right\} \quad (146a)$$

находим выражения для импульсов p_{sa} и p_{sb} :

$$\left. \begin{aligned} p_{sa}^2 &= -2\mathcal{M}_a \varepsilon_{sa}; \\ p_{sb}^2 &= -2\tilde{\mathcal{M}}_b \tilde{\varepsilon}_{sb} = -2\mathcal{M}_b \varepsilon_{sb} + O\{(2M)^{-2}\}, \end{aligned} \right\} \quad (146b)$$

где

$$\varepsilon_{sa} = E_{n\tau} - E_{sa}; \quad \varepsilon_{sb} = E_{n\tau} - E_{sb} \quad (146b)$$

— энергия относительного движения подсистем $(a, c) + b$ и $(b, c) + a$ соответственно. Таким образом, вторая итерация при решении секулярного уравнения (136) приводит к точному значению (146a) импульса p_{sa} в канале $(a, c) + b$, соответствующей ему приведенной массе \mathcal{M}_a и к значениям \tilde{p}_{sb} и $\tilde{\mathcal{M}}_b$, которые отличаются от точных значений p_{sb} и \mathcal{M}_b в канале $(b, c) + a$ лишь членами $O\{(2M)^{-2}\}$.

Сделаем несколько замечаний по поводу предыдущих вычислений. Прежде всего ограничение по точности $\sim (2M)^{-2}$ при нахождении значений p_{sa}^2 и p_{sb}^2 обусловлено приближенным решением секулярного уравнения (136) с матрицей (138) и не носит принципиального характера, поскольку матрицу (138) можно диагонализировать численно с заданной точностью даже в том случае, когда ее недиагональные элементы $\tilde{U}_{ij}(R)$, $i \neq j \neq 1$ отличны от нуля.

Кроме того, полученный результат справедлив, строго говоря, лишь при использовании полного набора решений задачи двух центров, т. е. в пределе $N_i \rightarrow \infty$, $N_s \rightarrow \infty$, $k_0 \rightarrow 0$, $k_m \rightarrow \infty$ систем уравнений (76). Численные исследования показывают, что для достижения относительной точности $\sim (2M)^{-3}$ при вычислении величин (146) достаточно использовать $N_i = 13$ состояний дискретного спектра задачи двух центров и $N_s = 6$ состояний сплошного спектра при значениях $0 \leq k \leq 10$. Как показано в [62], при таких значениях N_i , N_s , k_m и $R_m = 15,1$ сумма

$$4 \left\{ \sum_{j=2}^{N_i} \frac{q_{1j}(R) q_{j1}(R)}{E_1(R) - E_j(R)} + \sum_{\varepsilon=1}^{N_s} \int_0^{k_m} \frac{q_{1\varepsilon}(k, R) q_{\varepsilon 1}(k, R)}{E_1(R) - k^2/2} dk \right\} = 0,43, \quad (147)$$

т. е. отличается от значения $1/2$, следующего из (144). Однако погрешность, вносимая при этом в \mathcal{M}_b , не превышает $0,07 (2M)^{-2} < (2M)^{-3}$ для всех рассматриваемых нами систем, т. е. не является препятствием для вычислений с точностью $\sim (2M)^{-3}$.

Покажем теперь, что предельный переход (122), (123) естественно следует из выражения (124) с найденной асимптотикой (142) функции $\chi_i(R)$ при физических значениях импульсов (146). Как следует из

(128), в пределе $R \gg 1$, $r \ll R$ системы уравнений (76), (132) распадаются на две независимые подсистемы, соответствующие каналам a и b , и асимптотику полного решения (10), (50), (576) можно представить в виде суммы (124)–(126):

$$\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{R \rightarrow \infty} \{B_{sa} \Psi_{n\tau}^{(sa)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + B_{sb} \Psi_{n\tau}^{(sb)}(\mathbf{r}, \mathbf{R})\}, \quad (148)$$

где B_{sa} и B_{sb} — константы;

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{n\tau}^{(sa)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \sum_j \Psi_j^{(a)}(\mathbf{r}_a, \Theta, \Phi) R^{-1} \chi_{ja}^{(s)}(p_{sa}R) = \\ &= \sum_j \langle m_a \mathbf{r}_a \Theta \Phi | Jja \rangle R^{-1} \chi_{ja}(p_{sa}R); \\ \Psi_{n\tau}^{(sb)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \sum_j \Psi_j^{(b)}(\mathbf{r}_b, \Theta, \Phi) R^{-1} \chi_{jb}^{(s)}(p_{sb}R) = \\ &= \sum_j \langle m_b \mathbf{r}_b \Theta \Phi | Jjb \rangle R^{-1} \chi_{jb}(p_{sb}R) \end{aligned} \right\} \quad (149)$$

(индекс J в дальнейшем будем опускать).

С учетом соотношений (131), (142), (145) и (146) получим:

$$\chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}R) = \{\delta_{is} + ap_{sa} \langle i | z_a | s \rangle \exp(-p_{sa}R); \quad (150a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{ib}^{(s)}(p_{sb}R) &= \{\delta_{is} - \tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b} p_{sb} \langle i | z_b | s \rangle + \\ &+ \frac{\kappa}{M} \tilde{\gamma}^{-1} \frac{\langle i | -\frac{1}{2} \Delta_{r_b} | j \rangle}{E_i - E_s}\} \exp(-p_{sb}R) \approx \\ &\approx \sum_j \left\{ \delta_{ij} + \frac{\kappa}{M} \tilde{\gamma}^{-1} \frac{\langle i | -\frac{1}{2} \Delta_{r_b} | j \rangle}{E_i - E_s} \right\} \times \\ &\times \{\delta_{js} - \tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b} p_{sb} \langle j | z_b | s \rangle\} \exp(-p_{sb}R). \end{aligned} \quad (150b)$$

С точностью $\sim (2M)^{-2}$ справедливы соотношения:

$$\chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}R) = \langle ia | \exp(ap_{sa}z_a) | sa \rangle \exp(-p_{sa}R); \quad (151a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{ib}^{(s)}(p_{sb}R) &= \\ &= \sum_j \left\{ \langle ib | jb \rangle + \frac{\kappa}{M} \frac{\langle ib | -\frac{1}{2} \Delta_{r_b} | jb \rangle}{E_i - E_j} \right\} \times \\ &\times \langle jb | \exp(-\tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b} p_{sb} z_b) | sb \rangle \exp(-p_{sb}R), \end{aligned} \quad (151b)$$

где

$$\tilde{\gamma}^{-1} \tilde{b} = \gamma^{-1} b + O\{(\kappa M)^{-2}\}. \quad (152)$$

Обе функции (126) в пределе $R \rightarrow \infty$ удовлетворяют одному и тому же уравнению с гамильтонианом \hat{h}_a (11):

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{r} \right) \langle r | i \rangle = E_i \langle r | i \rangle, \quad (153a)$$

т. е. описывают состояние $|i\rangle$ изолированного атома с массой m_a , которая совпадает с приведенной массой атома (a, c) и отличается от приведенной массы m_b атома (b, c) . Истинная волновая функция $\langle m_b r_b | \bar{j}b \rangle$ атома (b, c) удовлетворяет уравнению (в единицах $e = \hbar = m_a = 1$):

$$\left(-\frac{1}{2\gamma} \Delta_r - \frac{1}{r} \right) \langle \gamma r | \bar{j}b \rangle = \gamma E_j \langle \gamma r | \bar{j}b \rangle, \quad (153b)$$

и поскольку

$$\gamma = (1 - \kappa/M)^{-1} = m_b/m_a, \quad (154)$$

то функция

$$\begin{aligned} \langle m_a r | \tilde{j}b \rangle &= \langle m_a r | j b \rangle + \\ &+ \frac{\kappa}{M} \sum_i \langle m_a r | i b \rangle \frac{\langle i b | -\frac{1}{2} \Delta_r | j b \rangle}{E_i - E_j} = \\ &= \langle m_b r | \bar{j}b \rangle + O\{(2M)^{-2}\} \end{aligned} \quad (155)$$

удовлетворяет с точностью $\sim (2M)^{-2}$ уравнению (153b). Принимая во внимание это соотношение, а также (152) и полноту набора $|\bar{j}b\rangle$, равенство (151b) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \chi_{ib}^{(s)}(p_{sb}R) &\approx \\ &\approx \sum_j \langle i b | \bar{j}b \rangle \langle j b | \exp(-\gamma^{-1} b p_{sb} z_b) | s b \rangle \exp(-p_{sb}R) \approx \\ &\approx \sum_j \langle i b | \bar{j}b \rangle \langle \bar{j}b | \exp(-b p_{sb} z_b) | \bar{s}b \rangle \exp(-p_{sb}R) = \\ &= \langle i b | \exp(-b p_{sb} z_b) | \bar{s}b \rangle \exp(-p_{sb}R). \end{aligned} \quad (156)$$

Отметим, что ортогональная матрица [23, 83, 86]:

$$\hat{S}_{ij}^{-1} = \begin{pmatrix} \delta_{ij} & 0 \\ 0 & \langle i b | \bar{j}b \rangle \end{pmatrix}, \quad (157a)$$

где

$$\begin{aligned} \langle i b | \bar{j}b \rangle &= \int d\mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) \psi_j(\gamma \mathbf{r}) = \\ &= \delta_{ij} + \frac{\kappa}{M} \tilde{\gamma}^{-1} \frac{\langle i | -\frac{1}{2} \Delta_r | j \rangle}{E_i - E_j} + O\{(2M)^{-2}\} \end{aligned} \quad (157b)$$

связывает между собой решения уравнений (153a) и (153б), которые описывает атом (b, c) с приведенными массами m_a и m_b соответственно. Подставляя выражения (151a) и (156) в соотношения (149) и используя свойство полноты наборов $|ia\rangle \equiv |\bar{ia}\rangle, |ib\rangle$ и соотношения

$$\begin{aligned} R_a &= |\mathbf{R} - a\mathbf{r}_a|_{R \gg 1} = R - az_a + O(a^2R^{-1}); \\ R_b &= |\mathbf{R} + b\mathbf{r}_b|_{R \gg 1} = R + bz_b + O(b^2R^{-1}), \end{aligned} \quad (158)$$

получаем:

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}^{(sa)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \sum_i \langle m_a \mathbf{r}_a \Theta \Phi | ia \rangle R^{-1} \chi_{ia}^{(s)}(p_{sa}R) = \\ &= \sum_i \langle m_a \mathbf{r}_a \Theta \Phi | ia \rangle \times \\ &\times \langle ia | \exp(ap_{sa}z_a) | \bar{sa} \rangle R^{-1} \exp(-p_{sa}R) = \\ &= \langle m_a \mathbf{r}_a \Theta \Phi | \bar{sa} \rangle R^{-1} \exp(-p_{sa}R); \end{aligned} \quad (159a)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}^{(sb)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \sum_i \langle m_b \mathbf{r}_b \Theta \Phi | ib \rangle R^{-1} \chi_{ib}^{(s)}(p_{sb}R) = \\ &= \sum_i \langle m_b \mathbf{r}_b \Theta \Phi | ib \rangle \langle ib | \exp(-bp_{sb}z_b) | \bar{sb} \rangle R^{-1} \exp(-p_{sb}R) = \\ &= \langle m_b \mathbf{r}_b \Theta \Phi | \bar{sb} \rangle R^{-1} \exp(-p_{sb}R). \end{aligned} \quad (159б)$$

Формулы (158) осуществляют замены $R \rightarrow R_a$ и $R \rightarrow R_b$, подобно тому как формулы (146) дают замены $M \rightarrow \mathcal{M}_a$ и $M \rightarrow \mathcal{M}_b$. Подчеркнем, что эти замены возникают в асимптотической области естественно и без дополнительных предположений.

Подставляя выражения (159) в (148), получаем:

$$\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_a, \mathbf{R}_a) + \Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_b, \mathbf{R}_b), \quad (160)$$

$R \rightarrow \infty$

где

$$\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_a, \mathbf{R}_a) = \sum_s B_{sa} \Psi_s^{(a)}(m_a \mathbf{r}_a, \Theta_a, \Phi_a) R_a^{-1} \exp(-p_{sa}R_a); \quad (161a)$$

$$\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}_b, \mathbf{R}_b) = \sum_s B_{sb} \Psi_s^{(b)}(m_b \mathbf{r}_b, \Theta_b, \Phi_b) R_b^{-1} \exp(-p_{sb}R_b). \quad (161б)$$

Здесь использованы обозначения (125) и равенства $\Theta_a \approx \Theta_b \approx \Theta$ и $R_a \approx R_b \approx R$, справедливые с точностью $\sim R^{-1}$.

Ведущий член асимптотики решений (160) определяется наиболее медленно убывающей экспонентой в разложениях (161). В случае $n = 1$, т. е. $n = (Nlm) = (100)$ достаточно учесть член $s = n = 1$:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{1\tau}(\mathbf{r}_a, \mathbf{R}_a) &\approx B_{1a} \Psi_1(m_a \mathbf{r}_a) \left(\frac{2J+1}{4} \right)^{1/2} \times \\ &\times D_{0m_J}^J(\Phi_a, \Theta_a, 0) R_a^{-1} \exp(-p_{1a}R_a); \\ \Psi_{1\tau}(\mathbf{r}_b, \mathbf{R}_b) &\approx B_{1b} \Psi_1(m_b \mathbf{r}_b) \left(\frac{2J+1}{4\pi} \right)^{1/2} \times \\ &\times D_{0m_J}^J(\Phi_b, \Theta_b, 0) R_b^{-1} \exp(-p_{1b}R_b), \end{aligned} \right\} \quad (162)$$

где \mathbf{r}_a и \mathbf{r}_b — координаты частицы c во вращающейся системе координат. Используя (117), получаем асимптотику волновой функции (7) системы трех тел в лабораторной системе координат ($XYZO$):

$$\tilde{\Psi}_{n\tau}(\mathbf{r}_0, \mathbf{R}) \underset{R \rightarrow \infty}{=} \tilde{\Psi}_{n\tau}(\mathbf{r}_{0a}, \mathbf{R}_a) + \tilde{\Psi}_{n\tau}(\mathbf{r}_{0b}, \mathbf{R}_b) \quad 70$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\Psi}_{n\tau}(\mathbf{r}_{0a}, \mathbf{R}_a) &= \\ &= B_{1a} \psi_1(m_a \mathbf{r}_{0a}) Y_{Lm_L}(\Theta_a, \Phi_a) R_a^{-1} \exp(-p_{1a} R_a); \\ \tilde{\Psi}_{n\tau}(\mathbf{r}_{0b}, \mathbf{R}_b) &= B_{1b} \psi_1(m_b \mathbf{r}_{0b}) \times \\ &\times Y_{Lm_L}(\Theta_b \Phi_b) R_b^{-1} \exp(-p_{1b} R_b), \end{aligned} \right\} \quad (163)$$

где \mathbf{r}_{0a} и \mathbf{r}_{0b} — координаты частицы c в лабораторной системе координат; L — орбитальный момент относительного движения атома (a, c) и ядра b (либо атома (b, c) и ядра a), а коэффициенты B_{1a} и B_{1b} находятся из условия нормировки (57а).

Окончательно можно сформулировать следующий рецепт построения асимптотики системы уравнений (76) по заданной физической асимптотике (122) состояния $|n\tau\rangle$ системы трех частиц. Пусть для симметрии рассмотренных каналов a и b волновые функции $\langle \mathbf{r} | ia \rangle$ и $\langle \mathbf{r} | ib \rangle$ соответствуют изолированным атомам (a, c) и (b, c) с некоторой эффективной массой m_* , например (5), тогда асимптотика функций $\chi_i(R)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \chi_{ia}(R) &= \langle ia | \exp(ap_{na}z_a) | \overline{na} \rangle \exp(-p_{na}R); \\ \chi_{ib}(R) &= \langle ib | \exp(-bp_{nb}z_b) | \overline{nb} \rangle \exp(-p_{nb}R), \end{aligned} \quad (164)$$

где $|\overline{na}\rangle$ и $|\overline{nb}\rangle$ — волновые функции атомов (a, c) и (b, c) с приведенными массами m_c и m_b (123), которые в единицах $e = \hbar = m_* = 1$ равны:

$$\left. \begin{aligned} \langle \gamma_a \mathbf{r} | \overline{na} \rangle &= \psi_n(\gamma_a \mathbf{r}); \quad \gamma_a = m_a/m_*; \\ \langle \gamma_b \mathbf{r} | \overline{nb} \rangle &= \psi_n(\gamma_b \mathbf{r}); \quad \gamma_b = m_b/m_* \end{aligned} \right\} \quad (165)$$

С учетом этого замечания матрицы преобразования (164) принимают вид:

$$\left. \begin{aligned} \langle ia | \exp(ap_{na}z_a) | \overline{na} \rangle &= \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \exp(ap_{na}z) \psi_n(\gamma_a \mathbf{r}); \\ \langle ib | \exp(-bp_{nb}z_b) | \overline{nb} \rangle &= \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \exp(-bp_{nb}z) \psi_n(\gamma_b \mathbf{r}), \end{aligned} \right\} \quad (166)$$

где выбор функций $\langle ia | \mathbf{r} \rangle$ и $\langle ib | \mathbf{r} \rangle$ диктуется лишь соображениями удобства, а функции $\langle \gamma_a \mathbf{r} | \overline{na} \rangle$ и $\langle \gamma_b \mathbf{r} | \overline{nb} \rangle$ описывают изолированные атомы (a, c) и (b, c) в параболических координатах (39).

10. ЭФФЕКТИВНОЕ ДВУХУРОВНЕВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Систему уравнений (76) и разложения (50), (68) для $\Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ (57) можно представить в более компактном виде:

$$\left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2ME_{n\tau} \right) - \hat{U}_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} \hat{U}_{ij}^J(R) \chi_j(R); \quad (167)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \sum_{jp} \mathcal{D}_{mm_j}^{J\lambda}(\Phi, \Theta, \varphi) \varphi_{jp}(\xi, \eta; R) R^{-1} \chi_{jp}(R) = \\ &= \sum_{jp} \langle \Phi \Theta \varphi \xi \eta; R | Jjp \rangle R^{-1} \chi_{jp}(R) = \\ &= \sum_{jp} \sum_{\alpha\beta} \langle \Phi \Theta \varphi \xi \eta; R | J\alpha p \rangle \hat{S}_{\alpha j}^{\hat{1}} \hat{S}_{j\beta}^{\hat{1}} R^{-1} \chi_{\beta p}(R) = \\ &= \sum_{jp} \langle \Phi \Theta \varphi \xi \eta; R | \overline{Jjp} \rangle R^{-1} \overline{\chi}_{jp}(R), \end{aligned} \quad (168)$$

где

$$\hat{S}_{ij}^{\hat{1}} = \begin{pmatrix} \delta_{ij} & 0 \\ 0 & \langle \overline{ib} | jb \rangle \end{pmatrix} \quad (169)$$

— ортогональная матрица (157), осуществляющая в пределе $R \rightarrow \infty$ переход от адиабатического базиса $|ja\rangle$ и $|jb\rangle$ (28), (72) к базису $|\overline{ja}\rangle \equiv |ja\rangle$ и $|\overline{jb}\rangle$ (153).

Система уравнений (167) получается из исходного уравнения Шредингера (13) с гамильтонианом (14) при усреднении по функциям (168)

$$\begin{aligned} &\sum_{jp'}^{N_m} \langle ipJ | H - E_{n\tau} | Jjp' \rangle R^{-1} \chi_{jp'}(R) = \\ &= \sum_{jp'}^{N_m} \langle ip\overline{J} | H - E_{n\tau} | \overline{Jjp'} \rangle R^{-1} \overline{\chi}_{jp'}(R) = 0. \end{aligned} \quad (170a)$$

Здесь, как и в (74), $(p, p') = (a, b)$, а индексы i и j нумеруют состояния как дискретного, так и сплошного спектра задачи двух центров.

В [62] показано, что с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ решение системы уравнений (170) при больших N_m можно свести к решению системы двух уравнений с новыми эффективными потенциалами. Для этого используется операторное преобразование $\hat{T}(R)$

$$\tilde{\chi}(R) = \hat{T}(R) \overline{\chi}(R); \quad (171)$$

$$\hat{T}(R) (\overline{H} - E_{n\tau}) \hat{T}^{-1}(R) \hat{T}(R) \overline{\chi}(R) = (\tilde{H} - E_{n\tau}) \tilde{\chi}(R) = 0, \quad (170б)$$

которое уничтожает недиагональные потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$ в системе (170) и сводит ее к системе двух уравнений

$$\left\{ (2M)^{-1} \begin{pmatrix} \mu_{ia, ia}^{-1} & \mu_{ia, ib}^{-1} \\ \mu_{ib, ia}^{-1} & \mu_{ib, ib}^{-1} \end{pmatrix} \frac{d^2}{dR^2} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} E_{n\tau} - \begin{pmatrix} \tilde{U}_{ia, ia} & \tilde{U}_{ia, ib} \\ \tilde{U}_{ib, ia} & \tilde{U}_{ib, ib} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{ia} \\ \tilde{\chi}_{ib} \end{pmatrix} = 0. \quad (172)$$

Эту систему уравнений мы будем называть *эффективным двухуровневым приближением* в адиабатическом представлении задачи трех тел.

Генератор $\hat{\Omega} = \hat{\Omega}(R, d/dR)$ преобразования

$$\hat{T}(R) = \exp(i\Omega) \quad (173)$$

находится методом последовательных приближений из операторного уравнения [62]

$$\hat{U}_{ij}(R) + i[\hat{\Omega}_{ij}\hat{U}_{jj}(R) - \hat{U}_{ii}(R)\hat{\Omega}_{ij}] = 0. \quad (174a)$$

Явные выражения для эффективных потенциалов

$$\mu_{ip, ip'} \equiv \mu_{ip, ip'}(R)$$

и

$$\tilde{U}_{ip, ip'} = \tilde{U}_{ip, ip'}(R) = \tilde{V}_{ip, ip'}(R) + 2(2M)^{-1} \tilde{Q}_{ip, ip'}(R) \frac{d}{dR} \quad (174b)$$

через исходные потенциалы $\hat{U}_{ij}(R)$ системы (167) приведены в [62]. Там же в качестве примера даны таблицы значений $\hat{\mu}_{ii}(R)$, $\tilde{Q}_{ii}(R)$, $\tilde{V}_{ii}(R)$ и $\hat{V}_{ii}(R)$ для мезомолекулы $ppr\mu$.

Значения $\epsilon_{Jv} = E_{n\tau} - E_{1a}$ (12), полученные при решении уравнений (172) с граничными условиями $\tilde{\chi}_i(0) = \tilde{\chi}_i(R_m) = 0$ при $R_m = 20$, приведены в шестой строке табл. 4–6, эти значения хорошо согласуются со значениями ϵ_{Jv} , найденными при решении полной системы уравнений (76).

В пределе $R \rightarrow \infty$ функции $\langle \Phi \Theta \Phi \xi \eta; R | \overline{Jj\rho} \rangle$ (168) определены соотношениями (125), а потенциалы $\bar{U}_{ij}(R) = \hat{S} \hat{U}_{ij} \hat{S}^{-1}$ при $R \gg 1$ имеют вид [62]:

$$\bar{U}_{ij}(R) = \bar{V}_{ij}(R) + 2\bar{Q}_{ij}^{(0)} \frac{d}{dR}, \quad (175)$$

где

$$\bar{V}_{ii}(R) = 2M\hat{E}_i + R^{-2} \langle ipJ | \mathbf{J}^2 - 2I_z^2 + \mathbf{I}^2 | Jip \rangle$$

$$\bar{V}_{ij}(R) = R^{-1} \begin{pmatrix} (1 + \kappa) v_{ij}^{(a)} & 0 \\ 0 & -\gamma(1 - \kappa) v_{ij}^{(b)} \end{pmatrix},$$

$$\hat{E}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} (E_i^{(0)} + E_i^{(2)} R^{-2}),$$

$$\begin{aligned}
 v_{ij}^{(a, b)} &= h_{ij}^{(a)}(\infty) + B_{ij}^{(a)}(\infty); \quad E_i^{(a)} = 3/2n(n_1 - n_2); \\
 h_{ij}^{(a)}(\infty) &= -\frac{1}{4} \langle i p J | l_+ p_- + p_- l_+ + l_- p_+ + p_+ l_- | J j p \rangle; \\
 B_{ij}^{(a)}(\infty) &= \frac{1}{2} \langle i p J | p_+ J_- + p_- J_+ | J j p \rangle; \\
 \langle i a | p_{\pm}^{(a)} | j a \rangle &= i(E_i - E_j) \langle i a | r_{\pm}^{(a)} | j a \rangle; \\
 \langle i b | p_{\pm}^{(b)} | j b \rangle &= i(E_i - E_j) \langle i b | r_{\pm}^{(b)} | j b \rangle; \\
 \bar{Q}_{ij}^{(a)} &= \begin{pmatrix} (1 + \kappa) q_{ij}^{(a)} & 0 \\ 0 & -\gamma(1 - \kappa) q_{ij}^{(b)} \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Здесь величины $q_{ij}^{a,b}$, γ , E_i определены формулами (134), (146), а операторы J^2 , J_{\pm} , I^2 , l_z , l_{\pm} , p_{\pm} заданы соотношениями (17), (22), (24). При $R \gg 1$ эффективные потенциалы $\hat{\mu}_{ii}(R)$ и $\tilde{U}_{ii}(R)$ связаны с потенциалами $\bar{U}_{ij}(R)$ соотношениями:

$$\left. \begin{aligned}
 \hat{\mu}_{ii}^{-1}(R) &= \hat{I} - (2M)^{-1} 4 \sum_{j \neq i} \frac{\bar{Q}_{ij}^{(a)} \bar{Q}_{ji}^{(a)}}{\hat{E}_i - \hat{E}_j}; \\
 \tilde{V}_{ii}(R) &= (2M)^{-1} \bar{V}_{ii}(R) + (2M)^{-2} \sum_{j \neq i} \frac{\bar{V}_{ij}(R) \bar{V}_{ji}(R)}{\hat{E}_i - \hat{E}_j}; \\
 \tilde{Q}_{ii}(R) &= 0.
 \end{aligned} \right\} \quad (176)$$

Используя (175), правила сумм (144) и

$$\sum_{j \neq i} \frac{\langle i | p_{\pm} | j \rangle \langle j | p_{\mp} | i \rangle}{E_i - E_j} = -1, \quad (177)$$

получаем:

$$\left. \begin{aligned}
 \hat{\mu}_{ii}^{-1}(\infty) &= \begin{pmatrix} 1 - M a^2 & 0 \\ 0 & 1 - M \gamma^{-1} b^2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \mathcal{M}_a^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}_b^{-1} \end{pmatrix}; \\
 \tilde{V}_{ii}(R) &= \begin{pmatrix} E_{ia} & 0 \\ 0 & E_{ib} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} R^{-2} \begin{pmatrix} \mathcal{M}_a^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}_b^{-1} \end{pmatrix} \{ J(J+1) - 2m^2 + \\
 &+ \langle i | I^2 | i \rangle \},
 \end{aligned} \right\} \quad (178)$$

где все обозначения введены в (145) и (146), т. е. мы вновь пришли к результатам разд. 9.

При проецировании (167) в основное состояние $i = (Nlm) = = (100)$ в пределе $R \gg 1$ уравнение (172) принимает вид:

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1)}{R^2} \right) - \begin{pmatrix} p_{1a}^2 & 0 \\ 0 & p_{1b}^2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{1a} \\ \tilde{\chi}_{1b} \end{pmatrix} = 0, \quad (179)$$

где

$$\begin{aligned} p_{1a}^2 &= -2\mathcal{M}_a \varepsilon_a; & \varepsilon_a &= E_{n\tau} - E_{1a}; \\ p_{1b}^2 &= -2\mathcal{M}_b \varepsilon_b; & \varepsilon_b &= E_{n\tau} - E_{1b} \end{aligned}$$

равны физическим импульсам в каналах a и b .

При $p_1^2 > 0$ асимптотика решений уравнений (179) имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\chi}_{1a}(R) &\approx B_{1a} \exp(-p_{1a}R) \{1 + J(J+1)/(2p_{1a}R)\}; \\ \tilde{\chi}_{1b}(R) &\approx B_{1b} \exp(-p_{1b}R) \{1 + J(J+1)/(2p_{1b}R)\}. \end{aligned} \right\} \quad (180)$$

Асимптотика решений $\chi_i(R)$ системы (76), (167) вычисляется по формулам

$$\chi = \hat{S}^{-1} \bar{\chi} = \hat{S}^{-1} \hat{T}^{-1} \tilde{\chi}. \quad (181)$$

Принимая во внимание, что при $R \gg 1$ генератор $\hat{\Omega}$ преобразования (173) имеет вид [62]:

$$\begin{aligned} i \hat{\Omega}_{ij} &= \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -\gamma^{-1}b \end{pmatrix} \frac{1}{E_i - E_j} \left(2q_{ij} \frac{d}{dR} + v_{ij} \frac{1}{R} \right) = \\ &= \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -\gamma^{-1}b \end{pmatrix} \left\{ \langle i | z | j \rangle \frac{d}{dR} + \right. \\ &+ \left. \frac{i}{2R} \langle i | \frac{1}{2} (l_{+r_{-}} + r_{-}l_{+} + l_{-}r_{+} + r_{+}l_{-}) + r_{+}J_{-} + r_{-}J_{+} | \rangle \right\} = \\ &= \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -\gamma^{-1}b \end{pmatrix} \langle i | \mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}}' | j \rangle = \\ &= \begin{pmatrix} a \langle i | \mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}}' | \bar{j} \rangle & 0 \\ 0 & -b \langle \bar{i} | \mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}}' | \bar{j} \rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (182)$$

где компоненты вектора \mathbf{r} и оператора $\nabla_{\mathbf{R}}'$ заданы во вращающейся системе координат формулами (18) и (24), получаем:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \chi_{ia} \\ \chi_{ib} \end{pmatrix} &= \sum_j \begin{pmatrix} \delta_{ij} & 0 \\ 0 & \langle ib | \bar{j} \bar{b} \rangle \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \exp(-a\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}}') & 0 \\ 0 & \exp(b\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}}') \end{pmatrix}_{j1} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{1a} \\ \tilde{\chi}_{1b} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (183)$$

Соотношение (183) дает рецепт построения асимптотики решений (76), оно совпадает с (154) и (156), если в разложениях (180) и (182) сохранить лишь ведущий член.

Эффективное двухуровневое приближение позволяет свести решение исходной системы дифференциальных уравнений к решению

двух уравнений (в случае равных масс — к решению одного уравнения) с эффективными потенциалами $\mu_{ip, ip'}(R)$ и $\tilde{U}_{ip, ip'}(R)$, которые построены с учетом всех потенциалов $U_{ij}(R)$ исходной задачи (76). Дальнейшее упрощение обсуждаемого подхода состоит в том, что вместо функции $\mu_{ip, ip'}(R)$ в уравнении (172) используется ее асимптотическое значение (178) $\mu_{ia, ia}(\infty) = \mathcal{M}_a/M$, а вместо потенциалов (174б) — их прежние выражения (67) в обычном двухуровневом приближении $i = j = 1$, в которых κ заменено на

$$\tilde{\kappa} = -\mathcal{M}_a(1 - m_b/m_a) = -\mathcal{M}_a(1 - \gamma).$$

Соответствующее этому простому подходу система двух уравнений имеет вид:

$$\left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2\mathcal{M}_a \varepsilon_{Jv} \right) - \hat{U}_{11}^J(\mathcal{M}_a, \tilde{\kappa}, R) \right\} \chi_1(R) = 0, \quad (184)$$

где потенциалы $\hat{U}_{11}^J(\mathcal{M}_a, \tilde{\kappa}, R)$ определены формулами (63), (65), (67), (71), (75) с заменой $M \rightarrow \mathcal{M}_a$ и $\kappa \rightarrow \tilde{\kappa}$.

Значения ε_{Jv} , найденные при решении системы (184), приведены в седьмой строке табл. 4—6. Отметим, что такой простой подход хотя и не может быть строго обоснован, тем не менее дает хорошее приближение к энергии ε_{Jv} , полученной при решении полной (76) системы. Он был успешно использован для вычисления сечения рассеяния $p\mu + p \rightarrow p\mu + p$ в квазирезонансных ситуациях [63] и позволил устранить многолетние расхождения между теорией и экспериментом [87].

Идея эффективного двухуровневого приближения восходит к работе [88], в которой обсуждалась возможность факторизации волновой функции системы трех тел и диагонализации матрицы потенциалов системы уравнений (76). Различные варианты такого подхода (известного как *best adiabatic approximation*) развивались во многих работах [89]. В нашем подходе преобразование (173), диагонализующее матрицу потенциалов, имеет ясный физический смысл, поскольку в пределе $R \gg 1$ переходит в операторный аналог (182), (183) *трансляционной экспоненты*, впервые введенной в [90]. С тех пор предложено много способов введения трансляционной экспоненты [91], которые до сих пор продолжают развиваться [92]. Особенность нашего подхода состоит в том, что он естественно обобщает понятие трансляционной экспоненты на всем интервале изменения R .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данный обзор представляет собой первое последовательное изложение метода решения задачи трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении. В настоящее время этот метод алгоритмизован и реализован в виде комплекса пакетов программ на ЭВМ. Чисто вычислительные аспекты построения соответствующих

алгоритмов, включая их обоснование, исследования сходимости, устойчивости и оценки точности, мы в данном обзоре не затрагивали (они представляют самостоятельный предмет исследования, которое сейчас также завершено).

Рассматриваемый метод позволяет вычислять энергии связи и волновые функции системы трех заряженных частиц с абсолютной точностью $\sim 10^{-5} \div 10^{-6}$. Метод одинаково хорошо пригоден для расчетов основного и возбужденных состояний системы трех частиц. Это особенно важно при вычислении энергии слабосвязанных состояний μ -мезомолекул изотопов водорода, знание которых необходимо для описания процессов мюонного катализа ядерных реакций синтеза [3]. Полученные результаты могут служить для калибровки других методов решения задачи трех тел, например при рассмотрении возбужденных состояний молекулярных ионов H_2^+ , HD^+ и т. д.

В течение многих лет в литературе существует мнение, что в адиабатическом представлении задачи трех тел нельзя обеспечить физические граничные условия. В обзоре показано, что это утверждение безосновательно, поскольку указанные трудности характерны не для самого метода, а лишь для его реализации в двухуровневом приближении. При использовании достаточно большого набора базисных двухцентровых функций упомянутые трудности отсутствуют.

Результаты исследования сходимости адиабатического разложения показывают, что использование конечного набора базисных функций не является препятствием для вычисления энергий системы трех тел с высокой точностью. Сформулирован рецепт вычисления вкладов высших состояний задачи двух центров в энергию связи системы трех частиц.

Потенциалы и развитые алгоритмы, используемые при вычислении энергии связи и волновых функций системы трех тел, в настоящее время нашли применение при расчетах релятивистских и спиновых эффектов мезомолекул изотопов водорода [45, 72, 73] при вычислении сечений многочисленных мезомолекулярных процессов [93—97], при расчетах скоростей ядерных реакций синтеза в мезомолекулах [74, 81], для учета экранирующего влияния электронной оболочки молекул на энергии связи мезомолекул [75], для расчета спектра энергии несимметричных систем, например μHe , μLi и т. д. [97]. Кроме того, этот метод использован для расчета спектра молекулы водорода [98] и описания процесса слабого μ -захвата в мезомолекуле $pp\mu$ [99].

В заключение авторы выражают признательность Д. И. Абрамову, Д. Бакалову, Ф. Вукайловичу, М. Касчиеву, И. В. Комарову, А. В. Матвеевко, В. С. Мележику, И. В. Пузынину, Т. П. Пузыниной, С. Ю. Славянову, Л. Н. Сомову, Н. Ф. Трусковой и М. П. Файфману, в содружестве с которыми была получена большая часть представленных здесь результатов.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

Гамильтониан (57) в координатах $\{\xi, \eta, R\}$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \langle m | \mathcal{P}_R^2 + \mathcal{L}^2 R^{-2} | m \rangle = & - \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} - \right. \\ & - \frac{1}{R^2 (\xi^2 - \eta^2)} \left[(\xi - \kappa \eta) (\xi^2 - 1) \left(2 \frac{\partial}{\partial \xi} + R \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial R} + R \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \right. \\ & + (\eta - \kappa \xi) (1 - \eta^2) \left(2 \frac{\partial}{\partial \eta} + R \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial R} + R \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \left. \right] - \\ & \left. - [\xi^2 + \eta^2 - 1 - 2\kappa \xi \eta + \kappa^2] \langle m | \mathbf{p}^2 | m \rangle / 4 \right\}; \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

$$\begin{aligned} \langle m | \mathbf{p}^2 | m \rangle = & - \frac{4}{R^2 (\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} - m^2 \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R^{-2} \langle m | \mathcal{L}_{\pm} | m \mp 1 \rangle = & \mp \frac{1}{R^2 (\xi^2 - \eta^2)} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \times \\ & \times \left[(\eta - \kappa \xi) \frac{\partial}{\partial \xi} + (\xi - \kappa \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + (m \mp 1) \frac{\xi \eta - \kappa}{R^2 [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

Матричные элементы (66), (67) гамильтониана (57) можно представить в виде:

$$\begin{aligned} H_{im, im}^{(+)}(R) = & \int d\tau \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial R} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial R} - \frac{1}{R} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} \left\{ \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial R} \left[\xi (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \right. \right. \\ & + \eta (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \left. \right] + \left[\xi (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \xi} + \eta (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \eta} \right] \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial R} \left. \right\} + \\ & + \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} (\xi^2 + \eta^2 - 1) \left[(\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \xi} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \right. \\ & + (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \eta} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \left. \right] + \frac{m^2}{R^2} \int d\tau (\xi^2 + \eta^2 - 1) \frac{\Phi_{im} \Phi_{jm}}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}; \\ H_{im, jm}^{(-)}(R) = & \frac{1}{R} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} \left\{ \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial R} \left[\eta (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \right. \right. \\ & + \xi (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \left. \right] + \left[\eta (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \xi} + \xi (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \eta} \right] \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial R} \left. \right\} - \\ & - \frac{2}{R^2} \int d\tau \xi \eta \left[(\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \xi} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \eta} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \right] - \\ & - \frac{2m^2}{R^2} \int d\tau \xi \eta \frac{\Phi_{im} \Phi_{jm}}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}; \\ H_{im, jm}^{(*)}(R) = & \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} \left[(\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \xi} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \right. \\ & + (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{im}}{\partial \eta} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \left. \right] + \frac{m^2}{R^2} \int d\tau \frac{\Phi_{im} \Phi_{jm}}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}; \\ Q_{im, jm}^{(+)}(R) = & - \int d\tau \Phi_{im} \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} \Phi_{im} \times \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\xi (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \eta (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \right]; \\
 Q_{im, jm}^{(-)}(R) &= -\frac{1}{R} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} \Phi_{im} \left[\eta (\xi^2 - 1) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \xi} + \xi (1 - \eta^2) \frac{\partial \Phi_{jm}}{\partial \eta} \right]; \\
 b_{im, jm'}^{(+)}(R) &= \mp \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \Phi_{im} \times \\
 & \times \left(\eta \frac{\partial \Phi_{jm \mp 1}}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial \Phi_{jm \mp 1}}{\partial \eta} \right) + \frac{(m \mp 1)}{R^2} \int d\tau \xi \eta \frac{\Phi_{im} \Phi_{jm \mp 1}}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}; \\
 b_{im, jm'}^{(-)}(R) &= \pm \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2 - \eta^2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \Phi_{im} \times \\
 & \times \left(\xi \frac{\partial \Phi_{jm \mp 1}}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial \Phi_{jm \mp 1}}{\partial \eta} \right) - \frac{(m \mp 1)}{R^2} \int d\tau \frac{\Phi_{im} \Phi_{jm \mp 1}}{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}; \\
 d\tau &= (R/2)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta.
 \end{aligned}$$

Выражения для матричных элементов, необходимые для построения потенциалов $U_{js}(k, R)$, $U_{si}(k, R)$ и $U_{ss'}(k, R)$, получаются заменой $i = \{n_1 q\} \rightarrow q$ в (П.3), эти разложения использовались при вычислении матричных элементов в [31, 53, 54].

При вычислении матричных элементов (П.3) с помощью алгоритма, предложенного в [51, 52], они были предварительно преобразованы к виду (аргумент R и индексы $m = m'$ опускаем)

$$\begin{aligned}
 H_{ii}^{(+)} &= -\frac{3}{2} R^{-2} + R^{-2} (4E_i + RE'_i) \langle i|r^2|i \rangle - \\
 & - 3R^2 \langle i|Vr^2|i \rangle + \int d\tau (\partial \Phi_i / \partial R)^2; \\
 H_{ii}^{(-)} &= -R^{-1} (4E_i + RE'_i) \langle i|z|i \rangle + 3R^{-1} \langle i|Vz|i \rangle; \\
 H_{ii}^{(*)} &= -(E_i + RE'_i)/2; Q_{ii}^{(+)} = Q_{ii}^{(-)} = 0; \\
 H_{ij}^{(+)} &= R^{-2} (E_i - E_j)^{-2} \{2(E_i + E_j) + R(E'_i + E'_j)\} \langle i|V|j \rangle + \\
 & + R^{-2} \{2(E_i + E_j) + (R/2)(E'_i + E'_j)\} \langle i|r^2|j \rangle - 3R^2 \langle i|r^2V|j \rangle - \\
 & - (2R)^{-1} (E_i - E_j) \int d\tau \Lambda_{ij}^{(-)} r^2 + R^{-1} (E_i - E_j)^{-1} \int d\tau \Lambda_{ij}^{(-)} V; \\
 H_{ij}^{(-)} &= -R^{-1} \{2(E_i + E_j) + (R/2)(E_i - E_j)\} \langle i|z|j \rangle + \\
 & + 3R^{-1} \langle i|zV|j \rangle + (1/2)(E_i - E_j) \int d\tau \Lambda_{ij}^{(-)} z; \\
 H_{ij}^{(*)} &= (1/2)(E_i \delta_{ij} - \langle i|V|j \rangle); \\
 Q_{ij}^{(+)} &= R^{-1} (E_i - E_j) \langle i|V|j \rangle - (2R)^{-1} (E_i - E_j) \langle i|r^2|j \rangle; \\
 Q_{ij}^{(-)} &= (1/2)(E_i - E_j) \langle i|z|j \rangle; \\
 \frac{dQ_{ij}^{(+)}}{dR} &= R^{-2} (E_i - E_j)^{-2} \{(E_i - E_j) - R(E'_i - E'_j)\} \langle i|V|j \rangle - \\
 & - R^{-2} \{2(E_i - E_j) + (R/2)(E'_i - E'_j)\} \langle i|r^2|j \rangle - (2R)^{-1} (E_i - E_j) \times \\
 & \times \int d\tau \Lambda_{ij}^{(+)} r^2 + R^{-1} (E_i - E_j)^{-1} \int d\tau \Lambda_{ij}^{(+)} V; \\
 \frac{dQ_{ij}^{(-)}}{dR} &= (2R)^{-1} \{4(E_i - E_j) + R(E'_i - E'_j)\} \langle i|z|j \rangle +
 \end{aligned}
 \tag{П.4}$$

$$+(1/2)(E_i - E_j) \int d\tau \Lambda_{ij}^{(\pm)} z;$$

$$b_{im, jm \mp 1}^{(\pm)} = \mp R^{-2} (E_{im} - E_{jm \mp 1}) \langle im | (r^2 - z^2)^{1/2} | jm \mp 1 \rangle.$$

Здесь введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} z_{ij} &= \langle i | z | j \rangle = \int d\tau \varphi_{im} \frac{R}{2} \xi \eta \varphi_{jm}; \\ \langle i | r^2 | j \rangle &= \int d\tau \varphi_{im} \frac{R^2}{4} (\xi^2 + \eta^2 - 1) \varphi_{jm}; \\ \langle im | (r^2 - z^2)^{1/2} | jm \pm 1 \rangle &= \int d\tau \varphi_{im} \frac{R^2}{4} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \varphi_{jm \mp 1}; \\ \Lambda_{ij}^{(\pm)} &= \varphi_{im} \frac{\partial \varphi_{jm}}{\partial R} \pm \frac{\partial \varphi_{im}}{\partial R} \varphi_{jm}; \\ V &= -\frac{2}{R(\xi^2 - \eta^2)} \{ (Z_a + Z_b) \xi + (Z_b - Z_a) \eta \}; \\ E_{im} &\equiv E_{im}(R); E'_i \equiv \frac{\partial}{\partial R} E_{im}(R); \varphi_{im} \equiv \varphi_{im}(\xi, \eta; R); \\ \langle i | j \rangle &\equiv \langle im | jm \rangle = \int d\tau \varphi_{im} \varphi_{jm} = (R/2)^3 \int (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta \varphi_{im} \varphi_{jm}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{П.5})$$

Выражения (П.4) получены из (П.3) коммутацией различных операторов $\hat{f}(\xi, \eta, R, \frac{\partial}{\partial \xi}, \frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial R})$ с гамильтонианом (28в). Например, из

$$\left[\frac{\partial}{\partial R}, h \right] = -\frac{2}{R} h + \frac{1}{R} V \quad (\text{П.6})$$

при $i \neq j$ следует соотношение

$$-\int d\tau \varphi_i \frac{\partial}{\partial R} \varphi_j = [R(E_i - E_j)]^{-1} \langle i | V | j \rangle, \quad (\text{П.7})$$

а при $i = j$ теорема Гельмана — Фейнмана [46, 55]

$$V_{ii} = R \frac{\partial E_i}{\partial R} + 2E_i. \quad (\text{П.8})$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я. Б., Герштейн С. С.— УФН, 1960, т. 71, с. 581.
2. Gerstein S. S., Ponomarev L. I.— In: Muon Physics. Eds V. Hughes and C. S. Wu. New York, Academic Press, 1975.
3. Ponomarev L. I. Muon Catalysis of Fusion Reactions in Deuterium—Tritium Mixture. X European Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics. September 14—19, 1981, Moscow.
4. Pekeris C. L.— Phys. Rev., 1958, v. 112, p. 1649; 1959, v. 115, p. 1217.
5. Hylleraas E., Midtdal J.— Phys. Rev. A, 1956, v. 103, p. 829.
6. Bishop D., Cheung L.— Phys. Rev., 1977, v. 16, p. 640.
7. Kolos W., Roothaan C. C., Sack R. A.— Rev. Mod. Phys., 1960, v. 32, p. 178.
8. Born M., Oppenheimer J. R.— Ann. Phys., 1927, v. 84, p. 457.
9. Kiselev A. A.— Can. J. Phys., 1978, v. 56, p. 615.
10. Bishop D., Wetmore R.— Mol. Phys., 1973, v. 26, p. 145; Hunter G., Yau A.W., Pritchard H. O.— Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1974, v. 14, p. II; Bishop D. e.a.— J. Chem. Phys., 1975, v. 63, p. 4836; Colbourn E., Bunker F.R.— J. Mol. Spectr., 1976, v. 63, p. 115.

11. Marschall H., Schmidt T.— *Z. Phys.*, 1958, Bd 150, S. 293; Зельдович Я. Б., Герштейн С. С.— *ЖЭТФ*, 1958, т. 35, с. 649; Беляев В. Б. и др.— *ЖЭТФ*, 1959, т. 37, с. 1652.
12. Cohen S., Judd D. L., Riddell R. J.— *Phys. Rev.*, 1958, v. 110, p. 1471; *Phys. Rev.*, 1960, v. 119, p. 386; Narumi H., Matsuo S.— *Progr. Theor. Phys.*, 1961, v. 25, p. 290; Muzino Y. *Phys. Soc. Japan*, 1961, v. 16, p. 1043; Joachain C., Wantiez N.— *Bull. Acad. Roy. Belg. Cl. Sci.*, 1962, v. 48, p. 147.
13. Patterson M. R., Becker R. L. Thesis. Oak Ridge National Laboratory USA. ORNL-TM-1850, 1967; Kolos W.— In: *Advances in Quantum Chemistry*. Ed. P.—O. Löwdin. V.5. N.Y., Academic Press, 1970, p. 99.
14. Пономарев Л. И., Пузынина И. В., Пузынина Т. П.— *ЖЭТФ*, 1973, т. 65, с. 28; Ponomarev L. I., Puzynina I. V., Puzynina T. P.— *J. Comp. Phys.*, 1973, v. 13, p. 1.
15. Fröman A., Kinsey J. L.— *Phys. Rev.*, 1961, v. 123, p. 2077; Schröder V.— *Z. Phys.*, 1963, Bd 173, S. 221; Frost A. A., Inokuti M., Lowe J. P.— *J. Chem. Phys.*, 1964, v. 41, p. 482; Wessel W. R., Phillipson P.— *Phys. Rev. Lett.*, 1964, v. 13, p. 23; Kabir P. K.— *Phys. Lett.*, 1965, v. 14, p. 257; Scherr C. W., Machaček M.— *Phys. Rev. A*, 1965, v. 138, p. 371; Delves L. M., Kolotas T.— *Aust. J. Phys.*, 1968, v. 21, p. 1; Kolos W.— *Phys. Rev.*, 1968, v. 165, p. 165.
16. Halpern A.— *Phys. Rev. Lett.*, 1964, v. 13, p. 660.
17. Carter V. P.— *Phys. Rev.*, 1968, v. 165, p. 139.
18. Carter V. P.— *Phys. Rev.*, 1966, v. 141, p. 863.
19. Born M.— *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen*, 1951, Bd 1, № 6, S. I; Борн М., Хаун Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1958.
20. Ву Т. Ю., Омура Т. Квантовая теория рассеяния. М., Наука, 1968.
21. Мотт Н., Мэсси Г. Теория атомных столкновений. Пер. с англ. М., Мир, 1969.
22. Виноцкий С. И. и др.— *ЖЭТФ*, 1980, т. 79, с. 698.
23. Ponomarev L. I., Vinitsky S. I.— *J. Phys. B: Atom Molec. Phys.*, 1979, v. 12, p. 567.
24. Виноцкий С. И. и др.— *ЖЭТФ*, 1978, т. 74, с. 849.
25. Cohen E. R., Taylor V. N.— *J. Phys. and Chem Ref. Data*, 1973, v. 2, p. 663.
26. Виноцкий С. И., Пономарев Л. И.— *Ядерная физика*, 1974, т. 20, с. 576.
27. Halpern A. M.— *Phys. Rev.*, 1969, v. 186, p. 14.
28. Крониг Р. Полосатые спектры и строение молекул. Пер. с англ. Харьков— Киев. ОНТИ, 1935.
29. Hunter G., Prichard H. A.— *J. Chem. Phys.*, 1966, v. 45, p. 3806.
30. Матвеево А. В., Пономарев Л. И.— *Ядерная физика*, 1972, т. 16, с. 620.
31. Hunter G.— *J. Chem. Phys.*, 1976, v. 64, p. 3213.
32. Pack R. T., Hirschfelder J. O.— *J. Chem. Phys.*, 1968, v. 50, p. 4009.
33. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., Наука, 1976.
34. Пономарев Л. И., Пузынина Т. П.— *ЖВМиМФ*, 1968, т. 8, с. 1256.
35. Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. Препринт ОИЯИ, P4-5040, 1970.
36. Puzynina T. P. TERM — Program for finding the eigenvalues of quantum-mechanical two centre problems in Collection of Scientific Papers of Algorithms and Programs for Solution of Some. Problem Phys. Eds L. Varga, E. P. Zhidkov, G. I. Makarenko, G. Nemeth, K FKI—1977—12. Budapest, Central Research Inst. for Phys., 1977, p. 144.
37. Трускова Н. Ф. Сообщение ОИЯИ, P11-10207, 1976.
38. Ponomarev L. I., Somov L. N.— *J. Comp. Phys.*, 1976, v. 20, p. 183; Nakamura H., Takagi H. Preprint IPPJ-AM-16, Japan, Nagoya University, 1980.
39. Abramov D. I. e.a.— *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 1979, v. 12, p. 1761.
40. Виноцкий С. И., Пономарев Л. И., Файфман М. П. Препринт ОИЯИ, P4-9312, 1975; Faifman M. P., Ponomarev L. I., Vinitsky S. I.— *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 1976, v. 9, p. 2255.
41. Coulson C. A., Gillam C. M. *Proc. Roy. Soc. A*, 1947, v. 62, p. 360.

42. Ситенко А. Г., Тартаковский В. К., Лекции по теории ядра. М., Атомиздат, 1972.
43. Nielson H. H. Encyclopedia of Physics. V. 37, pt 1, Berlin, Springer-Verlag, 1959, p. 187.
44. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика М., Физматгиз, 1963.
45. Бакалов Д. Д., Вилицкий С. И., Мележик В. С.— ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 1629.
46. Эпштейн С. Вариационный метод в квантовой химии. Пер. с англ. М., Мир, 1977.
47. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. Пер. с англ. М., Мир., 1977.
48. Канторович Л. В.— Изв. АН сер. физики, 1933, № 5.
49. Канторович Л. В., Крылов В. М. Приближенные методы высшего анализа. Л., Гостехтеориздат, 1952.
50. Pomomarev L. I., Puzynina T. P., Truskova N. F.— J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1978, v. 11, p. 3861.
51. Трускова Н. Ф. Сообщение ОИЯИ, P11-11218, 1978.
52. Трускова Н. Ф.— Ядерная физика, 1978, т. 28, с. 850
53. Pomomarev L. I., Puzynina T. P., Somov L. N.— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1977, v. 10, p. 1335.
54. Pomomarev L. I., Slavyanov S. Yu., Somov L. M.— J. Phys., B: Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 3797.
55. Слетер Дж. Электронная структура молекул. Пер. с англ. М., Мир, 1965.
56. Power J. D.— Phil. Trans. R. Soc. A, 1973, v. 274, p. 663.
57. Вилицкий С. И. и др. Сообщение ОИЯИ, P5-12787, 1979.
58. Мележик В. С. и др. Сообщение ОИЯИ, P5-12789, 1979.
59. Мележик В. С. и др. Сообщение ОИЯИ, P5-12790, 1979.
60. Жидков Е. П., Макаренко Г. И., Пузынин И. В.— ЭЧАЯ, 1973, т. 4, с. 127.
61. Вилицкий С. И. и др. Сообщение ОИЯИ, P5-12788, 1979.
62. Pomomarev L. I., Vinitzky S. I., Vukajlović F. R.— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 847.
63. Пономарев Л. И., Сомов Л. Н., Файфман М. П.— Ядерная физика, 1979, т. 29, с. 133.
64. Вилицкий С. И., Пономарев Л. И.— ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 1670.
65. Пономарев Л. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Препринты ОИЯИ, P4-8884, 1975, P4-9183, 1975; Pomomarev L. I., Puzynin I. V., Puzynina T. P.— J. Comp. Phys., 1976, v. 22, p. 125.
66. Весман Э. А.— Письма ЖЭТФ, 1967, т. 5, с. 113.
67. Вилицкий С. И., Мележик В. С., Пономарев Л. И.— ЖЭТФ, 1982, т. 82, с. 670.
68. Фок В. А. Начала квантовой механики. М., Наука, 1976.
69. Бете Г., Солпитер Е. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
70. Мележик В. С., Сомов Л. Н. Сообщение ОИЯИ, P11-81-856, 1981.
71. Вилицкий С. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Сообщение ОИЯИ, P11-82-428, 1982.
72. Бакалов Д.— ЖЭТФ, 1980, т. 79, с. 1149.
73. Melezhik V. S., Pomomarev L. I.— Phys., Lett. B, 1978, v. 77, p. 217; Мележик В.С. Препринт ОИЯИ, P4-82-410, 1982.
74. Богданова Л. Н. и др. Ядерная физика, 1981, т. 34, вып. 5, с. 1191.
75. Бакалов Д., Мележик В. С. Сообщение ОИЯИ, P4-81-835, 1981.
76. Abramov D. I., Slavyanov S. Yu., Somov L. N.— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 4717.
77. Вилицкий С. И., Мележик В. С., Пономарев Л. И.— Ядерная физика, 1982, т. 36, с. 465.
78. Chang E. S., Fano U.— Phys. Rev. A, 1972, v. 6, p. 173.
79. Вигнер Е. Теория групп. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
80. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория уг-

- ЛОВОГО МОМЕНТА. Л., Наука, 1975.
81. **Богданова Л. Н., Маркушин В. Е., Мележик В. С.**— ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 829.
 82. **Hahn Y.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1978, v. 11, p. 3221.
 83. **Ponomarev L. I., Somov L. N., Vukajlović F. R.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1981, v. 14, p. 591.
 84. **Смирнов В. И.** Курс высшей математики. Т. III, ч. 2, М., Физматгиз, 1958, с. 469.
 85. **Мотт Н., Снеддон И.** Волновая механика и ее применение. Пер. с англ. М., Наука, 1966, с. 98.
 86. **Матвеевко А. В., Пономарев Л. И.**— ТМФ, 1972, т. 12, с. 64.
 87. **Bertin A. e.a.**— Phys. Lett. B, 1978, v. 78, p. 335.
 88. **Pack R. T., Hirschfelder J. O.**— J. Chem. Phys., 1970, v. 52, p. 521.
 89. **Rosenthal H.**— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27 p. 635; **Hunter G.**— Int. J. Quantum Chem., 1975, v. 9, p. 237; **Bishop D., Hunter G.**— Molec. Phys., 1975, v. 30, p. 1433; **Bunker P. R., Moss R. E.**— Molec. Phys., 1977, v. 33, p. 417; **Albat R., Gruen N.**— J. Phys. B; Atom. Molec. Phys., 1976, v. 9, p. L463; **Wolniewicz L., Czub J.**— Molec. Phys., 1978, v. 36, p. 1301; **Klar H., Fano V.**— Phys. Rev. Lett., 1976, v. 37, p. 1132; **Klar H.**— Phys. Rev. A, 1977, v. 15, p. 1452; **Klar H., Klar M.**— Phys. Rev. A, 1978, v. 17, p. 1007.
 90. **Bates D. R., McCarroll R.**— Proc. R. Soc. A, 1958, v. 245, p. 175.
 91. **Bates D. R., Holt A. R.**— Proc. Roy. Soc. A, 1965, v. 292, p. 168; **Bates D. R., Sprevak D.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1971, v. 4, p. L47; **Schneiderman S. B., Russek A.**— Phys. Rev., 1969, v. 181, p. 311 (см. также **Smith K.**— In: Scattering Theory. Ed. Barut A. D. London, Gordon and Breach, 1969; **Thorson W. R.**— J. Chem. Phys., 1965, v. 42, p. 3878; J. Chem. Phys., 1969, v. 50, p. 1702; **Соловьев Е. А.**— ТМФ, 1976, т. 28, с. 240.
 92. **Chen J. C. Y., Ponce V. H., Watson K. M.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1973, v. 6, p. 965; **Matveenko A. V.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1976, v. 9, p. 1419; **Matveenko A. V., Lovas I.**— Nucl. Phys. A, 1978, v. 299, p. 333; **Schmid G. B.**— Phys. Rev. A, 1977, v. 15, p. 1459; **Thorson W. R., Delos J. B.**— Phys. Rev. A, 1978, v. 18, p. 117; 1978, v. 18, p. 135; **Kimura M., Thorson W. R.**— Phys. Rev., 1981, v. 24, p. 1780; **Grothers D. S. F., Hughes J. G.**— Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1979, v. 292, p. 539; **Delos J. B.**— Rev. Mod. Phys., 1981, v. 53, p. 287; **Winter T. G., Lane N. F.**— Phys., Rev. A, 1978, v. 17, p. 66; **Green T. A.**— Phys. Rev., A, 1981, v. 23, pp. 519, 532.
 93. **Матвеевко А. В., Пономарев Л. И.**— ЖЭТФ, 1970, т. 59, с. 1953.
 94. **Матвеевко А. В., Пономарев Л. И., Файфман М. П.**— ЖЭТФ, 1975, т. 68, с. 437.
 95. **Пономарев Л. И., Файфман М. П.**— ЖЭТФ, 1976, т. 71, с. 1689.
 96. **Виницкий С. И., Пономарев Л. И., Файфман М. П.**— ЖЭТФ, 1982, т. 82, с. 985.
 97. **Аристов Ю. А. и др.** Ядерная физика, 1981, т. 33, с. 1066.
 98. **Mogilevsky O. A., Vukajlović F. R.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 1947; **Vukajlović F. R., Mogilevsky O. A.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 2157; **Mogilevsky O. A., Ponomarev L. I., Vukajlović F. R.**— J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 1980, v. 13, p. 2489.
 99. **Bakalov D. D. e.a.**— Nucl. Phys. A, 1982, v. 384, p. 302.