

7-789
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

2 - 12524

ТРУСКОВА
Надежда Федоровна

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НЕКОМПАКТНЫХ ГРУПП

Специальность 01.04.02
- теоретическая и математическая физика
Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1979

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
профессор

Я.А.СМОРОДИНСКИЙ

Официальные оппоненты:

кандидат физико-математических наук

С.Ю.СЛАВЯНОВ

доктор физико-математических наук

В.И.МАНЬКО

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета

Защита диссертации состоится "___" _____ 1979 года
на заседании Специализированного ученого совета К 047.01.01 Ла-
боратории теоретической физики Объединенного института ядерных
исследований (Московская обл., г. Дубна).

Автореферат разослан "___" _____ 1979 года

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

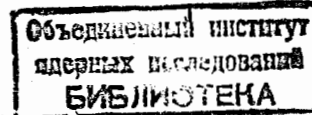
Актуальность проблемы. Современное развитие эксперимен-
тальной атомной физики и квантовой химии, резкое повышение объ-
ема и точности экспериментов ставят новые задачи перед теорией.
В связи с этим особенно необходимыми стали точные решения ос-
новных уравнений квантовой механики.

Одним из таких фундаментальных уравнений является уравне-
ние Шредингера с двумя кулоновскими центрами^{/1,2/}. Знание точ-
ных решений этого уравнения и соответствующих матричных элемен-
тов позволяет решить ряд существенных задач в атомной и мезо-
атомной физике и необходимо, в частности, для количественного
объяснения экспериментов по резонансному образованию мезомоле-
кул^{/3/}, по рассеянию тяжелых ионов^{/4/}, по перезарядке многоза-
рядных ионов на атомах водорода^{/5/}.

Многими авторами был получен ряд важных аналитических ре-
зультатов при исследовании этого уравнения и развиты методы
численных вычислений. Наиболее полное изложение всех этих резуль-
татов, а также подробная библиография приведены в монографии^{/1/}
и в обзоре^{/2/}.

В то же время в отличие от одноцентровой задачи с двумя
кулоновскими центрами (задача двух центров квантовой механики)
исследована еще недостаточно. Аналитические решения этой зада-
чи найдены лишь при асимптотических значениях параметров и для
некоторых частных случаев. Рекуррентные соотношения между соб-
ственными значениями этой задачи и между ее собственными функ-
циями отсутствуют. При произвольных значениях параметров реше-
ния задачи двух центров получены в настоящее время только чис-
ленно с помощью ЭВМ. Получение этих решений требует довольно
значительных затрат машинного времени. Получение же матричных
элементов задачи двух центров требует настолько значительных
затрат машинного времени, что реализация соответствующих алгорит-
мов возможна только на самых мощных современных ЭВМ. В СССР та-
кие алгоритмы практически осуществлены только в ОИЯИ в Дубне.

Наименее изученными в задаче двух центров являются группо-
вые свойства решений. Хотя вырожденность значений энергии в
двухатомной молекуле с одним электроном (пересечение термов
 $E_j(R)$ при некоторых значениях межъядерного расстояния R)
известна давно^{/6/} и обсуждалась многими авторами^{/1,2,7-II/}, но



соответствующая группа симметрии, аналогичная группе $O(4)$ для атома водорода, найдена не была. Не была получена также связь между решениями задачи двух центров и представлениями какой-либо группы, позволяющая получить замкнутую линейную алгебру двухцентровых интегралов.

Целью диссертационной работы является исследование групповых свойств решений задачи двух центров квантовой механики, а также создание новых эффективных алгоритмов численного вычисления собственных функций, собственных значений и матричных элементов дискретного спектра этой задачи.

Научная новизна и практическая ценность. В данной диссертации впервые показано, что задача двух центров квантовой механики в частных случаях эквивалентна задачам теории вырожденных неканонических представлений определенных компактных и некомпактных групп, а в случае решений общего вида – задачам теории вырожденных неканонических представлений некоторых некомпактных групп, и предложено описание решений задачи двух центров с помощью базисов вырожденных неканонических представлений этих групп. Это приводит к получению новых аналитических результатов в задаче двух центров и имеет важное значение как для дальнейшего развития теории вырожденных неканонических представлений рассматриваемых групп, так и для дальнейшего развития теории кулоновских сфероидальных функций.

Получена линейная алгебра двухцентровых интегралов, включающая, в частности, рекуррентные соотношения между двухцентровыми интегралами, соотношения между различными матричными элементами задачи двух центров, соотношения типа общих соотношений ортогональности для двухцентровых функций. Это позволяет свести вычисление всех возможных интегралов в задаче двух центров к вычислению только некоторых из них и существенно как при аналитических исследованиях этой задачи, так и при численных расчетах.

Предложены и реализованы на ЭВМ новые алгоритмы численных вычислений собственных функций, собственных значений и различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров, позволяющие получать необходимые величины с высокой точностью и требующие при реализации на ЭВМ по сравнению с существующими в настоящее время алгоритмами по меньшей мере на порядок меньше

счетное время. В этих алгоритмах все требуемые дифференцирования и интегрирования выполняются аналитически, а необходимые цепные дроби вычисляются с высокой точностью за минимально короткое время счета. Разработанные алгоритмы могут быть использованы при решении задачи трех тел с кулоновским взаимодействием.

С помощью разработанных алгоритмов вычислены параметры наиболее близких квазипересечений термов задачи двух центров с зарядами $Z_1=1$, $Z_2=4+28$. Эти параметры необходимы при вычислении сечения реакции перезарядки многозарядных ионов с зарядами $Z=4+28$ на атомах водорода.

С помощью разработанных алгоритмов вычислены неadiaбатические матричные элементы дискретного спектра задачи двух центров, необходимые при решении задачи трех тел с кулоновским взаимодействием.

Следующие основные результаты выдвигаются для защиты:

1. Доказательство эквивалентности задачи двух центров квантовой механики задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $O(2,2) \times O(2,2)$ (при $E_j < 0$), группы $O(3,1) \times O(3,1)$ (при $E_j > 0$), группы $P(2,1) \times P(2,1)$ (при $E_j = 0$) и описание решений общего вида задачи двух центров с помощью базисов вырожденных неканонических представлений этих групп.

2. Доказательство эквивалентности задачи двух центров квантовой механики задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $P(3) \times P(2,1)$, а также групп $P(5,1)$, $P(4,2)$ и описание решений общего вида задачи двух центров с помощью базисов вырожденных неканонических представлений этих групп.

3. Доказательство эквивалентности задачи двух центров квантовой механики в частных случаях регулярных в области $-1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta < \infty$ решений задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $O(4) \times O(4)$ (при $E_j < 0$), группы $O(3,1) \times O(3,1)$ (при $E_j > 0$), группы $P(3) \times P(3)$ (при $E_j = 0$) и описание таких регулярных решений с помощью базисов вырожденных неканонических представлений этих групп.

4. Доказательство эквивалентности задачи двух центров квантовой механики в частных случаях элементарных решений этой задачи, найденных в работе [12], задаче теории вырожденных нека-

ноических представлений группы $O(4) \times O(2,2)$ и описание таких элементарных решений с помощью базисов вырожденных неканонических представлений этой группы.

5. Условие взаимности для двухцентровых функций непрерывного спектра.

6. Линейная алгебра интегралов задачи двух центров.

7. Алгоритм численного вычисления собственных функций и собственных значений дискретного спектра задачи двух центров.

8. Алгоритм численного вычисления различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров.

9. Результаты численного счета параметров квазипересечений термов задачи двух центров с зарядами $Z_1=1$, $Z_2=4+28$.

10. Результаты численного счета различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров.

Апробация работы. Результаты данной диссертации докладывались и обсуждались на семинарах Лаборатории теоретической физики, Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, на 6-ой Международной конференции по атомной физике (Рига, 17-24 августа 1978 г.), 5-ой Всесоюзной конференции по атомным столкновениям (Петрозаводск, 28-30 сентября 1978 г.), 4-ой Всесоюзной конференции по использованию вычислительных машин в спектроскопии молекул (Новосибирск, 19-21 сентября 1977 г.).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в восьми работах.

Объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и трех приложений. Она содержит 153 страницы, в том числе: 3 таблицы, 28 рисунков и библиографический список, включающий 121 наименование.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении содержится краткий сравнительный обзор современного состояния исследований уравнений Шредингера с одним и двумя кулоновскими центрами и перечислены, в частности, наиболее изученные вопросы в задаче двух центров.

Приводится обоснование выбора темы диссертации.

Сформулированы основные задачи, решаемые в диссертации, и кратко приведены полученные в ней основные новые результаты.

В качестве напоминания приведены уравнения задачи двух центров в сфероидальной системе координат ^{1,2/}

$$\left[(\xi^2 - 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{R^2 E_j (\xi^2 - 1)}{2} + a\xi + \lambda_j - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \Pi_j(\xi; R) = 0 \quad (I.a)$$

$$\left[(1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2\eta \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{R^2 E_j (1 - \eta^2)}{2} + b\eta - \lambda_j - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \Xi_j(\eta; R) = 0 \quad (I.б)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + m^2 \right] W_j(\alpha) = 0; \quad (I.в)$$

$$a = R(z_1 + z_2); \quad b = R(z_2 - z_1); \quad +1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq +1, \quad 0 \leq \alpha \leq 2\pi,$$

$$|\Xi_j(\pm 1; R)| < \infty, \quad |\Pi_j(+1; R)| < \infty, \quad |\Pi_j(\infty; R)| < \infty,$$

где z_1, z_2 - заряды ядер; R - расстояние между зарядами; λ_j - константа разделения; E_j - энергия электрона. Система единиц $\hbar = e = m_e = 1$.

Приведены также некоторые краткие сведения о кулоновских сфероидальных функциях $\Pi_j(\xi; R)$, $\Xi_j(\eta; R)$ при $E_j < 0$ и $\Pi_j(\xi; k, R)$, $\Xi_j(\eta; k, R)$ при $E_j = k^2/2 > 0$.

Приведены интегралы движения задачи двух центров в сфероидальной системе координат, а также двухцентровые интегралы, необходимые при решении задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона.

В первой главе рассматривается связь между неканоническими представлениями определенных компактных и некомпактных групп и некоторыми частными случаями решений задачи двух центров. Показано, что при нахождении собственных функций и собственных значений полных наборов диагональных операторов в этих группах, то есть при решении задачи теории представлений этих групп в случае вырожденных неканонических представлений возникает задача, эквивалентная задаче двух центров квантовой механики. При этом собственные значения диагональных операторов таковы, что из всех возможных решений задачи двух центров выбираются решения, регулярные в области $-1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta < \infty$ или решения, имеющие простой аналитический вид. Эти решения при фиксированных значениях энергии E_j можно поставить в соответствие определенным групповым объектам - базисам вырожденных неканонических представлений рассматриваемых групп. Операторы, соответствующие энергии E_j , коммутируют со всеми генераторами рассматриваемых групп. Собственные значения таких операторов выра-

жаются через значения операторов Казимира этих групп.

В § I.1 в качестве напоминания рассмотрен хорошо изученный случай, когда $Z_1 = 0$ (или $Z_2 = 0$). Система уравнений (I) при этом представляет собой систему уравнений для волновых функций водородоподобного атома с зарядом Z_2 (или Z_1) в сферической системе координат^{/11/}. Соответствующие волновые функции регулярны в области $-1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta < \infty$. Они являются базисом вырожденного неканонического представления группы $O(4)$ (при $E_j < 0$), группы $O(3,1)$ (при $E_j > 0$), группы $P(3)$ (при $E_j = 0$). При $E_j = 0$ эти функции имеют простой аналитический вид.

В § I.2 показано, что задача двух центров в частных случаях регулярных в области $-1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta < \infty$ решений этой задачи при $Z_1 \neq 0$, $Z_2 \neq 0$, $E_j < 0$ эквивалентна задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $O(4) \times O(4)$, при $E_j > 0$ - группы $O(3,1) \times O(3,1)$, при $E_j = 0$ - группы $P(3) \times P(3)$. При этом функция, равная произведению регулярных в области $-1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta < \infty$ решений в евклидовом пространстве двух кулоновских двухцентровых задач соответственно с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$, одновременно равна произведению решений в евклидовом пространстве двух кулоновских одноцентровых задач: одной - с зарядом $(Z_1 + Z_2)$ и другой - с зарядом $(Z_1 - Z_2)$. Такие функции реализуют базис вырожденного неканонического представления группы $O(4) \times O(4)$ (при $E_j < 0$), группы $O(3,1) \times O(3,1)$ (при $E_j > 0$), группы $P(3) \times P(3)$ (при $E_j = 0$).

Условие взаимности для двухцентровых функций дискретного спектра, полученное в работе^{/12/}, естественным образом следует из данного группового рассмотрения. Аналогично из этого рассмотрения следует также условие взаимности для двухцентровых функций непрерывного спектра. Это условие взаимности при $Z_1 \neq Z_2$ подобно условию взаимности для двухцентровых функций дискретного спектра, а при $Z_1 = Z_2$ переходит в условие, при котором фаза рассеяния на конечном диполе равна нулю.

В § I.3 показано, что задача двух центров в случае элементарных решений этой задачи, найденных в работе^{/12/}, при $Z_1 \neq 0$, $Z_2 \neq 0$, $E_j < 0$ эквивалентна задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $O(4) \times O(2,2)$. При этом функции, равные произведению элементарных решений задачи двух центров на

$Const \exp(i\mathbf{m}\beta)$, являются базисом вырожденного неканонического представления группы $O(4) \times O(2,2)$.

Название "неканоническое представление" употребляется в данной диссертации, как и в работе^{/13/}, для мало изученных представлений, в которых не все операторы из полного набора наблюдаемых являются инвариантами подгрупп рассматриваемой группы.

Исследуемые в данной диссертации представления являются также вырожденными представлениями, поскольку некоторые из операторов Казимира рассматриваемых групп в этих представлениях имеют собственные значения, равные нулю.

Во второй главе рассматриваются унитарные неканонические представления групп $O(2,2) \times O(2,2)$, $O(3,1) \times O(3,1)$, $P(2,1) \times P(2,1)$. Показано, что задача двух центров квантовой механики в случае решений общего вида при $Z_1 \neq 0$, $Z_2 \neq 0$, $E_j < 0$ эквивалентна задаче теории вырожденных неканонических представлений группы $O(2,2) \times O(2,2)$, при $E_j > 0$ - группы $O(3,1) \times O(3,1)$, при $E_j = 0$ - группы $P(2,1) \times P(2,1)$. При этом функция, равная произведению решений в евклидовом пространстве двух одинаковых кулоновских двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 , одновременно равна произведению решений в псевдоевклидовом пространстве двух кулоновских одноцентровых задач: одной - с зарядом $(Z_1 + Z_2)$ и другой - с зарядом $(Z_1 - Z_2)$. Такие функции реализуют базис вырожденного неканонического представления группы $O(2,2) \times O(2,2)$ (при $E_j < 0$), группы $O(3,1) \times O(3,1)$ (при $E_j > 0$) и группы $P(2,1) \times P(2,1)$ (при $E_j = 0$).

Вследствие симметрии между решениями двух одноцентровых задач с зарядами $(Z_1 - Z_2)$ и $(Z_1 + Z_2)$ существует также симметрия между решениями двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$ соответственно. Эта симметрия приводит в частном случае к соотношениям между значениями энергии E_j^+ и E_j^- двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$ и к соотношениям между значениями операторов Казимира соответствующих групп $O(2,2) \times O(2,2)$.

Решения задачи двух центров, соответствующие пересекающимся термам, отвечают таким унитарным представлениям группы $O(2,2) \times O(2,2)$, которые имеют одинаковые значения операторов Казимира этой группы. Возможность пересечения термов с равными значениями m (термов одинаковой симметрии) естественным образом следует из данного группового рассмотрения.

Как и в главе I, исследуемые представления рассматриваются при фиксированных значениях энергии E_j . Операторы, соответствующие энергии E_j , коммутируют со всеми генераторами рассматриваемых в главе 2 групп. Собственные значения этих операторов выражаются через значения операторов Казимира этих групп.

Групповые свойства решений задачи двух центров, рассмотренные в главе 2, приводят к соотношениям между двухцентровыми интегралами дискретного и непрерывного спектров. Полученные в § 2.3 соотношения справедливы для интегралов, связывающих между собой состояния с одинаковыми значениями энергии $E_i = E_j = E$. Эти соотношения выполняются как при $E_i < 0$, так и при $E_i \geq 0$.

Для двухцентровых интегралов при $E_i = E_j$ получены также рекуррентные соотношения, позволяющие свести вычисление всех возможных таких интегралов к вычислению только некоторых из них.

В третьей главе показано, что задача двух центров квантовой механики в случае решений общего вида эквивалентна задаче теории вырожденных неканонических представлений группы, являющейся прямым произведением двух групп движений трехмерных пространств $P(3) \times P(2,1)$, или более широких групп движений шестимерных пространств $P(5,1)$, $P(4,2)$. Генераторы рассматриваемых групп при этом можно представить в виде дифференциальных операторов, действующих в пространстве функций Ψ_j , равных произведению радиальной и угловой двухцентровых функций на $\text{const} \times e^{\alpha(\text{im} \lambda + \text{im} \beta)}$. Эти функции реализуют базисы вырожденных неканонических представлений упоминаемых групп.

В отличие от описаний, представленных в главах I и 2, в групповом описании решений общего вида задачи двух центров, представленном в главе 3, оператор, соответствующий энергии E_j , не коммутирует со всеми генераторами упоминаемых в этой главе групп. Оператор \hat{E} и оператор $\hat{\Lambda}$, который соответствует "дополнительному" коммутирующему с \hat{E} оператору константы разделения λ_j , входят в набор взаимно коммутирующих операторов, определяющих неканонический базис Ψ_j в рассматриваемых группах.

Следствием такого группового описания решений задачи двух центров являются полученные в § 3.3 соотношения между двухцентровыми интегралами. Они связывают между собой отдельно интегралы по радиальным и интегралы по угловым переменным и представляют собой, по существу, реализованную в данном базисе алгебру матричных элементов выбранных неканонических представлений рассматриваемых групп. В отличие от соотношений главы 2 полученные в главе 3 соотношения справедливы как при $E_i = E_j$, так и при $E_i \neq E_j$. Эти соотношения выполняются для интегралов, связывающих состояния дискретного (или непрерывного) спектра, а также для интегралов, связывающих между собой состояния дискретного и непрерывного спектров. Для радиальной и угловой двухцентровых функций получены соотношения типа общих соотношений ортогональности, выполняющиеся отдельно в каждой из областей изменения переменных ξ и η .

Для двухцентровых интегралов как для случая $i=j$, так и для случаев $i \neq j$, $E_i \neq E_j$ получены рекуррентные соотношения, позволяющие свести вычисление всех возможных таких интегралов к вычислению только некоторых из них.

Особенности полученной линейной алгебры двухцентровых интегралов и возможные ее применения рассмотрены в § 3.4.

Четвертая глава посвящена описанию алгоритмов численных вычислений на ЭВМ собственных функций, собственных значений и различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров.

В начале главы 4 приводится обоснование необходимости создания таких алгоритмов, основанное, в частности, на требовании больших затрат счетного времени на ЭВМ в предшествующих программах. Приводится также краткий обзор предшествующих вычислений различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров.

В § 4.1 приведено описание алгоритма вычисления на ЭВМ собственных функций и собственных значений дискретного спектра задачи двух центров. Собственные значения $\lambda_j(R)$, $E_j(R)$ находятся с помощью минимизации соответствующих n_ξ, n_η раз обернутых цепных дробей, вычисленных с необходимой высокой точностью. Для минимизации этих дробей использован упрощенный вариант метода линеаризации, предложенного И.Н. Силиным [14]. Использо-

вание квадратичной интерполяции при вычислении начальных значений искомых параметров приводит к уменьшению числа итераций и сокращению времени счета.

Соответствующая программа, в которой используется описываемый алгоритм, реализована на языке ФОРТРАН (CDC-6500) и применима для решения поставленной задачи в широкой области значений R, Z_1, Z_2, j . Для получения решений с относительной точностью $\epsilon = 10^{-7}-10^{-12}$ требуется сравнительно небольшое время счета. Это время по меньшей мере на порядок меньше, нежели время, требуемое для получения таких решений с помощью некоторых предшествующих программ. При необходимости рассматриваемая программа вычисляет с высокой точностью также производные $\partial^2 E_j / \partial R^2, \partial E_j / \partial R$, применяемые в ряде физических задач.

В § 4.2 рассматриваются эффективные потенциалы задачи трех тел, взаимодействующих по закону Кулона. При малых скоростях движения ядер в адиабатическом представлении эту задачу можно решить, зная соответствующие эффективные потенциалы^{/15, 17/}. Они представляют собой матричные элементы операторов импульса и кинетической энергии относительного движения ядер и вычисляются между определенными состояниями задачи двух центров. В § 4.2 показано, что с помощью коммутационных соотношений выражения для этих потенциалов можно существенно упростить, что приводит при численном вычислении этих потенциалов на ЭВМ к значительному сокращению времени счета.

В § 4.3 изложен алгоритм численного вычисления на ЭВМ различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров. Все необходимые дифференцирования и интегрирования в таком алгоритме выполняются аналитически и сводятся в случае радиальных интегралов к вычислению неполной гамма-функции и ее первой и второй производных, которые вычисляются с помощью непрерывных цепных дробей с точностью до $\sim 10^{-16}$. Это приводит при реализации на ЭВМ как к высокой точности вычислений, так и к значительному сокращению необходимого времени счета. По сравнению с методом, применяемым в работах^{/18, 19/}, а также с методом, описанным в работе^{/20/}, представленный в § 4.3 способ вычисления матричных элементов требует при реализации на ЭВМ при одинаковой точности вычислений по меньшей мере на порядок меньше счетное время.

В заключении кратко сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

В приложении I приведены в виде таблицы вычисленные с помощью алгоритма, описанного в § 4.1, параметры наиболее близких квазипересечений термов E_j и E_j' при $Z_1=1, Z_2=4+28$.

В приложении 2 приведены в виде графиков вычисленные с помощью алгоритма, описанного в § 4.3 диссертации, матричные элементы, наиболее существенные при вычислении сечения реакции перезарядки многозарядных ионов с зарядами $Z=3+5$ на атомах водорода.

В приложении 3 приведены в виде графиков вычисленные независимо с помощью алгоритма^{/20/} и алгоритма, изложенного в § 4.3 диссертации, эффективные потенциалы задачи трех тел с кулоновским взаимодействием (две положительно заряженные частицы с зарядами $Z_1=Z_2=1$ и одна отрицательно заряженная частица с зарядом $Z_3=-1$) в интервале значений $R=0,1(0,1)20(1.)60$. Представленные матричные элементы связывают состояния дискретного спектра задачи двух центров, соответствующие трем первым оболочкам ($n, n'=1,2,3$) атома водорода по классификации разбединенных атомов.

Результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Трускова Н.Ф. ЯФ, 28, 558, 1978.
2. Трускова Н.Ф. ЯФ, 28, 850, 1978.
3. Трускова Н.Ф., ЯФ, 29, 243, 1979.
4. Трускова Н.Ф., ЯФ, 29, 1697, 1979.
5. Трускова Н.Ф., ОИЯИ, II-II218, Дубна, 1978.
6. Трускова Н.Ф., ОИЯИ, PII-10207, Дубна, 1976.
7. Ponomarev L.I., Puzinina T.P., Truskova N.F., J.Phys. B.: Atomic and Molec. Phys. 11, 3861, 1978.
8. Комаров И.В., Трускова Н.Ф., ОИЯИ, P4-II445, Дубна, 1978.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Комеров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю., "Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции". "Наука", М., 1976.
2. Power J.D. Phil. Trans. Roy Soc. Lond., 1973, A274, 663.
3. Быстрицкий В.М., Желепов В.П., и др. "Мезоны в веществе", сборник трудов международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе. ОИЯИ, 1977, ДИ-10908, Дубна.
4. Frank W., e.a. JINR, 1975, E7-9427, Dubna.
Gippner P., e.a. JINR, 1973, E7-7636; Dubna.
Greenberg J.S., Davis C.K., Vincent P. Phys.Rev.Let.1974,33,
5. Salop A., Olson R.E., Phys.Rev.,1976,A13,1312;A14,579. ⁴⁷³.
6. Бете Г. Квантовая механика простейших систем. ОИИ. М., 1935.
7. Лендау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, "Наука", М., 1963.
8. Герштейн С.С., Кривченков В.Д. ЖЭТФ, 1961, 40, 5, 1491.
9. Алдилуев С.П., Матвеев А.В., ЖЭТФ, 1966, 51, 6, 1873.
10. Смирнов Б.Н. Вестник МГУ, 1964, 3, 38.
11. Hatton F.J. Phys.Rev.,1976,A14,3,901.
12. Демков Ю.Н. Письма в ЖЭТФ, 1968, 7, 3, 101.
13. Лукач И., Смородинский Я.А., 1973, ОИЯИ, P2-7465, Дубна.
14. Соколов С.Н., Силин И.Н. ОИЯИ, 1961, Д-810, Дубна.
15. Born M., Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, 1951, 1.
16. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ, 1974, 20, 576.
17. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., ЖЭТФ, 1977, 72, 1670.
18. Hunter G., Gray V.F., Pritchard H.O., J.Chem.Phys.,1966, 45, 3806; 1967, 46, 2146; 1967, 46, 2153.
19. Ramaker D.E., Peek J.M. Atomic Data, 1973, 5, 167.
20. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П., 1970, ОИЯИ, P4-5040, Дубна.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 июня 1979 года.