

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

A 16

P11-87-749

А.Г.Абрашкевич*, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев,
И.В.Пузынин

ДВУМЕРНЫЙ БАЗИС ДЛЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ
В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

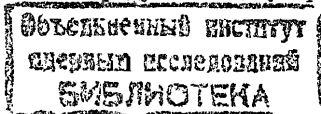
* Ужгородский государственный университет

1987

Введение

Для решения задачи трех тел часто применяется метод разложения трехчастичной волновой функции по собственным функциям некоторого вспомогательного оператора. Этот оператор является, как правило, частью полного гамильтониана. Его выбор должен согласовываться с наличием как точных, так и приближенных интегралов движения системы. При практической реализации выбор гамильтониана подсистемы зависит ещё и от возможностей эффективного вычисления характеристик его спектра. Такое выделение гамильтониана подсистемы и редукция полного гамильтониана в пространство меньшей размерности упрощают решение исходной шестимерной задачи и сводят её к решению бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, что, по существу, совпадает с известным методом Л.В. Канторовича^{1/}.

В настоящее время активно исследуются процессы возбуждения и ионизации в системе трех частиц как в атомной физике^{2/}, так и в явлении мюонного катализа^{3/}. В последнем случае возбуждение или ионизация происходят за счет сильного взаимодействия ядер дейтерия и трития в мезомолекуле $d\mu \rightarrow \{({}^4\text{He}\mu) + n, {}^4\text{He} + n + \mu\} + Q$. При теоретическом изучении таких процессов целесообразно, следуя работе В.А. Фока^{4/}, разделить движение системы трех частиц в пространстве R^6 на вращательное по поверхности сферы S^5 и радиальное по гиперрадиусу R . Тогда в качестве вспомогательного оператора естественно выбрать угловую часть полного гамильтониана, заданную на функциях, определенных на S^5 . Использование точных интегралов движения: полного орбитального момента J , его проекции и четности позволяет сузить область определения этого оператора до множества функций, заданных на двумерной конечной области. При этом как исходный, так и редуцированный операторы, порождающие базисные функции, имеют чисто дискретный спектр. Существенное преимущество этого гиперсферического базиса заключается в единообразном вычислении полной волновой функции для произвольного момента J , а также в выделении в ней логарифмической особенности Фока в окрестности точки тройного соударения и физических асимптотик приближенного дипольного интеграла движения в асимптотической области^{5/}. Изучение свойств высоковозбужденных состояний указанного базиса стало возможно благодаря созданию и развитию эффективных методов, алгоритмов и программ для численного решения двумерных спектральных задач, например^{6/}. Отметим, что в работе^{7/} рассмотрен алгебраический подход для изучения вращательного движения трехчастичной системы на S^5 без редукции в двумерную область. Такой



подход ограничивает возможность изучения высоковозбужденных состояний.

В работе^{/8/} сформулирована трехмерная спектральная задача для системы трех кулоновских частиц в гиперсферических координатах. В настоящей работе строится гиперсферический базис для разложения собственных функций указанной спектральной задачи. Для этого дана постановка задачи на собственные значения в конечной двумерной области, решения которой образуют базис разложения. В результате применения метода Канторовича получена система обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций. Эти радиальные функции являются коэффициентами разложения полной волновой функции по предложенному базису при фиксированном орбитальном моменте J .

Основная цель работы состоит в изучении свойств эффективных потенциалов (матричных элементов) системы $Ps^-e^+e^-$ при $J=0$, построенных по волновым функциям предложенной двумерной симметричной задачи. В частности, обнаружены точки квазипересечения термов. Этот результат позволяет сделать вывод, что свойства неadiaбатиности Ps^- сохраняются и при этом выборе базиса. Найдено значение \mathcal{E} энергии основного состояния Ps^- с помощью численного решения спектральной задачи для системы обыкновенных дифференциальных радиальных уравнений. Исследована зависимость \mathcal{E} от числа n этих уравнений. Показано, что для получения точности расчета $\sim 10^{-4}$ а.е. достаточно взять 3-5 уравнений, что указывает на быструю сходимость метода Канторовича в предложенной реализации.

2. Постановка задачи

Спектральная задача для уравнения Шредингера системы трех кулоновских частиц с полным орбитальным моментом $J=1$ и полной четностью $\lambda = -1 = (-1)^J$ имеет вид^{/8/}

$$\mathcal{L} F(\alpha, \vartheta, R) = \mathcal{E} F(\alpha, \vartheta, R). \quad (1)$$

Здесь \mathcal{E} - энергия системы, $F = (F_0, F_1)$ - волновая функция, $(\alpha, \vartheta, R) \in \Omega = \{0 \leq \alpha \leq \pi, 0 \leq \vartheta \leq \pi, 0 < R < \infty\}$ - гиперсферические координаты точки Ω , а оператор \mathcal{L} определяется соотношениями

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} T & T_{01} \\ T_{01}^* & T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_0 & V_1 \\ V_1 & V_2 \end{pmatrix},$$

$$T = -\frac{1}{R^2 \tau} \frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + t, \quad \tau = \frac{1}{8} R^3 \sin^2 \alpha \sin \vartheta,$$

$$t = -\frac{1}{\tau} \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} K_1 \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{\partial}{\partial \vartheta} K_2 \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right),$$

$$T_{01} = t_{01} = -\frac{1}{\tau} b \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad T_{01}^* = t_{01}^* = \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \vartheta} b,$$

$$K_1 = \frac{1}{4} R \sin^2 \alpha \sin \vartheta, \quad K_2 = \frac{1}{4} R \sin \vartheta, \quad b = \frac{1}{2} R \cos^2 \alpha / 2 \sin \vartheta,$$

$$V_0 = \frac{V}{R} + \frac{1}{R^2 \sin^2 \alpha / 2}, \quad V_1 = -\frac{ctg \vartheta}{R^2 \sin^2 \alpha / 2}, \quad V_2 = \frac{V}{R} + \frac{2}{R^2 \sin^2 \alpha \sin \vartheta},$$

$$V = \frac{\sqrt{M}}{\sin \alpha / 2} \left\{ Z_a Z_b - Z_a Z_c \left[\frac{M}{m} ctg^2 \alpha / 2 + \gamma_a \sqrt{\frac{M}{m}} \cos \vartheta ctg \alpha / 2 + \gamma_a^2 \right]^{1/2} - Z_b Z_c \left[\frac{M}{m} ctg^2 \alpha / 2 + \gamma_b \sqrt{\frac{M}{m}} \cos \vartheta ctg \alpha / 2 + \gamma_b^2 \right]^{1/2} \right\}.$$

В этих выражениях Z_a, Z_b и $-Z_c$ - заряды частиц, $M_a \geq M_b \geq M_c$ - их массы, а величины M, m, γ_a, γ_b определяются формулами

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}, \quad m = \frac{M_1 + M_2}{1 + M_1 + M_2}, \quad \gamma_a = \frac{M_b}{M_a + M_b}, \quad \gamma_b = -\frac{M_a}{M_a + M_b},$$

$$M_1 = M_a / M_c, \quad M_2 = M_b / M_c.$$

Здесь и далее используется атомная система единиц, $e = \hbar = M_c = 1$. Граничные условия, выражающие ограниченность волновой функции на границах области Ω , следующие^{/8/}:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0, \pi} \sin^2 \alpha \frac{\partial F_0}{\partial \alpha} = 0, \quad \lim_{\vartheta \rightarrow 0, \pi} \sin \vartheta \frac{\partial F_0}{\partial \vartheta} = 0, \quad (2)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0, \pi} \sin^2 \alpha \frac{\partial F_1}{\partial \alpha} = 0, \quad F_1(\alpha, 0, R) = F_1(\alpha, \pi, R) = 0, \quad (3)$$

$$\lim_{R \rightarrow 0} R^5 \frac{\partial F_k}{\partial R} = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} R^5 F_k = 0, \quad k=0,1. \quad (4)$$

Определим ортонормированный базис $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty} \equiv \{\phi_i^0, \phi_i^1\}_{i=1}^{\infty}$ как собственные функции следующей спектральной задачи

$$\mathcal{L} \Phi = E(R) \Phi(\alpha, \vartheta; R),$$

$$\{\alpha, \vartheta\} \in \Omega_1 = \{0 \leq \alpha \leq \pi, 0 \leq \vartheta \leq \pi\}, \quad (5)$$

где оператор \mathcal{L} определяется

$$L = \begin{pmatrix} t & t_{01} \\ t_{01}^* & t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_0 & V_1 \\ V_1 & V_2 \end{pmatrix}.$$

Собственные функции $\Phi = \{\Phi^0, \Phi^1\}$ уравнения (5) удовлетворяют граничным условиям

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0, \pi} \sin^2 \alpha \frac{\partial \Phi^0}{\partial \alpha} = 0, \quad \lim_{\vartheta \rightarrow 0, \pi} \sin \vartheta \frac{\partial \Phi^0}{\partial \vartheta} = 0, \quad (6)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0, \pi} \sin^2 \alpha \frac{\partial \Phi^1}{\partial \alpha} = 0, \quad \Phi^1(\alpha, 0; R) = \Phi^1(\alpha, \pi; R) = 0. \quad (7)$$

Решения Φ задачи (4)-(7) удовлетворяют условиям нормировки

$$\int_{\Omega_1} \tau (\Phi_i^0 \Phi_j^0 + \Phi_i^1 \Phi_j^1) = S_{ij}.$$

Рассмотрим подстановку формального разложения решения задачи (I)-(4) по введенному базису

$$F^0(\alpha, \vartheta, R) = \sum_{i=1}^{\infty} X_i(R) \Phi_i^0(\alpha, \vartheta; R),$$

$$F^1(\alpha, \vartheta, R) = \sum_{i=1}^{\infty} X_i(R) \Phi_i^1(\alpha, \vartheta; R) \quad (8)$$

в вариационный функционал^{/8/}

$$R(F) = \int_{\Omega} R^2 \left\{ \frac{1}{2} \tau \left[\left(\frac{\partial F^0}{\partial R} \right)^2 + \left(\frac{\partial F^1}{\partial R} \right)^2 \right] + K_1 \left[\left(\frac{\partial F^0}{\partial \alpha} \right)^2 + \left(\frac{\partial F^1}{\partial \alpha} \right)^2 \right] + \right.$$

$$+ K_2 \left[\left(\frac{\partial F^0}{\partial \vartheta} \right)^2 + \left(\frac{\partial F^1}{\partial \vartheta} \right)^2 \right] + \left. [F^0 \delta \frac{\partial F^1}{\partial \vartheta} + F^1 \delta \frac{\partial F^0}{\partial \vartheta} (bF^0)] + \right.$$

$$+ \tau (V_0 F^0 F^0 + 2V_1 F^0 F^1 + V_2 F^1 F^1) \left. \right\} d\alpha d\vartheta dR.$$

$$\cdot \left\{ \int_{\Omega} R^2 \tau (F^0 F^0 + F^1 F^1) d\alpha d\vartheta dR \right\}^{-1}.$$

Из условий минимума функционала (9) получаем бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка для определения энергии \mathcal{E} и коэффициентов $X(R) = \{X_i(R)\}_{i=1}^{\infty}$ разложения (8). Эта система имеет вид

$$-\frac{1}{2} I \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} X' + UX + Q \frac{dX}{dR} + \frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} (R^2 Q X) = \mathcal{E} I X, \quad (10)$$

$$\lim_{R \rightarrow 0} R^2 X'(R) = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} R^2 X(R) = 0. \quad (II)$$

Здесь I, U, Q - бесконечные матрицы, которые определяются соотношениями

$$I_{ij} = S_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots;$$

$$H_{ij} = H_{ji} = \int_{\Omega_1} \tau \left(\frac{\partial \Phi_i^0}{\partial R} \frac{\partial \Phi_j^0}{\partial R} + \frac{\partial \Phi_i^1}{\partial R} \frac{\partial \Phi_j^1}{\partial R} \right) d\alpha d\vartheta, \quad (12)$$

$$U_{ij} = \frac{1}{2} [E_i(R) + E_j(R)] S_{ij} + H_{ij},$$

$$\tilde{Q}_{ij} = \int_{\Omega_1} \tau \left(\Phi_i^0 \frac{\partial}{\partial R} \Phi_j^0 + \Phi_i^1 \frac{\partial}{\partial R} \Phi_j^1 \right) d\alpha d\vartheta,$$

$$Q_{ij} = -(1 - S_{ij}) \tilde{Q}_{ij}, \quad Q_{ij} = -Q_{ji}. \quad (13)$$

В практических расчетах обычно ограничиваются конечным числом членов n в разложениях (8), что приводит к конечной системе уравнений.

Отметим, что при $M_1 = M_2$ потенциалы $V_i, i = 0, 1, 2$ являются симметричными функциями по переменной ϑ относительно $\vartheta = \pi/2$. Это обстоятельство позволяет вычислять функции базиса в области $\Omega_2 = \{0 \leq \alpha \leq \pi, 0 \leq \vartheta \leq \pi/2\}$. На границе $\vartheta = \pi/2$ ставятся условия антисимметрии базисных функций, которые при $J = 1$ имеют вид

$$\frac{\partial \Phi^0}{\partial \vartheta} \Big|_{\vartheta = \pi/2} = 0, \quad \Phi^1 \Big|_{\vartheta = \pi/2} = 0.$$

Для полного момента J системы трех частиц, равного нулю, задача (I)-(4) существенно упрощается, и её можно записать^{/8/}

$$(T + V) F^0 = \mathcal{E} F^0. \quad (14)$$

Решение F^0 уравнения (14) удовлетворяет граничным условиям (2) и (4) при $k = 0$. Спектральная задача для определения базиса $\{\Phi_i^0\}_{i=1}^{\infty}$ задается уравнением

$$(t + V) \Phi^0 = E(R) \Phi^0 \quad (15)$$

с краевыми условиями (6). Соответствующие матричные элементы U_{ij} и Q_{ij} определяются соотношениями (12) и (13), если в них положить $\Phi_i^1 \equiv 0$, а под Φ_i^0 понимать решения задачи (15).

3. Численные результаты

В данном пункте изложена процедура вычисления значений уровней энергии системы $P_5^-(J=0)$. Эта процедура сводится к нахождению термов $E_i(R)$ и собственных функций $\Phi_i(\alpha v; R)$ задачи (6), (15), вычислению эффективных потенциалов $V_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$, и наконец, решению задачи (10), (11). При этом требуется исследовать зависимость \mathcal{E} от числа уравнений n в системе (10).

Задача (6), (15) аппроксимировалась при помощи восьмиузловых сирендиповых изопараметрических конечных элементов. Построение сетки, аппроксимация и решение алгебраической проблемы собственных значений осуществлялись методами и алгоритмами, разработанными в работах /6, 9, 10/. Применяемая в расчетах конечно-элементная сетка, показанная на рис. 1, содержала 888 узлов и состояла из 279 элементов. Отметим, что точность используемой схемы оценивается величиной $O(h^4)$, где h - шаг сетки. В каждой точке по R одновременно вычислялись первые 10 собственных значений $E_i(R)$ и соответствующие им собственные функции $\Phi_i(\alpha v; R)$ задачи (6), (15). Составленные программы использовали 1 Мбт памяти, а вычисления в среднем требовали 4 мин. времени на ЭВМ ЕС-10-61. Расчеты проводились в следующих точках по гиперрадиусу R : 0.1 (0.3) 1 (0.1) 10 (0.25) 12 (0.5) 16 (1) 20 (5) 40 (в скобках указан шаг). Производные $\partial \Phi_i / \partial R$ вычислялись по формуле четвертого порядка точности, а интегралы (12), (13) по методу конечных элементов. Разностная схема решения задачи (10), (11) выводилась при помощи квадратичных лагранжевых конечных элементов на основе исследований, выполненных в работе /11/.

Схема имеет четвертый порядок точности. При интерполяции потенциалов V_{ij} и Q_{ij} использовались те же конечные элементы. В таблице 1 проведено сравнение вычисленных значений термов при $R \rightarrow 0$ с их асимптотическими значениями. В таблице 2 дано сравнение соответствующих значений термов, уже вышедших на асимптотику при больших R . Проведенное сравнение позволяет, помимо теоретических оценок, наглядно проиллюстрировать точность вычислений. Графики термов показаны на рис. 2. Видно, что существуют точки квазипересечения термов. Некоторые из них на графиках обведены кружками.

Матричные элементы в точках квазипересечений имеют ярко выраженный максимум. При этом чем ближе подходят друг к другу термы, тем больше становится соответствующий максимум. Это следует из формулы

$$Q_{ij}(R) = [(E_i(R) - E_j(R)R^2)^{-1} \int \tau \Phi_i^0 V \Phi_j^0 d\alpha d\alpha] \quad (16)$$

которая эквивалентна (13). Наличие максимумов в матричных элементах Q_{ij} приводит к существованию максимумов и в потенциалах H_{ij} , так как согласно /5/ имеем

$$H_{ij} = - \sum_i Q_{ii} Q_{ij}$$

На рис. 3 показаны узловые линии волновых функций $\Phi_2^0(\alpha v; R)$ и $\Phi_3^0(\alpha v; R)$ в точках $R=1$, $R=7.2$ (точка квазипересечения) и $R=10$. Вид этих линий подтверждает факт квазипересечения. На рис. 4, 5 приведены графики некоторых матричных элементов V_{ij} и Q_{ij} . О точности вычисления производных $\partial \Phi_i^0 / \partial R$ можно судить по величине $\bar{Q}_{ii} = \int \tau \Phi_i^0 \partial \Phi_i^0 / \partial R \Phi_i^0 d\alpha d\alpha$. Из условия нормировки следует, что $\bar{Q}_{ii}(R) = -1.5/R$ для любого R . В таблице 3 даются значения точек R_0 квазипересечения и значения соответствующих термов и вычисленное значение $\bar{Q}_{ii}(R_0)$. Видно, что численные результаты согласуются с точным значением $-1.5/R_0$ в пределах $10^{-3} \sim 10^{-4}$.

Указанные кружками точки квазипересечения термов соответствуют точкам точного пересечения термов задачи двух центров (рис. 6), поскольку волновые функции этой задачи факторизуются в сфероидальных координатах $\{\xi \eta \chi; R\}$. Напомним, что здесь R - расстояние между фокусами сфероидальной системы, в которые помещены одноименные заряды $Z_a = Z_b = 1$. Однако точки пересечения термов задачи двух центров не являются точками экстремумов для матричных элементов $Q_{ij}(R)$, так как числитель выражения (16) в этой точке обращается в нуль /12/.

В работе /13/ показано, что при переходе в комплексную плоскость R имеются общие точки ветвления R_c различных термов. Если величина $\text{Im} R_c$ мала, то наличие точки ветвления проявляется на вещественной оси R как квазипересечение термов. Матричные элементы $Q_{ij}(R)$ в окрестности точек R_c имеют четко выраженный максимум на вещественной оси R /12/. Видно, что этот максимум имеет достаточно гладкую колоколообразную форму (см. рис. 7). Обнаруженное сингулярное поведение матричных элементов $Q_{ij}(R)$ (см. рис. 5) в окрестности точек квазипересечения термов позволяет предположить наличие некоторых точек ветвления, для которых мнимая часть близка к нулю.

Рассмотрим теперь численное решение задачи (10), (11). В таблице 4 показаны вычисленные значения \mathcal{E} в зависимости от числа n уравнений в системе (10). Результаты получены на сетке по гиперрадиусу R , состоящей из 97 элементов и содержащей 193 узла. При $R > 40$ использовались асимптотические значения эффективных потенциалов.

Полученные результаты указывают на быструю сходимость рядов (8). Это связано, по-видимому, с тем, что задача (6), (15) имеет только дискретный спектр. На основании проведенных исследований можно утверждать, что нами получено значение $\mathcal{E} = -0,262241$ а.е. с точностью $\pm 2 \cdot 10^{-4}$ а.е. Укажем на другие известные результаты: $-0,2620045^{/14/}$, $-0,262005^{/15/}$, $-0,26208^{/16/}$, $-0,26451^{/17/}$, $-0,267^{/18/}$, $-0,2646 < \mathcal{E} < -0,2597^{/17/}$. Потенциал $U_{22}(\mathcal{R})$ имеет асимптотику $-0,125 - 7 \cdot \mathcal{R}^{-2}$. Это означает, что для него существует серия Фешбаховских резонансов $\mathcal{E}_2^{(\nu)}$, $\nu = 1, 2, 3, \dots$, обусловленных действующим дипольным потенциалом. Здесь вычислены первые семь значений $\mathcal{E}_2^{(\nu)}$ и прослежена их зависимость от числа уравнений N . Результаты приведены в таблице 5. При $n=1$ вычисления проводились только в потенциале $U_{22}(\mathcal{R})$. В работе ^{/17/} получено значение $\mathcal{E}_2^{(1)} = -0,0763$ а.е., а в работе ^{/15/} $\mathcal{E}_2^{(1)} = -0,7602$ а.е.

Наряду с рассмотренной системой Ps^- нами проведены численные исследования термов $E_i(\mathcal{R})$ и волновых функций $\phi_i = \{\phi_i^0, \phi_i^1\}$ задачи (5)-(7) для мезомолекулы $dt\mu$. Вычислены четыре первых терма этой мезомолекулы с полным орбитальным моментом $J = 1$ и четностью $\lambda = -1$. Поскольку массы ядер $M_t \neq M_d$, то для вычислений эффективных потенциалов с нужной точностью необходимо сгущать конечно-элементную сетку вокруг двух особых точек $\alpha = 2 \arctg(\gamma \sqrt{m/M})$, $\psi = 0$ и $\alpha = 2 \arctg(\gamma \sqrt{m/M_1})$, $\psi = \pi$. Это обстоятельство, как и то, что в каждом внутреннем узле сетки определяются два неизвестных значения ϕ^0 и ϕ^1 , приводит к существенному увеличению требуемой памяти ЭВМ. По нашим оценкам, нужно рассматривать сетки, содержащие приблизительно 1000 узлов (2000 неизвестных), что потребует ~ 5 МБт памяти ЭВМ. При этом время вычисления термов двух оболочек (8 термов) возрастает до 20 мин в каждой точке по \mathcal{R} . В этой работе нами вычислены первые четыре терма с точностью $\sim 10^{-2}$, и для этого потребовалась сетка из 500 узлов, память ~ 2 МБт, время вычислений ~ 8 мин в каждой точке по \mathcal{R} . Графики полученных термов приведены на рис. 8. При решении задачи (10)-(11) получено значение основного состояния $\mathcal{E}_{\nu=1}^{J=1}(dt\mu) = -216$ эВ в то время, как это значение должно равняться $-232,44$ эВ ^{/16/}. Этот результат подтверждает, что для определения слабосвязанного состояния $\mathcal{E}_{\nu=1}^{J=1}$ необходимо вести вычисления с точностью порядка $\sim 10^{-4}$, а это приводит к сформулированным выше требованиям на ресурсы ЭВМ.

Заключение

В работе предложен метод решения трехмерной спектральной задачи для уравнения Шредингера системы заряженных частиц в гипер-

сферических координатах. Данный подход основан на модификации метода Канторовича. Основным моментом при реализации метода является вычисление собственных значений и соответствующих им собственных функций двумерного эллиптического оператора с неразделяющимися переменными α, ψ . Подробно исследована система Ps^- . Обнаружены точки квазипересечения термов. Получено значение основного состояния этой системы с точностью $\sim 10^{-4}$ а.е. С такой же точностью вычислены значения энергии некоторых высоковозбужденных состояний. Численные результаты указывают на высокую скорость сходимости по двумерному базису. В частности, для достижения указанной точности в рассмотренном примере Ps^- достаточно использовать $\sim 3-5$ уравнений метода Канторовича. Естественное применение предложенного базиса может быть связано с расчетами процессов рассеяния мезоатомов в высоковозбужденных состояниях ^{/19/}, если движение по гиперрадиусу \mathcal{R} считать классическим. В этом случае знание термов $E_i(\mathcal{R})$ и $E_j(\mathcal{R})$ и матричных элементов неадиабатической связи $Q_{ij}(\mathcal{R})$ достаточно для вычисления вероятностей перехода $P(i \rightarrow j)$, определяющихся значениями $Q_{ij}(\mathcal{R})$ в точках квазипересечений, соответствующих известным точкам ветвления задачи двух центров ^{/13, 20/}.

В заключение авторы благодарят Н.Н. Говоруна за поддержку, Л.И. Пономарева и Е.А. Соловьева за полезные советы.

Таблица I. Сравнение вычисленных значений термов $E_i(\mathcal{R})$ для $Ps^-(J=0)$ с асимптотическими ^{/15/}
 $E_i^{as}(\mathcal{R}) = 2(N^2 - 1)\mathcal{R}^{-2} + E_i^{(1)}\mathcal{R}^{-1}$
 в точке $\mathcal{R} = 1$. Здесь N - главное квантовое число, ℓ орбитальный момент электрона, $i = \{N, \ell\}$

i	Расчет	Асимптотика	$N\ell$	$2(N^2 - 1)$	$E_i^{(1)}$
1.	-1,3708	-1,2004	10	0	-1,2004
2.	5,109	5,108	20	6	-0,8917
3.	14,11	14,19	32	16	-1,8077
4.	15,38	15,38	30	16	-0,6201
5.	28,11	28,10	42	30	-1,9000
6.	29,56	29,52	40	30	-0,4723
7.	46,24	46,21	54	48	-1,7886
8.	46,51	46,42	52	48	-1,5785
9.	47,78	47,63	50	48	-0,3656
10.	68,08	67,92	64	70	-2,0803

Таблица 2. Сравнение вычисленных значений термов $E_i(\mathcal{R})$ для $Ps^-(J=0)$ с асимптотиками $E_i^{as}(\mathcal{R}) = -1/4n^2 + E_i^{(2)}\mathcal{R}^{-2}$ при больших \mathcal{R} . Здесь $i = \{nq\}$, n - главное квантовое число разьединенного атома позитрония, а q - квантовое число дипольного интеграла движения

i	\mathcal{R}	Расчет	Асимптотика nq	$-0.25n^{-2}$	$E_{nq}^{(2)}$	
I	20	-0,2550	-0,2556	10	-0,25	-2,25
2	40	-0,6645	-0,6646	20	-0,0625	-6,3197
3	20	-0,5744	-0,5795	21	-0,0625	+1,8197

Таблица 3. Значения термов $E_i(\mathcal{R})$ для $Ps^-(J=0)$ в точках псевдопересечения \mathcal{R}_0 и значения матричных элементов $\tilde{Q}_{ii}(\mathcal{R})$ в этих точках

\mathcal{R}_0	$-1.5\mathcal{R}_0^{-1}$
7,20 $E_2 = -0,034738$ $E_3 = -0,023206$	$\tilde{Q}_{22} = -0,206906$ $\tilde{Q}_{33} = -0,206901$ -0,208333
11,50 $E_4 = 0,043095$ $E_5 = 0,066169$	$\tilde{Q}_{44} = 0,130432$ $\tilde{Q}_{55} = -0,130432$ -0,130435
11,75 $E_6 = 0,179972$ $E_7 = 0,181045$	$\tilde{Q}_{66} = -0,133324$ $\tilde{Q}_{77} = -0,133320$ -0,133333
12 $E_9 = 0,290754$ $E_{10} = 0,296321$	$\tilde{Q}_{99} = -0,125050$ $\tilde{Q}_{10,10} = -0,124785$ -0,125

Таблица 4. Зависимость $\xi(a.e.)$ от числа уравнений n для $Ps^-(J=0)$

n	$\xi(a.e.)$
1	-0,261610
2	-0,262004
3	-0,262227
4	-0,262227
5	-0,262241

Таблица 5. Зависимость значений $\xi_2^{(\nu)}(a.e.)$, $\nu = 1,2,3,4,5,6,7$ от числа уравнений n

$\nu \backslash n$	1	2	3	4	5
1	-0,075093	-0,074790	-0,075359	-0,075390	-0,075396
2	-0,062281	-0,065723	-0,066312	-0,066385	-0,066495
3	-0,060134	-0,062187	-0,062263	-0,062267	-0,062268
4	-0,056734	-0,060077	-0,060738	-0,060819	-0,060744
5	-0,052024	-0,056638	-0,060169	-0,060217	-0,060178
6	-0,045927	-0,052040	-0,058129	-0,058216	-0,058155
7	-0,038462	-0,051893	-0,056834	-0,056878	-0,056879

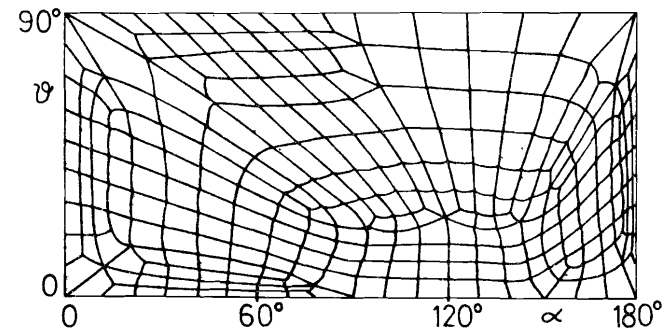


Рис. 1. Конечно-элементная сетка области Ω_2 .

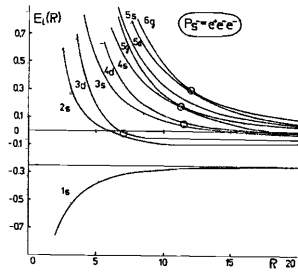


Рис. 2. Термы $E_i(R)$, $i = 1, 2, \dots, 10$ системы Ps^- .

Рис. 3. Узловые линии собственных функций $\Phi_2^0(\alpha, \vartheta; R)$ и $\Phi_3(\alpha, \vartheta; R)$ системы Ps^- при $R = 1, 7, 2, 10$.

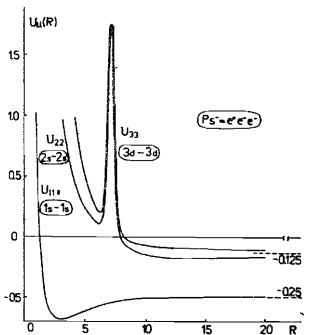
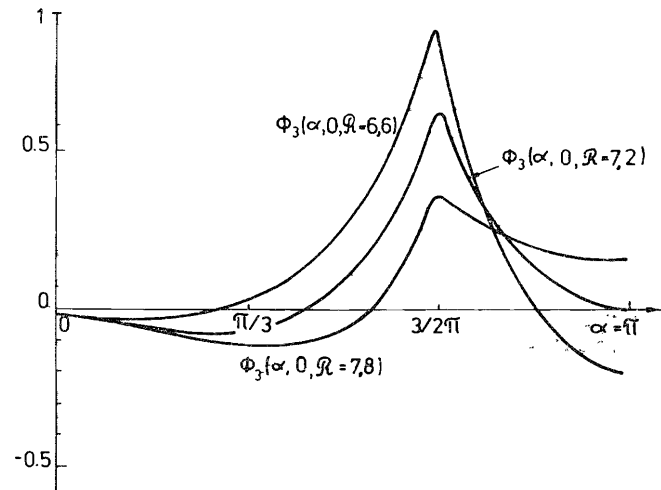
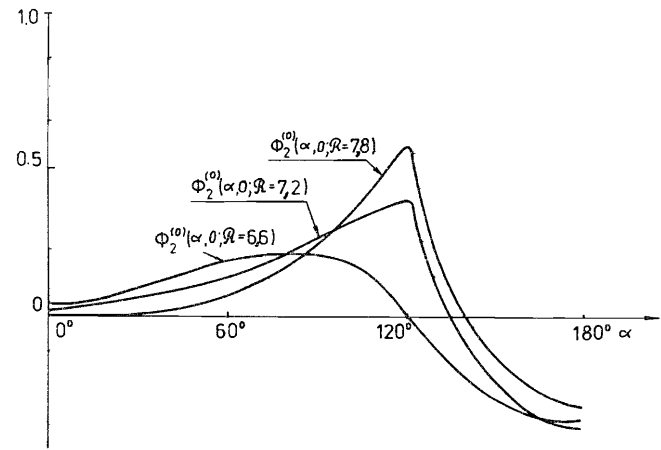
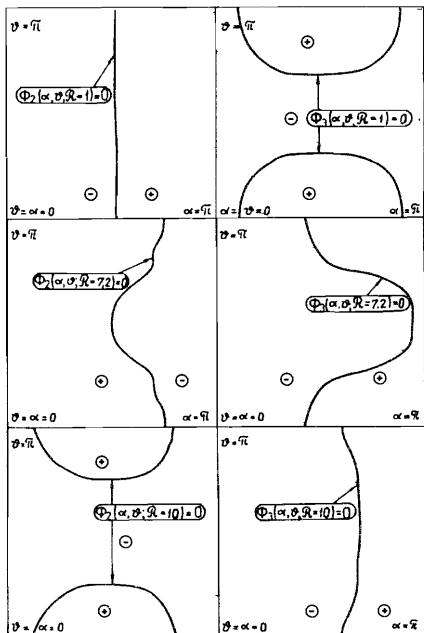


Рис. 4. Эффективные потенциалы $U_{ii}(R)$, $i = 1, 2, 3$ системы Ps^- .

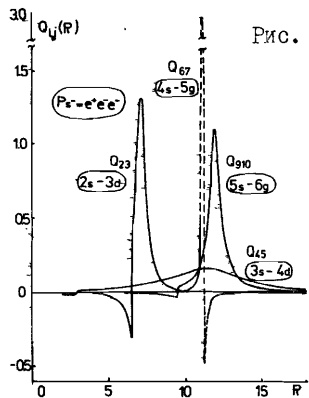


Рис. 5. Матричные элементы $Q_{ij}(R)$ системы Ps^- .

Рис. 6. Термы $E_i(R)$ задачи двух центров ($Z_a=Z_b=1, Z_c=-1$) в сфероидальных координатах

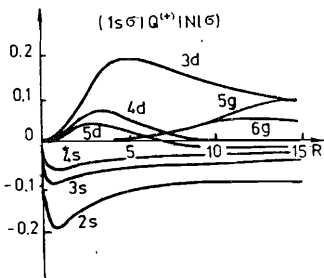
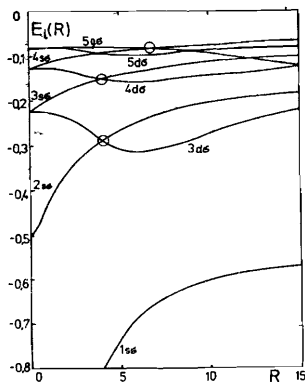


Рис. 7. Матричные элементы $Q_{ij}(R)$ задачи двух центров ($Z_a=Z_b=1, Z_c=-1$) в сфероидальных координатах

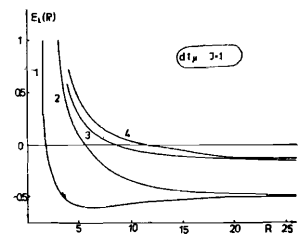


Рис. 8. Термы $E_i(R)$, $i = 1, 2, 3, 4$ мезомолекулы $d\mu$ с полным орбитальным моментом $J=1$.

Литература

1. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа, ГИИТЛ, М., 1952.
2. Fano U., Rau R.T. Atomic Collisions and Spectra. Wiley, New York, 1966.
3. Ponomarev L.I., Fiorintini G. Muon Catalyred Fusion, I, 1987, p. 3.
4. Фок В.А. Изв. Акад. наук. СССР, сер. физ., 1954, т. 18, с. 161.
5. Виницкий С.И., Кадомцев М.Б. ОИЯИ, Р4-86-696, Дубна, 1986.
6. Касчиев М.С. и др. ОИЯИ, ПИ-83-146, Дубна, 1983.
7. Botere J. Phys. Rev., A, v. 35, No 1, 1987, p. 36.
8. Виницкий С.И., Касчиев М.С., Пузынин И.В. ОИЯИ, Р4-87-8, Дубна, 1987.
9. Fe doss euev A.I. et al. NTM, Section A, v. 227, No 3, 1984, p. 411.
10. Гусев В.В., Касчиев М.С., В.И. Пузынин, ОИЯИ, ПИ-87-421, Дубна, 1987.
11. Касчиева В.А. Касчиев М.С. ОИЯИ, Р5-12382, Дубна, 1979.
12. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. JINR, E4-83-778, Dubna, 1983.
13. Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1986, т. 90, с. 1115, Овчинников С.Ю., Соловьев Е.А. ЖЭТФ т. 90, с. 921.
14. Bhatia A.K., Drachman R.J. Phys. Rev., A, v. 28, No 4, 1983, p. 2523.
15. Но У.К. J. Phys. B., v. 16, 1983, p. 1503.
16. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, т. 13, вып. 6, 1982, с. 1336.
17. Colgrave R.K., King A.M. J. Phys. B., v. 14, 1981, p. 1539.
18. Квицинский А.А. и др. ЭЧАЯ, т. 17, вып. 2, 1986, с. 267.
19. Mensikov L.I. and Ponomarev L.I. Z. Phys. "D", 1986, с. 1.
20. Карпешин Ф.Ф., Касчиева В.А., Касчиев М.С. ЯФ, т. 36, вып. 2(8), 1982, с. 336; Вестник ЛГУ, сер. 4, вып. 2, изд. ЛГУ, 1986, с. 71.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 октября 1987 года.

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Абрашкевич А.Г. и др.
Двумерный базис для задачи трех тел
в гиперсферических координатах

P11-87-749

Предложено разложение по двумерному базису для волновой функции задачи трех тел в гиперсферических координатах. В результате исходная спектральная задача в трехмерном пространстве сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Эффективные потенциалы системы строятся с помощью решений спектральной задачи в конечной двумерной области, имеющей чисто дискретный спектр. Эта задача решается численно с помощью метода конечных элементов и метода итерации подпространств. Для системы $Ps^- = e^+e^-e^-$ обнаружены серии точек квазипересечений термов, указывающих на сильную неадиабатичность системы и на возможность существования группы динамической симметрии. Вычислены значения энергии основного и нескольких высоковозбужденных состояний этой системы с точностью 10^{-4} а.е.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Abrashkevich A.G.
Two-Dimensional Basis for Three-Body Problem
in Hyperspherical Coordinates

P11-87-749

Expansion over a two-dimensional basis is proposed for the wave function of a three-body problem in hyperspherical coordinates. As a result, the initial spectral problem in a three-dimensional space is reduced to a system of ordinary differential equations. Effective potentials of the system are constructed with the use of solutions of the spectral problem in a finite two-dimensional region with a pure discrete spectrum. The problem is solved numerically by the finite-element method and the method of subspace iteration. For the system $Ps^- = e^+e^-e^-$ series of point are found of quasi-intersections of potential curves pointing out strong nonadiabaticity of the system and possible existence of the group of dynamical symmetry. The energies of the ground and some highly excited states of that system are calculated within the 10^{-4} a.u. accuracy.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987