

9/а - 80

+



объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

2453/2-80

P2-80-38

М.Касчиев, А.В.Матвеевко

ПЕРЕОПРЕДЕЛЕНИЕ
АДИАБАТИЧЕСКОГО БАЗИСА
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Направлено в ЖЭТФ

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача трех тел с кулоновским взаимодействием является, с одной стороны, наиболее трудным примером задачи трех тел из-за дальнегодействующего характера кулоновского потенциала, но одновременно, и опять-таки в силу специфики кулоновского взаимодействия, позволяет развить практическую схему для расчета различных физических характеристик системы. Мы имеем в виду разложение полной волновой функции системы трех частиц по адиабатическому базису, т.е. по решениям задачи о движении заряженной частицы в поле неподвижных зарядов. Благодаря усилиям многих авторов, в настоящее время существуют несколько алгоритмов для получения адиабатического базиса, включая расчет адиабатических поправок. Эти результаты позволили сформулировать простые приближенные уравнения для задачи трех тел.

Одновременно продолжалось изучение свойств адиабатического базиса как полного набора для последующего решения задачи трех тел. В этом направлении имеются некоторые успехи, которые весьма, скорее, с общим пониманием особенностей проблемы. Их можно резюмировать следующим образом: если взять весь адиабатический базис /или почти весь/, но обязательно каким-то образом учесть влияние непрерывного спектра задачи двух центров, то будет получен достаточно точный ответ в задаче о связанных состояниях системы трех тел. Для задачи рассеяния следует ожидать дополнительных трудностей.

Сущность проблемы состоит в том, что адиабатический подход /метод возмущенных стационарных состояний/ связан с выбором определенных координат Якоби и простейшая физическая ситуация, требующая иного выбора координат Якоби, нуждается в привлечении всего адиабатического базиса. Речь идет в первую очередь о постановке правильных граничных условий в задаче рассеяния.

В настоящей работе предлагается переопределить адиабатический базис, включив в гамильтониан задачи двух центров часть адиабатических поправок из оператора кинетической энергии ядер. Решение задачи двух центров при этом качественно усложняется, но проблема граничных условий частично решается уже в одноуровневом приближении, более точно, такой подход позволяет получить точное значение энергии изолированного атома /энергии диссоциации/ в одноуровневом приближении.

Проводятся вычисления основного состояния систем $e e e^+ + p p p^-$. Результаты этих вычислений сравниваются с существующими расчетами.

2. АДАБАТИЧЕСКИЙ БАЗИС И АДАБАТИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ

Использование адиабатического базиса для решения задачи трех тел с кулоновским взаимодействием восходит к знаменитой задаче об ионе молекулы водорода H_2^+ . Мы введем необходимые формулы на ее примере. Пусть $\vec{R}^{(1)}$, $\vec{R}^{(2)}$ - радиус-векторы протонов, $\vec{R}^{(3)}$ определяет положение электрона, а $m_1 = m_2 = m_p$ и $m_3 = m_e$ - массы частиц. В координатах Якоби

$$\vec{R} = (m_1 \vec{R}^{(1)} + m_2 \vec{R}^{(2)} + m_3 \vec{R}^{(3)}) / \mu,$$

$$\vec{r} = \vec{R}^{(3)} - (m_1 \vec{R}^{(1)} + m_2 \vec{R}^{(2)}) / (m_1 + m_2), \quad /1/$$

$$\vec{R} = \vec{R}^{(2)} - \vec{R}^{(1)}$$

приходим к гамильтониану для описания внутреннего движения системы:

$$H = -\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{1}{2m} \Delta_{\vec{r}} + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}. \quad /2/$$

Здесь мы положили $\hbar = 1$ и ввели обозначения

$$1/M = 1/m_1 + 1/m_2, \quad 1/m = 1/m_3 + 1/(m_1 + m_2), \quad /3/$$

$$\mu = m_1 + m_2 + m_3, \quad \vec{r}_1 = \vec{R}^{(3)} - \vec{R}^{(1)}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R}^{(3)} - \vec{R}^{(2)}.$$

В полярных координатах $\vec{R} = (R, \theta, \Phi)$ имеем обычным образом:

$$T_R = -\frac{1}{2M} \Delta_{\vec{R}} = -\frac{1}{2M} \left[\left(\frac{1}{R} + \frac{\partial}{\partial R} \right)^2 + \frac{1}{R^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right) \right\} \right].$$

Перейдем, наконец, к вращающейся системе координат для переменных электрона, что формально эквивалентно заменам операторов

$\frac{\partial}{\partial \theta}$, $\frac{\partial}{\partial \Phi}$ и $\frac{\partial}{\partial R}$ в формуле /4/ согласно правилам /2/ *

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta} - i \ell_y,$$

* В дальнейшем мы воспользуемся сфероидальными координатами $g = (\xi, \eta, \phi)$, которые явным образом зависят от R . Из-за этого возникает оператор $\frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r}$.

$$\frac{\partial}{\partial \Phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \Phi} - i(\ell_z \cos \theta - \ell_x \sin \theta),$$

$$\frac{\partial}{\partial R} \rightarrow \frac{\partial}{\partial R} + \frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Этот переход приведет нас к следующему выражению для T_R :

$$T_R = -\frac{1}{2MR^2} \left(1 + R \frac{\partial}{\partial R} + r \frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{2MR^2} [\hat{K}^2 + 2\hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}^2 - \hat{B}].$$

Здесь введены операторы

$$\hat{K}^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} - i \hat{\ell}_z \operatorname{ctg} \theta\right)^2 + \hat{\ell}_z^2,$$

$$\hat{B} = 2\hat{\ell}_x \hat{\ell}_z \operatorname{ctg} \theta - 2i \hat{\ell}_y \frac{\partial}{\partial \theta} + 2i \hat{\ell}_x \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi}.$$

Операторы \hat{K}^2 и \hat{B} связаны с вращательными степенями свободы молекулы H_2^+ . Мы их опустим, так как в дальнейшем будем интересоваться лишь основным состоянием системы. Таким образом, для основного состояния молекулы H_2^+ имеем гамильтониан

$$H = h - \frac{1}{2MR^2} \left[\left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + R \frac{\partial}{\partial R}\right)^2 - \hat{\ell}^2\right], \quad /5/$$

где

$$h = -\frac{1}{2m} \Delta_r + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \quad /6/$$

есть классический гамильтониан задачи двух центров ^{/1/}

$$h \phi(\vec{r}; R) = \epsilon(R) \phi(\vec{r}; R). \quad /7/$$

Везде в дальнейшем $\epsilon(R)$ - основной терм задачи /7/ и $\phi(\vec{r}; R)$ - основное состояние этой задачи. Они зависят от величины R как от параметра. В частности ^{/1/},

$$\epsilon(\infty) = -\frac{1}{2} m = -\frac{1}{2} \frac{2m_e m_p}{2m_p + m_e}, \quad /8/$$

что следует сравнивать с точной энергией изолированного атома водорода

$$\epsilon_H = -\frac{1}{2} \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}. \quad /9/$$

Причина того, что $\epsilon(\infty) \neq \epsilon_H$, очевидна. Выбор координат Якоби /1/ привел нас к соответствующим приведенным массам /3/ и гамильтониану /6/.

Будем искать решение уравнения Шредингера

$$H\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad /10/$$

с гамильтонианом /5/ в одноуровневом приближении

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi(\vec{R}) \phi(\vec{r}; \vec{R}) . \quad /11/$$

Подставляя $\Psi(\vec{R}, \vec{r})$ в уравнение /10/ и усредняя по электронным степеням свободы, приходим к уравнению для $\psi(\vec{R})$:

$$\left[-\frac{1}{2M R^2} \left(1 + R \frac{\partial}{\partial R}\right)^2 + \epsilon(\vec{R}) - E \right] \psi(\vec{R}) = \frac{1}{2M} K(\vec{R}) \psi(\vec{R}) . \quad /12/$$

Матричный элемент $K(\vec{R})$ содержит в себе адиабатические поправки к $\epsilon(\vec{R})$ в одноуровневом приближении /11/. Как следует из формулы /5/,

$$K(\vec{R}) = \frac{1}{R^2} \int d\vec{r} \phi \left[\left(1 + r \frac{\partial}{\partial r} + R \frac{\partial}{\partial R}\right)^2 - \hat{\ell}^2 \right] \phi . \quad /13/$$

Асимптотическое значение

$$\frac{1}{2M} K(\infty) = -\epsilon(\infty) - \frac{1}{4M} \quad /14/$$

принято ^{/4/} считать поправкой к величине $\epsilon(\infty)$ - см. формулу /8/. Тогда в одноуровневом приближении будем иметь следующее выражение для основного состояния атома водорода:

$$\tilde{\epsilon}(\infty) = \epsilon(\infty) - \frac{1}{2M} K(\infty) = -\frac{1}{2} m \left(1 - \frac{m}{4M}\right) . \quad /15/$$

Это выражение совпадает с формулой /9/ с точностью до членов порядка m_0/m_p включительно. Как было показано ранее ^{/4/}, расширение адиабатического базиса позволяет в принципе получить точное значение энергии изолированного атома в развиваемом подходе, новейшие результаты в этом направлении приведены в работе ^{/5/}. Здесь мы решим эту проблему иным способом.

3. ПЕРЕОПРЕДЕЛЕНИЕ АДИАБАТИЧЕСКОГО БАЗИСА

Введем гамильтониан

$$\bar{h} = h - \frac{1}{2MR^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hat{\ell}^2 - 3r \frac{\partial}{\partial r} \right] \quad /16/$$

и рассмотрим новую задачу двух центров

$$\bar{h} \vec{\phi}(\vec{r}; R) = \bar{\epsilon}(R) \vec{\phi}(\vec{r}; R) . \quad /17/$$

Сравнение с формулами /5/ и /6/ показывает, что таким образом мы включаем часть адиабатических поправок в базисный гамильтониан. Задача /7/ обычно решается в сфероидальной системе координат $\xi = (r_1 + r_2)/R$, $\eta = (r_1 - r_2)/R$, $\phi = \arctg(y/x)$, так как в этом случае для нее переменные разделяются. Приведем необходимые формулы /для основного состояния/:

$$\Delta_{\vec{r}} = \frac{4}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right],$$

$$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} = \frac{4}{R} \frac{\xi}{\xi^2 - \eta^2}, \quad /18/$$

$$r \frac{\partial}{\partial r} = - \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[\xi (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] = \hat{c},$$

$$\hat{c}^2 - \hat{r}^2 = \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 + \eta^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (\xi^2 + \eta^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + 3r \frac{\partial}{\partial r}.$$

При помощи этих формул можно получить гамильтониан новой задачи двух центров в переменных ξ, η :

$$\bar{h} = t_{\xi\eta} + \frac{1}{R} - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)}. \quad /19/$$

Оператор "кинетической энергии" $t_{\xi\eta}$ имеет вид

$$t_{\xi\eta} = - \frac{2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \frac{1}{m} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \rho(\xi, \eta) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \rho(\xi, \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \right], \quad /20/$$

где

$$\rho(\xi, \eta) = 1 + \frac{m}{4M} (\xi^2 + \eta^2 - 1). \quad /21/$$

Если $R \rightarrow \infty$, сфероидальные координаты переходят в параболические λ, ν , причем /1/

$$\xi \rightarrow 1 + \lambda/R; \quad \eta \rightarrow \pm 1 - \nu/R. \quad /22/$$

Производя замену переменных /22/ в формуле /20/, можно убедиться, что

$${}^t \xi \eta \xrightarrow{R \rightarrow \infty} -\frac{1}{2\bar{m}} \Delta \lambda \nu, \quad /23/$$

причем

$$\bar{m} = \frac{m}{1 + m/4M} \equiv \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

совпадает с приведенной массой пары $e+p$. Таким образом, гамильтониан \hat{h} переходит в пределе $R \rightarrow \infty$ в гамильтониан атома водорода с точной приведенной массой.

В соответствии с формулой /11/ будем искать решение задачи трех тел в виде

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi(\vec{R}) \bar{\phi}(\vec{r}; \vec{R}), \quad /11a/$$

тогда, действуя таким же образом, как и ранее, можно получить уравнение для $\psi(\vec{R})$:

$$\left[-\frac{1}{2M} \left(\frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R} \right)^2 + \bar{\epsilon}(\vec{R}) - E \right] \psi(\vec{R}) = \frac{1}{2M} \bar{K}(\vec{R}) \psi(\vec{R}), \quad /12a/$$

а для адиабатических поправок $\bar{K}(\vec{R})$ приходим к формуле

$$\begin{aligned} \bar{K}(\vec{R}) &= \int d\vec{r} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R} \right)^2 - \frac{2}{R} \int \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R} \vec{r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \vec{r}} d\vec{r} - \frac{3}{R} \int d\vec{r} \bar{\phi} \vec{r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \vec{r}}, \\ d\vec{r} &= \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2). \end{aligned} \quad /24/$$

Последний интеграл легко вычисляется:

$$\int d\vec{r} \vec{r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \vec{r}} \bar{\phi} = -R \int d\vec{r} \bar{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R} = \frac{3}{2}. \quad /24a/$$

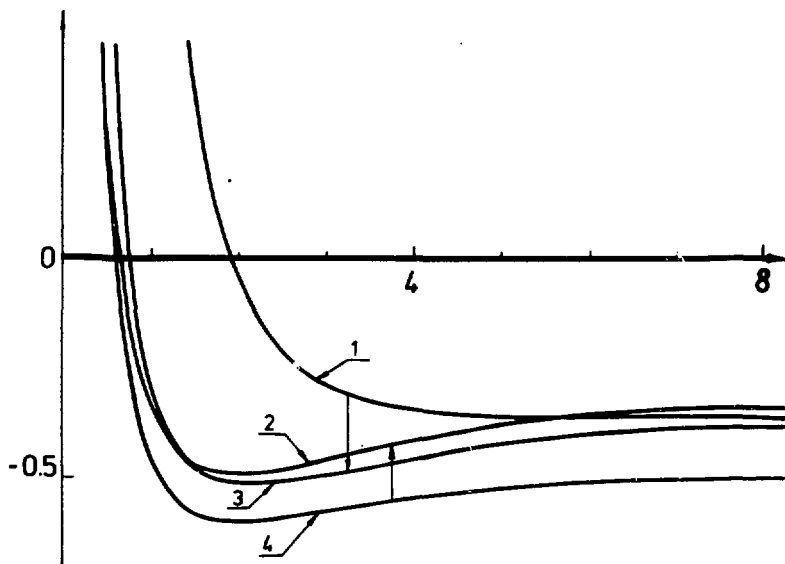
Мы вели изложение на примере H_2^+ . Хотя и для этой системы эффекты, связанные с движением ядер, представляют практический интерес /6/, удобнее все же провести исследование нового адиабатического подхода на примере таких задач, для которых включение адиабатических поправок имеет большее значение. По этой причине вычисления проводились для систем $e e e^+$ и $p p p^-$.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ СИСТЕМ $e e e^+$ и $p p p^-$

В случае задачи $e e e^+$ адиабатические поправки, строго говоря, не являются поправками, поскольку они есть величины того же порядка малости, что и терм $\bar{\epsilon}(\vec{R})$. Действительно, $m_1 = m_2 = m_3 = m_e$, поэтому в соответствии с формулами /3/ $m = 2/3 m_e$, $M = 1/2 m_e$.

Величина $m/2M$, которую условно можно считать параметром малости задачи, равна $2/3$. Задача решалась в естественных единицах $m=e=h=1$, которые использованы на рисунке. Для перехода к атомным единицам необходимо величины размерности энергии умножить на фактор $2/3$. Таким образом, например, $\bar{\epsilon}(\infty) \cdot \frac{2}{3} = -\frac{3}{8} \cdot \frac{2}{3} = -0,25$, что совпадает с энергией основного состояния атома позитрония.

На рисунке приведены результаты расчетов системы eee^+ : терм $\bar{\epsilon}(R)$ задачи /17/ - кривая 1, терм и адиабатические поправки $\bar{\epsilon}(R) + \frac{m}{2M} K(R)$ - кривая 3. Для сравнения приведены "аналогичные" величины для классической задачи двух центров /1/: $\bar{\epsilon}(R)$ - кривая 4 и $\bar{\epsilon}(R) + \frac{m}{2M} K(R)$ - кривая 2. Бросается в гла-



Эффективный потенциал для расчета системы eee^+ , полученный в настоящей работе /кривая 3/. Аналогичная величина для классического подхода /1,3/ /кривая 2/. Эти потенциалы связаны стрелками с соответствующими решениями /термами/ двухцентровых задач /кривые 1 и 4/.

Таблица

| Система Вариационный расчет | Одноуровневое приближение | | |
|----------------------------------|---------------------------|------------|------------|
| | старый подход | эта работа | работа /7/ |
| eee^+ (а.е.) $-0,012^{/11/}$ | $-0,0072$ | $-0,0059$ | $-0,0068$ |
| $pp\mu^-$ /э.в./ $-253,1^{/12/}$ | -249 | -244 | -247 |

за, что новый терм $\bar{\epsilon}(R)$ лежит значительно выше, чем $\epsilon(R)$, не только при больших R , что и следовало ожидать, но и при конечных R , не имея практически минимума. Более естественно сравнивать кривые /2/ и /3/, имеющие одинаковый физический смысл. Видно, что в классическом случае адиабатические поправки поднимают соответствующий терм во всей области R , а в нашем случае асимптотическое значение терма не меняется, $K(R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$, но для всех конечных R адиабатические поправки двигают терм вниз. В результате кривые /2/ и /3/ оказываются весьма похожими по форме, но выходят на разные пределы при $R \rightarrow \infty$. В нашем случае этот предел совпадает со значением энергии изолированного атома позитрония, что мы уже отмечали.

Для задачи $pp\mu^-$ $m_1 = m_2 = m_p$, $m_3 = m_\mu$, $m = 2m_p m_\mu / (2m_p + m_\mu)$, $M = m_p / 2$. Вычисления проводились в естественных единицах $m = e = \hbar = 1$. Как и в случае системы eee^+ , были получены кривые терма $\bar{\epsilon}(R)$ и $\epsilon(R) + \frac{m}{2M} \bar{K}(R)$. Все качественные выводы, сформулированные выше, остаются в силе, хотя становятся менее наглядными, так как в этом случае параметр малости, который позволяет оценить вклад адиабатических поправок, $m/2M = 0,1$.

В таблице приведены энергии связи /с обратным знаком/ для eee^+ и $pp\mu^-$ в одноуровневом приближении трех типов: а/ в старом подходе, т.е. для потенциальной кривой 2, б/ в нашем приближении, т.е. для кривой 3, и в/ по результатам работы /7/. Случай /в/ формально получается из нашего подхода, если в операторе $t_{\xi\eta}$, см. формулу /20/, вместо $\rho(\xi, \eta)$ подставить $\lim_{R \rightarrow \infty} \rho(\xi, \eta) = 1 + \frac{m}{4M}$. Таким образом, в асимптотической области $R \rightarrow \infty$ эти два подхода эквивалентны. Приводятся также результаты вариационных расчетов, которые в нашем приближении можно считать точ-

ными. Непосредственно видно, что для обеих систем наихудший результат получается в нашем подходе, что кажется довольно неожиданным и, по-видимому, объясняется "нефизическим" поведением $\bar{\epsilon}(R)$ при малых R , $\bar{\epsilon}(R) - 1/R \rightarrow +\infty$ при $R \rightarrow 0$.

5. НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для численного решения уравнения Шредингера /17/ использовался метод конечных элементов^{/8/}. В разработанном алгоритме условие $\phi(\xi, \eta; R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$ заменяется условием $\phi(l, \eta; R) = 0$, $l \gg 1$.

Этот подход позволяет в области $R > 0,5$ вычислить термы $\epsilon(R)$ и $\bar{\epsilon}(R)$ и соответствующие волновые функции с заданной точностью. Существенным моментом здесь является то, что в уравнении /17/ переменные не разделяются и задача решается на плоскости (ξ, η) . Нами выбрана относительная точность вычислений $10^{-3} - 10^{-4}$, которая позволила проводить вычисления с небольшими затратами машинного времени. Так как при $R < 0,5$ уравнение /17/ вырождается /малый параметр перед старшей производной/, то для того, чтобы устойчиво вычислять матричные элементы, необходимо брать $l \sim 10^6 - 10^7$. Это приводит к увеличению затрат машинного времени, и алгоритм становится неэффективным. Поэтому при $R < 0,5$ нужно искать другие способы решения, например, асимптотическое разложение вблизи $R = 0$.

При вычислении матричных элементов для члена $\int dr (\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R})^2$ мы применяли численное дифференцирование волновой функции. Матричный элемент $\int dr r \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R}$ был преобразован к виду

$$\int dr r \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R} = \frac{9}{2} \frac{1}{R} - \int dr \bar{\phi} r \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial R}, \quad /25/$$

а интеграл в правой части /28/, в свою очередь, вычислялся с использованием тождества /коммутатора/

$$[r \frac{\partial}{\partial r}, h] = -\frac{2}{R} f h - f \frac{2\xi}{R^2} + (3 + 2r \frac{\partial}{\partial r}) \frac{\partial}{\partial R} \quad /26/$$

аналогично тому, как это делается в работе^{/9/}. В формуле /26/

$$f \equiv f(\xi, \eta) = \frac{k^4}{4} \ln \rho(\xi, \eta). \quad /27/$$

Функция ρ была приведена раньше /21/. С учетом формул /24а/, /25/, /26/ и /27/ для адиабатических поправок /24/ имеет место формула

$$\begin{aligned} \bar{K}(R) = & -\frac{9}{2} \frac{1}{R^2} + \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial R}, \frac{\partial \phi}{\partial R} \right\rangle + \\ & + \frac{1}{aR^2} (2\bar{\epsilon}(R) + R \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial R}) \langle f \rangle - \frac{1}{aR^2} \langle fV \rangle, \quad /28/ \\ a = & \frac{m}{4M}, \quad V = -\frac{4}{R} \frac{\xi}{\xi^2 - \eta^2}. \end{aligned}$$

Из формулы /28/ наглядно видно, что "новый терм" $\bar{\epsilon}(R)$ не имеет физического смысла, поскольку величина $\bar{\epsilon}(R) - \frac{9}{2} \frac{m}{2M} \frac{1}{R^2}$ на равных основаниях с $\bar{\epsilon}(R)$ может отождествляться с классическим термом $\epsilon(R)$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Часть оператора кинетической энергии ядер в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием можно естественным образом объединить с оператором кинетической энергии третьей частицы в классической задаче двух центров. Для нахождения собственных значений и собственных векторов новой задачи двух центров приходится решать двумерную задачу, что качественно сложнее, чем в классическом случае, когда переменные разделяются. Однако в нашем подходе точный предел диссоциации соответствующей молекулярной системы естественно возникает уже в одноуровневом приближении. При использовании традиционного адиабатического базиса такой результат получается лишь путем искусственного переопределения приведенной массы в задаче двух центров, что может быть проделано лишь для случая тождественных центров /7/. Что касается энергии связи, то новое одноуровневое приближение оказывается менее точным. Мы надеемся, что новый базис будет полезнее при рассмотрении несимметричных систем, например $d\mu^-$, когда существуют два различных двухчастичных порога.

ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976; Power J. D. Phil. Trans. R. Soc. Lond., 1973, A247, p. 663.

2. Matveenko A.V. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1976, 9, p.1419.
3. Пономарев Л.И., Пузынина Т.Р., Трускова Н.Ф. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1978, 11, p.3861.
4. Матвеенко А.В., Пономарев Л.И. ЯФ, 1972, 16, с.620.
5. Виницкий С.Н., Вукайлович Ф., Пономарев Л.И. ОИЯИ, Р4-12018, Дубна, 1976.
6. Bishop D.M., Hunter G. Mol.Phys., 1975, 30, p.1433.
7. Пономарев Л.И., Vinitsky S.I. J.Phys.B: Atom.Molec. Phys., 1979, 12, p.567.
8. Bathe K.-J., Wilson E.A. Numerical Methods in Finite Element Analysis, 1976, Engle-wood, Clif., N.Y., 1976.
9. Лазаров Р., Касчиев М. ОИЯИ, Р11-12307, Дубна, 1979.
10. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, 11-11218, Дубна, 1978.
11. Kolos W., Roothann C.C., Sack R.A. Rev.Mod.Phys., 1960, 32, p.178.
12. Carter B.P. Phys.Rev., 1968, 165, p.139.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 января 1980 года.