

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



19/01-78

P4 - 11332

B-486

2548/2-78

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ
I. Выбор эффективного гамильтониана

1978

P4 - 11332

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ
I. Выбор эффективного гамильтоннана

Направлено в J. Phys. B.



1. Введение

Несмотря на очевидные преимущества адиабатического представления при описании медленных столкновений в системе трех тел (например, два ядра + электрон или μ^- -мезон), а также при вычислении энергии их связи адиабатический метод долгое время находился в забвении, и до недавнего времени практически во всех учебниках его рассматривали скорее как теоретическую возможность, нежели как эффективное средство для решения практических задач. Отчасти такое скептическое отношение к возможностям метода было связано с недостаточным знанием адиабатического базиса, т.е. решений задачи двух центров квантовой механики, а также эффективных потенциалов задачи трех тел, т.е. матричных элементов операторов импульса и кинетической энергии относительного движения ядер по волновым функциям задачи двух центров. В настоящее время эти трудности в значительной мере преодолены (см., например, /1-9/), что позволило решить ряд задач атомной и мезоатомной физики /10-14/.

Основное возражение против адиабатического метода связано с трудностями постановки граничных условий в адиабатическом базисе. Эти трудности можно свести к следующим основным:

1. Неверный предел диссоциации в системе трех тел при ее распаде на атом и ядро и, как следствие этого, неверное определение энергии связи системы.

2. Неверное определение импульсов в каналах реакции и, как следствие этого, неверное определение фаз и сечений рассеяния.

Виницкий С.И., Пономарев Л.И.

P4 - 11332

Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. I. Выбор эффективного гамильтониана

В адиабатическом представлении задачи трех тел (a, b, c) получен правильный предел диссоциации для реакций с обменом (a, c) + b → a + (b, c). В качестве примера приведен расчет уровней энергии мезомолекул ppμ и ddμ. Обсуждается взаимосвязь различных трудностей адиабатического метода и пути их преодоления.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Vinitsky S.I., Ponomarev L.I.

P4 - 11332

Adiabatic Representation of the Three-Body Problem with the Coulomb Interaction. I. The Choice of the Effective Hamiltonian

A correct dissociation limit for the exchange reaction (a, c) + b → a + (b, c) has been obtained in the adiabatic representation of the three-body problem (a, b, c). As an example, the calculation of the energy levels of mesic molecules ppμ and ddμ is presented.

Relation of various difficulties of the adiabatic method is discussed as well as the ways of their overcoming.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

3. Конечность недиагональных эффективных потенциалов задачи при бесконечном разведении ядер, т.е. сильная связь каналов в асимптотической области, что противоречит одному из основных требований корректной многоканальной задачи рассеяния.

4. Наличие далекодействующих эффективных потенциалов, порождаемых кориолисовым взаимодействием электронного и ядерного движений.

В данной работе устранены трудности I) и частично 3), при этом установлено, что они тесно связаны между собой. Кроме того, показано, что при вычислении энергии связи и волновых функций дискретного спектра задачи трех тел трудности 3)-4) несущественны. Предлагаемая схема иллюстрируется на примере вычисления энергии связи мезомолекул изотопов водорода $pp\mu$ и $dd\mu$.

Следует отметить, что в литературе до сих пор не установлено окончательно название обсуждаемого метода. Чаще всего его называют "методом возмущенных стационарных состояний" /15/, но встречаются также термины "молекулярное представление" /16/, "метод Борна-Оппенгеймера" /3/, "adiaбатическое представление" /17, 18/ и т.д. В дальнейшем мы будем использовать термин "adiaбатическое представление в задаче трех тел", как наиболее точно отражающий суть и особенности излагаемого метода.

2. Постановка задачи

Уравнение Шредингера системы трех тел, состоящей из двух ядер с массами $M_a \geq M_b$ и зарядами Z_a и Z_b и электрона или μ^- -мезона с массой m_c , после отделения координат центра инерции системы имеет вид

$$(\hat{H} - E_{n\tau}) \Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = 0. \quad (I)$$

Здесь $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R})$ - волновая функция системы трех тел в состоянии с квантовыми числами $n = (N\ell m)$ электронного движения и $\tau = (\nu J m_J \lambda)$ ядерного движения, где ν - колебательное квантовое число относительного движения ядер, J и m_J - полный момент системы трех тел и его проекция, λ - полная четность системы /19-22/; \vec{R} - вектор, соединяющий ядра M_a и M_b , а \vec{r} - вектор, соединяющий электрон (мезон) с центром отрезка R (см. рис. 1). Гамильтониан системы в единицах $e = \hbar = 1$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -(2M_0)^{-1} (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2 - (2m_0)^{-1} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R} = \\ &= \hat{T}_0 + \hat{h}_0 + \frac{Z_a Z_b}{R}, \end{aligned} \quad (2)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} M_0^{-1} &= M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad m_0^{-1} = m_c^{-1} + (M_a + M_b)^{-1}, \\ \alpha &= (M_b - M_a) / (M_b + M_a), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\hat{T}_0 = -(2M_0)^{-1} (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2, \quad \hat{h}_0 = -(2m_0)^{-1} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b}. \quad (4)$$

Здесь h_0 - гамильтониан задачи двух центров, который представляет движение "электрона" с эффективной массой m_0 в поле двух закрепленных ядер с зарядами Z_a и Z_b , удаленных друг от друга на расстояние R .

Адиабатический базис определяется как полный набор решений уравнения Шредингера с гамильтонианом задачи двух центров (в дальнейшем положено $m_0 = 1$)

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_e}{r_e}, \quad (5)$$

соответствующих дискретному и непрерывному спектрам оператора \hat{h} :

$$\hat{h} \phi_j(\vec{r}; R) = E_j(R) \phi_j(\vec{r}; R), \quad (6a)$$

$$\hat{h} \phi_c(\vec{r}; k, R) = \frac{k^2}{2} \phi_c(\vec{r}; k, R). \quad (6b)$$

Термы $E_j(R)$ и соответствующие им волновые функции $\phi_j(\vec{r}; R)$ дискретного спектра задачи двух центров удобно нумеровать набором параболических квантовых чисел $j = [n_1, n_2, m]$, характеризующих состояние изолированного атома $m_e M_a$ (или $m_e M_e$) при бесконечном удалении ядер. Волновые функции $\phi_c(\vec{r}; k, R)$ соответствуют непрерывному спектру задачи двух центров и характеризуются импульсом k и набором параболических квантовых чисел $c = [n_2, m]$.

В случае равных зарядов, $Z_a = Z_e$ (но необязательно равных масс, $M_a \neq M_e$) появляется дополнительное квантовое число - четность $P_{j,\alpha} = (-)^{\ell}$, где $\ell = 2n_2 + m$ или $\ell = 2n_2 + m + 1$ в зависимости от симметрии решений по отношению к плоскости

$Z=0$, ортогональной вектору \vec{R} и проходящей через его середину^{/8/}. В соответствии с этим четное ($P_j = 1$) и нечетное ($P_j = -1$) решения уравнений $\phi_{jg}(\vec{r}; R)$ и $\phi_{ju}(\vec{r}; R)$ соответствуют наборам квантовых чисел $j = [n_1, n_2, m]_g$ и $j = [n_1, n_2, m]_u$ и одной и той же энергии при $R \rightarrow \infty$:

$$E_{jg}(\infty) = E_{ju}(\infty) = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = n_1 + n_2 + m + 1. \quad (7)$$

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением случая $Z_a = Z_e = 1$, $M_a \neq M_e$, как наиболее сложного и важного в приложениях. В этом случае известно, что правильными функциями нулевого приближения, представляющими изолированные атомы $m_e M_a$ и $m_e M_e$ при $R \rightarrow \infty$, являются функции

$$\begin{aligned} \phi_{ja}(\vec{r}; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{jg}(\vec{r}; R) - \phi_{ju}(\vec{r}; R)], \\ \phi_{je}(\vec{r}; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{jg}(\vec{r}; R) + \phi_{ju}(\vec{r}; R)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Волновая функция $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{r}')$ задачи трех тел, соответствующая полной четности системы $\lambda = + (-)^J$, разлагается по адиабатическому базису следующим образом^{/19-22/}:

$$\begin{aligned} \Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{R} \sum_j [\Psi_{ja}(\xi, \zeta; R) \chi_{ja}^{n\tau}(R) + \\ &+ \Psi_{je}(\xi, \zeta; R) \chi_{je}^{n\tau}(R)] F_j(\phi, \theta, \varphi), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\xi = (r_a + r_e)/R$, $\zeta = (r_a - r_e)/R$ - сферические координаты^{/1,8/}, а функции $\Psi_j(\xi, \zeta; R)$ определены соотношениями

$$\phi_j(\vec{r}; R) = \Psi_j(\xi, \zeta; R) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} (-)^m & \text{при } m > 0, \\ 1 & \text{при } m < 0. \end{cases} \quad (10)$$

Угловая часть разложения (9) имеет вид (11)

$$F_j(\phi, \theta, \varphi) = [4\pi(1 + \delta_{0m})]^{-1/2} [(-)^m e^{im\varphi} D_{mm}^J(\phi, \theta, 0) + e^{-im\varphi} D_{mm}^J(\phi, \theta, 0)],$$

где $D_{mm}^J(\phi, \theta, 0)$ - нормированные D -функции

Вигнера^{/23-24/}, Θ и Φ - угловые переменные вектора \vec{R} в неподвижной системе координат.

В обозначениях Дирака разложение (9) приобретает вид

$$\begin{aligned} |n\tau\rangle &= \frac{1}{R} |\varphi\rangle \langle \varphi | n\tau \rangle F = \frac{1}{R} \sum_j |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j | n\tau \rangle F_j = \\ &= \frac{1}{R} \sum_j |\varphi_{ja} \varphi_{j\theta}\rangle \left\langle \begin{matrix} \chi_{ja} \\ \chi_{j\theta} \end{matrix} \middle| F_j \right\rangle. \end{aligned} \quad (9a)$$

Знак \sum_j включает в себя суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру задачи двух центров:

$$\sum_j = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} + \int_0^{\infty} dk \right). \quad (12)$$

После подстановки разложения (9) в уравнение (I) и усреднения по координатам \vec{r} , Θ , Φ приходим к бесконечномерной системе интегродифференциальных уравнений для вектор-столбца функций $\chi_j = \langle \varphi_j | n\tau \rangle = \chi_j^{n\tau}(R)$:

$$\frac{d^2}{dR^2} \chi_i(R) + [2ME_{n\tau} - U_{ii}(R)] \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^N U_{ij}(R) \chi_j(R), \quad (13)$$

где

$$\chi_j(R) = \begin{pmatrix} \chi_{ja}(R) \\ \chi_{j\theta}(R) \end{pmatrix}, \quad U_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ia,ja}(R) & U_{ia,j\theta}(R) \\ U_{i\theta,ja}(R) & U_{i\theta,j\theta}(R) \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Величина эффективной массы M и вид эффективных потенциалов $U_{ij}(R)$ зависят от способа разбиения исходного гамильтониана на сумму "кинетической" \hat{T} и "потенциальной" \hat{h} энергий.

Разбиение (2) принято практически во всех работах по адиабатическому методу. В этом случае $M = M_0/m_0$, а способ построения эффективных потенциалов $U_{ij}(R)$ подробно изложен в предыдущих работах авторов^{/13,22,25/}.

Разбиение

$$\hat{H} = \hat{T}_* + \hat{h}_* + \frac{1}{R}, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{T}_* &= -(2M_0)^{-1} \left[\Delta_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} (\nabla_{\vec{R}} \nabla_{\vec{r}} + \nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{R}}) \right], \\ \hat{h}_* &= -(2m_*)^{-1} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}, \\ (m_*)^{-1} &= m_0^{-1} + \alpha^2/4M_0 = m_c^{-1} + (4M_0)^{-1} \end{aligned} \quad (16)$$

принято в работах^{/13/} и ^{/19,21/}. Уравнения (13) во всех случаях сохраняют свой вид, но единицы измерения в них, конечно, различны: $e = \hbar = m_0 = 1$ в случае разбиения (2) и $e = \hbar = m_* = 1$ в случае разбиения (15).

В случае разбиения (2) эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ выражаются через матричные элементы операторов \hat{T}_0 и \hat{h}_0 по волновым функциям $\varphi_{jg}(\xi, \zeta; R)$ и $\varphi_{ju}(\xi, \zeta; R)$ по формулам

$$\begin{aligned} (\varphi_{ja} \varphi_{j\theta}) &= (\varphi_{jg} \varphi_{ju}) A^+, \quad U_{ij} = A V_{ij} A^+, \\ A &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad V_{ij} = \begin{pmatrix} V_{ig,jg} & V_{ig,ju} \\ V_{iu,jg} & V_{iu,ju} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

Например^{/13/}:

$$U_{ia,ja}(R) = \frac{1}{2} \left[(V_{ig,jg} + V_{iu,ju}) - (V_{ig,ju} + V_{iu,jg}) \right], \quad (17a)$$

где

$$V_{ij} = \delta_{mm'} \left\{ \delta_{ij} \left[\frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + \frac{2M}{R} + 2ME_{im}(R) \right] + H_{ij}(R) + \frac{dQ_{ij}(R)}{dR} + 2Q_{ij}(R) \frac{d}{dR} \right\} + B_{im,jm'}^J(R). \quad (18)$$

Матричные элементы

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= Q_{ij}^{(+)} + \alpha Q_{ij}^{(-)}, \\ H_{ij} &= H_{ij}^{(+)} + \alpha H_{ij}^{(-)} + \alpha^2 H_{ij}^{(*)}, \\ B_{im,jm'}^J &= B_{im,jm'}^{(+)} + \alpha B_{im,jm'}^{(-)} \end{aligned} \quad (19)$$

(для разбиения (2)) и $H_{ij} = H_{ij}^{(+)} + \alpha H_{ij}^{(-)}$ (для разбиения (15)) определены в работах /13,25/.

В настоящее время они вычислены с точностью $\sim 10^{-7}$ и выше на интервале $0,1 \leq R \leq 60$ для пар состояний $i = [n_1 n_2 m]$, $j = [n_1' n_2' m']$ при всех n_1, n_2, m , удовлетворяющих условиям $n = n_1 + n_2 + m + 1 \leq 3$, $n' = n_1' + n_2' + m' + 1 \leq 3$ /26/.

Аналогичные матричные элементы $Q_{ic}(R)$, $H_{ic}(R)$, $B_{im,cm'}^J(R)$, связывающие основное состояние $i = [000]$ дискретного спектра задачи двух центров с состояниями $c = [k n_2 m]$ непрерывного спектра при значениях $n_2 = 0, 1, 2, 3$, $m = 0, 1$ и $k = 0, 2(0,1), 1, 2(0,2), 2(1)5$ вычислены в работе /27/.

3. Граничные условия в адиабатическом методе

Система уравнений (13) – точная и в общем виде впервые получена в работах Борна /17/. При ее выводе не сделано никаких упрощающих предположений, и поэтому точность вычисления энергии $E_{n\tau}$ системы трех тел зависит лишь от приближений, допущенных при решении системы уравнений (13). Отметим сразу же, что полная энергия $E_{n\tau}$ системы трех тел есть инвариант и ее значение не зависит от способа разбиения исходного гамильтониана на кинетическую и потенциальную энергии.

Для дальнейшего удобно работать в системе единиц $e = \hbar = m_c = 1$ и в явном виде выделять зависимость величин от эффективных масс, входящих в уравнение. Тогда для случая стандартного разбиения (2) гамильтониана (1) система уравнений (13) примет вид

$$\begin{aligned} m_0^{-2} \frac{d^2 \chi_i(m_0 R)}{dR^2} + \left[2M \frac{E_{n\tau}}{m_0} - U_{ii}(m_0 R) \right] \chi_i(m_0 R) = \\ = \sum_{j \neq i} U_{ij}(m_0 R) \chi_j(m_0 R). \end{aligned} \quad (20)$$

Уравнения, определяющие адиабатический базис, изменятся следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{h}_0 \phi_j(m_0 \vec{r}; m_0 R) &= m_0 E_j(m_0 R) \phi_j(m_0 \vec{r}; m_0 R), \\ \hat{h}_0 \phi_c(m_0 \vec{r}; m_0^{-1} k, m_0 R) &= \frac{k^2}{2m_0} \phi_c(m_0 \vec{r}; m_0^{-1} k, m_0 R), \end{aligned} \quad (21)$$

а все соотношения (8)–(10), (13), (18) сохраняют свой вид после замен $\vec{r} \rightarrow m_0 \vec{r}$, $\vec{R} \rightarrow m_0 \vec{R}$, $k \rightarrow m_0^{-1} k$, $E_{n\tau} \rightarrow m_0^{-1} E_{n\tau}$.

При $R \rightarrow \infty$ имеют место предельные соотношения

$$\phi_{j_a}(m_0 \vec{r}; \infty) = \psi_j(m_0 \vec{r}_a), \quad m_0 E_j(\infty) = -m_0/2n^2, \quad (22a)$$

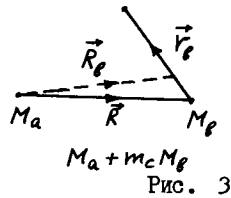
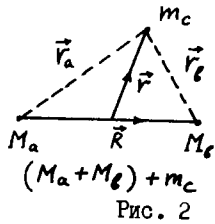
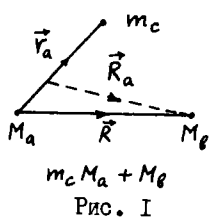
$$\phi_{j_b}(m_0 \vec{r}; \infty) = \psi_{j'}(m_0 \vec{r}_b), \quad m_0 E_{j'}(\infty) = -m_0/2n'^2, \quad (22b)$$

где $\psi_j(m_0 \vec{r}_a)$ и $\psi_{j'}(m_0 \vec{r}_b)$ - волновые функции состояний $j = [n_1 n_2 m]$ и $j' = [n'_1 n'_2 m']$ и атомов $m_c M_a$ и $m_c M_b$ соответственно в параболических координатах ($n = n_1 + n_2 + m + 1$ и $n' = n'_1 + n'_2 + m' + 1$). Легко видеть, что эффективная масса m_0 этих атомов и энергии состояний (22) не совпадают истинными приведенными массами m_a и m_b и энергиями

$$E_a = -m_a/2n^2, \quad m_a^{-1} = m_c^{-1} + M_a^{-1},$$

$$E_b = -m_b/2n'^2, \quad m_b^{-1} = m_c^{-1} + M_b^{-1}. \quad (23)$$

Как известно, волновые функции (22) представляют электронное движение в двух предельных системах координат, которые возникают из координат рис.2 при $R \rightarrow \infty$ (рис.1 и 3).



В этих координатах главные члены асимптотики решений

$\Psi_{n\tau}(m_0 \vec{r}, m_0 \vec{R})$, соответствующих связанному состоянию системы трех тел, при разделении ее на подсистемы $m_c M_a + M_b$ и $M_a + m_c M_b$ имеют вид:

$$\Psi_{n\tau}(m_0 \vec{r}, m_0 \vec{R}) \sim \begin{cases} \psi_n(m_0 \vec{r}_a) D_{m m_{j'}}^J(\phi, \theta, 0) e^{-\tilde{x}_{na} R}, \\ \psi_n(m_0 \vec{r}_b) D_{m m_{j'}}^J(\phi, \theta, 0) e^{-\tilde{x}_{nb} R}, \end{cases} \quad (24)$$

где

$$\tilde{x}_{na} = |2M_0 \tilde{E}_{n\tau}|^{1/2}, \quad \tilde{x}_{nb} = |2M_0 (\tilde{E}_{n\tau} + \Delta \tilde{E}_n)|^{1/2},$$

а

$$\tilde{E}_{n\tau} = E_{n\tau} - \tilde{E}_{na}. \quad (25)$$

Энергия связи $\tilde{E}_{n\tau}$ системы трех тел в этом случае отсчитывается от энергии \tilde{E}_{na} изолированного атома $m_c M_a$ в адиабатическом представлении^{/28/}:

$$\tilde{E}_{na} = \frac{m_0}{2M} U_{na,na}(\infty) =$$

$$= m_0 \left[E_n(\infty) + \frac{1}{2M} H_{nn}(\infty) \right] = -\frac{m_0}{2n^2} \left[1 - \frac{(1+\alpha)^2}{4M} \right], \quad (26)$$

$$\Delta \tilde{E}_n = \tilde{E}_{na} - \tilde{E}_{nb} = \frac{1}{2n^2} \cdot \frac{\alpha}{M}. \quad (27)$$

Значение \tilde{E}_{nb} отличается от выражения (26) знаком α . Для разбиения гамильтониана (15) соответствующие выражения принимают вид

$$\tilde{E}_{na} = -\frac{m_0}{2n^2} \left(1 - \frac{1+2\alpha}{4M} \right),$$

$$\tilde{E}_{nb} = -\frac{m_0}{2n^2} \left(1 - \frac{1-2\alpha}{4M} \right), \quad (28)$$

а выражение для $\Delta \tilde{E}_n$ совпадает с (27).

Первые члены в правой части равенств (26) и (28) равны энергиям изолированных атомов $m_c M_a$ и $m_c M_e$ при бесконечной массе ядер M_a и M_e , вторые члены учитывают первые адиабатические поправки на движение ядер, так что

$$\tilde{E}_{na} = -\frac{1}{2n^2} \left(1 - \frac{1}{M_a} + \frac{A}{M_a^2} + \dots \right). \quad (29)$$

Выражения (26) и (28) различаются величиной коэффициента A , причем разложение (28) несколько ближе к точному значению E_{na} энергии изолированного атома $m_c M_a$:

$$E_{na} = -m_a/2n^2 = -\frac{m_c}{2n^2} \left(1 + \frac{m_c}{M_a} \right)^{-1}. \quad (30)$$

Указанное отличие значений \tilde{E}_{na} и E_{na} - первая трудность адиабатического метода, известная как неверный предел диссоциации^{/3,28-30/}. Эта трудность не носит, однако, принципиального характера и, как мы в дальнейшем покажем, может быть устранена простым преобразованием исходного гамильтониана.

Вторая трудность - неверная асимптотика (24) функций

$\Psi_{nc}(\vec{r}, \vec{R})$ - очевидна уже при простом сравнении с истинной асимптотикой:

$$\Psi_{nc}(\vec{r}, \vec{R}) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \psi_n(m_a \vec{r}_a) D_{mm_j}^J(\phi_a, \theta_a, 0) e^{-\alpha_{na} R_a} \\ \psi_n(m_e \vec{r}_e) D_{mm_j}^J(\phi_e, \theta_e, 0) e^{-\alpha_{ne} R_e} \end{cases}. \quad (31)$$

Здесь:

$$\alpha_{na} = |2M_a \epsilon_{nc}|^{1/2}, \quad \alpha_{ne} = |2M_e (\epsilon_{nc} + \Delta E_n)|^{1/2}, \quad (32)$$

$$\epsilon_{nc} = E_{nc} - E_{na}, \quad \Delta E_n = E_{na} - E_{ne},$$

значения

$$M_a^{-1} = (m_c + M_a)^{-1} + M_e^{-1},$$

$$M_e^{-1} = M_a^{-1} + (m_c + M_e)^{-1} \quad (33)$$

равны приведенным массам систем $m_c M_a + M_e$ и $M_a + m_c M_e$, а векторы \vec{R}_a и $-\vec{R}_e$ соединяют центры масс атомов $m_c M_a$ и $m_c M_e$ с ядрами M_e и M_a соответственно (см. рис. 2).

При нахождении дискретного спектра задачи трех тел эта вторая трудность несущественна, поскольку в обоих случаях, (24) и (31),

$\Psi_{nc}(m_o \vec{r}, m_o \vec{R}) \rightarrow 0$ при достаточно больших R . Этот общий вывод подтверждается конкретными численными расчетами (см. п. 5).

Однако при описании процессов рассеяния в системе трех тел, например, упругого рассеяния атома $m_c M_a$ в основном состоянии, $n=1$,

$$m_c M_a + M_e \rightarrow m_c M_a + M_e, \quad (34)$$

с энергией $\epsilon < \Delta E_1$ отмеченная трудность становится существенной.

В этом случае асимптотика решений, следующая из системы уравнений (20)

$$\Psi_{1c}(m_o \vec{r}, m_o \vec{R}) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \psi_1(m_o \vec{r}_a) D_{mm_j}^J(\phi, \theta, 0) \sin(\tilde{k}_{1a} R + \tilde{\delta}_j(k_{1a})), \\ \psi_1(m_o \vec{r}_e) D_{mm_j}^J(\phi, \theta, 0) e^{-\tilde{\alpha}_{1e} R}, \end{cases} \quad (35)$$

где $\tilde{\alpha}_{1e} = [2M_o(\epsilon + |\Delta \tilde{E}_1|)]^{1/2}$, $\tilde{k}_{1a} = (2M_o \epsilon)^{1/2}$ -

- импульсы, а $\tilde{\delta}_J(\tilde{k}_a)$ - фаза рассеяния, отличается от истинной асимптотики:

$$\Psi_{1\tau}(m_0\vec{r}, m_0\vec{R}) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \Psi_1(m_a\vec{r}_a) D_{mm_J}^J(\phi_a, \theta_a, 0) \sin(k_{1a} R_a + \delta_J(k_{1a})), \\ \Psi_1(m_e\vec{r}_e) D_{mm_J}^J(\phi_e, \theta_e, 0) e^{-\alpha_{1e} R_e} \end{cases} \quad (36)$$

где

$$k_{1a} = (2M_a \varepsilon)^{1/2}, \quad \alpha_{1e} = [2M_e(\varepsilon + |\Delta E_{11}|)]^{1/2},$$

$$\varepsilon = E_{1\tau} - E_{1a}.$$

В резонансных ситуациях, когда даже небольшое изменение импульса k может резко изменить значение фазы $\delta_J(k)$ отличия определений k и \tilde{k} приобретает решающий характер и должно быть устранено.

Отмеченная трудность адиабатического метода известна как неверный импульс в канале рассеяния. Для ее устранения предложено несколько способов^{/31-36/}, которые, однако, до сих пор не привели к успеху. Первая попытка такого рода - введение т.н. трансляционной экспоненты, позволяющей ликвидировать различие между \tilde{k} и k , предложена Бейтсом и др.^{/31/}, наиболее далеко в этом направлении продвинулись Чен и др.^{/34/}.

Указанные трудности адиабатического метода в многоканальной задаче рассеяния усугубляются тем, что система уравнений (20) не удовлетворяет обычным требованиям разрешимости, поскольку потенциалы $U_{ij}(R)$ при $i \neq j$ убывают в асимптотической области медленнее, чем $\sim R^{-2}$. Действительно,^{/25/} асимп-

тотика матричных элементов при $R \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$H_{ij}(R) \sim \text{const} + R^{-1}, \quad (37)$$

$$Q_{ij}(R) \sim \text{const}, \quad B_{im, jm'}(R) \sim R^{-1}.$$

В связи с этим для корректной постановки граничных условий задачи рассеяния в адиабатическом базисе необходимы дополнительные преобразования системы (20).

При вычислении энергии связи $E_{1\tau}$ системы трех тел упомянутые ограничения на потенциалы можно ослабить, поскольку правая часть системы (20) всегда стремится к нулю вследствие экспоненциального убывания решений $\chi_j(R)$ при $R \rightarrow \infty$.

4. Преобразование исходного гамильтониана

Общая причина перечисленных трудностей заключается в том, что "кинетическая" \hat{T}_0 и "потенциальная" \hat{h}_0 части исходного гамильтониана \hat{H} не могут быть диагонализированы одновременно и в одних и тех же координатах. В этом смысле все трудности адиабатического метода взаимосвязаны и, в принципе, должны устраняться одновременно. Оказывается, однако, что их можно разбить на две группы и устранить по частям. В данной работе мы покажем, что простым преобразованием исходного гамильтониана можно восстановить в адиабатическом представлении правильный предел диссоциации и одновременно с этим добиться условия $H_{ij}(R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$.

Для этого напомним, что при $R \rightarrow \infty$ оператор $\nabla_{\vec{R}}$ при действии на функции $\phi_j(\vec{r}; R)$ переходит в

$$\nabla_{\vec{R}} \underset{R \rightarrow \infty}{\rightarrow} \begin{cases} \frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_a}, \\ -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_e} \end{cases} \quad (38)$$

и в соответствии с этим^{/28/}

$$\hat{T}_0 = (\nabla_{\vec{r}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2 \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^2 \Delta_{\vec{r}} = \begin{cases} \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^2 \Delta_{\vec{r}_a}, \\ \left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2 \Delta_{\vec{r}_b}. \end{cases} \quad (39)$$

Поэтому, добавляя и вычитая предельный оператор (39), приходим к следующему разбиению исходного гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{T}_a + \hat{h}_a + \frac{1}{R} = \hat{T}_a + \hat{W}_a, \quad (40a)$$

где

$$\hat{T}_a = -(2M_0)^{-1} \left[(\nabla_{\vec{r}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2 - \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^2 \Delta_{\vec{r}} \right], \quad (41a)$$

$$\hat{h}_a = -(2m_a)^{-1} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}.$$

Величина m_a , следующая из этого разбиения,

$$\frac{1}{m_a} = \frac{1}{m_0} + \frac{(1+\alpha)^2}{4M_0} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_a} \quad (42)$$

совпадает с истинной приведенной массой атома $m_c M_a$.

Вполне аналогично имеем второе разбиение:

$$\hat{H} = \hat{T}_b + \hat{h}_b + \frac{1}{R} = \hat{T}_b + \hat{W}_b, \quad (40b)$$

$$\hat{T}_b = -(2M_0)^{-1} \left[(\nabla_{\vec{r}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}})^2 - \left(\frac{1-\alpha}{2}\right)^2 \Delta_{\vec{r}} \right], \quad (41b)$$

$$\hat{h}_b = -(2m_b)^{-1} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b},$$

где величина

$$\frac{1}{m_b} = \frac{1}{m_0} + \frac{(1-\alpha)^2}{4M_0} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_b}. \quad (42b)$$

Очевидно, разбиения (40a) и (40b) равноправны и выбор одного из них диктуется лишь соображениями удобства. В дальнейшем будем работать в системе единиц $e = \hbar = m_a = 1$ (это небольшое нарушение симметрии каналов a и b окупается простотой окончательных формул). Введем функции:

$$\Psi_{ig} = \Psi_{ig}(\xi, \zeta; R), \quad \Psi_{iu} = \Psi_{iu}(\xi, \zeta; R), \quad (43)$$

$$\bar{\Psi}_{ig} = \Psi_{ig}(\xi, \zeta; \gamma R), \quad \bar{\Psi}_{iu} = \Psi_{iu}(\xi, \zeta; \gamma R),$$

которые являются собственными функциями гамильтонианов \hat{h}_a и \hat{h}_b

$$\hat{h}_a \Psi_{ig,u} = E_{ig,u}(R) \Psi_{ig,u}, \quad \gamma = \frac{m_b}{m_a}, \quad (44)$$

$$\hat{h}_b \bar{\Psi}_{ig,u} = \gamma E_{ig,u}(\gamma R) \bar{\Psi}_{ig,u},$$

а также функции Ψ_{ia} и Ψ_{ib} , $\bar{\Psi}_{ia}$ и $\bar{\Psi}_{ib}$, построенные по формулам (8). При $R \rightarrow \infty$ функции Ψ_{ia} и $\bar{\Psi}_{ib}$ переходят в правильные нормированные функции изолированных атомов $m_c M_a$ и $m_c M_b$ (с учетом определения (10))

$$\langle \bar{\Psi}_i | \Psi_i \rangle = \int d\alpha \Psi_i^2(\xi, \zeta; \gamma R) = 1, \quad d\alpha = \frac{R^3}{\delta} (\xi^2 - \zeta^2) d\xi d\zeta,$$

$$\Psi_{ia} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \Psi_i(\vec{r}_a),$$

$$\bar{\Psi}_{ib} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \Psi_i(\gamma \vec{r}_b). \quad (45)$$

Очевидно, можно построить преобразование вектор-строки базисных функций:

$$|\bar{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle S^+, \quad (46)$$

или, более подробно:

$$\langle \bar{\Psi} | = S \langle \Psi |, \quad \begin{pmatrix} \bar{\Psi}_{ia} \\ \bar{\Psi}_{ib} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{ia,ja}^\gamma & S_{ia,jb}^\gamma \\ S_{ib,ja}^\gamma & S_{ib,jb}^\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{ja} \\ \Psi_{jb} \end{pmatrix}, \quad (47)$$

где $\bar{\Psi}_{ia} \equiv \Psi_{ia}$.

Элементы матрицы $S_{ij} = \langle \bar{\psi}_i | \psi_j \rangle$ вычисляются по формулам

$$S_{ia,ja}^\delta = \langle \bar{\psi}_{ia} | \psi_{ja} \rangle = \delta_{ij},$$

$$S_{ia,jb}^\delta = \langle \bar{\psi}_{ia} | \psi_{jb} \rangle = 0,$$

$$S_{ib,ja}^\delta = \langle \bar{\psi}_{ib} | \psi_{ja} \rangle = \frac{1}{2} [S_{ig,dg}^\delta(R) - S_{ia,ju}^\delta(R)], \quad (48)$$

$$S_{ib,jb}^\delta = \langle \bar{\psi}_{ib} | \bar{\psi}_{jb} \rangle = \frac{1}{2} [S_{ig,dg}^\delta(R) + S_{ia,ju}^\delta(R)].$$

Здесь введены обозначения:

$$S_{ig,dg}^\delta(R) = \int d\tau \psi_{ig}(\xi, \zeta; \gamma R) \psi_{dg}(\xi, \zeta; R),$$

$$S_{ia,ju}^\delta(R) = \int d\tau \psi_{ia}(\xi, \zeta; \gamma R) \psi_{ju}(\xi, \zeta; R), \quad (48a)$$

и во всем дальнейшем изложении следует помнить, что первый индекс матрицы всегда относится к функции, содержащей масштабный множитель γ .

В отличие от базиса $|\psi\rangle$ базис $|\bar{\psi}\rangle$ неортогонален, и вместо соотношения $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$ имеем теперь:

$$\langle \bar{\psi}_i | \bar{\psi}_j \rangle = G_{ij} = (S S^+)_{ij}. \quad (49)$$

Выражения (47), (48) определяют вид метрического тензора

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} G_{ia,ja} & G_{ia,jb} \\ G_{ib,ja} & G_{ib,jb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{ij} & S_{je,ia} \\ S_{ie,ja} & \delta_{ij} \end{pmatrix} \quad (50)$$

и полезное соотношение, которое может служить для проверки вычислений:

$$\sum_k [S_{ie,ka} S_{je,ka} + S_{ie,ke} S_{je,ke}] = \delta_{ij}. \quad (51)$$

Используем новый базис $|\bar{\psi}\rangle$ для разложения (9a) волновой функции $|n\tau\rangle$ задачи трех тел:

$$\begin{aligned} |n\tau\rangle &= R^{-1} |\bar{\psi}\rangle \langle \bar{\psi} | n\tau \rangle F = \\ &= R^{-1} \sum_j |\bar{\psi}_{ja} \bar{\psi}_{jb}\rangle \langle \bar{\chi}_{ja} \bar{\chi}_{jb} | F_j, \end{aligned} \quad (52)$$

где новые функции $\langle \bar{\chi} | = (S^+)^{-1} \langle \chi |$ удовлетворяют соотношению нормировки

$$\sum_{i,j} \langle \bar{\chi}_i | G_{ij} | \bar{\chi}_j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\tau\tau'}, \quad (53)$$

которое следует из соотношений (49), (52) и условия полной нормировки $\langle n\tau | n'\tau' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\tau\tau'}$.

Подставляя разложение (52) в исходное уравнение (I), усредняя по угловым переменным Φ, Θ, φ и базису $|\bar{\psi}\rangle$, приходим к системе уравнений для функций $\bar{\chi}_j$:

$$\sum_j [\langle \bar{\psi}_i | \hat{T} + \hat{W} | \bar{\psi}_j \rangle - E_{n\tau} G_{ij}] \bar{\chi}_j = 0. \quad (54)$$

Домножая также уравнение (54) слева на G^{-1} , окончательно получим:

$$\sum_j (\bar{T}_{ij} + \bar{W}_{ij} - E_{n\tau}) \bar{\chi}_j = 0, \quad (55)$$

где

$$\bar{T} = (S^+)^{-1} T S^+, \quad \bar{W} = G^{-1} \tilde{W}. \quad (56)$$

Матричные элементы матрицы \widetilde{W}_{ij} потенциальной энергии имеют вид:

$$\begin{aligned}\widetilde{W}_{ia,ja} &= \frac{1}{2} [W_{jg}(R) + W_{ju}(R)] \delta_{ij}, \\ \widetilde{W}_{ia,je} &= \frac{\gamma}{2} [W_{jg}(\gamma R) S_{jg,ig}^{\gamma} - W_{ju}(\gamma R) S_{ju,iu}^{\gamma}], \\ \widetilde{W}_{ie,ja} &= \frac{1}{2} [W_{jg}(R) S_{ig,jg}^{\gamma} - W_{ju}(R) S_{iu,ju}^{\gamma}], \\ \widetilde{W}_{ie,je} &= \frac{\gamma}{2} [W_{jg}(\gamma R) + W_{ju}(\gamma R)] \delta_{ij}.\end{aligned}\quad (57)$$

При получении выражений (57) использованы оба разбиения, (40а) и (40в), полного гамильтониана \hat{H} и введены обозначения

$$W_{ig,u} = E_{ig,u} + \frac{1}{R}.\quad (58)$$

Матрица T_{ij} кинетической энергии выражается через матричные элементы H_{ij} , Q_{ij} и $B_{im,jm'}$, введенные ранее (18), следующим образом:

$$\begin{aligned}2MT_{ij} &= \left[-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \right] \delta_{ij} \delta_{mm'} + \\ &+ \left[H_{ij}^{(0)} + \alpha H_{ij}^{(1)} + 2Q_{ij} \frac{d}{dR} \right] \delta_{mm'} + B_{im,jm'}.\end{aligned}\quad (59)$$

При построении матричных элементов операторов $H^{(0)}$ и $H^{(1)}$ используются формулы (17), (17а) и, кроме того, соотношения (40)-(42) и (44), (47):

$$\begin{aligned}H^{(0)} &= K^{(+)} - H^{(*)}, \\ K^{(\pm)} &= H^{(\pm)} + \frac{dQ^{(\pm)}}{dR},\end{aligned}\quad (60)$$

$$H_{ia,ja}^{(1)} = [K^{(-)} - 2H^{(*)}]_{ia,ja},$$

$$H_{ia,je}^{(1)} = [K^{(-)} + 2H^{(*)}]_{ia,je},$$

$$H_{ie,ja}^{(1)} = [K^{(-)} - 2H^{(*)}]_{ie,ja},$$

$$H_{ie,je}^{(1)} = [K^{(-)} + 2H^{(*)}]_{ie,je}.\quad (61)$$

Окончательно система уравнений для функций $\bar{\chi}_j$ принимает вид

$$\sum_j \left[\left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + 2ME_{n\tau} \right) \delta_{ij} - \bar{U}_{ij}(R) \right] \bar{\chi}_j = 0,\quad (62)$$

где вид матрицы \bar{U} эффективных потенциалов определяется формулами (17), (19), (48), (56)-(61).

$$\begin{aligned}\bar{U} &= 2M\bar{W} + \bar{H}^{(0)} + \alpha \bar{H}^{(1)} + \bar{B} + 2\bar{Q} \frac{d}{dR} + \\ &+ (S^+)^{-1} 2Q \frac{dS^+}{dR} - 2(S^+)^{-1} \frac{dS^+}{dR} - (S^+)^{-1} \frac{d^2 S^+}{dR^2}.\end{aligned}\quad (63)$$

Как следует из определений (48а), в пределе $R \rightarrow \infty$ справедливы соотношения

$$\begin{aligned}S_{ig,jg}^{\gamma}(\infty) &= S_{iu,ju}^{\gamma}(\infty), \\ S_{ie,ja}^{\gamma}(\infty) &= 0, \quad S_{ie,je}^{\gamma}(\infty) = \bar{S}_{ie,je}^{\gamma} = const.\end{aligned}\quad (64)$$

(Например, для основного состояния $\bar{S}_{ie,ie}^{\gamma} = \gamma^{3/2} \left(\frac{2}{1+\gamma} \right)^3$).

Кроме того, с учетом асимптотических равенств

$$G_{ij}(\infty) = \delta_{ij},$$

$$W_{jg}(\infty) = W_{ju}(\infty) = E_j(\infty) = -(2n^2)^{-1} \quad (65)$$

матрица потенциальной энергии \bar{W} при $R \rightarrow \infty$ приобретает вид

$$\bar{W}_{ij}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_j(\infty) \delta_{ij}. \quad (66)$$

Значения ($m_c = 1$)

$$\bar{W}_{ja,ja}(\infty) = E_j(\infty) = -\frac{m_a}{2n^2},$$

$$\bar{W}_{je,je}(\infty) = \gamma E_j(\infty) = -\frac{m_e}{2n^2} \quad (67)$$

совпадают в точности с энергиями изолированных атомов $m_c M_a$ и $m_c M_e$ в каждом из каналов реакции a и b , соответствующих системам координат на рис. 1 и 3.

Используя также асимптотические равенства^{/25,26/}

$$H_{ig,jg}^{(+)}(\infty) = H_{iu,ju}^{(+)}(\infty) = H_{ig,jg}^{(*)}(\infty) = H_{iu,ju}^{(*)}(\infty) =$$

$$= -\frac{1}{2} H_{ig,ju}^{(-)}(\infty) = -\frac{1}{2} H_{iu,jg}^{(-)}(\infty), \quad (68)$$

формулы преобразования (17) и определения (60) и (61), легко показать, что при $R \rightarrow \infty$

$$H_{ij}^{(0)}(\infty) = 0, \quad H_{ij}^{(1)}(\infty) = 0. \quad (69)$$

В результате матрица потенциальной энергии в асимптотической области равна

$$\bar{U}_{ij}(\infty) = 2M \bar{W}_{ij}(\infty) + 2 \bar{Q}_{ij}(\infty) \frac{d}{dR}. \quad (70)$$

Из равенства $Q_{ig,ju}(R) = -Q_{ju,ig}(R)$ и предельных соотношений (64) вытекает равенство $Q_{ii}(\infty) = 0$, откуда следует с учетом (66) и (67), что в пределе $R \rightarrow \infty$ в системе уравнений (62) в каждом из каналов a и b начало отсчета энергий $(2M)^{-1} \bar{U}_{ii}(\infty)$ определено правильно, т.е. совпадает с энергиями E_{ia} и E_{ib} (23).

5. Численный пример

В качестве иллюстрации изложенной схемы рассмотрим вычисление уровней энергии μ -мезомолекул водорода $pp\mu$ и $dd\mu$ в состояниях с полным моментом $J=0$. В этом случае $m_a = m_e$, $S_{ij}^{\gamma} = \delta_{ij}$ и уравнения несколько упрощаются, хотя общая схема остается неизменной. Параметр разложения $(2M)^{-1}$, который появляется в адиабатическом подходе, в случае мезомолекул не мал и равен 0,101212 и 0,053329 соответственно для молекул $pp\mu$ и $dd\mu$. Величина этого параметра определяет порядок величины вклада неадиабатических матричных элементов в полную энергию E_{nc} системы трех тел при вычислении ее в адиабатическом базисе. Метод вычисления, принятый в работе^{/13/}, позволяет найти вклад каждого из состояний $j = [n_1 n_2 m]$ задачи двух центров, по волновым функциям которой разлагается полная функция системы (9).

Полная энергия системы равна

$$E_{1r} = \tilde{E}_{1a} + \tilde{E}_{J\nu} = E_{1a} + E_{J\nu}, \quad (71)$$

причем

$$E_{J\nu} = E_{J\nu}^{(0)} + E_{J\nu}^{(2)},$$

$$E_{J\nu}^{(2)} = E_{\text{дискр.}}^{(2)} + E_{\text{непр.}}^{(2)},$$

$$E_{\text{дискр.}}^{(2)} = \sum_j E_j^{(2)} = \sum_{m=0} \sum_{n_2=0} \sum_{n_3=0} E_{n_1 n_2 m}^{(2)},$$

$$E_{\text{непр.}}^{(2)} = \sum_{m=0} \sum_{n_2=0} \int dk E_{n_2 m}^{(2)}(k). \quad (72)$$

Здесь $E_{J\nu}^{(0)}$ — энергия связи мезомолекул в состоянии с полным моментом J и колебательным квантовым числом ν , вычисленная в двухуровневом приближении, т.е. из системы уравнений (62) при $i=j=1$, а $E_{J\nu}^{(2)}$ — поправки второго приближения, обусловленные связью основного состояния $i=1$ задачи двух центров с высшими состояниями $j \neq 1$.

В таблицах I-3 приведены результаты вычислений для двух случаев разложения гамильтониана: (15) и (40a). Частичное сравнение разложений (15) и (2) приведено в работе /37/. Из анализа результатов расчетов следует, что при вычислении энергии связи системы трех тел разложения (15) и (40a) эквивалентны, однако сходимость разложения (40a) значительно лучше, чем разложения (15). Этот факт весьма важен, поскольку позволяет существенно ограничить размерность матрицы $\bar{V}_{ij}(R)$ эффективных потенциалов и, следовательно, размерность системы уравнений (62).

6. Заключение

В данной работе предложен и реализован последовательный метод выделения каналов реакций с перестройкой в системе трех частиц при описании их в адиабатическом базисе. С помощью унитарного преобразования S удается восстановить правильный предел диссоциации в обоих каналах, α и β , и одновременно с этим обратить в нуль недиагональные матричные элементы $H_{ij}(R)$ в асимптотической области. Подчеркнем, что условие $H_{ij}(R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$ выполняется в операторном смысле, т.е. для всех матричных элементов одновременно, и поэтому матрица $H_{ij}(\infty)$ не требует дополнительной диагонализации, как это предлагалось, например, в работе /28/. Из предыдущего следует, что трудности I и 3 Введения взаимообусловлены и вследствие этого устранение одной из них автоматически приводит к устранению другой.

Опираясь на этот результат, вполне логично предположить, что трудности 2, 3 и 4 также взаимообусловлены и что, построив преобразование, убирающее матричные элементы $\bar{Q}_{ij}(\infty)$, мы тем самым восстановим правильные импульсы в каждом из каналов реакции. Одновременно с этим устранение далекодействующих членов $\sim R^{-1}$ в потенциалах кориолисова взаимодействия $V_{i,m,j,m'}(R)$ и $H_{ij}^{(2)}(R)$ должно надлежащим образом исправить центробежный член в эффективных потенциалах системы уравнений (62). Иными словами, искомое преобразование осуществляет переход от эффективной массы M в системе уравнений (62) к правильным приведенным массам M_α и M_β в каждом из каналов реакции α и β . Как мы покажем в последующей работе, такое преобразование, действительно, можно построить и тем самым последовательно сформулировать задачу рассеяния в адиабатическом базисе.

В заключение выражаем благодарность Т.П.Пузыниной, К.В.Пузынину, Л.Н.Сомову за помощь и сотрудничество.

Таблица I

Составляющие полной энергии $E_{1\tau}$ мезомолекул $pp\mu$ и $dd\mu$ в состояниях с полным моментом J и колебательном состоянии ν x)

	$pp\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=1)$	
	m_*	m_a	m_*	m_a	m_*	m_a
E_{1a}	-2521,25	-2528,43	-2661,14	-2663,14	-2661,14	-2663,14
$\varepsilon_{J\nu}^{(0)}$	-249,35	-247,31	-323,09	-322,69	-33,09	-33,14
$\varepsilon_{\text{дискр.}}^{(2)}$	-7,42	-3,99	-2,44	-1,65	-3,01	-1,84
$\varepsilon_{\text{непр.}}^{(2)}$	-4,39	-1,49	-1,45	-0,65	-1,51	-0,69
$E_{J\nu}$	-261,16	-252,79	-326,98	-324,99	-37,61	-35,67
$E_{1\tau}$	-2782,41	-2781,22	-2988,12	-2988,13	-2698,75	-2698,81
$E_{1\tau}^{\text{вар.}}$						
$E_{1\tau}$		-2781,52 ^{xx)}		-2987,41 ^{xx)}		-2695,90 ^{xx)}

x) Все значения приведены в электрон-вольтах. Значения энергии связи $\varepsilon_{J\nu}^{(0)}$ в двухуровневом приближении, поправки $\varepsilon_{\text{дискр.}}^{(2)}$, $\varepsilon_{\text{непр.}}^{(2)}$ во втором порядке теории возмущений и значение $\varepsilon_{J\nu}^{(2)} = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon_{\text{дискр.}}^{(2)} + \varepsilon_{\text{непр.}}^{(2)}$ вычислены согласно алгоритму работы^{13/}. Значения вкладов, приведенные в колонках m_* и m_a , соответствуют выбору разбиений (15) и (40a) гамильтониана \hat{H} . При вычислениях использованы значения масс частиц $m_\mu = 206,769$, $M_p = 1836,152$, $M_d = 3670,481$ и значение $R_y = 13,60535 \text{ эВ}^{38/}$.

xx) Результаты вариационных расчетов, приведенные в работе^{39/}.

Таблица 2

Вклад $\varepsilon_j^{(2)}$ (эВ) различных состояний $j = [n_1 n_2 m]$ дискретного спектра задачи двух центров в энергию связи $\varepsilon_{J\nu}$ мезомолекул $pp\mu$ и $dd\mu$.

j	$pp\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=1)$		
	$[n_1 n_2 m]$	m_*	m_a	m_*	m_a	m_*	m_a
[100]		-1,80	-1,53	-0,76	-0,69	-0,83	-0,72
[010]		-4,25	-1,74	-1,19	-0,63	-1,66	-0,78
[200]		-0,30	-0,32	-0,13	-0,14	-0,15	-0,14
[110]		-0,70	-0,21	-0,22	-0,10	-0,23	-0,10
[020]		-0,00	-0,00	0,00	0,00	-0,01	-0,01
[300]		-0,11	-0,12	-0,05	-0,05	-0,05	-0,05
[210]		-0,26	-0,07	-0,09	-0,04	-0,08	-0,04
$\varepsilon_{\text{дискр.}}^{(2)}$		-7,42	-3,99	-2,44	-1,65	-3,01	-1,84

Таблица 3

Вклад $\varepsilon_{n_2 m}^{(2)}$ (эВ) различных состояний $c = [n_2 m]$ непрерывного спектра задачи двух центров в энергию связи $\varepsilon_{J\nu}$ мезомолекул $pp\mu$ и $dd\mu$.

c	$pp\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=0)$		$dd\mu (J=0, \nu=1)$		
	$[n_2 m]$	m_*	m_a	m_*	m_a	m_*	m_a
[00]		-0,84	-0,90	-0,37	-0,40	-0,34	-0,32
[10]		-2,65	-0,40	-0,88	-0,20	-0,58	-0,25
[20]		-0,79	-0,17	-0,18	-0,05	-0,47	-0,09
[30]		-0,11	-0,02	-0,02	-0,00	-0,12	-0,02
$\varepsilon_{\text{непр.}}^{(2)}$		-4,39	-1,49	-1,45	-0,65	-1,51	-0,69

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Bates D.R., Ledsham K., Stewart A.L. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1953, A246, 215. Bates D.R., Reid R.H.G. in "Advances in Atomic and Molec. Phys.", v. 1V, Ed. D.R. Bates and I. Esterman, Academic Press, New York and London, 1968.
2. Peek J.M. J. Chem. Phys., 1965, 43, 3004.
3. Hunter G., Gray B.F., Pritchard H.O. J. Chem. Phys., 1966, 45, 3806.
Hunter G., Pritchard H.O. J. Chem. Phys., 1967, 46, 2146.
4. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖЭТФ, 1967, 52, 1273;
Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВМ и МФ 1968, 8, 1256;
ОИЯИ Р4-5040, Дубна, 1970.
5. Teller E., Sahlin H.L. In "Physical Chemistry", v. 5, Ed. H. Eyring, Academic Press, New York, 1970.
6. Power J.D. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1973, A274, 663.
7. Ponomarev L.I., Somov L.N. J. Comp. Phys., 1976, 20, 183.
8. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, Наука, М., 1976.
9. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-10207, Р11-11218, Дубна, 1977.
10. Матвеевко А.В., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1975, 68, 920.
11. Матвеевко А.В., Пономарев Л.И., Файфман М.П. ЖЭТФ, 1975, 68, 437.
12. Винацкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Сомов Л.Н. ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.
13. Винацкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1977, 72, 1670.
14. Винацкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Файфман М.П. ОИЯИ Р4-10929, Дубна, 1977.
15. Мотт Н.Ф., Месси Г.С. Теория атомных столкновений, Мир, М., 1969.
16. Бу Т.Ю., Омута Т. Квантовая теория рассеяния, Мир, М., 1969.
17. Born M., Grött.Nachr., 1, 1951. Born M., Huang K., Dynamical theory of Crystal Lattices, The Clarendon Press, Oxford, England, 1954.
18. Smith F. Phys. Rev., 1969, 179, 111.
19. Patterson M.R., Becker R.L. Thesis, Oak Ridge National Laboratory, U.S.A., ORNL-TM-1850, 1967.
20. Pack R.T., Hirschfelder J.O., J. Chem. Phys. 1968, 49, 4009.
21. Halpern A.M., Phys. Rev., 1969, 186, 14.
22. Винацкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ, 1974, 20, 576.
23. Nielson H.H. Encyclopedia of Physics, v. 37, part. 1, p. 187, Springer-Verlag, Berlin, 1959.
24. Ситенко А.Г., Тартаковский В.К. Лекции по теории ядра, Атомиздат, 1972.
25. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitzky S.I., J. Phys. B, Atom and Molec. Phys., 1976, 9, 2255.
26. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П., Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р4-11185, Дубна, 1978.
27. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N., J. Phys. B.: Atom. and Molec. Phys., 1977, 10, 1335.
28. Матвеевко А.В., Пономарев Л.И., ТМФ, 1972, I, 64, ЯФ, 1972, 16, 3, 620.
29. Fröman A., J. Chem. Phys., 1962, 36, 1490.
30. Hunter G., Pritchard H.O., J. Chem. Phys., 1967, 46, 2153.
Hunter G., J. Chem. Phys., 1976, 64, 3213.
31. Bates D.R., Massey H.S.W., Stewart A.L., Proc. Roy. Soc., 1953, A216, 437; Bates D.R., McCarroll R., Proc. Roy. Soc., 1958, A245, 175.
32. Torson W.R., J. Chem. Phys. 1965, 42, 3878, 1969, 50, 1702.

33. Pack R.T., Hirschfelder J.O., J. Chem. Phys., 1970, 52, 521.
34. Chen J.C.Y., Ponce V.H., Watson K.M., J. Phys. B: Atom. and Molec. Phys., 1973, 6, 965.
35. Riera A., Salin A., J. Phys. B: Atom and Molec. Phys., 1976, 9, 2877.
36. Matveenko A.V., J. Phys. B, 9, 1419, 1976.
Matveenko A.V., Lovas I., JINR, E4-11024, Dubna, 1977.
37. Пономарев Л.И., Пузынин И.Б., Пузынина Т.П.
ЖЭТФ, 1973, 65, 28.
38. Cohen E.R., Taylor B.N., J. Phys. Chem. Ref. Data, 2, 663 (1973).
39. Carter B.P., Phys. Rev., 1968, 165, 139.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 февраля 1978 года.