

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



23/10-79

P4 - 12018

B-486

1477/2-79

С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович, Л.И.Пономарев

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ

С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

II. Эффективное двухуровневое приближение

1978

P4 - 12018

С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович,* Л.И.Пономарев

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ

С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

II. Эффективное двухуровневое приближение

Направлено в J. Phys. B



* Институт физики "Борис Кидрич", Белград,
Югославия.

Виницкий С.И., Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И. P4 - 12018

Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. II. Эффективное двухуровневое приближение

Предложено каноническое операторное преобразование бесконечномерной системы интегродифференциальных уравнений, представляющих движение системы трех тел в адиабатическом базисе, которое позволяет свести исходную задачу к решению конечного числа дифференциальных уравнений. В качестве примера приведена система двух связанных дифференциальных уравнений, которая представляет исходную бесконечномерную систему с точностью $\sim (2M)^{-2}$, где $M^{-1} = m_c/M_0$ - отношение массы отрицательно заряженной частицы c к приведенной массе положительно заряженных частиц a и b . Показано, что предложенное преобразование устраняет известные трудности постановки граничных условий в адиабатическом базисе. Обсуждается физический смысл преобразования и полученных решений.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Vinitsky S.I., Vukajlovic F.R., Ponomarev L.I. P4 - 12018

Adiabatic Representation of the Three-Body Problem with the Coulomb Interaction. II. Effective Two-Level Approximation

A canonical transformation of an infinite set of differential equations describing the motion of the three-body system in the adiabatic basis is suggested. This transformation allows one to reduce the initial problem to the solution of a finite set of differential equations. As an example, a system of two bound differential equations is constructed. It represents the initial infinite set of equations with the accuracy $O((2M)^{-2})$, where $M^{-1} = m_c/M_0$ is the ratio of the mass of the negative charged particle c to the reduced mass of two positive charged particles a and b . It is shown that the transformation suggested removes the difficulties in formulating the boundary conditions in adiabatic basis. The physical meaning of the transformation and solution obtained is discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubno 1978

I. Введение

Использование адиабатического базиса в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием позволяет свести исходное уравнение Шредингера для системы трех заряженных частиц (a, b, c) с массами ($M_a \gg M_b, M_c$) к системе обыкновенных интегродифференциальных уравнений (в единицах $e = \hbar = m_a = 1$, $m_a^{-1} = M_a^{-1} + M_c^{-1}$) /1,2/:

$$\left\{ \hat{I} \left(\frac{d^2}{dR^2} + 2ME_{n\tau} \right) - U_{ii}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i} U_{ij}(R) \chi_j(R),$$

$$\chi_j = \begin{pmatrix} \chi_{ja} \\ \chi_{je} \end{pmatrix}, U_{ij} = \begin{pmatrix} U_{ia,ja} & U_{ia,je} \\ U_{ie,ja} & U_{ie,je} \end{pmatrix}, \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{ij},$$

$$M = M_0/m_a, M_0^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}. \quad (I)$$

Здесь ($n\tau$) - полный набор квантовых чисел задачи трех тел, характеризующий движение (n) отрицательно заряженной частицы c и относительное движение (τ) ядер a и b ; R - расстояние между одноименно заряженными частицами a и b ; знак $\sum_{j \neq i}$ включает в себя суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектрам задачи двух центров, а матрица потенциалов $U(R) = \{ U_{ij}(R) \}$ имеет вид (все обозначения см. в /2-4/)

$$U(R) = \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \hat{I} + 2MW(R) + H(R) + \frac{dQ(R)}{dR} + B(R) + 2Q(R) \frac{d}{dR},$$

$$H(R) = H^{(0)}(R) + \alpha H^{(1)}(R) =$$

$$= \{H^{(+)}(R) - H^{(*)}(R)\} + \alpha \{H^{(-)}(R) - 2H^{(*)}(R)\},$$

$$\alpha = (M_b - M_a) / (M_b + M_a), \quad (2)$$

где

$$H_{ij}(R) + \frac{dQ_{ij}(R)}{dR} = \langle i | \mathcal{P}_R^2 + \vec{L}^2 R^{-2} | j \rangle - (1+\alpha)^2 H_{ij}^{(*)}(R),$$

$$H_{ij}^{(*)}(R) = \frac{1}{2} \langle i | -\frac{1}{2} \Delta \vec{r} | j \rangle, \quad Q_{ij}(R) = -i \langle i | \mathcal{P}_R | j \rangle,$$

$$B_{im, jm'}(R) = -\gamma_{mm'}^J b_{im, jm'}(R),$$

$$H_{ij}(R) = H_{ji}(R), \quad Q_{ij}(R) = -Q_{ji}(R), \quad b_{im, jm'}(R) = b_{jm', im}(R),$$

$$\gamma_{mm'}^J = (1 + \delta_{m0} \delta_{m'1} + \delta_{m'0} \delta_{m1})^{1/2} \left[\{(J-m+1)(J+m)\}^{1/2} \delta_{m', m-1} + \{(J+m+1)(J-m)\}^{1/2} \delta_{m', m+1} \right],$$

$$b_{im, jm \mp 1}(R) = R^{-2} \langle im | L_{\pm} | jm \mp 1 \rangle,$$

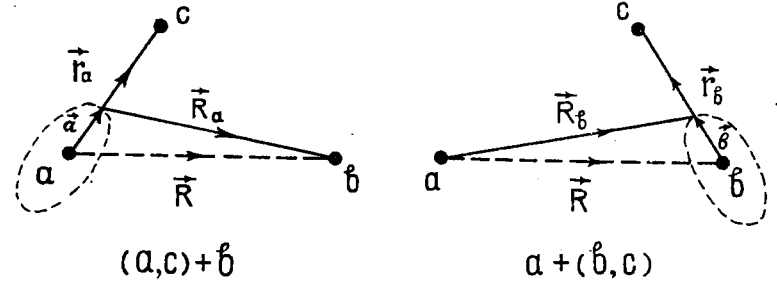
$$\mathcal{P}_R = -i \frac{\vec{R}}{R} (\nabla_{\vec{R}} + \frac{\alpha}{2} \nabla_{\vec{r}}), \quad \vec{L} = -i \left\{ (\vec{r} - \frac{\alpha}{2} \vec{R}) \times \nabla_{\vec{r}} \right\},$$

$$\vec{L}^2 = \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2, \quad (2a)$$

$$L_{\pm} = \vec{L} \cdot \vec{e}_{\pm}, \quad \vec{e}_{\pm} = \vec{e}_{\theta} \pm i \vec{e}_{\phi}, \quad \vec{R} = R \vec{e}_R.$$

$\vec{e}_R, \vec{e}_{\theta}, \vec{e}_{\phi}$ - сферические орты вектора \vec{R} .

Как известно, непосредственная попытка согласовать физические граничные условия задачи трех тел с асимптотикой решений системы (I) наталкивается на определенные трудности, а именно: неверный предел диссоциации системы (a, b, c) при ее развале на подсистемы $(a, c) + b$ и $a + (b, c)$ (см. рисунок);



неверный импульс в каналах a и b , соответствующих процессам рассеяния $(a, c) + b$ и $a + (b, c)$; конечность и далекодействующий характер недиагональных потенциалов $U_{ij}(R)$ при $R \rightarrow \infty$.

В предыдущей работе [2] было построено преобразование $S(R)$ адиабатического базиса $|i\rangle$, позволяющее восстановить правильные пределы диссоциации в каналах a и b . Дополнительное исследование показало, что для этой цели достаточно использовать асимптотически унитарное преобразование

$$\bar{S} = \lim_{R \rightarrow \infty} S(R),$$

$$\bar{Y}(R) = \bar{S} Y(R), \quad \bar{U}(R) = \bar{S} U(R) \bar{S}^+, \quad (3)$$

которое обращает в нуль недиагональные матричные элементы $\bar{H}_{ij}^{(0)}(\infty)$ и $\bar{H}_{ij}^{(2)}(\infty)$, в результате чего матрица эффективных потенциалов в асимптотической области приобретает вид [2-4]

$$(2M)^{-1} \bar{U}_{ij}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_{ij}(\infty) \delta_{ij} +$$

$$+ (2M)^{-1} \begin{pmatrix} 1+\alpha & 0 \\ 0 & -\gamma(1-\alpha) \end{pmatrix} 2Q_{ij}(\infty) (1-\delta_{ij}) \frac{d}{dR} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_{ij}(\infty) \delta_{ij} - i \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & -\beta \end{pmatrix} \{P_z(\infty)\}_{ij} (1-\delta_{ij}) \frac{d}{dR}, \quad (4)$$

где

$$\gamma = m_\beta / m_\alpha = \left(1 - \frac{\alpha}{M}\right)^{-1}, \quad m_\alpha^{-1} = M_\alpha^{-1} + M_c^{-1}, \quad m_\beta^{-1} = M_\beta^{-1} + M_c^{-1},$$

$$\alpha = \frac{1+\alpha}{2M} = \frac{M_c}{M_\alpha + M_c} = \frac{m_\alpha}{M_\alpha}, \quad \beta = \gamma \frac{1-\alpha}{2M} = \frac{M_c}{M_\beta + M_c} = \frac{m_\beta}{M_\beta},$$

$$2Q_{ij}(\infty) = -i \left\{ P_z(\infty) \right\}_{ij} = \lim_{R \rightarrow \infty} \langle i | -\frac{\partial}{\partial z} | j \rangle = \{ E_i(\infty) - E_j(\infty) \} \langle i | z | j \rangle. \quad (4a)$$

В данной работе построено преобразование $T(R)$, которое с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ диагонализует матрицу потенциалов $\bar{U}(R)$ во всей области изменения R , т.е. сводит ее к системе двух уравнений ($i = i_\alpha, i_\beta$) (в дальнейшем, если это не оговорено особо, мы везде используем единицы $e = \hbar = m_\alpha = 1$)

$$\left\{ (2M)^{-1} \mu_{ii}^{-1}(R) \frac{d^2}{dR^2} + E_{nc} \hat{I} - \tilde{U}_{ii}(R) \right\} \tilde{\chi}_i(R) = 0, \quad (5)$$

$$\tilde{\chi}(R) = T(R) \bar{\chi}(R), \quad \tilde{U}(R) = T(R) (2M)^{-1} \bar{U}(R) T^{-1}(R), \quad (5a)$$

причем с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$

$$\tilde{U}_{ij}(R) = \begin{pmatrix} \tilde{U}_{i_\alpha, j_\alpha}(R) & \tilde{U}_{i_\alpha, j_\beta}(R) \\ \tilde{U}_{i_\beta, j_\alpha}(R) & \tilde{U}_{i_\beta, j_\beta}(R) \end{pmatrix} \delta_{ij}. \quad (5b)$$

В асимптотической области $R \rightarrow \infty$ имеют место предельные соотношения

$$\tilde{Q}_{ii}(\infty) = 0,$$

$$\tilde{U}_{ii}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_i(\infty) = \begin{pmatrix} E_{i_\alpha} & 0 \\ 0 & E_{i_\beta} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где в единицах $e = \hbar = M_c = 1$

$$E_{i_\alpha} = -m_\alpha / 2n^2, \quad E_{i_\beta} = \gamma E_{i_\alpha} = -m_\beta / 2n^2,$$

а n - главное квантовое число состояния $|i\rangle$ изолированных атомов (α, c) и (β, c). Одновременно с этим в матрице $\tilde{U}(R)$

исчезают недиагональные дальнедействующие потенциалы $\tilde{U}_{ij}(R) \sim R^{-1}$ которые присутствуют в матрице $\bar{U}(R)$, а члены $\sim R^{-2}$ корректируются таким образом, что восстанавливается правильное выражение для центробежного члена в обоих каналах, α и β .

Структура матрицы $\mu_{ii}(R)$ такова, что при $R \rightarrow \infty$

$$M \begin{pmatrix} \mu_{i_\alpha, i_\alpha}(R) & \mu_{i_\alpha, i_\beta}(R) \\ \mu_{i_\beta, i_\alpha}(R) & \mu_{i_\beta, i_\beta}(R) \end{pmatrix} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} M_\alpha & 0 \\ 0 & M_\beta \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где

$$M_\alpha^{-1} = m_\alpha \left\{ (M_c + M_\alpha)^{-1} + M_c^{-1} \right\}, \quad M_\beta^{-1} = m_\beta \left\{ M_\alpha^{-1} + (M_c + M_\beta)^{-1} \right\}$$

суть приведенные массы систем $(\alpha, c) + \beta$ и $\alpha + (\beta, c)$ соответственно. Из соотношений (6) и (7) следует, что преобразование $T(R)$ в асимптотической области $R \rightarrow \infty$ восстанавливает правильные импульсы в каналах α и β :

$$k_\alpha^2 = 2M_\alpha \varepsilon_\alpha, \quad k_\beta^2 = 2M_\beta \varepsilon_\beta,$$

$$\varepsilon_\alpha = E_{nc} - E_{i_\alpha}, \quad \varepsilon_\beta = E_{nc} - E_{i_\beta}. \quad (8)$$

Систему уравнений (5) будем называть эффективным двухуровневым приближением задачи трех тел в адиабатическом представлении.

Преобразование $T(R)$ может быть построено с любой степенью точности по параметру $(2M)^{-1}$. Однако при практической его реализации разумно ограничиться вторым порядком теории возмущений. В этом случае преобразование $T = T(R)$ реализуется в виде последовательности двух преобразований:

$$T = T^{(2)} T^{(1)} = e^{i\bar{\Lambda}^{(2)}} e^{i\bar{\Lambda}^{(1)}}, \quad (9)$$

каждое из которых содержит параметр малости $(2M)^{-1}$, а генераторы $\bar{\Lambda}^{(n)}$ определяются из условий диагональности преобразованного потенциала $\tilde{U}_{ii}(R)$ в соответствующем порядке теории возмущений.

Преобразования подобного типа использовались еще Ван Флеком^{6/} при рассмотрении Λ - удвоения в спектре двухатомных молекул, Тхаррасом^{7/} при построении потенциала взаимодействия, зависящего от скорости, Моргенсоном и Педерсеном^{8/} в задачах квантовой химии, Гартенхаузом и Шварцем^{9/}, Хирокой и Сунакавой^{10/}, Крайчиком и Фолди^{11/} и многими другими авторами для выделения движения центра масс составных систем.

Преобразование (9) является операторным и по смыслу близко к преобразованию Фолди-Воткхойзена^{5/}, с помощью которого уравнение Дирака можно привести к двухкомпонентной форме. Отмеченную аналогию можно продолжить достаточно далеко, принимая во внимание соответствие величин: $\vec{\alpha} \rightarrow \vec{p}$, $\beta \rightarrow E$, где $\vec{\alpha}$ и β - известные матрицы Дирака.

В пределе $R \rightarrow \infty$ преобразование (9) принимает вид матричной "трансляционной экспоненты"

$$T_{ij}(\infty) = \lim_{R \rightarrow \infty} T_{ij}(R) = \left\{ e^{i\vec{\Lambda}^{(s)}} \right\}_{ij} = \begin{pmatrix} e^{i\vec{a}\vec{\nabla}_R} & 0 \\ 0 & e^{-i\vec{b}\vec{\nabla}_R} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $\vec{a} = a\vec{r}_a$, $\vec{b} = b\vec{r}_c$, а величины a и b определены формулами (4а) и представляют собой величину сдвига из ядер a и b в центры масс атомов (a, c) и (b, c) . Преобразование, обратное (10), рассмотрено в работе Матвеевко и Ловаша^{12/}.

Исторически первой попыткой исправить асимптотику адиабатических решений было введение "трансляционной экспоненты" Бейтсом и Мак Керролом^{13/}. Этот подход в дальнейшем развивали Бейтс и Хольт, Бейтс и Спревак^{14/}, Шнейдерман^{15/}, Торсон^{16/} и др.; Чен и др.^{17/} вводили трансляционную экспоненту на основе эйконала в технике проекционных операторов Гешбаха^{18/}, а Шмид^{19/} обсуждал ее связь с унитарными преобразованиями.

Другой подход был предложен Паком и Хиршфельдером^{20/} под названием "the best adiabatic approximation", в настоящее время развиваются его различные варианты: "the post adiabatic approximation" Клара и Фано^{21/}, "the non-adiabatic pseudo-potential" Хантера и Бишоп^{22/}, "a diagonalisation treatment of the electron translation effect" Албата и Груена^{23/} (идея которого предложена Розенталем^{24/}) и др. Основная идея этих подходов состоит в факторизации волновой функции системы трех тел и диагонализации исходной системы потенциалов.

Подход, предлагаемый в данной работе, объединяет в себе идею "the best adiabatic approximation" с идеей введения "трансляционной экспоненты" на основе преобразования (9). Показано, что с помощью одного этого преобразования можно решить обе задачи одновременно: диагонализировать матрицу потенциалов $\bar{U}(R)$ и восстановить правильные импульсы k_i в каналах реакции.

2. Диагонализация системы уравнений

Систему уравнений (I) после преобразования (3), восстанавливающего правильные пределы диссоциации в каналах a и b , представим в виде

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + 2M(E_{nc}\hat{I} - U_{ii}) \right\} \chi_i^{(o)} = \sum_{j \neq i} u_{ij} \chi_j^{(o)}, \quad (II)$$

где введены обозначения:

$$\chi_j^{(o)} = \bar{\chi}_j(R),$$

$$U_{ii} = (2M)^{-1} \bar{U}_{ii}(R) = V_{ii} + (2M)^{-1} \left\{ \frac{dQ_{ii}}{dR} + 2Q_{ii} \frac{d}{dR} \right\},$$

$$u_{ij} = \bar{U}_{ij}(R) = v_{ij} + \frac{dq_{ij}}{dR} + 2q_{ij} \frac{d}{dR},$$

$$V_{ii} = \bar{E}_i(R) + \frac{1}{R} + (2M)^{-1} \left\{ \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \hat{I} + \bar{H}_{ii}(R) \right\},$$

$$Q_{ii} = \bar{Q}_{ii}(R), \quad v_{ij} = \bar{H}_{ij}(R) + \bar{B}_{ij}(R), \quad q_{ij} = \bar{Q}_{ij}(R). \quad (I2)$$

Преобразованная функция

$$\bar{\chi}^{(s)} = e^{i\vec{\Lambda}^{(s)}} \chi^{(o)} \quad (I3)$$

удовлетворяет системе уравнений:

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + 2M(E_{nc}\hat{I} - \bar{U}_{ii}^{(s)}) \right\} \bar{\chi}_i^{(s)} = \sum_{j \neq i} \bar{u}_{ij}^{(s)} \bar{\chi}_j^{(s)}, \quad (I4)$$

где с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ по $\bar{\Lambda}^{(s)}$

$$\bar{U}_{ii}^{(s)} = U_{ii} + i(2M)^{-1} [\bar{\Lambda}^{(s)}, u]_{ii} + \frac{i^2}{2} [\bar{\Lambda}^{(s)}, [\bar{\Lambda}^{(s)}, U]]_{ii},$$

$$\bar{u}_{ij}^{(s)} = u_{ij} + i[\bar{\Lambda}^{(s)}, 2MU]_{ij} + \frac{i^2}{2} [\bar{\Lambda}^{(s)}, [\bar{\Lambda}^{(s)}, 2MU]]_{ij} + i[\bar{\Lambda}^{(s)}, u]_{ij} - i[\bar{\Lambda}^{(s)}, \frac{d^2}{dR^2}]_{ij}. \quad (I4a)$$

Чтобы исключить недиагональные члены $\sim (2M)^{-1}$ в потенциалах (I4a) достаточно положить*

$$i[\bar{\Lambda}^{(2)}, U]_{ij} = -(2M)^{-1} u_{ij}, \quad (I5)$$

где, как обычно, $\bar{\Lambda}_{ij}^{(2)}$, U_{ii} и u_{ij} - двумерные матрицы вида (Ia). Однако решить непосредственно это операторное уравнение не представляется возможным, и мы найдем $\bar{\Lambda}^{(2)}$ методом последовательных приближений. Для этого преобразование $T^{(2)}$ представим в виде произведения двух преобразований:

$$T^{(2)} = e^{i\bar{\Lambda}^{(2)}} = e^{i\Lambda^{(2)}} e^{i\Lambda^{(2)}}. \quad (I6)$$

Генератор $\Lambda^{(2)}$ определим из системы уравнений, которая следует из соотношения

$$i[\Lambda^{(2)}, V]_{ij} = -(2M)^{-1} u_{ij}, \quad (I7)$$

которое в развернутой записи имеет вид

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{ia,ja}^{(2)} & \Lambda_{ia,jb}^{(2)} \\ \Lambda_{ib,ja}^{(2)} & \Lambda_{ib,jb}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{ja,ja} & V_{ja,jb} \\ V_{jb,ja} & V_{jb,jb} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} V_{ia,ia} & V_{ia,ib} \\ V_{ib,ia} & V_{ib,ib} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_{ia,ja}^{(2)} & \Lambda_{ia,jb}^{(2)} \\ \Lambda_{ib,ja}^{(2)} & \Lambda_{ib,jb}^{(2)} \end{pmatrix} = \\ = i(2M)^{-1} \begin{pmatrix} u_{ia,ja} & u_{ia,jb} \\ u_{ib,ja} & u_{ib,jb} \end{pmatrix}. \quad (I8)$$

Приводя его к виду, в котором все операторы $\Lambda_{ij}^{(2)}$ стоят справа от потенциалов V_{ii} , и отбрасывая все возникающие при этом приведении коммутаторы, приходим к следующему уравнению для определения $\Lambda_{ij}^{(2)}$:

$$i \sum_{\beta=1}^4 \Gamma_{\alpha\beta}^{-1} \Lambda_{\beta}^{(2)} = (2M)^{-1} u_{\alpha}, \quad (I9)$$

* Такое определение генератора $\bar{\Lambda}_{ij}^{(2)}$ соответствует частичному учету вкладов третьего порядка в матрице потенциалов $\bar{U}_{ii}^{(2)}$.

в котором все величины представлены в четырехкомпонентном виде, причем последовательности индексов $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$ (при фиксированных i и j) соответствует последовательность $(ia, ja), (ib, ja), (ia, jb), (ib, jb)$. Матрица Γ^{-1} имеет вид

$$(\Gamma^{-1})_{\alpha\beta}^{ij} \equiv (\Gamma^{-1})_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} V_{ia,ia} - V_{ja,ja} & V_{ia,ib} & -V_{jb,ja} & 0 \\ V_{ib,ia} & V_{ib,ib} - V_{ja,ja} & 0 & -V_{jb,ja} \\ -V_{ja,ib} & 0 & V_{ia,ia} - V_{jb,jb} & V_{ia,ib} \\ 0 & -V_{ja,ib} & V_{ib,ia} & V_{ib,ib} - V_{jb,jb} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Решая систему уравнений (I9), получим:

$$i\Lambda_{\alpha}^{(2)} = (2M)^{-1} \sum_{\beta=1}^4 \Gamma_{\alpha\beta} u_{\beta} = (2M)^{-1} (\Gamma u)_{\alpha}, \quad (21)$$

где

$$\Gamma \Gamma^{-1} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad \left\{ \Lambda^{(2)} \right\}_{\alpha}^{ij} = \begin{pmatrix} \Lambda_{ia,ja}^{(2)} \\ \Lambda_{ib,ja}^{(2)} \\ \Lambda_{ia,jb}^{(2)} \\ \Lambda_{ib,jb}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{ia,ja}^{(2)} & \Lambda_{ia,jb}^{(2)} \\ \Lambda_{ib,ja}^{(2)} & \Lambda_{ib,jb}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Замена генератора $\bar{\Lambda}^{(2)}$ на генератор $\Lambda^{(2)}$ в правой части равенств (I4a) приводит с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ к следующим выражениям для эффективных потенциалов:

$$U_{ii}^{(2)} = U_{ii} + \frac{i}{2} (2M)^{-1} [\Lambda^{(2)}, u]_{ii} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(2)}, (\chi^{(2)} V)]_{ii}, \\ u_{ij}^{(2)} = i(\chi^{(2)} 2MV)_{ij} + \frac{i}{2} [\Lambda^{(2)}, u]_{ij} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(2)}, (\chi^{(2)} 2MV)]_{ij} + \\ + \left[\Lambda^{(2)}, \frac{dQ}{dR} + 2Q \frac{d}{dR} \right]_{ij} - i \left[\Lambda^{(2)}, \frac{d^2}{dR^2} \right]_{ij}, \quad (23)$$

где $\chi^{(2)}$ - дифференциальная часть генератора $\Lambda^{(2)}$,

$$i\chi_{\alpha}^{(2)} = (2M)^{-1} \sum_{\beta=1}^4 \Gamma_{\alpha\beta} 2q_{\beta} \frac{d}{dR} = (2M)^{-1} (\Gamma \cdot 2q)_{\alpha} \frac{d}{dR}. \quad (24)$$

Преобразование, соответствующее генератору $\Lambda^{(2)}$, приводит к следующему уравнению для функции

$$\chi^{(2)} = e^{i\Lambda^{(2)}} e^{i\Lambda^{(1)}} \chi^{(0)}, \quad (25)$$

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + 2M (E_{nc} \hat{I} - U_{ii}^{(2)}) \right\} \chi_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} u_{ij}^{(2)} \chi_j^{(2)}, \quad (26)$$

где с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ по $\Lambda^{(2)}$

$$\begin{aligned} U_{ii}^{(2)} &= U_{ii}^{(1)} + i(2M)^{-1} [\Lambda^{(2)}, u^{(1)}]_{ii} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(2)}, [\Lambda^{(2)}, U^{(1)}]]_{ii}, \\ u_{ij}^{(2)} &= u_{ij}^{(1)} + i [\Lambda^{(2)}, 2MU^{(1)}]_{ij} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(2)}, [\Lambda^{(2)}, 2MU^{(1)}]]_{ij} + \\ &+ i [\Lambda^{(2)}, u^{(1)}]_{ij} + i [\Lambda^{(2)}, \frac{dQ}{dR} + 2Q \frac{d}{dR}]_{ij} - i [\Lambda^{(2)}, \frac{d^2}{dR^2}]_{ij}; \end{aligned} \quad (26a)$$

Генератор $\Lambda^{(2)}$ определяется из уравнения

$$i [\Lambda^{(2)}, V]_{ij} = -i (\chi^{(1)} \cdot V)_{ij}, \quad (27)$$

решая которое, получим с учетом определений (20), (22):

$$i \Lambda_{\alpha}^{(2)} = i \sum_{\beta=1}^4 \Gamma_{\alpha\beta} (\chi^{(1)} \cdot V)_{\beta} = i (\Gamma \cdot (\chi^{(1)} \cdot V))_{\alpha}. \quad (28)$$

Такой выбор генератора $\Lambda^{(2)}$ исключает член $i(\chi^{(1)} 2MV)_{ij}$ в потенциалах $u_{ij}^{(2)}$, появившийся вследствие замены $\bar{\Lambda}^{(1)} \rightarrow \Lambda^{(1)}$ в выражениях (14a).

Функции $\chi_i^{(2)}$ и потенциалы $U_{ii}^{(2)}$ и $u_{ij}^{(2)}$ лишь членами порядка $\sim (2M)^{-3}$ отличаются от функций $\chi_i^{(1)}$ и потенциалов $\bar{U}_{ii}^{(1)}$ и $\bar{u}_{ij}^{(1)}$ в уравнении (14). Их явный вид следует из соотношений (26a) и (27):

$$\begin{aligned} U_{ii}^{(2)} &= U_{ii} + \frac{i}{2} (2M)^{-1} [\Lambda^{(1)}, u]_{ii} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}, (\chi^{(1)} \cdot V)]_{ii}, \\ u_{ij}^{(2)} &= \frac{i}{2} [\Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}, u]_{ij} + \frac{i^2}{2} [\Lambda^{(1)}, (\chi^{(1)} 2MV)]_{ij} + \\ &+ i [\Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}, \frac{dQ}{dR} + 2Q \frac{d}{dR}]_{ij} - i [\Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)}, \frac{d^2}{dR^2}]_{ij}. \end{aligned} \quad (29)$$

Преобразование $T^{(2)}$, диагонализующее матрицу $u_{ij}^{(2)}$ с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$, можно построить с помощью трех генераторов $\Lambda^{(n)}$, $n = 3, 4, 5$:

$$T^{(2)} = e^{i\bar{\Lambda}^{(2)}} = e^{i\Lambda^{(5)}} e^{i\Lambda^{(4)}} e^{i\Lambda^{(3)}}. \quad (30)$$

Отбрасывая согласно принятому условию члены $O\{(2M)^{-3}\}$ для функции

$$\chi^{(5)} = T^{(2)} \chi^{(2)}, \quad (31)$$

получим следующее уравнение:

$$\left\{ \hat{I} \frac{d^2}{dR^2} + 2M (E_{nc} \hat{I} - U_{ii}^{(5)}) \right\} \chi_i^{(5)} = 0. \quad (32)$$

Преобразование (30) изменяет в диагональных потенциалах $U_{ii}^{(2)}$ лишь члены $\sim (2M)^{-3}$, что находится за пределами принятой точности. Таким образом, с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ справедливы равенства

$$\tilde{U}_{ii} = U_{ii}^{(5)} = U_{ii}^{(2)}, \quad u_{ij}^{(5)} = 0, \quad \tilde{\chi}_i = \chi_i^{(5)}. \quad (33)$$

Принимая во внимание соотношения (16) и (30), можно убедиться, что с той же степенью точности уравнения (32) и (5) эквивалентны.

Подставляя в выражение (29) для потенциалов $U_{ii}^{(2)}$ явный вид генератора $\Lambda^{(4)}$, $\Lambda^{(2)}$ и $\chi^{(1)}$, придем к уравнению

$$\left\{ (2M)^{-1} \mu_{ii}^{-1}(R) \frac{d^2}{dR} + E_{nc} \hat{I} - \tilde{U}_{ii}(R) \right\} \tilde{\chi}_i(R) = 0, \quad (5)$$

где матрицы $\mu_{ii}(R)$ и $\tilde{U}_{ii}(R)$ определены формулами

$$\mu_{ii}^{-1}(R) = \hat{I} - 2(2M)^{-1} \sum_{j \neq i} \left\{ (\Gamma \cdot \eta)_{ij} \eta_{ji} - \eta_{ij} (\Gamma \cdot \eta)_{ji} \right\}, \quad (34)$$

$$\mu_{ii}(R) \mu_{ii}^{-1}(R) = \hat{I},$$

$$\tilde{U}_{ii}(R) = \tilde{V}_{ii}(R) + (2M)^{-1} 2\tilde{Q}_{ii}(R) \frac{d}{dR};$$

$$\tilde{u}_{ij} = v_{ij} + q'_{ij}, \quad q'_{ij} = \frac{dq_{ij}}{dR},$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{ii}(R) = & \bar{V}_{ii}(R) + (2M)^{-1} \frac{d\bar{Q}_{ii}(R)}{dR} + \\ & + \frac{1}{2} (2M)^{-2} \sum_j \left[(\Gamma \cdot \tilde{\alpha})_{ij} \left\{ \tilde{\alpha} + 2((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V') \right\}_{ji} - \left\{ \tilde{\alpha} + 2((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V') \right\}_{ij} (\Gamma \cdot \tilde{\alpha})_{ji} \right. \\ & + 2(\Gamma \cdot \varphi)_{ij} \left\{ \tilde{\alpha} + 2((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V') \right\}_{ji} - 2q_{ij}(\Gamma \cdot \tilde{\alpha})'_{ji} + \\ & \left. + 4 \left\{ (\Gamma \cdot ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V'))_{ij} ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V')_{ji} - ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V')_{ij} (\Gamma \cdot ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V'))_{ji} \right\} \right], \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{ii}(R) = & \bar{Q}_{ii}(R) - (2M)^{-1} \sum_j \left[(\Gamma \cdot \varphi)_{ij} q'_{ji} - q_{ij} (\Gamma \cdot \varphi)'_{ji} + \right. \\ & + \frac{1}{2} \left\{ (\Gamma \cdot \varphi)_{ij} \tilde{\alpha}'_{ji} - \tilde{\alpha}'_{ij} (\Gamma \cdot \varphi)_{ji} + (\Gamma \cdot \tilde{\alpha})_{ij} q_{ji} - q_{ij} (\Gamma \cdot \tilde{\alpha})_{ji} \right\} + \\ & \left. + (\Gamma \cdot \varphi)_{ij} ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V')_{ji} - ((\Gamma \cdot \varphi) \cdot V')_{ij} (\Gamma \cdot \varphi)_{ji} \right]. \end{aligned} \quad (36)$$

Произведения в круглых скобках $(\Gamma \cdot \varphi)$, $(\Gamma \cdot \tilde{\alpha})$ и т.д. следует понимать в смысле определения (21), а переход $(\Gamma \cdot \varphi)_{\alpha} \rightarrow (\Gamma \cdot \varphi)_{ij}$ и т.д. (22) от четырехвекторов к матрицам 2x2 осуществляется по изложенным выше правилам соответствия. Символ \sum включает в себя суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектрам задачи двух центров:

$$\sum_j = \sum_{m=0} \sum_{n_2=0} \left\{ \sum_{n_1=0}^{k_s} + \sum_{s=1} \int_{k_{s-1}}^{k_s} dk \right\}, \quad (37)$$

где n_1, n_2, m - параболические квантовые числа состояния изолированных атомов (a, c) и (b, c) , а интеграл по непрерывному спектру представлен в виде суммы, как в работах^{25,26/}

3. Граничные условия

При $i = n = 1$, т.е. при описании системы трех тел, находящейся в основном состоянии по движению частицы c , система двух уравнений (5) относительно функций \tilde{X}_{1a} и \tilde{X}_{1b} с потенциалами (34)-(36) представляет собой эффективное двухуровневое приближение задачи трех тел в адиабатическом представлении с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$. Она получается как результат проектирования системы интегродифференциальных уравнений (I) в два наинизших состояния.

Покажем теперь, что решения \tilde{X}_{1a} и \tilde{X}_{1b} системы уравнений (5) в отличие от решений \tilde{X}_1 системы (I) удовлетворяют правильным граничным условиям задачи рассеяния.

Прежде всего, из определений (12), (20) и формул (4), (4a) следуют асимптотические равенства

$$\begin{aligned} V_{ii}(\infty) = & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_i, \quad E_i \equiv E_i(\infty), \quad v_{ij}(\infty) = 0, \\ (2M)^{-1} 2q_{ij}^{\infty} = & \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -b \end{pmatrix} \langle i | -\frac{\partial}{\partial z} | j \rangle = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -b \end{pmatrix} 2q_{ij}(\infty) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -b \end{pmatrix} (E_i - E_j) \langle i | z | j \rangle, \\ \Gamma_{ij} = & \begin{pmatrix} (E_i - E_j)^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\gamma E_i - E_j)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (E_i - \gamma E_j)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma^{-1} (E_i - E_j)^{-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (38)$$

откуда в соответствии с равенством (34) следует соотношение:

$$\begin{aligned} M_{ii}^{-1}(\infty) = & \hat{I} - 2M \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & \gamma^{-1} b^2 \end{pmatrix} \frac{1}{4} \sum_j \frac{q_{ij}(\infty) q_{ji}(\infty)}{E_i - E_j}, \\ i \Lambda_{ij}^{(1)}(\infty) = & \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -\gamma^{-1} b \end{pmatrix} \langle i | z | j \rangle (1 - \delta_{ij}) \frac{d}{dR}. \end{aligned} \quad (39)$$

С учетом правила сумм^{27/}

$$\frac{1}{4} \sum_j \frac{q_{ij}(\infty) q_{ji}(\infty)}{E_i - E_j} = \sum_j \langle i | \frac{\partial}{\partial z} | j \rangle \langle j | z | i \rangle = \frac{1}{2}, \quad (40)$$

которое справедливо при использовании полного набора $|j\rangle$, т.е. при суммировании по всему дискретному и интегрировании по непрерывному спектрам задачи двух центров, при $R \rightarrow \infty$ окончательно получим:

$$M^{-1} M_{ii}^{-1}(\infty) = \begin{pmatrix} M^{-1} - (m_a/M_a)^2 & 0 \\ 0 & M^{-1} - \gamma^{-1} (m_b/M_b)^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_a^{-1} & 0 \\ 0 & M_b^{-1} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Таким образом, в пределе $R \rightarrow \infty$ преобразование (5a) восстанавливает в уравнении (5) правильные импульсы (8) в каналах реакции a и b :

$$2M\mu_{ii}(\infty)\{E_{nc}\hat{I} - \tilde{U}_{ii}(\infty)\} = \\ = 2 \begin{pmatrix} M_a & 0 \\ 0 & M_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{nc} - E_{ia} & 0 \\ 0 & E_{nc} - E_{ib} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_{ia}^2 & 0 \\ 0 & k_{ib}^2 \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Подчеркнем, что этот результат, полученный во втором порядке теории возмущений по параметру $(2M)^{-1}$, в действительности является точным, поскольку все члены $\sim (2M)^{-3}$ и выше, возникающие в потенциалах $\tilde{U}_{ij}(R)$ от генераторов $\Lambda^{(3)}$, $\Lambda^{(4)}$, $\Lambda^{(5)}$ и т.д., обращаются в нуль в асимптотической области $R \rightarrow \infty$ и приводят лишь к изменению функции $\tilde{X}_i(R)$.

На первый взгляд этот результат может показаться удивительным даже при использовании полноты набора $|j\rangle$, однако атом водорода представляет собой систему, для которой можно строить точные решения^{/29/} по теории возмущений.

Отметим, что с помощью операции суммирования типа (40) в работе Теллера и Сахлина^{/30/} при рассмотрении атома водорода в адиабатическом представлении суммарная масса атома $M_p + m_e$, соответствующая движению атома как целого, была восстановлена лишь с точностью $O\{(m_e/M_p)^2\}$. Точную массу таким способом им не удалось получить, поскольку предварительно не была сформирована приведенная масса m_e . В работе^{/31/} для решения той же задачи^{/30/} было предложено преобразование $\{\exp(-i\vec{b}\vec{K})\}_{ij}$, где \vec{K} - импульс центра масс атома водорода, аналогичное преобразованию $T(\infty)$ в виде (II) для канала β .

Покажем теперь, что одновременно с восстановлением правильных импульсов в каналах α и β преобразование (5a) исправляет также приведенную массу M при центробежном потенциале $\{J(J+1) - 2m^2\}/2MR^2$. Для этого выпишем явный вид членов $\sim R^{-1}$ и $\sim R^{-2}$ в потенциалах $\tilde{V}_{ij}(R)$ при $R \gg 1$, который следует из результатов работ^{/2-4, 28/}:

$$u_{ij}^{as} = v_{ij}^{as} + (2M)^{-1} 2q_{ij}^{as} \frac{d}{dR}, \quad q_{ij}^{as} = \begin{pmatrix} 1+x & 0 \\ 0 & -\gamma(1-x) \end{pmatrix} q_{ij}^{(0)}, \\ v_{ij}^{as} = R^{-1} \begin{pmatrix} 1+x & 0 \\ 0 & -\gamma(1-x) \end{pmatrix} \{h_{ij}^{(+)}(\infty) + B_{ij}^{(-)}(\infty)\} + O(R^{-2}), \\ V_{ii}^{as} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_i + (2M)^{-1} R^{-2} \{[J(J+1) - 2m^2]\hat{I} + h_{ii}^{(+)}(\infty)\} + O(R^{-3}). \quad (43)$$

Здесь введены обозначения^{/4, 28/}

$$h_{ii}^{(+)}(\infty) = \langle i | \vec{\ell}^2 | i \rangle, \\ h_{ij}^{(-)}(\infty) = -\frac{1}{2} \langle i | l_+ p_- + p_- l_+ + l_- p_+ + p_+ l_- | j \rangle, \\ B_{ij}^{(-)}(\infty) = \frac{1}{2} \langle i | p_+ J_- + p_- J_+ | j \rangle, \quad (44)$$

где $\vec{\ell}$ и \vec{J} - орбитальный момент легкой частицы s и полный момент системы трех тел соответственно, p_{\pm} - компоненты импульса частицы s , а $|i\rangle$ - решения задачи двух центров при $R \rightarrow \infty$. С учетом соотношений

$$\vec{\ell}^2 = \frac{1}{2}(l_+ l_- + l_- l_+) + l_z^2, \\ \vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2, \\ \ell_z^2 = J_z^2 = m^2, \\ p_{\pm} = \pm i p_x - p_y \quad (45)$$

и правил сумм

$$\sum_j \langle i | p_x | j \rangle \langle j | x | i \rangle = \sum_j \langle i | p_y | j \rangle \langle j | y | i \rangle = -\frac{i}{2}, \\ \langle i | p_{\pm} | j \rangle = i(E_i - E_j) \langle i | r_{\pm} | j \rangle, \quad r_{\pm} = \pm ix - y, \\ \sum_j \frac{\langle i | p_+ | j \rangle \langle j | p_- | i \rangle}{E_i - E_j} = \sum_j \frac{\langle i | p_- | j \rangle \langle j | p_+ | i \rangle}{E_i - E_j} = -1 \quad (46)$$

из выражения (35), используя соотношения (43)-(46), для потенциала $\tilde{V}_{ii}(R)$ с точностью $O(R^{-2})$ получим при $R \gg 1$

$$\tilde{V}_{ii}(R) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} E_i + (2M)^{-1} R^{-2} \{[J(J+1) - 2m^2]\hat{I} + \langle i | \vec{\ell}^2 | i \rangle\} - \\ - \frac{1}{2} R^{-2} \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & \gamma^{-1} \ell^2 \end{pmatrix} \langle i | \vec{J}^2 + \vec{\ell}^2 - 2m^2 | i \rangle + O(R^{-3}) = \\ = \begin{pmatrix} E_{ia} & 0 \\ 0 & E_{ib} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} M_a^{-1} & 0 \\ 0 & M_b^{-1} \end{pmatrix} \{[J(J+1) - 2m^2 + \langle i | \vec{\ell}^2 | i \rangle\} R^{-2}. \quad (47)$$

Таким образом, в результате преобразования (9) в каждом из каналов α и β реакции при центробежном барьере восстанавливаются правильные приведенные массы M_α и M_β систем $(\alpha, c) + \beta$ и $\alpha + (\beta, c)$ соответственно. Величина $\langle i | \vec{e}^2 | i \rangle \neq l(l+1)$, поскольку адиабатический базис $|i\rangle$ при $R \rightarrow \infty$ переходит в волновые функции изолированного атома водорода в параболических координатах^{/4/}.

При проектировании на основное состояние $i = I$, для которого $l = m = 0$, используя формулы (41), (42) и (47), получим для уравнения (5) асимптотику, соответствующую физическим граничным условиям задачи рассеяния при $R \gg 1$:

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1)}{R^2} \right) + \begin{pmatrix} k_{\alpha a}^2 & 0 \\ 0 & k_{\beta c}^2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{\alpha a} \\ \tilde{\chi}_{\beta c} \end{pmatrix} = 0. \quad (48)$$

Отметим, что в рассматриваемом эффективном двухуровневом приближении (5) кориолисово взаимодействие $2\vec{J}\vec{e}^2 R^{-2}$ отсутствует по построению, поскольку оно соответствует переходам $m \rightarrow m \pm 1$ для описания которых необходимо минимум четыре состояния^{/17,24/}. Однако члены $\sim (2M)^{-2} (\vec{J}\vec{e})^2 R^{-4}$ не исчезают и дают вклад в потенциал $\tilde{V}_{ii}(R)$ (35).

В реальных расчетах с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ нет необходимости формировать предварительную массу m_β в канале β с помощью преобразования \tilde{S} (3), поскольку с этой точностью она уже содержится в преобразовании T (9) по построению. В этом случае $\tilde{S} = \hat{I}$, $\gamma = 1$ и согласно работе^{/2/} и определениям (4), (6), (12) получим

$$v_{ij}(\infty) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4\alpha H_{ij}^{(*)}(\infty) \end{pmatrix},$$

$$V_{ii}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} E_{ia} + (2M)^{-1} v_{ii}(\infty) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{\alpha}{M} \end{pmatrix} E_{ia}, \quad (49)$$

поскольку $H_{ii}^{(*)}(\infty) = -\frac{1}{2} E_i$ /4/.

Согласно формулам (20), (34), (35) имеем

$$\tilde{V}_{ii}(\infty) = \begin{pmatrix} E_{ia} & 0 \\ 0 & E_{i\beta}^{(2)} \end{pmatrix},$$

$$E_{i\beta}^{(2)} = V_{ii}(\infty) + (2M)^{-2} 16\alpha^2 \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} \sum_j \frac{H_{ij}^{(*)}(\infty) H_{ji}^{(*)}(\infty)}{E_i - E_j}. \quad (50)$$

Последняя сумма вычислена в работе^{/32/} и равна $\frac{1}{4} E_i$. Принимая во внимание соотношение $E_{i\beta} = \left(1 - \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} E_{ia}$ и определения (4a), получим

$$E_{i\beta}^{(2)} = E_{i\beta} \left\{ 1 + \frac{\alpha}{M} + \left(\frac{\alpha}{M}\right)^2 \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} \right\} \left(1 - \frac{\alpha}{M}\right), \quad (51)$$

откуда следует, что $E_{i\beta}^{(2)}$ с точностью $\sim (\alpha/M)^3$ совпадает с истинной энергией $E_{i\beta}$ изолированного атома (β, c) .

Для величины $M_{ii}^{-1}(\infty)$ соответственно получим:

$$\begin{aligned} M_{ii}^{-1}(\infty) &= M^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 \\ 0 & \left(1 + \frac{\alpha}{M}\right)^{-1} \alpha^2 \end{pmatrix} \frac{1}{4} \sum_j \frac{v_{ij}(\infty) v_{ji}(\infty)}{E_i - E_j} = \\ &= \begin{pmatrix} M_\alpha^{-1} & 0 \\ 0 & M_\beta^{(2)-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (52)$$

где масса

$$M_\beta^{(2)} \approx M_\beta + \frac{\alpha^2 (1 - \alpha)^2}{4M^3}.$$

Таким образом, одно преобразование (9) без предварительного преобразования (3) восстанавливает физические граничные условия (48) с точностью $\sim M^{-3}$.

4. Физический смысл решений

Преобразование $T(R)$ относится к классу канонических преобразований, для которых вопросы определения средних значений от операторов представляют самостоятельный интерес. В дальнейшем обсуждении мы будем основываться на отмеченной ранее аналогии между рассматриваемым преобразованием и преобразованием Фолди-Вотхойзена^{/5/}.

Решения уравнения (5) нормированы условием

$$\langle \tilde{\chi}_i | \tilde{\chi}_i \rangle = \sum_{(\sigma, \nu) = (\alpha, \beta)} \int dR \tilde{\chi}_{i\sigma}(R) \tilde{\chi}_{i\nu}(R). \quad (53)$$

Оператор

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} \vec{R} & 0 \\ 0 & \vec{R} \end{pmatrix}_{ij}, \quad (54)$$

который в старом представлении соответствует координате \vec{R} , в новом представлении преобразуется в оператор

$$\hat{R}' = T(R) \hat{R} T^{-1}(R), \quad (55)$$

Однако в новом представлении физически измеримым значениям координаты соответствует не оператор \hat{R}' , а так называемый оператор \hat{R}'_m "mean position" /5/, который по форме совпадает с оператором координаты \hat{R} в старом представлении и среднее значение R'_m которого определяется выражением

$$R'_m = \langle \tilde{\chi} | \hat{R} | \tilde{\chi} \rangle = \int_0^\infty dR \tilde{\chi}^+(R) \hat{R} \tilde{\chi}(R). \quad (56)$$

Вид оператора "mean position" в старом представлении получается обратным преобразованием

$$\hat{R}_m = T^{-1}(R) \hat{R}'_m T(R) = T^{-1}(R) \hat{R} T(R) = \hat{R} + \delta \hat{R}. \quad (57)$$

Он состоит из двух частей: оператор \hat{R} представляет среднее движение вектора \vec{R} в процессе столкновения, а оператор $\delta \hat{R}$ описывает "дрожание" концов этого вектора на расстояниях $\sim a$ и $\sim b$ соответственно, т.е. в областях порядка размеров $\sim (m_a/M_a)$ и $\sim (m_b/M_b)$. Эта делокализация вектора \vec{R} аналогична "дрожанию" ("Zitterbewegung") релятивистского электрона в теории Дирака на расстояниях порядка его комптоновской длины волны /5/. В новом представлении делокализация вектора \vec{R} заключена не в операторе $\hat{R}'_m = \hat{R}$, а в волновых функциях $\tilde{\chi}(R)$.

При конечных R смысл преобразования $T(R)$ состоит в сдвиге на некоторый вектор, величина которого не определена, поскольку оператор $\delta \hat{R}$ недиагонален. В асимптотической области $R \rightarrow \infty$, где оператор $T^{-1}(\infty)$ представляет собой матричную "трансляционную экспоненту" (10), он преобразует оператор \hat{R} в оператор /12/

$$\hat{R}_m = T^{-1}(\infty) \hat{R} T(\infty) = \begin{pmatrix} \vec{R}_a & 0 \\ 0 & \vec{R}_b \end{pmatrix}_{ij}, \quad (58)$$

где $\vec{R}_a = \vec{R} - \vec{a}$ и $\vec{R}_b = \vec{R} + \vec{b}$ представляют собой расстояния между центрами масс атомов (a, c) и (b, c) и ядрами b и a соответственно (см. рисунок).

По аналогии с определением (56) в новом представлении можно построить средние значения операторов момента J'_m и l'_m , тока j'_m и т.д., как средние значения от операторов $\hat{J}, \hat{e}, \hat{j}$ и т.д. в исходном представлении по волновым функциям $\tilde{\chi}(R)$ в новом представлении.

Из предыдущего следует, что преобразование $T(R)$ меняет лишь форму функции*, не затрагивая ее аргумента:

$\tilde{\chi}(R) = T(R) \bar{\chi}(R)$. При этом аргумент функции преобразуется с помощью обратного оператора, в силу чего справедливы равенства

$$R_m = \langle \tilde{\chi} | \hat{R}_m | \tilde{\chi} \rangle = \langle \tilde{\chi} | \hat{R} | \tilde{\chi} \rangle = R'_m,$$

т.е. средние значения операторов "mean position" в старом и новом представлениях совпадают между собой.

Заметим, что асимптотическое преобразование, предложенное в работе Чена и др. /17/, содержит не только преобразование формы функций, но также и смену их аргументов. В наших обозначениях его можно представить в виде

$$\tilde{\chi}(R) = \lim_{R \rightarrow \infty} T^{-1}(R) T(\hat{R}_m) \tilde{\chi}(\hat{R}_m),$$

или

$$\begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{ia}(R) \\ \tilde{\chi}_{ib}(R) \end{pmatrix}_{R \rightarrow \infty} = \begin{pmatrix} e^{-\vec{a} \cdot \nabla_{\vec{R}}} & 0 \\ 0 & e^{\vec{b} \cdot \nabla_{\vec{R}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{ja}(R) \\ \tilde{\chi}_{jb}(R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\vec{a} \cdot \nabla_{\vec{R}}} & 0 \\ 0 & e^{\vec{b} \cdot \nabla_{\vec{R}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\vec{a} \cdot \nabla_{\vec{R}_a}} & 0 \\ 0 & e^{-\vec{b} \cdot \nabla_{\vec{R}_b}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{ja}(R_a) \\ \tilde{\chi}_{jb}(R_b) \end{pmatrix}$$

5. Численный пример

В качестве иллюстрации изложенной схемы вычислим с ее помощью уровни энергии μ -мезомолекул изотопов водорода $p\mu, d\mu, t\mu, p_d\mu, p_t\mu, d_t\mu$ в состоянии с полным моментом $J=0$, а также энергию связанного состояния e^+e^-e .

В случае равных масс ядер ($M_a = M_b, \alpha = 0$) не требуется предварительного преобразования (3) \tilde{S} , а все эффективные потенциалы симметричны относительно замены индексов $a \leftrightarrow b$. В этом случае при переходе от функций $\tilde{\chi}_{ia}$ и $\tilde{\chi}_{ib}$ к функциям

$$\tilde{\chi}_{1g} = \frac{\tilde{\chi}_{1a} + \tilde{\chi}_{1b}}{\sqrt{2}} \quad \text{и} \quad \tilde{\chi}_{2g} = \frac{-\tilde{\chi}_{1a} + \tilde{\chi}_{1b}}{\sqrt{2}} \quad (59)$$

система (5) распадается на два независимых уравнения с потенциалами $\tilde{U}_{1g,1g}(R)$ и $\tilde{U}_{2g,2g}(R)$, причем связанное состояние существует только в потенциале $\tilde{U}_{1g,1g}(R)$. Таким образом, в случае равных масс ядер задача трех тел с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$ сводится к решению одномерного уравнения Шредингера.

* Такая интерпретация преобразования, аналогичного $T(\infty)$, обсуждалась Дешпанде и Маканти /31/ при рассмотрении атома водорода в адиабатическом представлении.

В таблице I приведены матрицы потенциалов $\tilde{V}_{11}(R)$ и $\tilde{Q}_{11}(R)$ эффективного двухуровневого приближения для мезомолекулы $pp\mu$ в основном состоянии $n=1$ по движению μ -мезона. Для сравнения приведены также исходные потенциалы $V_{11}(R)$ (в рассматриваемом случае $Q_{11}(R) = 0$).

При построении $\tilde{V}_{11}(R)$, $\tilde{Q}_{11}(R)$ и $\mu(R)$ по формулам (34), (35), (12) использованы термы $E_j(R)$ и матричные элементы $U_{1j}(R)$ и $q_{1j}(R)$, связывающие основное состояние $i=1$ задачи двух центров (т.е. пару $1g$ и $1u$) с 2×20 возбужденными состояниями, что соответствует учету первых четырех оболочек $n=1,2,3,4$ по классификации изолированных атомов^{3,4/}. Кроме того, в сумме (37) был учтен также интеграл по непрерывному спектру задачи двух центров, учитывающий связь с состояниями $|k n_2 m\rangle$ для значений $m=0,1$; $n_2=0,1,2,3$; $k=0,2(0,1)1(0,2)2(1)10^{3/}. Все термы и матричные элементы (как для дискретного, так и для непрерывного спектров) вычислены с шагом $R=0,1(0,1)20$ и абсолютной точностью не хуже чем $\sim 10^{-5}$, а их асимптотика найдена в работах^{4,28/}.$

Эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ (Ia) системы (I) построены по формулам

$$\begin{pmatrix} U_{ia,ja} & U_{ia,jb} \\ U_{ib,ja} & U_{ib,jb} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} U_{is,js} & U_{is,ja} \\ U_{ia,js} & U_{ia,ja} \end{pmatrix} A^{-1}, \quad (60)$$

где

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$U_{is,ja} = \langle is | \hat{U} | ja \rangle$ и т.д., а индексы s и a характеризуют симметричное и антисимметричное решения задачи двух центров по отношению к операции отражения $\xi \rightarrow \bar{\xi}$, $\eta \rightarrow -\eta$, $\varphi \rightarrow -\varphi$ для каждого набора параболических квантовых чисел $j = [n_1 n_2 m]$ ^{4,28/}. Такое определение (60) отличается от принятого в предыдущих работах^{2,33/} заменами $g \rightarrow s$ и $u \rightarrow a$.

Из таблицы I непосредственно видно, что преобразованные потенциалы $\tilde{V}_{11}(R)$ (35) в области взаимодействия $1 < R < 10$ отличаются от исходных $V_{11}(R)$ (2) на величину $\sim 10^{-2}-10^{-3}$, т.е. на величину $\sim (2M)^{-2}$.

При $R=15,1$ величина $\mu_{1a,1a}^{-1} = 0,9565$, что отличается от асимптотического значения $\mu_{1a,1a}^{-1}(\infty) = M_0/M_a = 0,9494$. Отмеченное отличие объясняется тем, что в вычислениях использована лишь часть полного адиабатического набора $|j\rangle$ и, кроме того, тем, что при $R=15$ еще не достигается асимптотическое значение $\mu_{1a,1a}^{-1}(\infty)$. Однако величина отличия составляет $\sim 10^{-3} \approx (2M)^{-3}$, т.е. находится за пределами принятой точности $0 \{ (2M)^{-2} \}$.

При построении матрицы Γ^{-1} (20) потенциалы V_{jj} для $j \neq 1$ были переопределены следующим образом:

$$V_{jj} = E_j(R) + \frac{1}{R} + (2M)^{-1} \left\{ \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} \hat{I} + H_{jj}(R) \right\} (1+\alpha), \quad (61)$$

где α - некоторое положительное число, которое варьировалось в пределах $0,1 < \alpha < 2,0$.

Такая процедура была использована для сглаживания потенциалов $\tilde{V}_{11}(R)$ при $R < 1$. Она подобна способу, который был использован Вольневичем и Поллом^{34/} для регуляризации вычислений во втором порядке теории возмущений и в некотором смысле напоминает регуляризацию Тихонова^{35/}, используемую для подавления высших гармоник при суммировании ряда Фурье.

Выбор численного значения α в указанных пределах изменял вычисленное значение энергии связи μ -мезомолекул на величину $\sim 0,01$ эВ, а для системы $e^+e^-e^+$ - на величину $\sim 0,001$ эВ, что находится за пределами принятой точности. При желании можно провести экстраполяцию к значению $\alpha = 0^{34/}$.

В таблице 2 представлены значения $\tilde{\epsilon}_{j\nu}$ энергий связи мезомолекул и системы $e^+e^-e^+$, вычисленные из системы уравнений (5) с помощью алгоритма^{36/}, основанного на непрерывном аналоге метода Ньютона. Для сравнения приведены также значения $\epsilon_{j\nu}$, вычисленные из полной исходной системы уравнений (I), а также значения $\epsilon_{j\nu}^{(0)}$, найденные в двухуровневом приближении этой системы ($i=j=1$), и результаты вариационных расчетов. Легко видеть, что в случае мезомолекул отличие между значениями $\tilde{\epsilon}_{j\nu}$ и $\epsilon_{j\nu}$ не превышает $\sim 0,1$ эВ, в то время как отличие между $\epsilon_{j\nu}$ и $\epsilon_{j\nu}^{(0)}$ по крайней мере на порядок больше. Во всех случаях отличие $\tilde{\epsilon}_{j\nu}$ и $\epsilon_{j\nu}$ составляет величину $\sim (2M)^{-3}$ или меньше от энергии E_1 основного состояния атомов (a,c) и (b,c) .

Отметим, что в случае равных масс формальная замена $M \rightarrow M_a$ в системе уравнений (I) без изменения потенциалов $\overline{U}(R)$ позволяет получить уже в двухуровневом приближении ($i=1$) неожиданно хорошие результаты как для энергии связи, так и для сечений рассеяния в системе трех тел^{38/}.

6. Эффективное многоуровневое приближение

В задачах рассеяния при энергиях столкновения E , больших, чем энергия возбуждения $E = E_n - E_1$ второго уровня $n=2$ изолированного атома водорода, необходимо решать систему уравнений (5) размерности большей чем два. Для построения эффективных потенциалов (35) в этом случае необходимо, кроме V_{11}, Q_{11}, v_{1j} и q_{1j} , использовать также все потенциалы $V_{ss}, V_{ss}, v_{st}, v_{sj}, Q_{st}, q_{sj}$ и т.д. Наметим общую схему построения таких потенциалов, ограничившись для определенности случаем восьми уравнений ($s, t = 2, 3, 4$), что соответствует учету всех состояний второй оболочки изолированного атома водорода, т.е. состояний $s = [n_1 n_2 m]$: $2 = [100], 3 = [010], 4 = [001]$.

В этом случае, кроме матриц $\Gamma_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta}^{1j}, \Gamma_{\alpha\beta}^{j1}$ с $j \neq s$, которые вычисляются, как обычно (20), необходимо ввести матрицы $\Gamma_{\alpha\beta}^{sj}$ и $\Gamma_{\alpha\beta}^{js}$ при $s \neq j$ по следующим правилам:

а. Переопределяются потенциалы V_{1s} и u_{1s} :

$$\begin{aligned} V^{11} &= V_{11}, & V^{ss} &= V_{ss}, & V^{st} &= v_{st}, \\ V^{1s} &= u_{1s} - u_{1s}^{as}, & u^{1s} &= u_{1s}^{as}, \\ V^{s1} &= u_{s1} - u_{s1}^{as}, & u^{s1} &= u_{s1}^{as}, \end{aligned} \quad (62)$$

где u_{ij}^{as} определены формулами (43). Остальные потенциалы вычисляются обычным образом (12) с той лишь разницей, что индексы состояний пишутся наверху.

б. Генераторы (22) $\{\Lambda^{(1)}\}_\alpha^{sj} = \Lambda^{sj}$ находятся из уравнения

$$i[\Lambda, V]^{sj} = (2M)^{-1} u^{sj},$$

или в развернутой записи,

$$\begin{pmatrix} \Lambda^{2j} \\ \Lambda^{3j} \\ \Lambda^{4j} \end{pmatrix} V^{jj} - \begin{pmatrix} V^{22} & V^{23} & V^{24} \\ V^{32} & V^{33} & V^{34} \\ V^{42} & V^{43} & V^{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda^{2j} \\ \Lambda^{3j} \\ \Lambda^{4j} \end{pmatrix} = i(2M)^{-1} \begin{pmatrix} u^{2j} \\ u^{3j} \\ u^{4j} \end{pmatrix}, \quad (63)$$

где $\Lambda^{sj}, V^{st}, V^{jj}$ и u^{sj} - обычные матрицы размерности 2×2 . Аналогично (19) представим равенство (63) в виде

$$i \sum_{t=2}^4 \sum_{\beta=1}^4 \{\Gamma^{-1}\}_{\alpha\beta}^{stj} \Lambda_\beta^{tj} = (2M)^{-1} u_\alpha^{sj}, \quad (64)$$

откуда найдем выражение для Λ_α^{sj} :

$$i \Lambda_\alpha^{sj} = (2M)^{-1} \sum_{t=2}^4 \sum_{\beta=1}^4 \Gamma_{\alpha\beta}^{stj} u_\beta^{tj} = (2M)^{-1} \{(\Gamma \cdot u)_\alpha\}^{sj}. \quad (65)$$

Матрица $\Gamma_{\alpha\beta}^{stj}$ имеет вид

$$\{\Gamma^{-1}\}_{\alpha\beta}^{stj} = \begin{pmatrix} (\Gamma^{-1})_{\alpha\beta}^{2j} & V_{\alpha\beta}^{23} & V_{\alpha\beta}^{24} \\ V_{\alpha\beta}^{32} & (\Gamma^{-1})_{\alpha\beta}^{3j} & V_{\alpha\beta}^{34} \\ V_{\alpha\beta}^{42} & V_{\alpha\beta}^{43} & (\Gamma^{-1})_{\alpha\beta}^{4j} \end{pmatrix}, \quad (66)$$

причем каждая из матриц $(\Gamma^{-1})_{\alpha\beta}^{sj}$ имеет вид (20), а $V_{\alpha\beta}^{st}$ имеет блочную структуру:

$$V_{\alpha\beta}^{st} = \begin{pmatrix} V^{st} & 0 \\ 0 & V^{st} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

где V^{st} - обычная матрица 2×2 (Ia).

Матрицы $\Gamma_{\alpha\beta}^{js}$ строятся по формулам (66), (67) транспонированием всех индексов:

$$\{\Gamma^{-1}\}_{\alpha\beta}^{stj} \rightarrow \{\Gamma^{-1}\}_{\beta\alpha}^{jts}.$$

Система уравнений (5) примет теперь вид:

$$\sum_{j=1}^4 \left\{ (2M)^{-1} \mu_{ij}^{-1}(R) \frac{d^2}{dR^2} + E_{n\tau} \hat{I} \delta_{ij} - \tilde{U}_{ij}(R) \right\} \tilde{Y}_j(R) = 0, \quad (68)$$

где потенциалы строятся по формулам (34)-(36) с учетом определений (62)-(67) и с заменой $(\Gamma \cdot u)_\alpha \rightarrow \{(\Gamma \cdot u)_\alpha\}^{sj}$ и т.п. Принятое определение (62) потенциалов обеспечивает, с одной стороны, физическую асимптотику

$$\sum_{t=2}^4 \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2 + \langle s | \vec{L}^2 - 2\vec{L}\vec{J} | t \rangle}{R^2} \right) + \begin{pmatrix} k_{ia} & 0 \\ 0 & k_{ie} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{Y}_{ia} \\ \tilde{Y}_{ie} \end{pmatrix} = 0, \quad (69)$$

$i = 1, 2, 3, 4, \quad (s, t) = 2, 3, 4,$

а с другой - сильную связь каналов в области реакций и короткодействующий характер эффективных потенциалов.

Изложенный способ построения генераторов $\Lambda^{(1)}$ и $\Lambda^{(2)}$ ((21) и (28)) диагонализует потенциалы $\tilde{U}_{ij}(R)$ системы (I) по всем квантовым числам $i = [n_1 n_2 m]$ задачи двух центров. Поэтому матричный элемент кориолисова взаимодействия $\langle im | 2\vec{L}\vec{J} | jm \pm 1 \rangle R^{-2}$ при $i \neq j$ отсутствует в преобразованных потенциалах $\tilde{U}_{ij}(R)$ системы (68). Возможно, однако, другие способы построения генераторов, которые сохраняют сильную связь каналов, соответствующих состояниям $|im\rangle$ и $|jm \pm 1\rangle$, через оператор $2\vec{L}\vec{J} R^{-2}$. В этом случае оператор центробежного барьера примет вид

$$\left\{ J(J+1) - 2m^2 + \langle i | \vec{L}^2 | j \rangle - \langle im | 2\vec{L}\vec{J} | jm \pm 1 \rangle \right\} R^{-2},$$

что соответствует усреднению $\langle im | \vec{L}^2 | jm \pm 1 \rangle$ оператора орбитального момента $\vec{L} = \vec{J} - \vec{e}$ относительного движения ядер по адиабатическому базису.

7. Заключение

В данной работе предложен и реализован последовательный метод преобразования бесконечномерной системы интегродифференциальных уравнений адиабатического метода, позволяющий поставить физические граничные условия для задачи трех тел, решаемой в адиабатическом базисе.

Эффективное двухуровневое приближение адиабатического представления задачи трех тел, построенное в данной работе, сводит квантовомеханическую задачу трех тел к решению системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений. Полученная система эквивалентна исходной задаче с точностью $O\{(2M)^{-2}\}$, в то время как стандартное двухуровневое приближение адиабатического метода представляет исходную задачу трех тел лишь с точностью $O\{(2M)^{-1}\}$.

Построенная система уравнений может быть эффективно использована для решения широкого класса задач атомной и мезоатомной физики, в частности, для нахождения энергий связи системы трех тел и для вычисления сечений рассеяния. Выполненные нами численные расчеты подтверждают это заключение. Обобщение изложенного метода на многоуровневый случай позволяет изучать возбуждение атомов при столкновении с ядрами, пороговые и спиновые эффекты в таких реакциях и т.д.

Основная идея изложенного подхода состоит в преобразовании потенциалов исходной системы уравнений с целью согласовать асимптотику ее решений с физическими граничными условиями задачи рассеяния. Альтернативный^{12,39} подход состоит в том, чтобы известные физические граничные условия с помощью асимптотических преобразований согласовать с асимптотикой решений исходной системы уравнений. Такой подход позволяет снять ограничение $\sim (2M)^{-3}$ по точности, и мы рассмотрим его в последующих работах.

В заключение авторы благодарят К.Н.Данилову, В.С.Мележика, И.В.Пузынина, Т.П.Пузынину, Л.Н.Сомова, Н.Ф.Трускову, М.П.Файфмана за разностороннюю помощь и Ю.Н.Демкова и И.В.Комарова за полезные обсуждения.

Таблица I

Потенциалы эффективного двухуровневого приближения системы уравнений (5) мезомолекулы ppm с $J = 0$

R	$M_{1a,1a}^{-1}(R)$	$M_{1a,1b}^{-1}(R)$	$\tilde{Q}_{1a,1a}(R)$	$\tilde{Q}_{1a,1b}(R)$
.I	.9986E+00	-.1405E-02	.1889E-01	.1947E-01
I.I	.9770E+00	-.1974E-02	.1305E-01	-.8584E-02
2.I	.9829E+00	-.1225E-01	-.9881E-03	.5871E-02
3.I	.9734E+00	-.1005E-01	-.6647E-03	.1040E-01
4.I	.9628E+00	-.1184E-01	.3365E-02	.9733E-02
5.I	.9545E+00	-.1474E-01	.1228E-02	.5823E-02
6.I	.9506E+00	-.1404E-01	-.2537E-02	.1533E-02
7.I	.9500E+00	-.1060E-01	-.4170E-02	-.3474E-03
8.I	.9506E+00	-.6315E-02	-.4147E-02	-.1058E-02
9.I	.9518E+00	-.2615E-02	-.3122E-02	-.1365E-02
10.I	.9530E+00	-.8744E-04	-.1856E-02	-.1151E-02
11.I	.9539E+00	.1224E-02	-.7449E-03	-.8005E-03
12.I	.9545E+00	.1560E-02	.1995E-04	-.5873E-03
13.I	.9551E+00	.1323E-02	.4183E-03	-.6574E-03
14.I	.9557E+00	.8365E-03	.5184E-03	-.8082E-03
15.I	.9565E+00	.8388E-03	.4328E-03	-.8388E-03

R	$\tilde{V}_{1a,1a}(R)$	$V_{1a,1a}(R)$	$\tilde{V}_{1a,1b}(R)$	$V_{1a,1b}(R)$
.I	.1797E+03	.1909E+03	-.1189E+03	-.1076E+03
I.I	.4332E+01	.4671E+01	-.4606E+01	-.4912E+01
2.I	.9945E+00	.9994E+00	-.2120E+01	-.2125E+01
3.I	.1979E+00	.2012E+00	-.9777E+00	-.9830E+00
4.I	.1293E-01	.1364E-01	-.4546E+00	-.4571E+00
5.I	-.1801E-01	-.1750E-01	-.2047E+00	-.2055E+00
6.I	-.1524E-01	-.1479E-01	-.8782E-01	-.8803E-01
7.I	-.9329E-02	-.9128E-02	-.3586E-01	-.3613E-01
8.I	-.5474E-02	-.5451E-02	-.1405E-01	-.1436E-01
9.I	-.3295E-02	-.3381E-02	-.5272E-02	-.5576E-02
10.I	-.2214E-02	-.2202E-02	-.1940E-02	-.2125E-02
11.I	-.1330E-02	-.1497E-02	-.7803E-03	-.7967E-03
12.I	-.9556E-03	-.1055E-02	-.2946E-03	-.2943E-03
13.I	-.6737E-03	-.7651E-03	-.1506E-03	-.1071E-03
14.I	-.4621E-03	-.5686E-03	-.8107E-04	-.3842E-04
15.I	-.3300E-03	-.4315E-03	-.5614E-04	-.1356E-04

Таблица 2

Энергия связи ϵ_{ju} системы $e^+e^-e^+$ и мезомолекул в состояниях с полным моментом $J = 0$ и наибольшим квантовым числом ν *

Система	$(2M)^{-1}$	ν	$-\epsilon_{ju}^{(0)}$	$-\epsilon_{ju}^{(1)}$	$-\epsilon_{ju}^{(2)}$
$e^+e^-e^+$	1/2	0	0,186	0,301	0,295
ppm	0,10121	0	247,31	253,00	252,79
ddm	0,05333	0	322,69	325,00	324,99
ddm	0,05333	I	33,14	35,71	35,67
ttm	0,03625	0	361,56	362,91	362,88
ttm	0,03625	I	81,61	83,76	83,67
ptm	0,07997	0	215,68	221,69	221,48
ptm	0,07239	0	207,28	214,23	213,85
dtm	0,04527	0	317,04	319,13	319,07
dtm	0,04527	I	32,20	34,90	34,70
					0,326a)
					253,00b)
					324,27b)
					32,76b)
					361,4c)
					75,2c)
					221,28a)
					213,0c)
					318,07b)
					32,95b)

* Все значения приведены в электрон-вольтах. Энергии связи $\epsilon_{ju}^{(0)}$ получены в двухуровневом приближении системы уравнений (1), $\epsilon_{ju}^{(1)}$ - при решении системы уравнений (5), $\epsilon_{ju}^{(2)}$ - при решении полной системы уравнений (1), (3), $\epsilon_{ju}^{(2)}$ - вариационные расчеты /a), b), c)/. При вычислениях использованы значения масс частиц $m_e = 206,769$, $M_p = 1836,152$, $M_d = 3670,481$, $M_\pi = 5496,918$ и значение $k_y = 13,60535$ эВ/3г. Энергия связи мезомолекул отсчитывается от энергии соответствующего (более тяжелого в случае $M_a \neq M_b$) мезотома $E_{JM} = -2663,14$ эВ, $E_{JM} = -2711,18$ эВ, $E_{JM} = -6,803$ эВ.

a) Kolos W., Roothaan C.C. and Sack R.A., Rev. Mod. Phys., **32**, 178, 1960.

b) Carter B.P., Phys. Rev., **165**, 139, 1968.

c) Carter B.P., Phys. Rev., **141**, 863, 1966.

Л и т е р а т у р а

- I. Born M., G5tt. Nachr. 1, 1951;
Born M. and Huang K., Dynamical theory of Crystal Lattices;
The Clarendon Press, Oxford, England, 1954.
2. Винацкий С.И., Пономарев Л.И., ОИЯИ, P4-II332, 1978.
3. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F., J. Phys. B:
Atom and Molec. Phys., 1978, 11, 1375 ;
Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Somov L.N., J. Phys. B:
Atom and Molec. Phys., 1977, 10, 1335.
4. Faifman M.P., Ponomarev L.I. and Vinitsky S.I., J. Phys. B:
Atom and Molec. Phys., 1976, 9, 2255;
Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сферические
и кулоновские сферические функции. Наука, М., 1976.
5. Foldy L.L. and Wouthouysen S.A., Phys. Rev., 1950, 78, 29.
6. Van Vleck J.H., Phys. Rev., 1929, 33, 467.
7. Tharrats J., Gerceau O. and Rojo O., J. Math. Phys., 1965,
6, 1315.
8. Jorgensen F. and Pedersen T., Molec. Phys., 1974; 27, 33,
1974, 27, 959; Jorgensen F., Pedersen T. and Chedin A.,
Molec. Phys., 1975, 30, 1377;
Jorgensen F., Molec. Phys., 1975, 29, 1137; Pedersen T.,
Molec. Phys., 1976, 32, 407.
9. Gartenhaus S. and Schwatz C., Phys. Rev., 1957, 108, 482.
10. Hirooka M. and Sunakawa S., Progr. Theor. Phys., 1974, 52, 131.
11. Krajcik R.A. and Foldy L.L., Phys. Rev. D., 1974, 10, 1777.
12. Matveenko A.V., and Lovas I., Nucl. Phys., 1978, A299, 333.
13. Bates D.R. and R.McCarroll., Proc. Roy. Soc., 1958, A245,
175.

14. Bates D.R. and Holt A.R., Proc. Roy Soc., 1965, A292, 168 ;
Bates D.R. and Sprevak D., J. Phys. B: Atom and Molec.
Phys., 1971, 4, L47.
15. Schneiderman S.B. and Russek A., Phys. Rev., 1969, 181,
311, See also Smith K. in "Scattering Theory" ed. by
A.D.Barut, London, England, Gordon and Breach, 1969.
16. Torson W.R., J. Chem. Phys., 1965, 42, 3878,
1969, 50, 1702.
17. Chen J.C.Y., Ponce V.H. and Watson K.M., J. Phys. B:
Atom and Molec. Phys., 1973, 6, 965.
18. Feshbach H., Ann. Phys., 1958, 5, 357; 1962, 19, 287.
19. Schmid G.B., Phys. Rev. A, 1977, 15, 1459.
20. Pack R.T. and Hirschfelder J.O., J. Chem. Phys., 1970,
52, 521.
21. Klar H. and Fano U., Phys. Rev. Lett., 1976, 37, 1132 ;
Klar H. Phys. Rev. A., 1977, 15, 1452 ;
Klar H. and Klar M., Phys. Rev. A, 1978, 17, 1007.
22. Hunter G., Int. J. quant. Chem., 1975, 9, 237 ;
Bishop D. and Hunter G., Molec. Phys., 1975, 30, 1433 ;
Wolniewicz L. and Czub J. , Molec.Phys., 1978, 36, 128.
23. Albat R. and Gruen N., J. Phys. B.: Atom and Molec. Phys.,
1976, 9, L463.
24. Rosenthal H., Phys. Rev. Lett., 1971, 27, 635.
25. Fues E., Ann. d. Phys., 1926, 81, 281 ;
Зоммерфельд А., Строение атома и спектры. Часть II.,
стр. 108, ТТЛ, М., 1956.
26. Farrel J.P., Vincent C.M. and Austern N., Ann. Phys., 1976,
96, 333.

27. Бете Г., Солпитер Э., Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, ФМЛ, М., 1960.
28. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ, 1974, 20, 576 ;
Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Файнман М.П., ОИЯИ Р4-9312, Дубна, 1975.
29. Wigner E.P., Phys. Rev., 1954, 94, 77 ;
Tees R.E., Phys. Rev., 1956, 102, 1553 ;
Dalgarno A. Proc. Phys. Soc., 1956, A69, 784 ;
Gray B.F., J. Chem. Phys., 1962, 36, 1801; 1971, 55, 2848 ;
Gray B.F. and Gonda I.J., Chem. Phys. 1975, 62, 3007 ;
J. Chem. Soc. Farad. Trans. (II), (G.B.), 1975, 11, 2016.
30. Teller E. and Sahlin H.L. In "Physical Chemistry". Vol. V, ed. H. Eyring, New York, Academic Press, 1970.
31. Deshpande V.K. and Mahanty J., Amer. J. Phys., 1969, 37, 823.
32. Матвеевко А.В., Пономарев Л.И., ТМФ, 1972, 12, 64.
33. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., ЖЭТФ, 1977, 72, 1670 ;
Виноцкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.И., в сб.: "Мезоны в веществе", стр. 187.
ДИ-10908, Дубна, 1977.
34. Wolniewicz L. and Poll J.D. J. Mol. Spectroscopy, 1978, 71, 47.
35. Калиткин Н.Н., Численные методы, стр. 58, Наука, М., 1978 ;
Тихонов А.Н., ДАН СССР, 1964, 156, 268.
36. И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, в сб.:
"Algorithms and Programs", KFKI-34, 93, Budapest, 1974.
37. Cohen E.R., Taylor B.N., J. Phys. Chem. Ref. Data, 1973, 2, 663.

38. Пономарев Л.И., Сомов Л.И., Файнман М.П., ОИЯИ Р4-II446, Дубна, 1978.
39. Elbaz E. Riv. Nuovo Cim., 1975, 5, 561.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 ноября 1978 года.