

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

838/2-81

23/11-81

P4-80-775

С.И.Виницкий, В.С.Мележик, Л.И.Пономарев

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ  
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ  
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

IV. Асимптотика решений при  $R \rightarrow 0$

Направлено в "Journal of Physics B".

1980

## I. Введение

Адиабатический базис определяется как полный набор решений квантовомеханической задачи двух кулоновских центров<sup>/1/</sup>

$$\begin{aligned} \hat{h} \phi_i(\vec{z}; R) &= E_i(R) \phi_i(\vec{z}; R), \\ \hat{h} \phi_s(\vec{z}; k, R) &= \frac{k^2}{2} \phi_s(\vec{z}; k, R), \end{aligned} \quad (Ia)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{h} &= -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{z}} - \frac{Z_a}{z_a} - \frac{Z_b}{z_b}, \\ z_a &= |\vec{z} + \frac{1}{2} \vec{R}|, \quad z_b = |\vec{z} - \frac{1}{2} \vec{R}|. \end{aligned}$$

Здесь:  $i \equiv i m = (N \ell m)$ ,  $s = (\ell m)$  - набор сферических квантовых чисел по классификации объединенного атома,  $E_i(R) < 0$  и  $k^2/2 > 0$  - энергия электрона (мюона) в поле двух кулоновских центров,  $k$  - импульс электрона при движении с положительной энергией, а координаты  $\vec{z} = \{z, \vartheta, \varphi\}$  заданы во вращающейся системе координат, построенной на ортах  $\vec{e}_x = \vec{e}_\theta$ ,  $\vec{e}_y = \vec{e}_\varphi$  и  $\vec{e}_z = \vec{e}_R$ , связанных с вектором  $\vec{R}$ <sup>/2/</sup> (см. рис. 1). В этом случае потенциальная энергия электрона ( $\mu^-$ -мезона), движущегося в кулоновском поле двух ядер  $a$  и  $b$  с зарядами  $Z_a$  и  $Z_b$ , находящихся на расстоянии  $R$  друг от друга, не зависит от ориентации межъядерной оси  $\vec{R} = \{R, \theta, \phi\}$  /3,4/.

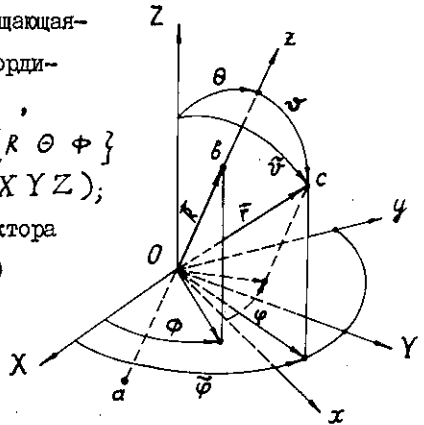
В пределе  $R \rightarrow 0$  волновые функции задачи двух центров (I) переходят в волновые функции объединенного атома с зарядом  $Z = Z_a + Z_b$ <sup>/1/</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{h}_0 \phi_i^{(0)}(\vec{z}) &= E_i^{(0)} \phi_i^{(0)}(\vec{z}), \\ \hat{h}_0 \phi_s^{(0)}(\vec{z}; k) &= \frac{k^2}{2} \phi_s^{(0)}(\vec{z}; k), \end{aligned} \quad (Ib)$$

где

$$\hat{h}_0 = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{z}} - \frac{Z}{z}, \quad z = |\vec{z}|.$$

Рис. 1. Лабораторная  $(X Y Z)$  и вращающаяся  $(x y z)$  с вектором  $\vec{R}$  системы координат. Ядра помещены в точки  $a$  и  $b$ , электрон ( $\mu^-$ -мезон) — в точку  $c$ ;  $\{R \theta \phi\}$  — координаты вектора  $\vec{R}$  в системе  $(X Y Z)$ ;  $\{z \vartheta \varphi\}$  и  $\{z \tilde{\vartheta} \tilde{\varphi}\}$  — координаты вектора  $\vec{z}$  в системах  $(x y z)$  и  $(X Y Z)$  соответственно.



Поправки к энергии и к волновым функциям объединенного атома при  $R \ll 1$  известны<sup>/1/</sup>, но в данной работе мы ограничимся только главными членами в разложении:  $E_j^{(0)}$  и  $\phi_j^{(0)}(\vec{z})$ . В этом случае орбитальный момент  $\vec{L} = -i[\vec{z} \nabla_{\vec{z}}]$  электрона сохраняется и квантуется на ось  $\vec{e}_z$ . При  $R \rightarrow 0$  ось  $z$  "исчезает", и за ось квантования естественно выбрать ось  $Z$  лабораторной системы координат, в которой связь между движениями электрона и ядер отсутствует<sup>/3,4/</sup>.

Чтобы проследить такой переход от вращающейся системы координат  $(x y z)$  к лабораторной  $(X Y Z)$  в пределе  $R \rightarrow 0$ , необходимо найти асимптотику волновой функции  $\Psi(\vec{z}, \vec{R})$  системы трех тел в пределе объединенного атома и, прежде всего, асимптотику решений  $X_i(k)$  и  $X_s(R, k)$  системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих относительное движение ядер по переменной  $R$  в адиабатическом представлении<sup>/5/</sup>. Эта задача решается в настоящей работе с помощью преобразования Чэнга-Фано<sup>/6/</sup>, хорошо известного в теории рассеяния электронов на молекулах.

В качестве примера найденная асимптотика сравнивается с решениями  $R^{-1} \chi_c(R)$ , полученными при прямом вычислении значений уровней энергии связанных состояний мезомолекулы  $\rho d \mu$  /7/ с помощью алгоритмов, развитых в работах /8-13/.

## 2. Асимптотика решений $\chi_c(R)$ при $R \rightarrow 0$

В адиабатическом представлении задачи трех тел с кулоновским взаимодействием волновая функция системы разлагается по адиабатическому базису /5/:

$$\Psi_{m_J}^J(\vec{z}, \vec{R}) = R^{-1} \sum_{j m} \langle \vec{z} R \Theta | j m J m_J \rangle \chi_{j m}^J(R) = R^{-1} \sum_{j m} [2(1 + \delta_{om})]^{-1/2} \cdot \left\{ \phi_{j m}(\vec{z}; R) D_{m m_J}^J(\Phi, \Theta, 0) + \phi_{j -m}(\vec{z}; R) D_{-m m_J}^J(\Phi, \Theta, 0) \right\} \chi_{j m}^J(R) \quad (2)$$

где  $D_{m m_J}^J(\Phi, \Theta, 0)$  - функции Вигнера, а функции  $\chi_{j m}^J(R) \equiv \chi_j(R)$  описывают относительное движение ядер  $\alpha$  и  $\beta$  с массами  $M_\alpha$  и  $M_\beta$  и зарядами  $Z_\alpha$  и  $Z_\beta$ . Система обыкновенных дифференциальных уравнений, которой удовлетворяют функции

$\chi_j(R)$ , имеет вид /5/ (в единицах  $e = \hbar = m_e = 1$ ,  $m_e^{-1} = m_c^{-1} + M_\alpha^{-1}$ ,  $m_c$  - масса электрона или мезона)

$$\left\{ \hat{I} \left( \frac{d^2}{dR^2} + 2ME_{n\tau} \right) - U_{ii}(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^{N_0} U_{ij}(R) \chi_j(R), \quad (3)$$

где

$$\chi_j = \begin{pmatrix} \chi_{j\alpha} \\ \chi_{j\beta} \end{pmatrix}, \quad U_{ij} = \begin{pmatrix} U_{i\alpha, j\alpha} & U_{i\alpha, j\beta} \\ U_{i\beta, j\alpha} & U_{i\beta, j\beta} \end{pmatrix}, \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{ij} \quad (4)$$

$$M = M_\alpha M_\beta / (M_\alpha + M_\beta) m_e.$$

Здесь  $(n\tau)$  - полный набор квантовых чисел, характеризующих движение  $(n)$  электронов и относительное движение  $(\tau)$  ядер  $\alpha$  и  $\beta$ ,  $\sum_{j \neq i}$  означает суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектрам задачи двух центров (1)

$$\sum_{j \neq i} N_{ij} = \sum_{m=0}^J \sum_{n_2=0}^m \left( \sum_{n_1=0}^m + \int dk \right), \quad (5)$$

где  $n_1, n_2, m$  - параболические квантовые числа, характеризующие адиабатический базис по классификации разьединенного атома  $/I, I_2/$ ,  $J$  - квантовое число полного орбитального момента системы трех частиц,  $N_{ij}$  - общее число решаемых пар уравнений;  $E_{n\sigma}$  - энергия системы трех тел в центре масс,

$U_{ij}(\mathbf{r})$  - эффективные потенциалы, вычисленные в работах <sup>/8-12/</sup>.

В интересующем нас случае  $Z_a = Z_b = 1$  набор параболических квантовых чисел  $i = [n_1 n_2 m]$ ,  $s = [n_2 m]$  связан с набором сферических квантовых чисел  $i = (N \ell m)$ ,  $s = (\ell m)$  простыми соотношениями <sup>/1/</sup>:

$$N = n_1 + \ell + 1$$

$$\ell = 2n_2 + m + \frac{1 + (-)^{m+\ell+1}}{2}. \quad (6)$$

Состояния с четными значениями  $\ell$  ( $g$  - состояния) и с нечетными значениями  $\ell$  ( $u$  - состояния) характеризуются собственными значениями  $p = (-)^{\ell} = (g, u)$  оператора инверсии  $\vec{z} \rightarrow -\vec{z}$  координат электрона.

При малых  $R$  естественно перейти от классификации решений  $\chi_i(\mathbf{r})$  по параболическим квантовым числам разьединенного атома к классификации по сферическим квантовым числам объединенного атома. Такому переходу соответствует ортогональное преобразование <sup>/5/</sup>:

$$\begin{pmatrix} \chi_{ig} \\ \chi_{iu} \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \chi_{ia} \\ \chi_{ib} \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} U_{ig,jg} & U_{ig,ju} \\ U_{iu,jg} & U_{iu,ju} \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} U_{ia,ja} & U_{ia,jb} \\ U_{ib,ja} & U_{ib,jb} \end{pmatrix} A$$

Асимптотика эффективных потенциалов  $U_{i\rho, j\rho'} \equiv U_{i\rho, j\rho'}(R)$  найдена в работе<sup>/12/</sup>. Оставляя в системе уравнений (3) лишь ведущие члены  $\sim R^{-2}$  в разложении эффективных потенциалов по степеням  $R^{-1}$ , приходим к системе уравнений ( $m=0, 1, \dots, \min(\ell, J)$ ):

$$\left\{ \frac{d^2}{dk^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2 + H_{i\rho, i\rho'}^{(2)}}{R^2} \right\} \chi_{i\rho}^J(R) = R^{-2} \left\{ B_{i\rho, i\rho'}^{(2)} \chi_{i\rho}^J(R) + B_{i\rho, i\rho'}^{(2)} \chi_{i\rho}^J(R) \right\}, \quad (3a)$$

где<sup>/5, 12/</sup>

$$H_{i\rho, i\rho'}^{(2)} = \ell(\ell+1) \cdot \begin{cases} \delta_{NN'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \\ \delta(k-k') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \end{cases}$$

$$B_{i\rho, i\rho'}^{(2)} = -\gamma_{mm'}^J \cdot b_{N\ell m, N\ell m'}^{(2)} \cdot \begin{cases} \delta_{NN'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m', m \mp 1} \\ \delta(k-k') \delta_{\ell\ell'} \delta_{m', m \mp 1} \end{cases}$$

$$\gamma_{mm'}^J = (1 + \delta_{m1} \delta_{m'0} + \delta_{m0} \delta_{m'1})^{1/2} \cdot [(J-m+1)(J+m) \delta_{m', m-1} + (J+m+1)(J-m) \delta_{m', m+1}], \quad (40)$$

$$b_{N\ell m, N\ell m'}^{(2)} = [(\ell \mp m + 1)(\ell \pm m)]^{1/2}.$$

Как показано в работе<sup>/5/</sup>, имеет место соотношение:

$$\left\{ J(J+1) - 2m^2 + H_{i\rho, i\rho'}^{(2)} \right\} \delta_{mm'} + B_{i\rho, i\rho'}^{(2)} \equiv \langle i\rho J m_J | (\vec{J} - \vec{\ell})^2 | i\rho' J m_J \rangle, \quad (8)$$

где  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{\ell}$  - полный орбитальный момент системы трех тел, а  $\vec{L}$  и  $\vec{\ell}$  - орбитальные моменты относительного движения ядер и электрона соответственно. Все три момента заданы<sup>/2/</sup> во вращающейся системе координат  $(x, y, z)$  на функциях<sup>/5/</sup> (см. (1a), (2) и рис. 1), которые при  $R \rightarrow 0$  имеют вид:

$$\langle \varphi \varphi \theta \Phi | \ell m J m_J \rangle \equiv \Psi_{\ell m m_J}^{\ell J}(\varphi, \varphi, \theta, \Phi) = [2(1 + \delta_{m0})]^{-1/2} \left\{ Y_{\ell m}(\varphi, \varphi) \mathcal{D}_{m m_J}^J(\Phi, \theta, 0) + Y_{\ell -m}(\varphi, \varphi) \mathcal{D}_{-m m_J}^J(\Phi, \theta, 0) \right\} \quad (9)$$

Здесь  $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$  - сферические гармоники с положительной фазой Кондона-Шортли,  $D_{m m_j}^J(\Phi, \theta, 0)$  - нормированные  $D$  - функции Вигнера, определенные в работах<sup>/2/</sup>,  $m_j$  - собственное значение проекции  $J_z$  момента  $\vec{J}$  на ось  $Z$  лабораторной системы координат (см. рис. 1). Тогда, согласно работе<sup>/6/</sup>, имеем:

$$\langle \ell m J m_j | (\vec{J} - \vec{e})^2 | \ell m' J m_j \rangle = \sum_{L=|J-\ell|}^{J+\ell} G_{mL}^{\ell J} L(L+1) G_{m'L}^{\ell J}, \quad (8a)$$

где

$$G_{mL}^{\ell J} = (-1)^{\ell+m} \frac{1 + (-1)^{J-\ell-L}}{[2(1 + \delta_{m0})]^{1/2}} C_{\ell m J - m}^{L0} \quad (10)$$

- ортогональное преобразование Чэнга-Фано,  $C_{\ell m J - m}^{L0}$  - коэффициенты Клебша-Гордона<sup>/14/</sup>.

Решения системы уравнений (3a) ищем в виде

$$\chi_{N\ell P}^J(R) \equiv \chi_{N\ell P}^J(R) = \sum_{\alpha} G_{m\alpha}^{\ell J} R^{\alpha+1} A_{N\ell P}^{\alpha J}, \quad (11)$$

где  $A_{N\ell P}^{\alpha J}$  - столбец произвольных коэффициентов. После подстановки (11) в (3a) с учетом (8), (9) и (4a) получим систему линейных алгебраических уравнений для определения собственных значений  $x = \alpha(\alpha+1)$ ,  $\alpha = \alpha(\ell, J)$  и собственных векторов  $G_{m\alpha}^{\ell J}$ :

$$\sum_{m'} \left\{ \alpha(\alpha+1) \delta_{m m'} - \langle \ell m J m_j | (\vec{J} - \vec{e})^2 | \ell m' J m_j \rangle G_{m'\alpha}^{\ell J} \right\} = 0 \quad (12)$$

$$0 \leq (m, m') \leq \min(\ell, J).$$

Используя соотношение (8a) и свойство ортогональности преобразования (10) (см. Приложение), получим

$$G_{mL}^{\ell J} \left\{ \alpha(\alpha+1) - L(L+1) \right\} = 0, \quad (13)$$

т.е. вектор  $G_{mL}^{\ell J}$  при фиксированном  $L$  является собствен-

ным вектором системы (I2), которому соответствует собственное значение  $\alpha(\alpha+1) = L(L+1)$ , откуда

$$\begin{cases} \alpha = L & \text{— для регулярного решения} \\ \alpha = -(L+1) & \text{— для нерегулярного решения.} \end{cases} \quad (\text{I4})$$

Для каждой пары  $\ell$  и  $J$  все возможные значения  $L$  находятся по правилу треугольника  $|J-\ell| \leq L \leq J+\ell$  с учетом правила отбора (I0):  $1 + (-1)^{J-\ell-L} \neq 0$ , а  $m$  пробегает значения  $m = 0, 1, \dots, \min(\ell, J)$ .

Общее решение системы уравнений (3а) можно представить в виде

$$\chi_{NLmp}^J(R) = \sum_L G_{mL}^{\ell J} R^{L+1} A_{N\ell p}^{LJ} + \sum_L G_{mL}^{\ell J} R^{-L} A_{N\ell p}^{-(L+1)J} \quad (\text{I5})$$

Для регулярного решения  $A_{N\ell p}^{-(L+1)J} = 0$ , а ведущий коэффициент  $A_{N\ell p}^{LJ}$  определяется из соотношений (I5) при численном решении системы уравнений (3) с граничными условиями  $\chi_j(0) = \chi_j(R_m) = 0$  и условием нормировки  $\sum_{j=1}^{N_0} \int_0^{R_m} \chi_j^2(R) dR = 1$ .

В приложении приведен явный вид матриц  $G_{mL}^{\ell J}$  для некоторых наборов  $J \leq 3$  и  $\ell \leq 2$  и рассмотрены их некоторые свойства.

### 3. Асимптотика волновой функции системы трех частиц

при  $R \rightarrow 0$

В пределе  $R \rightarrow 0$  волновая функция системы трех частиц принимает вид

$$\Psi_{m_J}^J(\vec{z}, \vec{k}) = R^{-1} \sum_{N\ell} \mathcal{R}_{N\ell}(z) \sum_{m=0}^J \Psi_{mm_J}^{\ell J}(\vartheta, \varphi, \theta, \Phi) \chi_{N\ell m}^J(R) \quad (\text{I6})$$

Здесь сумма по  $N\ell$  соответствует суммированию по  $n_1$  и  $n_2$  в определении (5) с учетом (6),  $\mathcal{R}_{N\ell}(z)$  — радиальная кулоновская функция объединенного атома с зарядом  $Z$ , функция  $\Psi_{mm_J}^{\ell J}(\vartheta, \varphi, \theta, \Phi)$  определена соотношением (9), где  $\vartheta, \varphi$



характеризуют движение электрона во вращающейся системе координат  $(xyz)$  (см. рис. I).

С другой стороны, движение электрона при  $R \rightarrow 0$  более естественно <sup>/7/</sup> характеризовать углами  $\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}$  в лабораторной системе координат (см. рис. I) и вместо функции  $\Psi_{m_J}^{eJ}(\vartheta, \varphi, \theta, \Phi)$  использовать функцию ( $m_J = m_e + m_L$ ):

$$\tilde{\Psi}_{m_J}^{(eL)J}(\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}, \theta, \Phi) = \sum_{m_e = -l}^l C_{l m_e L m_L}^{J m_J} Y_{l m_e}(\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}) Y_{L m_L}(\theta, \Phi), \quad (17)$$

которая представляет собой угловую часть волновой функции (2) системы трех тел с полным моментом  $J$  в лабораторной системе координат. Эта последняя функция связана с функцией (9), заданной во вращающейся системе координат, преобразованием (10) Ченга-Фано <sup>/6/</sup>

$$\Psi_{m_J}^{eJ}(\vartheta, \varphi, \theta, \Phi) = \sum_{L=|J-l|}^{J+l} \tilde{\Psi}_{m_J}^{(eL)J}(\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}, \theta, \Phi) G_{m_L}^{eJ}. \quad (18)$$

Из определения (18) следует свойство (8а) преобразования  $G_{m_L}^{eJ}$  диагонализировать корриolisово взаимодействие, поскольку последнее появляется как следствие перехода из лабораторной системы координат во вращающуюся при описании системы трех тел. Подставляя (18) и (15) в (16) и используя ортогональность преобразования (10), получим для асимптотики регулярного решения выражение

$$\begin{aligned} \Psi_{m_J}^J(\vec{z}, \vec{R}) &= R^{-1} \sum_{Nl} R_{Nl}(z) \sum_L \tilde{\Psi}_{m_J}^{(eL)J}(\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}, \theta, \Phi). \\ &\cdot \sum_{m=c}^J G_{mL}^{eJ} \sum_{L'} G_{mL'}^{eJ} R^{L'+1} A_{Nl}^{L'J} = \\ &= \sum_{Nl} R_{Nl}(z) \sum_{L=|J-l|}^{J+l} \tilde{\Psi}_{m_J}^{(eL)J}(\tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi}, \theta, \Phi) R^L A_{Nl}^{LJ}. \end{aligned} \quad (19)$$

При  $R=0$  неисчезающий член в сумме (19) имеет квантовые числа  $L=0$ ,  $m_L=0$ , и поскольку  $C_{\ell m \ell 0}^{J m_J} = \delta_{\ell J} \delta_{m \ell m_J}$ , то с учетом (17) соотношение (19) примет вид:

$$\Psi_{m_J}^J(\vec{z}, 0) = \sum_N \mathcal{R}_{N\Gamma}(z) Y_{J m_J}(\vec{z}, \vec{\varphi}) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} A_{N\Gamma}^{0J}, \quad (20)$$

где, в соответствии с формулой (15),

$$\begin{aligned} A_{N\Gamma}^{0J} &= \left( G_{m_0}^{JJ} \right)^{-1} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-1} \chi_{N\Gamma m}^J(R) = \\ &= \left( G_{00}^{JJ} \right)^{-1} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-1} \chi_{N\Gamma 0}^J(R) = (2J+1)^{1/2} \lim_{R \rightarrow 0} R^{-1} \chi_{N\Gamma 0}^J(R). \quad (21) \end{aligned}$$

Формулы (20) и (21) дают практический рецепт построения главного члена асимптотики волновой функции системы трех тел в лабораторной системе координат по известным значениям функций  $\chi_{N\Gamma m}^J(R)$  при  $R \rightarrow 0$ , найденным при численном решении системы уравнений (3), соответствующих рассмотрению задачи во вращающейся системе координат. В действительности, как видно из (21), для нахождения коэффициентов  $A_{N\Gamma}^{0J}$  достаточно знать асимптотику функций  $\chi_{N\Gamma m}^J(R)$  с  $m=0$ . В случае  $J=1$  правильное поведение при  $R \rightarrow 0$  достигается лишь при включении в систему уравнений (3) потенциалов  $U_{\ell m, j m}(R)$ , осуществляющих связь  $\sigma$ - и  $\pi$ -состояний задачи двух центров (см. таблицы I и 2, где значения  $\chi_{2p\sigma u}^1(R)$  при  $R \rightarrow 0$  для случаев  $N_0=2$  и  $N_0=8$  различаются на несколько порядков величины).

#### 4. Численный пример

На рис. 2а,б и 3а,б приведены графики, а в таблицах I и 2 — некоторые значения функций  $R^{-1} \chi_{N\Gamma m}^J(R)$  основного ( $J=0, v=0$ ) и возбужденного вращательного ( $J=1, v=0$ )

состояний мезомолекулы  $p d \mu$   $\pi$ . Эти функции были найдены при численном решении задачи Штурма-Лиувилля для системы  $N_0 = 1 \times 2 = 2$  и  $N_0 = 4 \times 2 = 8$  уравнений (3) с массой  $M = 6,263$  и граничными условиями

$$\chi_{N_{\text{стр}}}(0) = 0 \quad \text{и} \quad \chi_{N_{\text{стр}}}(20) = 0.$$

Из таблиц и рисунков следует, что при  $R \rightarrow 0$  поведение волновых функций  $\chi_j(\kappa)$  описывается формулой (15) для состояний с  $J=0$  уже при  $N_0 = 2$ , а для состояний с  $J=1$  - лишь при  $N_0 = 8$ .

ТАБЛИЦА I.

Волновые функции связанных состояний ( $J=0, \nu=0$ ) и ( $J=1, \nu=0$ ) мезомолекулы  $p d \mu$ , полученные при численном решении задачи (3)-(4) для  $M=2$ .

R	J=0, $\nu=0$		J=1, $\nu=0$	
	$R^{-1} \chi_{1s \sigma_j}$	$R^{-1} \chi_{2p \sigma_u}$	$R^{-1} \chi_{1s \sigma_j}$	$R^{-1} \chi_{2p \sigma_u}$
0,001	1,532E-2	2,003E-6	2,656E-5	5,285E-8
0,002	1,541E-2	4,009E-6	5,328E-5	1,544E-7
0,003	1,551E-2	6,019E-6	8,017E-5	2,881E-7
0,005	1,570E-2	1,005E-5	1,345E-4	6,303E-7
0,010	1,619E-2	2,019E-5	2,731E-4	1,816E-6
0,015	1,669E-2	3,041E-5	4,159E-4	3,367E-6
0,020	1,719E-2	4,072E-5	5,631E-4	5,213E-6
0,030	1,822E-2	6,158E-5	8,702E-4	9,650E-6
0,050	2,036E-2	1,042E-4	1,537E-3	2,097E-5
0,075	2,322E-2	1,589E-4	2,473E-3	3,890E-5
0,100	2,626E-2	2,148E-4	3,524E-3	6,038E-5
0,500	9,480E-2	9,386E-4	3,508E-2	5,700E-4
1,000	2,014E-1	-2,954E-4	1,066E-1	3,674E-4
2,000	2,855E-1	-9,757E-3	2,165E-1	-6,756E-3
4,000	1,056E-1	-1,324E-2	1,256E-1	-1,658E-2
6,000	1,962E-2	-5,105E-3	3,460E-2	-1,011E-2
10,000	5,819E-4	-3,299E-4	2,422E-3	-1,589E-3
15,000	9,573E-6	-7,835E-6	1,315E-4	-1,182E-4
20,000	1,872E-7	-1,744E-7	8,966E-6	-8,730E-6

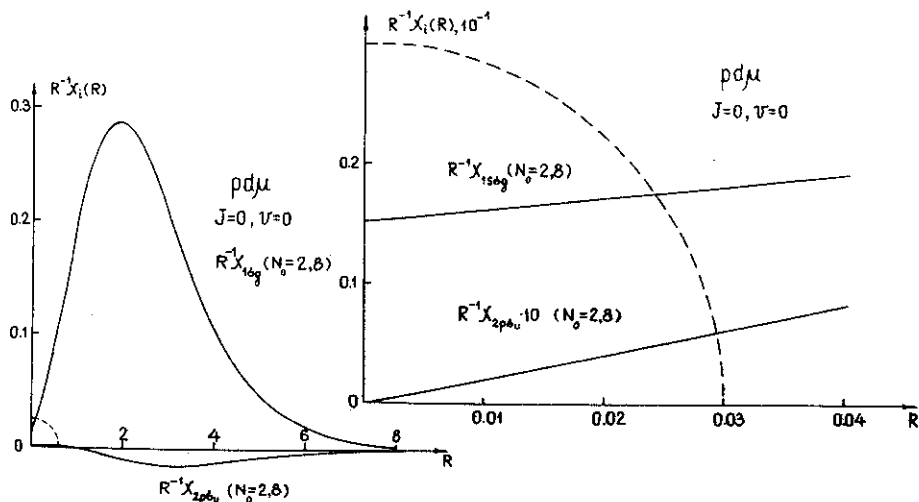


Рис. 2а, б. Волновые функции основного состояния ( $J=0, v=0$ ) мезомолекулы  $\rho d\mu$ : функция  $X_{156g}(R)$  превышает  $X_{2p6u}(R)$  во всей области изменения  $R$ , и ее численное значение при  $R \rightarrow 0$  не зависит от размерности  $N_0$  системы уравнений (3).

Без учета кориолисова взаимодействия  $B_{im, im'}^{(2)}$  в уравнении (3а) и, в частности, в двухуровневом приближении ( $N_0 = 2$ ) поведение решений (3) при  $R \rightarrow 0$  определяется выражением

$$X_{метр}^J(R) \sim R^\gamma, \quad (22)$$

$$\gamma = \frac{1}{2} + \left\{ \frac{1}{4} + J(J+1) + l(l+1) - 2m^2 \right\}^{1/2}.$$

В случае  $J=0$  отсюда следует правильная асимптотика  $\sim R^{\ell+1}$ , которая сохраняется при расширении системы уравнений от  $N_0 = 2$  до  $N_0 = 8$  (см. рис. 2а, 2б).

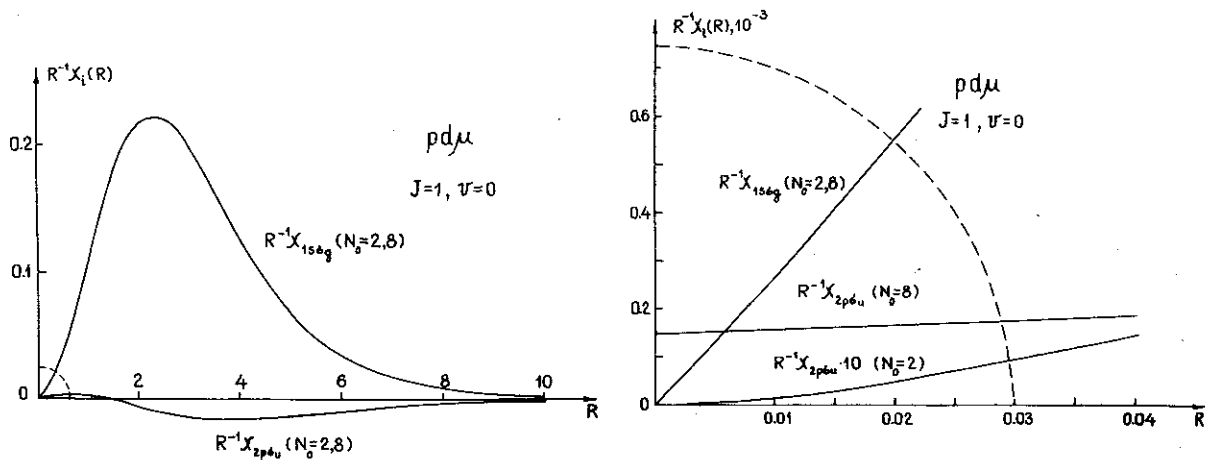


Рис. За,б. Волновые функции возбужденного состояния

( $J=1, v=0$ ) мезомолекулы  $pd\mu$ : при  $N_0=2$   
 во всей области изменения  $R$   $X_{1s\sigma_g}(R) \gg X_{2p\sigma_u}(R)$ ;  
 правильная асимптотика функции  $X_{2p\sigma_u}(R)$  следу-  
 ет из системы (3) при  $N_0=8$ , в этом случае при  
 $R \leq 0,005$   $X_{2p\sigma_u}(R) > X_{1s\sigma_g}(R)$ .

ТАБЛИЦА 2. Волновые функции связанного состояния ( $J = 1, v = 0$ ) мезомолекулы  $p_d\mu$  и отношения их квадратов, полученные при численном решении задачи (3)-(4) для  $N_0 = 8$

R	$R^{-1}\chi_{1s5g}$	$R^{-1}\chi_{2p5u}$	$R^{-1}\chi_{2p7u}$	$(\chi_{2p7u}/\chi_{2p5u})^2$	$R^{-1}\chi_{3d5g}$	$R^{-1}\chi_{3d7g}$	$(\chi_{3d7g}/\chi_{3d5g})^2$
0,001	2,618E-5	1,504E-4	2,127E-4	2,000E+0	1,035E-7	1,267E-7	1,500E+0
0,002	5,253E-5	1,513E-4	2,140E-4	2,000E+0	2,076E-7	2,542E-7	1,500E+0
0,003	7,904E-5	1,523E-4	2,153E-4	2,000E+0	3,123E-7	3,824E-7	1,500E+0
0,005	1,326E-4	1,542E-4	2,180E-4	1,999E+0	5,234E-7	6,410E-7	1,500E+0
0,010	2,692E-4	1,590E-4	2,247E-4	1,997E+0	1,062E-6	1,300E-6	1,499E+0
0,015	4,101E-4	1,639E-4	2,314E-4	1,994E+0	1,617E-6	1,978E-6	1,498E+0
0,020	5,551E-4	1,689E-4	2,382E-4	1,990E+0	2,187E-6	2,675E-6	1,496E+0
0,030	8,580E-4	1,792E-4	2,520E-4	1,978E+0	3,379E-6	4,126E-6	1,491E+0
0,050	1,516E-3	2,008E-4	2,801E-4	1,946E+0	5,977E-6	7,263E-6	1,477E+0
0,075	2,438E-3	2,298E-4	3,164E-4	1,196E+0	9,672E-6	1,165E-5	1,450E+0
0,100	3,475E-3	2,609E-4	3,539E-4	1,840E+0	1,393E-5	1,657E-5	1,415E+0
0,500	3,477E-2	8,604E-4	1,071E-3	1,550E+0	1,591E-4	1,610E-4	1,023E+0
1,000	1,063E-1	7,204E-4	1,972E-3	7,497E+0	5,385E-4	5,315E-4	9,740E-1
2,000	2,171E-1	-6,327E-3	2,393E-3	1,431E-1	4,740E-4	1,388E-3	8,571E+0
4,000	1,259E-1	-1,597E-2	6,407E-4	1,610E-3	-3,515E-3	1,131E-3	1,035E-1
6,000	3,396E-2	-9,710E-3	4,335E-5	1,994E-5	-1,979E-3	3,332E-4	2,835E-2
10,000	2,247E-3	-1,483E-3	-5,547E-6	1,399E-5	-8,391E-5	1,556E-5	3,449E-2
15,000	1,163E-4	-1,049E-4	-3,523E-7	1,128E-5	-2,092E-6	4,718E-7	5,086E-2
20,000	7,569E-6	-7,375E-6	-2,014E-8	7,458E-6	-1,146E-7	2,167E-8	3,574E-2

При  $J \neq 0$  вместо асимптотики (22) следует использовать асимптотику (15), которая получена с учетом кориолисова взаимодействия (см. рис. 3а, 3б). Для получения этой асимптотики при численном решении системы уравнений (3) необходимо расширить ее от  $N_0 = 2$  до  $N_0 = 8$  и тем самым учесть зацепление пар состояний  $2\rho\sigma_u - 2\rho\pi_u$  и  $3d\sigma_g - 3d\pi_g$ . Из явного выражения для матриц  $G_{ml}^{LJ}$ , приведенных в Приложении, следуют соотношения

$$\left(\chi_{2\rho\pi_u} / \chi_{2\rho\sigma_u}\right)^2 = 2 \quad \text{и} \quad \left(\chi_{3d\pi_g} / \chi_{3d\sigma_g}\right)^2 = \frac{3}{2}, \quad (23)$$

которые начинают выполняться с точностью  $\sim 10^{-3}$ , начиная с  $R = 0,02$  (в единицах  $a_{m\alpha} = \frac{\hbar^2}{m_\alpha e^2}$ ,  $e = \hbar = m_\alpha = 1$ , см. табл. 2). Отметим, что связь с  $\delta$ -состояниями ( $m=2$ ) возникает лишь при  $J = 2$ , так как всегда  $m \leq J$ .

Соотношения (23) могут служить для контроля вычислений при решении системы уравнений (3) (см. табл. 2).

### 5. З а к л ю ч е н и е

В предыдущих работах<sup>/5/</sup> нами было показано, что все известные трудности, характерные для двухуровневого приближения ( $N_0 = 2$ ) адиабатического метода решения задачи трех тел (неверное начало отчета энергий, неправильная асимптотика решений при  $R \rightarrow \infty$  и т.д.), исчезают, если в разложении (2) использовать достаточно полный набор ( $N_0 \gg 1$ ) базисных двухцентровых функций. Точно такая же ситуация возникает при нахождении асимптотики решений (2) в пределе  $R \rightarrow 0$ .

При  $R \rightarrow 0$  волновая функция  $\Psi(\vec{r}, \vec{R})$  системы трех тел претерпевает ряд различных, связанных между собой изменений:

а) происходит разделение электронного и ядерного движений, т.е. зависимость от координат  $\vec{z}$  и  $\vec{R}$  факторизуется;

б) изменяется ось квантования орбитального момента  $\vec{L}$  электронного движения: от оси  $\vec{R}$  вращающейся системы координат (связанной с вектором  $\vec{R}$ ) к оси  $Z$  лабораторной системы координат;

в) одновременно с этим происходит изменение аргументов  $(r, \vartheta, \varphi) \rightarrow (r, \tilde{\vartheta}, \tilde{\varphi})$  волновых функций электрона, т.е. движение электрона описывается теперь в лабораторной системе координат  $(XYZ)$ , а не во вращающейся  $(xyz)$ , как при равновесных значениях  $R$ ;

г) зависимость от углов  $\Theta$  и  $\Phi$  и асимптотика (15), (19) радиальных функций  $X_j(\kappa)$  определяется моментом  $L$  относительного движения ядер, хотя уравнения (3) и исходное разложение (2) для функции  $\Psi(\vec{z}, \vec{R})$  записаны в представлении полного момента  $J$  системы трех тел. В данной работе показано, что все эти свойства предельного перехода  $R \rightarrow 0$  естественно следуют из асимптотического решения системы уравнений (3) без дополнительных искусственных преобразований (типа функции включения и т.д.), если размерность  $N_0$  системы (3) выбрана достаточно большой.

Полученные в данной работе соотношения весьма важны при описании ядерной реакции синтеза в  $\mu$ -мезомолекулах изотопов водорода <sup>15</sup>, при постановке граничных условий задачи рассеяния для реакций типа <sup>16</sup>:



а также для построения асимптотики волновой функции  $\Psi(\vec{z}, \vec{R})$  при  $R \rightarrow \infty$  ( $z \ll R$ ) с точностью до членов  $\sim R^{-2}$  включительно, которая будет рассмотрена в последующих работах.



В заключение авторы благодарят Д.Бакалова, Ю.Н.Демкова, И.В.Комарова, Л.Н.Сомова и М.П.Файмана за полезные обсуждения, один из авторов (С.И.В.) благодарит Ч.Кларка за обсуждения некоторых аспектов преобразования Ченга-Фано.

## П Р И Л О Ж Е Н И Е

Ортогональное преобразование  $G_{mL}^{\ell J} = (G_{Lm}^{\ell J})^+$  удовлетворяет соотношениям ортогональности

$$\sum_m G_{mL}^{\ell J} G_{mL'}^{\ell J} = \delta_{LL'}$$

$$\sum_L G_{mL}^{\ell J} G_{m'L}^{\ell J} = \delta_{mm'}$$

Здесь верхние индексы матрицы преобразования фиксированы,

$L$  нумерует столбцы матрицы и принимает значения

$|J-\ell| \leq L \leq |J+\ell|$ , совместимые с правилами отбора (10),

$m$  нумерует строки матрицы и пробегает ряд значений

$$m = 0, 1, \dots, \min(\ell, J).$$

Матрицы  $G_{mL}^{\ell J}$  (10) системы уравнений (12) при значениях  $J \leq 3$ ,  $\ell \leq 2$  имеют вид:

$$J=0, \quad \ell=L=0; \quad G_{mL}^{\ell J} = \delta_{mL}$$

$$J>0, \quad \ell=0, \quad L=J; \quad G_{mL}^{\ell J} = \delta_{mL}$$

$$\begin{aligned} J=1, \ell=1; \\ L=0, 2; \end{aligned} \quad G_{mL}^{\ell J} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} J=1, \ell=2; \\ L=1, 3; \end{aligned} \quad G_{mL}^{\ell J} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$J=2, \ell=1;$$

$$L=1, 3;$$

$$C_{mL}^{\ell J} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$J=2, \ell=2;$$

$$L=0, 2, 4;$$

$$C_{mL}^{\ell J} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\sqrt{\frac{2}{7}} & 3\sqrt{\frac{2}{35}} \\ \sqrt{\frac{2}{5}} & -\sqrt{\frac{1}{7}} & -4/\sqrt{35} \\ \sqrt{\frac{2}{5}} & 2/\sqrt{7} & 1/\sqrt{35} \end{pmatrix}$$

$$J=3, \ell=1;$$

$$L=2, 4;$$

$$C_{mL}^{\ell J} = \frac{1}{\sqrt{7}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -2 \\ 2 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

$$J=3, \ell=2;$$

$$L=1, 3, 5;$$

$$C_{mL}^{\ell J} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{35} & -2/\sqrt{15} & \sqrt{10/21} \\ 4/\sqrt{35} & -1/\sqrt{15} & -\sqrt{10/21} \\ \sqrt{2/7} & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{21} \end{pmatrix}$$

#### Л и т е р а т у р а

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. Наука, М., 1976.
2. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, 576;  
Nielson Н.Н. Encyclopedia of Physics, v. 37, part I, Springer-Verlag, Berlin, 1959, p. 167.
3. Крониг Р. Полосатые спектры и строение молекул. ОНТИ, Харьков, 1935.
4. Van Vleck J.H. Phys. Rev., 1929, 33, 467-506;  
J. Chem. Phys., 1936, 4, 327-338.
5. Ponomarev L.I. and Vinitzky S.I. J. Phys., 1979, B12, 567;  
Ponomarev L.I., Vinitzky S.I. and Vukajlović F.R. J. Phys., 1980, B13, 847;  
Вукайлович Ф.Р., Пономарев Л.И., Сомов Л.Н. Препринт ОИЯИ Р4-80-442, Дубна, 1980.

6. Chang E.S. and Fano U. Phys. Rev., 1972, A6, 173.
7. Винацкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И., Пузынина И.В.,  
Пузынина Т.П., Сомов Л.Н., Трускова Н.Ф.  
ЖЭТФ, 1980, 79, 698.
8. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВМИФ, 1968, 8, 1256;  
Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна, 1970.
9. Трускова Н.Ф. Сообщение ОИЯИ PII-10207, Дубна, 1976.  
Препринт ОИЯИ PII-II218, Дубна, 1978.
10. Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Truskova N.F., J. Phys.,  
1978, B11, 3861.
11. Ponomarev L.I. and Somov L.N. J. Comput. Phys., 1976, 20,  
183; Ponomarev L.I., Puzynina T.P. and Somov L.N. J. Phys.,  
1977, B10, 1335.  
Пономарев Л.И., Славянов С.Ю., Сомов Л.Н. Препринт ОИЯИ,  
Р4-13028, Дубна, 1980.
12. Faifman M.P., Ponomarev L.I. and Vinitzky S.I. J. Phys.,  
1976, B9, 2255;  
Винацкий С.И., Пономарев Л.И., Файфман М.П. Препринт ОИЯИ,  
Р4-9312, Дубна, 1975.
13. Винацкий С.И., Мележик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П.,  
Сомов Л.Н., Сообщение ОИЯИ Р5-12787, Дубна, 1979; Меле-  
жик В.С., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Сообще-  
ние ОИЯИ Р5-12789, Дубна, 1979.
14. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Харсэвский В.К. Квантовая  
теория углового момента, Наука, Л., 1975.
15. Зельдович Я.Б., Герштейн С.С. УФН, 1960, 71, 581.  
Gerstein S.S., Ponomarev L.I. Phys. Lett., 1977, 72B, 80.
16. Ponomarev L.I. "Mesic Atomic and Mesic Molecular Processes  
in the Hydrogen Isotope Mixtures", VI Int. Conf. on Atomic  
Physic, Riga, 17-22, August 1978. Proc. p. 182, Zinante and  
Plenum Press, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 ноября 1980 года.