

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

5484/2-81

9/4-81

P4-81-515

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

СХОДИМОСТЬ АДИАБАТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ
В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ
С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Направлено в ЖЭТФ

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

Уравнение Шредингера задачи трех тел с кулоновским взаимодействием - две положительно заряженные частицы /ядра/ а и б с зарядами и массами $(Z_a M_a)$ и $(Z_b M_b)$ и отрицательно заряженная частица с /электрон или μ^- -мезон, $Z_c = -1$, $m_c = m_e$ или m_μ / - имеет вид^{1/}:

$$(\hat{H} - E_{n\tau}) \Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = 0. \quad /1/$$

Здесь R - расстояние между ядрами а и б, r - расстояние частицы с до середины отрезка R, n и τ - квантовые числа, характеризующие состояние системы трех тел.

Набор квантовых чисел $n = (N \ell m)$ водородоподобного атома с зарядом $Z = Z_a + Z_b$, в который переходит система трех тел в пределе $R \rightarrow 0^{1/2}$, характеризует движение частицы с в поле ядер а и б. Набор $\tau = (v J m_J \lambda)$ характеризует относительное движение ядер, J - полный момент системы трех тел, m_J - его проекция, $\lambda = \pm(-1)^J$ - полная четность системы, v - колебательное квантовое число.

Гамильтониан системы трех тел имеет вид^{3/} /в единицах $e = \hbar = m_a = 1$ /

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M} \left\{ \left(\vec{V}_R + \frac{\kappa}{2} \vec{V}_r \right)^2 - \frac{(1+\kappa)^2}{4} \Delta_r \right\} - \frac{1}{2} \Delta_r - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b} + \frac{Z_a Z_b}{R}, \quad /2/$$

где

$$\frac{1}{M} = m_a \left(\frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right), \quad \frac{1}{m_a} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{M_a}, \quad \kappa = \frac{M_b - M_a}{M_b + M_a}, \quad /2a/$$

r_a и r_b - расстояние частицы с до ядер а и б.

В адиабатическом представлении задачи трех тел волновую функцию системы $\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R})$ ищем в виде разложения^{1,3/}

$$\Psi_{n\tau}(\vec{r}, \vec{R}) = R^{-1} \sum_{m=-\xi}^{\xi} \left[\frac{1}{2}(1 + \delta_{0m}) \right]^{1/2} \left\{ \sum_{N=1}^{N_0} \sum_{\ell=0}^{N-1} \phi_{N\ell m}(\vec{r}; R) \chi_{N\ell|m|}^{Jv}(R) + \sum_{\ell_0=0}^{\ell_0} \int_{k_0}^{k_m} dk \phi_{\ell m}(\vec{r}; k, R) \chi_{\ell|m|}^{Jv}(k, R) \right\} D_{mmJ}^J(\Phi, \Theta, 0), \quad /3/$$

где $\xi = \min(\ell, J)$, функции $\phi_{N\ell m}(\vec{r}; R)$ и $\phi_{\ell m}(\vec{r}; k, R)$ - регулярные и ограниченные решения задачи двух центров квантовой механики ².

$$\{\hat{h} - E_{N\ell m}(R)\} \phi_{N\ell m}(\vec{r}; R) = 0, \quad /4a/$$

$$\{\hat{h} - k^2/2\} \phi_{\ell m}(\vec{r}; k, R) = 0 \quad /4б/$$

с гамильтонианом

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b}, \quad /4в/$$

соответствующие дискретному и непрерывному спектрам, Θ и Φ - угловые переменные вектора $R = \{R, \Theta, \Phi\}$, D-функции Вигнера $D_{mm}^J(\Phi, \Theta, 0)$ нормированы на единицу.

При подстановке разложения /3/ в уравнение /1/ и усреднении по координатам \vec{r} , Θ , Φ , придем к системе обыкновенных дифференциальных уравнений ^{/1/}

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{jv} - U_{ii}^J(R) \right\} \chi_i(R) = \sum_{j \neq i}^{N_i} U_{ij}(R) \chi_j(R) + \quad /5а/$$

$$+ \sum_s^{N_s} \int_{k_0}^{k_m} dk U_{js}(k, R) \chi_s(k, R),$$

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2M\epsilon_{jv} - U_{ss}^J(k, R) \right\} \chi_s(k, R) = \sum_j^{N_j} U_{sj}(k, R) \chi_j(R) +$$

$$+ \sum_{s' \neq s}^{N_s} \int_{k_0}^{k_m} dk' U_{ss'}(k, k', R) \chi_{s'}(k', R), \quad /5б/$$

где мы ввели сокращенные обозначения $j \equiv (N\ell m)$, $s \equiv (\ell m)$, $\chi_j(R) \equiv \chi_{N\ell m}^{jv}(R) = |j\rangle$, $\chi_s(k, R) \equiv \chi_{\ell m}^{jv}(k, R) = |ks\rangle$, $U_{ii}^J(R) = \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + \frac{2M}{R} + U_{ii}(R)$, а эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$, $U_{sj}(R)$, $U_{ss'}(k, k', R)$, определенные в ^{/1/}, вычислены в работах ^{/4-8/}; энергия связи $-\epsilon_{jv} = -(E_{nr} - E_{1a})$ системы трех тел отсчитывается от энергии $E_{1a} = -1/2$ основного состояния изолированного атома (M_a, m_c) .

В пределе $N_i \rightarrow \infty$, $N_s \rightarrow \infty$, $k_0 \rightarrow 0$, $k_m \rightarrow \infty$ система уравнений /5/ с граничными условиями

$$\chi_j(0) = \chi_s(k, 0) = \chi_j(R_m) = \chi_s(k, R_m) = 0, \quad /6/$$

$$R_m \rightarrow \infty$$

эквивалентна исходному уравнению /1/, так как разложение /3/ в этом пределе - точное, поскольку решения /4/ образуют полный набор.

В предыдущих работах авторов^{/1/} система уравнений /5/ использовалась для вычисления энергии состояний μ -мезомолекул изотопов водорода при значениях $N_i = 13$, $N_s = 6$, $k_0 = 0,2$, $k_m = 10$ с потенциалами $U_{ij}(R)$ и т.д., заданными на сетке узлов $R = 0,1(0,1)20(1)R_m = 60$.

Достигнутая при этом точность вычислений $\sim 0,1$ эВ недостаточна для детального описания процессов резонансного образования μ -мезомолекул^{/15/}, и ее необходимо улучшить по крайней мере на порядок. Для этого прежде всего необходимо вычислить вклад в энергию ϵ_{J_V} высших состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ задачи двух центров, т.е. вычислить ϵ_{J_V} в пределе $N_i \rightarrow \infty$, $k_0 \rightarrow 0$. При решении этой задачи в данной работе использованы значения $N_i = 23$, $R_m = 100$, интегрирование по переменной k в уравнениях /5/ выполнено так же, как и в работе^{/1/}, $N_s = 6$.

2. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Система уравнений /5/-/6/ решалась с помощью программы ВААР^{/9/}, созданной на основе алгоритмов, использующих непрерывный аналог метода Ньютона^{/10/}. Матрица $\hat{U}(R)$ эффективных потенциалов системы уравнений /5/ имеет вид, представленный в работе^{/1/}. Матрица $\hat{U}(R)$ состоит из блоков $U_{ij}(R)$, $U_{is}(k, R)$ и $U_{ss}(k, k', R)$ размерности 2×2 , например,

$$U_{ij}(R) = \begin{pmatrix} U_{ig,jg} & U_{ig,ju} \\ U_{iu,jg} & U_{iu,ju} \end{pmatrix} \quad \text{и т.д.,} \quad /7/$$

где состояния $|ig\rangle$ и $|iu\rangle$ при $R \rightarrow \infty$ образуют пары с одинаковым набором параболических квантовых чисел $[n_1 n_2 m]$, отличающиеся лишь четностью $p = g, u = (-1)^p$.

В программе ВААР использована матрица $\hat{U}(R)$, состоящая из "строки" $U_{ij}(R)$, $U_{1s}(k, R)$, "диагонали" $U_{jj}(R)$, $U_{ss}(k, R)$ и "столбца" $U_{j1}(R)$, $U_{s1}(k, R)$. Специальное исследование, предпринятое в работе^{/1/}, показывает, что включение потенциалов $U_{ij}(R)$ при $i \neq j \neq 1$ в систему уравнений /5/ не изменяет результатов вычислений энергии ϵ_{J_V} мезомолекул с относительной точностью $\sim 10^{-4}$.

Решив систему уравнений /5/ с граничными условиями /6/, найдем энергию ϵ_{J_V} и волновые функции $\chi_i(R)$ и $\chi_s(k, R)$ с

* Правила соответствия: $n_1 = N - l - 1$, $n_2 = \frac{1}{2}(l - m - \frac{1 - (-1)^{l-m}}{2})$.

относительной точностью $\sim 10^{-4}/1,9$, после чего можно определить, какой вклад в энергию ϵ_{J_V} вносит каждое из состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$. Для этого представим ϵ_{J_V} в виде /1/

$$\bar{\epsilon}_{J_V} = \epsilon_{J_V}^{(0)} + \epsilon_{J_V}^{(1)} + \epsilon_{J_V}^{(2)}, \quad /8/$$

где*

$$\epsilon_{J_V}^{(0)} + \epsilon_{J_V}^{(1)} = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} \chi_1(R) \left(-\frac{d^2}{dR} + U_{11}^J(R) \right) \chi_1(R) dR,$$

$$\epsilon_{J_V}^{(2)} = \sum_{N=2}^{N_0} \epsilon_N^{(2)} + \int_{k_0}^{k_m} \epsilon^{(2)}(k) dk = \epsilon_d^{(2)} + \epsilon_c^{(2)},$$

$$\epsilon_N^{(2)} = \sum_{\ell=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{\xi} \epsilon_{N\ell m}^{(2)}, \quad \epsilon^{(2)}(k) = \sum_{\ell=0}^{\ell_0} \sum_{m=0}^{\xi} \epsilon_{\ell m}^{(2)}(k), \quad /9/$$

$$\epsilon_j^{(2)} = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} \chi_1(R) U_{1j}(R) \chi_j(R) dR,$$

$$\epsilon_s^{(2)}(k) = (2M)^{-1} \int_0^{R_m} \chi_1(R) U_{1s}(k, R) \chi_s(k, R) dR.$$

Выражения /8/, /9/ по форме аналогичны разложению ϵ_{J_V} во втором порядке теории возмущений Шредингера^{12/} по параметру $(2M)^{-1}$. Однако в действительности их точность выше, поскольку априорная оценка точности $\sim (2M)^{-3}$ не учитывает локализации волновых функций системы трех тел при конечных значениях R , что приводит к дополнительному подавлению вклада высших состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ в энергию связи ϵ_{J_V} . Кроме того, функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$, используемые при вычислении $\bar{\epsilon}_{J_V}$ по формулам /8/, /9/, получены не по теории возмущений, а при точном решении системы /5/.

Из табл.1 видно, что значения $\bar{\epsilon}_{J_V}$, вычисленные по формулам /8/, /9/, совпадают со значениями ϵ_{J_V} , найденными при численном интегрировании системы уравнений /5/ по программе ВААР с относительной точностью $10^{-2} - 10^{-3}$. Это позволяет использовать формулы /8/, /9/ для исследования сходимости разложения /3/.

* В дальнейшем мы ограничимся исследованием состояний с полным моментом $J=0$ и $J=1$. В этом случае достаточно учитывать лишь состояния $j = |N\ell m\rangle$ и $s = |\ell m\rangle$ с $m \leq \xi = 1$.

Таблица 1

Энергии ϵ_{Jv} /эВ/ мезомолекул и поправки к ним $\delta\epsilon_{Jv}$ /эВ/ *

	pdM ($J=0, v=0$)	ddM ($J=1, v=0$)	dtM ($J=1, v=0$)	ddM ($J=1, v=1$)	dtM ($J=1, v=1$)
ϵ_{Jv}	-221,761	-226,715	-232,542	-1,9606	-0,7017
$\bar{\epsilon}_{Jv}$	-221,498	-226,572	-232,420	-1,9649	-0,6882
$\delta\epsilon_{Jv}$	- 0,221	- 0,104	- 0,095	-0,0587	-0,0535

Таблица 2

Вклад $\epsilon_N^{(2)}$ /эВ/ различных состояний $|j\rangle$ дискретного спектра задачи двух центров в энергию ϵ_{Jv} мезомолекул *

N	pdM ($J=0, v=0$)	ddM ($J=1, v=0$)	dtM ($J=1, v=0$)	ddM ($J=1, v=1$)	dtM ($J=1, v=1$)
1	-213,429	-223,956	-229,755	-0,5495	0,8405
2	- 2,996	- 0,605	- 0,736	-0,3121	-0,4602
3	- 2,084	- 0,922	- 0,742	-0,5753	-0,5203
4	- 0,402	- 0,171	- 0,167	-0,0918	-0,0912
5	- 0,161	- 0,069	- 0,068	-0,0450	-0,0390
6	- 0,083	- 0,036	- 0,035	-0,0225	-0,0202
$\sum_{N=7}^g \epsilon_N^{(2)}$	- 0,038	- 0,014	- 0,015	-0,0102	-0,0097
$\epsilon_d^{(2)} = \sum_{N=2}^g \epsilon_N^{(2)}$	- 6,766	- 1,817	- 1,864	-1,0568	-1,1406
$\delta\epsilon_d^{(2)}$	- 0,149	- 0,071	- 0,064	-0,0398	-0,0360

* Все вычисления выполнены при значениях масс частиц: $m_\mu = 206,769$; $M_p = 1836,152$; $M_d = 3670,481$; $M_t = 5496,918$ и значениях $2Ry = 27,2107$ эВ.

Таблица 3

Вклады $\epsilon_{Nl_m}^{(2)}$ /эВ/ в энергию связи ϵ_{Jv} состояния ($J = 1, v = 1$)
 мезомолекулы $d\mu$

(l_m)	N	2	3	4	5	6	7	8	9	$\sum_{N=2}^9 \epsilon_{Nl_m}^{(2)}$
(00)	0,2771	0,0510	0,0188	0,0092	0,0052	-	-	-	-	0,3612
(10)	0,1750	0,0095	0,0024	0,0010	0,0005	0,0003	-	-	-	0,1886
(20)		0,3955	0,0496	0,0173	0,0083	0,0047	-	-	-	0,4754
(30)			0,0057	0,0020	0,0011	0,0006	0,0004	-	-	0,0097
(40)				0,0034	0,0018	0,0011	0,0007	-	-	0,0070
(50)					0,0002	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0003
(60)						0,0000	-	-	-	0,0000
(70)							0,0000	-	-	0,0000
(11)	0,0084	0,0011	0,0003	0,0002	0,0001	-	-	-	-	0,0101
(21)		0,0633	0,0137	0,0055	0,0028	0,0017	-	-	-	0,0870
(31)			0,0006	0,0002	-	-	-	-	-	0,0008
(41)				0,0003	0,0002	-	-	-	-	0,0005
$-\epsilon_N^{(2)}$	0,4602	0,5203	0,0912	0,0390	0,0202	0,0085	0,0012	0,0000	0,0000	$\epsilon_d^{(2)} = -1,1406$
$-\int_d(E)$	0,9204	3,5122	1,4596	1,2179	1,0886	-	-	-	-	

В табл. 2 приведены вклады $\epsilon_N^{(2)}/9/$ в $\epsilon_d^{(2)}$ различных состояний мезомолекул $pd\mu$, $dd\mu$ и $dt\mu$. При вычислении вклада $\epsilon_N^{(2)}$ от оболочек $N=7,8,9$ учтена лишь часть состояний с различными ℓ и m /в таблице приведен их суммарный вклад/.

В табл. 3 представлены вклады $\epsilon_{N\ell m}^{(2)}$ в энергию состояния $(J=1, v=1)$ мезомолекулы $dt\mu$, которые позволяют увидеть сходимость разложений /3/ и /9/ по адиабатическому базису. Прочерком отмечены состояния оболочек $N=7+9$, которые не учитывались в проведенных расчетах /вклад каждого из них $\leq 0,002$ эВ/.

В табл. 4 и 5 приведены аналогичные вклады $\epsilon_c^{(2)}(k)$ и $\epsilon_s^{(2)}(k)$ в $\epsilon_c^{(2)}$ от состояний непрерывного спектра задачи двух центров. При вычислении $\epsilon_c^{(2)}$ учтены все вклады $\epsilon_{\ell m}^{(2)}(k)$ с $m=0, \ell=0,1,\dots,7$ и $m=1, \ell=1,2,3,4$. Неучтенные вклады $\epsilon_s^{(2)} = \epsilon_{\ell m}^{(2)} = \int_{k_0}^{k_m} \epsilon_{\ell m}^{(2)}(k) dk$ от более высоких ℓ не превышают $0,01$ эВ^{1/2}. По данным табл. 5 можно оценить вклад состояний $|k\ell m\rangle$ с большими ℓ .

Таблица 4

Вклад $\epsilon_c^{(2)}(k)$ /эВ/ состояний $|ks\rangle$ непрерывного спектра задачи двух центров в ϵ_{Jv}

k	$pd\mu$ ($J=0, v=0$)	$dd\mu$ ($J=1, v=0$)	$dt\mu$ ($J=1, v=0$)	$dd\mu$ ($J=1, v=1$)	$dt\mu$ ($J=1, v=1$)
0,2	-0,697	-0,325	-0,297	-0,1846	-0,1702
0,4	-1,178	-0,535	-0,494	-0,2943	-0,2789
0,6	-1,375	-0,597	-0,560	-0,3125	-0,3086
0,8	-1,340	-0,554	-0,527	-0,2652	-0,2770
1,0	-1,192	-0,463	-0,448	-0,2014	-0,2224
2,0	-0,439	-0,116	-0,128	-0,0373	-0,0500
5,0	-0,031	-0,002	-0,005	-0,0006	-0,0012
10,0	-0,001	-0,000	0,000	0,0000	0,0000
$\epsilon_c^{(2)}$	-2,303	-0,799	-0,801	-0,3586	-0,3881
$\delta\epsilon_c^{(2)}$	-0,072	-0,033	-0,031	-0,0189	-0,0175

Таблица 5

Вклады $\epsilon_s^{(2)}(k)$ /эВ/ в энергию связи $-\epsilon_{Jv}$ состояния ($J=1, v=1$)
мезомолекулы $dt\mu^*$

$S=[n_1, m]$	k	0,2	0,3	0,4	0,5	1,0	2,0	5,0	$-\epsilon_s^{(2)}$
[00]		0,0612	0,0838	0,0986	0,1058	0,0732	0,0104	0,0001	0,1215
[10]		0,0650	0,0885	0,1035	0,1100	0,0713	0,0128	0,0002	0,1259
[20]		0,0172	0,0254	0,0326	0,0382	0,0360	0,0126	0,0003	0,0635
[30]		0,0003	0,0006	0,0010	0,0017	0,0056	0,0057	0,0004	0,0149
[01]		0,0234	0,0317	0,0369	0,0390	0,0265	0,0060	0,0001	0,0478
[11]		0,0032	0,0048	0,0064	0,0076	0,0099	0,0026	0,0001	0,0145
$-\epsilon^{(2)}(k)$		0,1702	0,2347	0,2789	0,3024	0,2224	0,0500	0,0012	$-\epsilon_c^{(2)} = 0,3881$
$-\epsilon_c(E)$		0,8511	0,7822	0,6972	0,6047	0,2224	0,0250	0,0002	

* Приведены вклады от g^- , u^- пар состояний с $\ell = 2n_2 + m$
и $\ell = 2n_2 + m + 1$.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ $\delta\epsilon_d^{(2)}$ И $\delta\epsilon_c^{(2)}$

При вычислении вкладов $\delta\epsilon_d^{(2)}$ и $\delta\epsilon_c^{(2)}$ от высших состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ задачи двух центров прежде всего учтем то обстоятельство, что волновые функции $\chi_j(R)$ и $\chi_s(k, R)$ экспоненциально затухают вне области $R \approx 3$ /при больших значениях энергии связи $-\epsilon_{jv}$ / или $R \approx 7$ /для слабосвязанных состояний/ ^{1,12}. Это означает, что при вычислении величин $\epsilon_j^{(2)}$ и $\epsilon_s^{(2)}(k)$ матричные элементы $U_{1j}(R)$ и $U_{1s}(k, R)$ достаточно знать лишь в ограниченной области изменения $R \leq 7$. В этой области двухцентровые функции $\phi_j(\vec{r}, R)$ и $\phi_s(\vec{r}; k, R)$ с хорошей точностью аппроксимируются одноцентровыми функциями водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = Z_a + Z_b$ при выполнении условий ¹²:

$$p_j = \frac{R}{2} \{-2E_j(R)\}^{1/2} = \frac{RZ}{2N} \leq 1, \quad c = \frac{kR}{2} \leq 1, \quad /10/$$

т.е. при $N \geq 7$ и $k \leq 0,3$. При этих значениях N и k волновые функции дискретного и непрерывного спектров атома водорода переходят друг в друга при замене $Z/N \rightarrow ik$ ^{13,14}.

Соотношения /9/ при $N \gg 1$ и $k \ll 1$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_d^{(2)} &= \sum_{N=N_0+1}^{\infty} \epsilon_N^{(2)} = \int_{N_1=N_0+1}^{\infty} \epsilon_N^{(2)} dN = \int_{N_1}^{\infty} \frac{N^3}{Z^2} \epsilon_N^{(2)} d\left(-\frac{Z^3}{2N^2}\right) = \int_{E_1}^0 f_d(E) dE, \\ \delta\epsilon_c^{(2)} &= \int_0^{k_0} \epsilon_c^{(2)}(k) dk = \int_0^{k_0} \frac{\epsilon_c^{(2)}(k)}{k} d\left(-\frac{k^2}{2}\right) = \int_0^{E_0} f_c(E) dE, \end{aligned} \quad /11/$$

где $E = -\frac{Z^2}{2N^2}$ и $E = \frac{k^2}{2}$ для дискретного и непрерывного спектров атома водорода соответственно, а функции

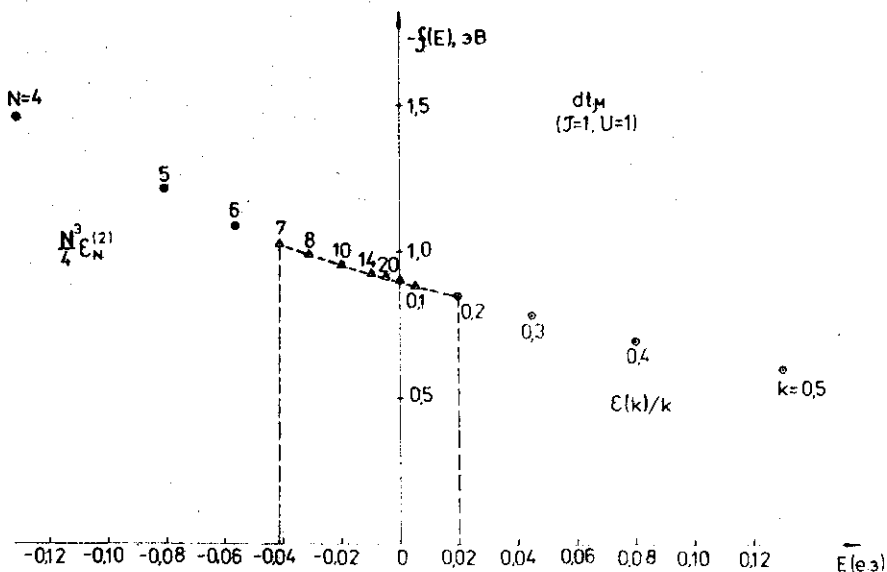
$$f_d(E) = \frac{N^3}{Z^2} \epsilon_N^{(2)} \quad \text{и} \quad f_c(E) = \frac{\epsilon_c^{(2)}(k)}{k} \quad /12/$$

совпадают между собой в пределе $N \rightarrow \infty$ и $k \rightarrow 0$:

$$f_d(0) = f_c(0) = A, \quad /12a/$$

т.е. на границе дискретного и непрерывного спектров атома водорода, что согласуется с известными результатами ^{13,14}.

На рисунке приведены значения функций $f_d(E)$ и $f_c(E)$, вычисленные по формулам /12/ при $N = 4, 5, 6$ и $k = 0,2; 0,3; 0,4; 0,5$; а также интерполяционная функция $f(E)$, представляющая их в



Вычисление вкладов $\delta \epsilon_d^{(2)}$ и $\delta \epsilon_c^{(2)}$ в энергию ϵ_{Jv} состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы dt_M . Кружки - значения функций $f_d(E) = \frac{N^3}{4} \epsilon_N^{(2)}$ и $f_c(E) = \epsilon^{(2)}(k)/k$, вычисленные по формулам /9/ и /12/. Треугольники - значения функции $f(E) = A + B \cdot E + C \cdot E^2$ /13/ с коэффициентами, приведенными в табл. 6. При $E=0$, что соответствует $k=0$ или $N=\infty$, $f(0) = A$. Вклады $\delta \epsilon_d^{(2)} = 0,036$ эВ и $\delta \epsilon_c^{(2)} = 0,018$ эВ равны площадям, ограниченным пунктиром и отрезками оси абсцисс $E_1 \leq E \leq 0$ и $0 \leq E \leq E_0$ соответственно. Они вычислены по формулам /14/ при $N_1=7, E_0=0,02, f_d(E) = f_c(E) = f(E)$. Значения E приведены в единицах $e = h = m_a = 1$.

области $E_1 \leq E \leq E_0$ *. Функция $f(E)$ выбрана в виде

$$f(E) = A + B \cdot E + C \cdot E^2,$$

/13/

* Значения $f_d(E)$ при $N=7, 8$ и 9 меньше соответствующих значений функции $f(E)$, поскольку при вычислении $\epsilon_N^{(2)}$ использована только часть состояний $|Nlm\rangle$: при $N=7$ - только 7 состояний из 13, при $N=8$ - только 4 из 15, при $N=9$ - только 1 состояние из 17. Поэтому для построения $f(E)$ значения $f_d(E)$ при $N=7, 8, 9$ не использовались.

а ее коэффициенты, определенные по значениям функций $f_d(E)$ и $f_c(E)$ в точках $N=5,6$ и $k=0,2; 0,3$, представлены в табл.6.

Поправки $\delta\epsilon_d^{(2)}$ и $\delta\epsilon_c^{(2)}$ вычисляются по формулам

$$\delta\epsilon_d^{(2)} = \sum_{N_1=7}^{N_2} \frac{4}{N^3} \left(A - B \frac{2}{N^2} + C \frac{4}{N^4} \right) + \frac{2A}{N_2^2} - \sum_{N=7}^9 \epsilon_N^{(2)}, \quad /14/$$

$$\delta\epsilon_c^{(2)} = A \cdot E_0 + \frac{1}{2} B \cdot E_0^2 + \frac{1}{3} C \cdot E_0^3$$

при $E_0 = 0,03$, $N_1 = 7$, $N_2 = 40$, которые следуют из определений /9/, /12/ и рисунка.

Погрешность $\Delta(\delta\epsilon_{Jv})$ вычисления вклада

$$\delta\epsilon_{Jv} = \delta\epsilon_d^{(2)} + \delta\epsilon_c^{(2)} \quad /15/$$

высших состояний $|j\rangle$ и $|ks\rangle$ в энергию связи ϵ_{Jv} определяется погрешностями вычисления коэффициентов A , B и C и погрешностью вычисления значений $\epsilon_N^{(2)}$ и $\epsilon^{(2)}(k)$ по формулам /9/.

Как следует из сравнения значений ϵ_{Jv} и $\bar{\epsilon}_{Jv}$, последняя погрешность не превышает 10^{-2} от значения ϵ_{Jv} и может служить для оценки погрешности при вычислении $\epsilon_N^{(2)}$ *.

Значения $\delta\epsilon_{Jv}$ для глубоких уровней мезомолекул составляют величину $\sim 0,2$ эВ, а для уровней $(J=1, v=1)$ мезомолекул $d\mu$ и $t\mu$ не превышают значения $\sim 0,05$ эВ. Погрешности $\Delta(\delta\epsilon_{Jv})$ вычисления величин $\delta\epsilon_{Jv}$ определяются точностью $\Delta A/A = 10^{-2}$ определения коэффициентов функции $f(E)$. Они приведены в табл.6 и равны $\sim 0,004$ эВ для сильносвязанных и $\sim 0,001$ эВ для слабосвязанных $(J=1, v=1)$ состояний мезомолекул $d\mu$ и $t\mu$.

* В действительности различие между ϵ_{Jv} и $\bar{\epsilon}_{Jv}$ обусловлено в основном погрешностью вычисления величины $\epsilon_{Jv}^{(0)} + \epsilon_{Jv}^{(1)}$ по формуле /9/: как известно, точность формул /9/ увеличивается с ростом N , поэтому абсолютная погрешность при вычислении $\epsilon_N^{(2)}$ в случае $N \gg 1$ меньше, чем общая погрешность при вычислении $\bar{\epsilon}_{Jv}$.

Таблица 6

Коэффициенты разложения функции $f(E)$ и значения $\delta_c^{(2)}$, $\delta_c^{(2)}$, δ_{Jv} и $\Delta(\delta_{Jv})$

	$pd\mu$ ($J=0, v=0$)	$dd\mu$ ($J=1, v=0$)	$dt\mu$ ($J=1, v=0$)	$dd\mu$ ($J=1, v=1$)	$dt\mu$ ($J=1, v=1$)
$A \pm \Delta A$	$-3,68$ $\pm 0,06$	$-1,70$ $\pm 0,05$	$-1,57$ $\pm 0,03$	$-0,975$ $\pm 0,039$	$-0,900$ $\pm 0,019$
$B \pm \Delta B$	11 ± 2	$3,8 \pm 1,7$	$4,6 \pm 0,9$	$3,1 \pm 1,2$	$2,7 \pm 0,6$
$C \pm \Delta C$	-62 ± 50	-17 ± 49	-23 ± 26	-22 ± 34	-13 ± 18
$\sum \epsilon_d^{(2)}$	$-0,149$	$-0,071$	$-0,064$	$-0,0398$	$-0,0360$
$\sum \epsilon_c^{(2)}$	$-0,072$	$-0,033$	$-0,031$	$-0,0189$	$-0,0175$
$\sum \epsilon_{Jv}$	$-0,221$	$-0,104$	$-0,095$	$-0,0587$	$-0,0535$
$\pm \Delta(\delta_{Jv})$	$\pm 0,004$	$\pm 0,003$	$\pm 0,002$	$\pm 0,0026$	$\pm 0,0012$

Таблица 7

Вклады $\epsilon_{n_1 n_2 m}^{(2)}$ /эВ/ в энергию связи - ϵ_{Jv} состояния ($J=1, v=1$) мезомолекулы $dt\mu$

$[n_2 m]$	n_1	0	1	2	3	4	5
[00]			0,2867	0,0534	0,0198	0,0097	0,0055
[10]	0,4012		0,0517	0,0183	0,0090	0,0051	
[01]	0,0717		0,0148	0,0058	0,0030	0,0017	
[20]	0,0035		0,0019	0,0012	0,0008		
[11]	0,0009		0,0004				
[30]	0,0000						

Таблица 8

Вклад $\epsilon_{n_2 m}^{(2)}$ состояний непрерывного спектра в энергию $\epsilon_c^{(2)}$.

$[n_2 m]$	pd_m ($J=0, v=0$)	dd_m ($J=1, v=0$)	dt_m ($J=1, v=0$)	dd_m ($J=1, v=1$)	dt_m ($J=1, v=1$)
[00]	-0,878	-0,309	-0,252	-0,1239	-0,1215
[10]	-1,116	-0,144	-0,250	-0,0944	-0,1259
[20]	-0,275	-0,060	-0,071	-0,0440	-0,0635
[30]	-0,034	-0,006	-0,008	-0,0125	-0,0149
[01]	0,000	-0,265	-0,207	-0,0585	-0,0477
[11]	0,000	-0,015	-0,012	-0,0254	-0,0145
$\epsilon_c^{(2)}$	-2,303	-0,799	-0,801	-0,3586	-0,3881

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненное исследование дает регулярный способ вычисления вклада $\delta\epsilon_{Jv}$ в энергию связи мезомолекул от высших состояний $|N\ell m\rangle$ и $|k\ell m\rangle$ задачи двух центров при $N \rightarrow \infty$ и $k \rightarrow 0$. Из него следует, что использование ограниченного набора базисных двух-центровых функций в разложении [3] волновой функции системы трех тел при вычислении энергий ϵ_{Jv} состояний (Jv) мезомолекул не является препятствием для нахождения ϵ_{Jv} с высокой точностью. Полученный результат слабо зависит от малости формального параметра разложения $(2M)^{-1}$ /который в случае мезомолекул равен $\sim 0,1/$ и может быть использован для вычисления энергий связи таких систем, как $e^+e^-e^+$ и H^- , для которых $(2M)^{-1} = 1/2$ и $=1$ соответственно.

В заключение авторы благодарят И.В.Пузынина, Т.П.Пузынину, Л.Н.Сомова за помощь, Н.Ф.Трускову за предоставление программы вычисления эффективных потенциалов задачи трех тел, связывающих состояния дискретного спектра задачи двух центров, Д.И.Абрамова, И.В.Комарова за многочисленные и плодотворные обсуждения постановки и результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, с.698 -712.
2. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
3. Popomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1979, 12, p.567-584.
4. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВМ и МФ, 1968, 8, с.1256-1268; ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970.
5. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-10207, Дубна, 1976; ОИЯИ, Р11-11218, Дубна, 1978.
6. Popomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1978, 11, p.3861-74.
7. Popomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1977, 10, p.1335-43.
8. Popomarev L.I., Slavjanov S.Yu., Somov L.N. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1978, 13, p.3797-805.
9. Мележик В.С. и др. ОИЯИ, Р5-12790, Дубна, 1979.
10. Жидков Е.П., Макаренко Г.И., Пузынин И.В. ЭЧАЯ, 1973, 4, вып.1, с.127-166.
11. Мележик В.С. и др. ОИЯИ, Р5-12789, Дубна, 1979.
12. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЖЭТФ, 1977, 5, с.1670-1686.
13. Фок В.А. Начала квантовой механики. "Наука", М., 1976.
14. Бете Г., Солпитер Е. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. ИЛ, М., 1960.
15. Виницкий С.И. и др. ЖЭТФ, 1978, 74, с.849-861.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 июля 1981 года.