объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

А 16

Р4-88-746

А.Г.Абрашкевич*, Д.Г.Абрашкевич*, С.И.Виницкий,
И.В.Пузынин, И.В.Химич*

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ЭКСТРАПОЛЯЦИИ ПО КОНСТАНТЕ СВЯЗИ

Направлено в журнал "Physica Scripta"

* Ужгородский государственный университет

1988

Введение

Исследование резонансной структуры сечений рассеяния электронов на атомах и ионах и расчет параметров резонансных состояний представляют большой интерес для прикладных разделов физики: лазерной спектроскопии, физики плазмы, квантовой химии, физики верхних слоев атмосферы, астрофизики и др. Существует ряд методов для расчета характеристик резонансных состояний атомов и ионов при возбуждении электронами. Среди них наиболее известными являются: метод сильной связи каналов [1,2], R-матричный метод [3], матричный вариационный метод [4,5], метод наложения конфигураций [6], многоконфигурационный метод Хартри-Фока [7], гиперсферический адиабатический (HSA) подход [8,9]. Все эти методы используют разложение полной волновой функции системы - налетающий электрон плюс атом - по полному набору базисных функций атома. Нахождение таких базисных функций сводится к решению соответствующей задачи на собственные значения гамильтониана двухэлектронного атома. Волновую функцию налетающего электрона, принадлежащую непрерывному спектру, находят из решения системы связанных интегро-дифференциальных уравнений с граничными условиями излучения [1,2]. Это связано с различным асимптотическим поведением волновых функций. Таким образом, для решения задачи рассеяния и вычисления параметров резонансов необходимо решить две, вообще говоря, разные задачи - задачу Штурма-Лиувилля и задачу Коши. Для решения этой проблемы целесообразно использовать L^2-методы [10], позволяющие извлекать информацию о рассеянии из данных, получаемых при решении задачи на собственные значения. Способы получения и использования необходимой информации могут быть разными (см., напр., обзоры [10-12,14]). Наиболее известными в L^2-подходе являются: метод комплексных координат [11,12], комплексный метод наложения конфигураций [13], метод детерминантов Фредгольма [14], J-матричный метод [15], метод моментов Стильтьеса-Чебышева [16], Т-матричный подход [17], методы сведения задачи рассеяния к спектральной задаче на основе непрерывного аналога метода Ньютона [18] и, наконец, группа методов, использующая идею аналитического продолжения: по энергии [19-21] и по константе связи [22-27].

В настоящей работе проводится дальнейшее развитие метода аналитического продолжения по константе связи для описания резонансных состояний в многоканальной теории рассеяния электронов на атомах, начатое в серии работ [26-27]. Основу метода составляет знание структуры комплексной плоскости константы связи g парциальной многоканальной S-матрицы и определение резонанса как аналитического продолжения соответст-

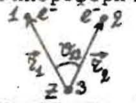
Объединенный институт ядерных исследований БИБЛИОТЕКА

вующего связанного состояния по g [22,23,26]. Заметим, что в одноканальном рассеянии метод аналитического продолжения по константе связи был применен для описания некоторых ядерных систем в работах [23]. Результаты вычислений параметров (положения E_r и ширины Γ_r) резонансов формы ряда отрицательных ионов (Be^-, Li^-, He^-), выполненные в приближении Хартри-Фока [27], указывают на необходимость дополнительного учета корреляционных и поляризационных эффектов. Уточнение результатов в рамках метода наложения конфигураций или многоконфигурационного метода Хартри-Фока требует трудоемких вычислений. В то же время использование коллективных переменных (гиперсферических координат) в рамках адиабатического подхода [8,9] позволяет учесть коррелированное движение электронов, используя небольшое число уравнений.

В настоящей работе метод аналитического продолжения по константе связи в рамках HSA-подхода применен для вычисления ${}^1P^0$ резонанса формы в $e^- - H$ рассеянии.

I. Адиабатический гиперсферический базис

Уравнение Шредингера для двухэлектронного атома с зарядом Z в гиперсферических координатах



$$R=\sqrt{r_1^2+r_2^2}\,,\quad \alpha=\mathrm{arctg}(r_2/r_1),\ \hat{r}_i=\{\theta_i,\varphi_i\}\,,\ i=1,2,$$

имеет вид $(e=\hbar=m_e=1)$ [8]

$$\hat{H}\Psi(R,\Omega)=2E\,\Psi(R,\Omega), \tag{I}$$

$$\hat{H}=-\frac{1}{R^5}\frac{\partial}{\partial R}R^5\frac{\partial}{\partial R}+h(R),\qquad \Omega=\{\alpha,\hat{r}_1,\hat{r}_2\}\,,$$

где $h(R)$ есть угловая часть гамильтониана на сфере $S^5_R(\Omega)$, зависящая от R как от параметра

$$h(R)=T(R)+R^{-1}V(\alpha,\vartheta_{12}),$$

$$T(R)=-\frac{1}{R^2}\left[\frac{1}{\sin^2 2\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2 2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\vec{L}_1^2}{\cos^2\alpha}-\frac{\vec{L}_2^2}{\sin^2\alpha}\right], \tag{2}$$

$$V(\alpha,\vartheta_{12})=-\frac{2Z}{\cos\alpha}-\frac{2Z}{\sin\alpha}+\frac{2}{(1-\sin 2\alpha\cos\vartheta_{12})^{1/2}}\,. \tag{3}$$

Потенциальная энергия $R^{-1}V(\alpha,\vartheta_{12})$ обращается в бесконечность в точке тройного столкновения частиц $R=0$ и в точках парных столкновений

$$\begin{array}{lll} (I3) & \vartheta_{12}\in[0,\pi]\,, & \alpha=\pi/2\,,\\ (23) & \vartheta_{12}\in[0,\pi]\,, & \alpha=0\,,\\ (I2) & \vartheta_{12}=0\,, & \alpha=\pi/4\,. \end{array} \tag{4}$$

Разложим волновую функцию $\Psi(R,\Omega)$ по полному набору $\{\Phi_\mu(R;\Omega)\}_{\mu=1}^{\infty}\in L^2(S^5)$ решений задачи

$$h(R)\Phi_\mu(R;\Omega)=R^2U_\mu(R)\Phi_\mu(R;\Omega), \tag{5}$$

заданному с инвариантной мерой $d\Omega^\gamma=R^{2\gamma}d\Omega_{S^5}$, $\gamma=3/2$, на сфере $S^5\equiv\Omega$ [29]

$$\langle\mu|\nu\rangle=\int d\Omega^\gamma\,\Phi^*_\mu(R;\Omega)\Phi_\nu(R;\Omega)=\delta_{\mu\nu}, \tag{6}$$

$$R^{2\gamma}\sum_\mu\Phi_\mu(R;\Omega)\Phi^*_\mu(R;\Omega')=\delta(\Omega-\Omega'). \tag{6'}$$

Здесь $U_\mu(R)$ есть собственные значения (термы), зависящие от R как от параметра, для фиксированного набора квантовых чисел μ. Разложение Ψ имеет вид

$$\Psi(R,\Omega)=R^{-1}\sum_\mu F_\mu(R)\,\Phi_\mu(R;\Omega)\,. \tag{7}$$

Подстановка разложения (7) в уравнение (I) и усреднение по базисным функциям $\Phi_\mu(R;\Omega)$ приводят к системе связанных обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов разложения $F_\mu(R)$:

$$\sum_\mu\left\{-D^2_{\nu\mu}(R)+\left[\tilde{U}_\mu(R)+R^{-2}[\gamma(\gamma+1)+\mathcal{K}(\mathcal{K}+4)]-2E\right]\langle\nu|\mu\rangle\right\}F_\mu(R)=0,$$

$$\tilde{U}_\mu(R)=U_\mu(R)-\mathcal{K}(\mathcal{K}+4)R^{-2}, \tag{8}$$

$$F_\mu(0)=F_\mu(\infty)=0,\quad R\in[0,\infty),\ \mu,\nu=1,2,\ldots \tag{9}$$

где $[\gamma(\gamma+1)+\mathcal{K}(\mathcal{K}+4)]R^{-2}$ - центробежный потенциал, $\mathcal{K}=l_1+l_2+2n$ - гипермомент, l_1 и l_2 - орбитальные моменты электронов, n - число узлов функции

$$\Phi_{\mathcal{K}}=C_n\sin^{l_1}\alpha\cos^{l_2}\alpha\,P_n^{(l_2+1/2,\,l_1+1/2)}(2\alpha)\,\mathcal{Y}^{LM}_{l_1l_2}(\hat{r}_1,\hat{r}_2)\in L^2(S^5)$$

по переменной α [8,9], $\mathcal{Y}^{LM}_{l_1l_2}$ - бисферический базис в $L^2(S^2(\hat{r}_1)\times S^2(\hat{r}_2))$ [8,9], а $P_n^{(l_2+1/2,\,l_1+1/2)}(2\alpha)$ - полином Якоби. Здесь L и M - полный момент и его проекция на ось Z,

$$D_{\mu\nu}=\langle\mu|\nu\rangle\frac{d}{dR}+\langle\mu|\frac{d}{dR}|\nu\rangle+\gamma R^{-1}\langle\mu|\nu\rangle \tag{I0}$$

- ковариантная производная [29].

В результате разложения базисных функций $\Phi_\mu(R;\Omega)$ по бисферическим гармоникам $\mathcal{Y}^{LM}_{\ell_1\ell_2}(\hat{r}_1,\hat{r}_2)$ приходим к системе связанных дифференциальных уравнений для коэффициентов этого разложения $g_{\ell_1\ell_2}(R;\alpha)$ [8]

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha^2}-\frac{\ell_1(\ell_1+1)}{\cos^2\alpha}-\frac{\ell_2(\ell_2+1)}{\sin^2\alpha}+R^2U_\mu(R)\right]g_{\ell_1\ell_2}(R;\alpha)+$$
$$+R\sum_{\ell_1'\ell_2'}\left\langle\mathcal{Y}^{LM}_{\ell_1\ell_2}(\hat{r}_1,\hat{r}_2)\middle|V(\alpha,v_{12})\middle|\mathcal{Y}^{LM}_{\ell_1'\ell_2'}(\hat{r}_1,\hat{r}_2)\right\rangle g_{\ell_1'\ell_2'}(R;\alpha)=0. \tag{11}$$

Коэффициенты $\langle\mathcal{Y}^{LM}_{\ell_1\ell_2}|V(\alpha,v_{12})|\mathcal{Y}_{\ell_1'\ell_2'}\rangle$ определены в [8,9]. Граничные условия, выражающие ограниченность волновой функции и учитывающие принцип Паули, имеют вид [8]

$$g_{\ell_1\ell_2}(R;0)=0,$$
$$g_{\ell_1\ell_2}(R;\pi/4)=(-1)^{\ell_1+\ell_2+L+S}g_{\ell_2\ell_1}(R;\pi/4),$$
$$\frac{dg_{\ell_1\ell_2}(R;\pi/4)}{d\alpha}=(-1)^{\ell_1+\ell_2+L+S+1}\frac{dg_{\ell_2\ell_1}(R;\pi/4)}{d\alpha}. \tag{12}$$

Исследование сходимости гиперсферического адиабатического разложения для гелиеподобных систем, выполненное в работе [28], указывает на быструю сходимость этого разложения, что позволяет ограничиться в разложении (7) первыми N_R членами.

2. Аналитические свойства S-матрицы как функции константы связи и энергии

Для применения метода аналитического продолжения по константе связи необходимо знать аналитические свойства S-матрицы как функции константы связи g и энергии E. Такое исследование в рамках многоканальной теории рассеяния электрона на атоме было выполнено в серии работ [26-27]. В недавней работе [29] была развита корректная адиабатическая формулировка многоканальной задачи рассеяния в системе трех частиц. В данном разделе, следуя общей схеме [26] и основываясь на результатах работы [29], мы проведем исследование аналитических свойств многоканальной S-матрицы.

Перепишем уравнение (8) в виде

$$\left[\hat{I}\frac{d^2}{dR^2}-\hat{I}\frac{\gamma(\gamma+1)+\varkappa(\varkappa+4)}{R^2}+g\hat{V}(R)+\hat{K}^2\right]\hat{F}(R)=0, \tag{13}$$

где $\hat{I}$, $\hat{V}(R)$, $\hat{K}$ - квадратные матрицы размерности $N_R\times N_R$, определяемые соотношениями:

$$I_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu},\quad \mu,\nu=1,2,\dots,N_R,$$

$$V_{\mu\nu}(R)=2\langle\mu|\nu\rangle\frac{d}{dR}A_{\mu\nu}(R)+A^2_{\mu\nu}(R)-U_\mu(R)\delta_{\mu\nu},$$
$$A_{\mu\nu}(R)=\langle\mu|\frac{d}{dR}|\nu\rangle+\gamma R^{-1}\langle\mu|\nu\rangle, \tag{14}$$

$K_\alpha=\sqrt{2(E-\varepsilon_\alpha)}$ - канальные импульсы $\hat{K}$, ε_α - энергии возбуждения α-го канала, g - параметр, характеризующий интенсивность "включения" взаимодействия. При $g=0$ взаимодействие отсутствует, значение $g=1$ отвечает реальному физическому случаю.

Асимптотика волновой функции $F_g(K,R)$ при больших R имеет вид [29]

$$F_g(K,R)\xrightarrow[KR\to\infty]{}-(2i)^{-1}\left[\hat{I}\cdot e^{-i\left(KR-\frac{\pi(\gamma+\varkappa)}{2}\right)}-e^{i\left(KR-\frac{\pi(\gamma+\varkappa)}{2}\right)}\bar{S}(K)\right], \tag{15}$$

где $\bar{S}$ есть парциальная многоканальная матрица рассеяния. Решение уравнения (13) с асимптотическим условием (15) удовлетворяет матричному интегральному уравнению Липпмана-Швингера

$$F_g(K,R)=U_\varkappa(KR)+g\int_0^\infty dR'N_\varkappa(K;R,R')F_g(K,R'), \tag{16}$$

где $N_\varkappa(K;R,R')$ есть ядро интегрального уравнения (16)

$$N_\varkappa(K;R,R')=G_\varkappa(K;R,R')V(R'), \tag{17}$$

$$G_\varkappa(K;R,R')=e^{-i\pi(\gamma+\varkappa)}K^{-1}U_\varkappa(KR_<)\widetilde{W}^{(+)}_\varkappa(KR_>), \tag{18}$$
$$R_<=\min(R,R'),\quad R_>=\max(R,R')$$

- функция Грина, удовлетворяющая уравнению

$$\left[I\cdot\frac{d^2}{dR^2}-I\cdot\frac{\gamma(\gamma+1)+\varkappa(\varkappa+4)}{R^2}+K^2\right]G_\varkappa(K;R,R')=\delta(R-R'), \tag{19}$$

а

$$U_\varkappa(KR)=\sqrt{\frac{\pi KR}{2}}\,\dot{J}_{\gamma+\varkappa+\frac12}(KR),\quad v_\varkappa(KR)=\sqrt{\frac{\pi KR}{2}}\,N_{\gamma+\varkappa+\frac12}(KR),$$
$$W^{(+)}_\varkappa(KR)=ie^{i\pi(\gamma+\varkappa)}\sqrt{\frac{\pi KR}{2}}\,H^{(1)}_{\gamma+\varkappa+\frac12}(KR),\quad W^{(-)}_\varkappa(KR)=-i\sqrt{\frac{\pi KR}{2}}\,H^{(2)}_{\gamma+\varkappa+\frac12}(KR)$$

- есть функции Бесселя, Неймана и Ганкеля (первого и второго рода) соответственно. Следуя общей схеме [30], введем регулярное решение

$$F_g^{reg}(K,R)=F^{(0)reg}(K,R)+g\int_0^R N_\varkappa(K;R,R')F_g^{reg}(K;R'), \tag{20}$$

удовлетворяющее граничному условию

$$\lim_{R\to 0} F_g^{reg}(K,R)\,R^{-(\gamma+\mathcal{X}+1)} = I\,. \qquad (21)$$

Регулярное решение может быть представлено в виде линейной комбинации матричных решений Йоста

$$F_g^{reg}(K,R) = -(2i)^{-1}\{F_g^-(K,R)K^{-1}\mathcal{F}_g^+(K) - F_g^+(K,R)K^{-1}\mathcal{F}_g^-(K)]\,, \qquad (22)$$

которые удовлетворяют уравнению (13) и граничным условиям

$$\lim_{R\to\infty} e^{\mp i\left(KR - \frac{\pi(\gamma+\mathcal{X})}{2}\right)} F_g^\pm(K,R) = I\,. \qquad (23)$$

Знак "+" и "-" отвечает расходящимся и сходящимся волнам. Здесь $\mathcal{F}_g^\pm(K)$ есть матрица Йоста, которая определяется как

$$\mathcal{F}_g^\pm(K) = W[F_g^\pm(K,R), F_g^{reg}(K,R)] = \tilde{F}_g^\pm(K,R)D(R)F_g^{reg}(K,R) - \{\widetilde{D(R)F_g^\pm(K,R)}\}F_g^{reg}(K,R),$$

где „~" означает транспонирование, а W -вронскиан.
Матрица Йоста $\mathcal{F}_g^\pm(K)$ связана с решением Йоста соотношением

$$\mathcal{F}_g^\pm(K) = 2\left(\gamma+\mathcal{X}+\tfrac{1}{2}\right)\lim_{R\to 0} R^{\gamma+\mathcal{X}} F_g^\pm(K,R)\,, \qquad (24)$$

из которого следует, что регулярные решения имеют асимптотический вид

$$F_g^{reg}(K,R) \underset{KR\to\infty}{\sim} -(2i)^{-1}K^{-1}\left\{e^{-i\left(KR-\frac{\pi(\gamma+\mathcal{X})}{2}\right)}\mathcal{F}_g^+(K) - e^{i\left(KR-\frac{\pi(\gamma+\mathcal{X})}{2}\right)}\mathcal{F}_g^-(K)\right\}. \qquad (25)$$

Сравнение выражения (15) с выражением (25) при $R\to\infty$ приводит к следующему виду для матрицы рассеяния:

$$\bar{S}_g(K) = e^{i\pi\mathcal{X}}K^{-1}\mathcal{F}_g^-(K)[\mathcal{F}_g^+(K)]^{-1}K\,, \qquad (26)$$

которая в терминах нормированной функции Йоста

$$f_g^\pm(K) = \mathcal{F}_g^\pm(K)[(2\mathcal{X}+4)!!]^{-1}K^{\mathcal{X}+\gamma}e^{\mp\frac{i\pi\mathcal{X}}{2}}$$

примет вид

$$S_g(K) = K^{\frac{1}{2}}\bar{S}(K)K^{-\frac{1}{2}} = K^{-\frac{1}{2}}f_g^-(K)[f_g^+(K)]^{-1}K^{\frac{1}{2}}\,, \qquad (27)$$

причем $S^+S = SS^+ = I$.

Таким образом, задача исследования аналитических свойств S -матрицы сводится к исследованию аналитических свойств матриц Йоста $f_g^\pm(K)$.

Как показано в работе [31], функция $f_g^\pm(K)$ не обладает простыми аналитическими свойствами по энергии. Однако такими свойствами обладает детерминант от матрицы Йоста, который эквивалентен [31] определителю Фредгольма. А элементы S -матрицы выражаются через определитель Фредгольма $\Delta_g(K)$ с помощью простых соотношений [30]

$$S_{\alpha\alpha} = \frac{\Delta_g(\dots,-K_\alpha,\dots)}{\Delta_g(\dots,K_\alpha,\dots)}\,, \quad (S_{\alpha\beta})^2 = S_{\alpha\alpha}S_{\beta\beta} - \frac{\Delta_g(\dots,-K_\alpha,-K_\beta,\dots)}{\Delta_g(\dots,K_\alpha,K_\beta,\dots)}\,. \qquad (28)$$

Тем самым исследование аналитических свойств S -матрицы по энергии и константе связи сводится теперь к изучению аналитических свойств детерминанта Фредгольма. Подобное исследование удобно провести с помощью рекуррентного метода [30,31].

Рассмотрим интегральное уравнение (16). Его решение имеет вид

$$F_g(K,R) = U_\mathcal{X}(KR) + \frac{g}{\Delta_g(K)}\int_0^\infty dR'\,Y_g(K;R,R')\,U_\mathcal{X}(KR')\,, \qquad (29)$$

где $Y_g(K;R,R')$ - первый минор определителя Фредгольма.
Матрица $Y_g(K;R,R')$ находится из разложения в степенной ряд по константе g

$$Y_g(K;R,R') = \sum_{n=0}^\infty g^n Y_g^{(n)}(K;R,R'), \quad Y^{(0)}(K;R,R') = N_\mathcal{X}(K;R,R'). \qquad (30)$$

Члены ряда (30) удовлетворяют простым рекуррентным соотношениям [26,31]. Детерминант Фредгольма ищется в виде следующего разложения

$$\Delta_g(K) = 1 - \sum_{n=1}^\infty \frac{g^n}{n}\,Sp\int_0^\infty dR\,Y_g^{(n-1)}(K;R,R)\,. \qquad (31)$$

Для исследования свойств сходимости и регулярности рядов (30) и (31) используем оценки для функций $U_\mathcal{X}(KR)$, $W_\mathcal{X}^{(+)}(KR)$ и $G_\mathcal{X}(K;R,R')$ [32,34]

$$|U_\mathcal{X}(KR)| \le Ce^{|\nu|R}\left(\frac{|K|R}{1+|K|R}\right)^{\gamma+\mathcal{X}+1}, \quad |W_\mathcal{X}^{(+)}(KR)| \le Ce^{\nu R}\left(\frac{|K|R}{1+|K|R}\right)^{-\gamma-\mathcal{X}},$$

$$|G_\mathcal{X}(K;R,R')| \le Ce^{|\nu|(R-R')}\left(\frac{|K|R}{1+|K|R}\right)^{\gamma+\mathcal{X}+1}|K|^{-1}\left(\frac{|K|R'}{1+|K|R'}\right)^{-\gamma-\mathcal{X}}, \qquad (32)$$

$$\nu = \Im K, \quad 0 < R \le R'.$$

Для ядра $N_\mathcal{X}(K;R,R')$ получаем оценку

$$|N_{\alpha\beta}(K_\alpha;R,R')| \le Ce^{|\nu_\alpha|R_< - \nu_\alpha R_>}|V_{\alpha\beta}(R')|\left(\frac{R_<}{1+|K_\alpha|R_<}\right)^{\gamma+\mathcal{X}+1}\left(\frac{R_>}{1+|K_\alpha|R_>}\right)^{-\gamma-\mathcal{X}}. \qquad (33)$$

Применение неравенства Адамара [33, стр. 192] для оценки $Y^{(n)}(K;R,R')$ с учетом (33) и использование достаточного условия сходимости Даламбера показывают, что ряды $\Delta_g(K)$ и $Y_g(K;R,R')$ сходятся в g-плоскости при следующих ограничениях на потенциал

$$\int_0^\infty dR\, R\, |V_{\alpha\beta}(R)| < \infty\,, \quad \nu_\alpha \geqslant 0\,, \quad \alpha = 1,2,\dots,N, \tag{34}$$

$$\int_0^\infty dR\, R\, e^{2|\nu_\alpha|R}\, |V_{\alpha\beta}(R)| < \infty\,, \quad \nu_\alpha < 0\,. \tag{35}$$

Другими словами, $\Delta_g(K)$ и $Y_g(K;R,R')$ являются целыми аналитическими функциями константы связи g, а парциальная S-матрица $S_g(K)$ является мероморфной функцией g.

Аналогичное исследование свойств регулярности $\Delta_g(K)$ и $Y_g(K;R,R')$ по K_α показывает, что для обеспечения регулярности по K_α кроме условий (34) и (35) необходимо потребовать выполнения соответственно условий

$$\int_0^\infty dR\, R^2\, |V_{\alpha\beta}(R)| < \infty\,, \quad \nu_\alpha \geqslant 0\,, \tag{36}$$

$$\int_0^\infty dR\, R^2\, e^{2|\nu_\alpha|R}\, |V_{\alpha\beta}(R)| < \infty\,, \quad \nu_\alpha < 0\,. \tag{37}$$

Таким образом, при выполнении условий (34) и (36) (или (35) и (37)) S-матрица является мероморфной функцией импульсов всех каналов, заданных в своих верхних (или нижних) полуплоскостях. При выводе соотношений (34)-(37) предполагалось, что $Z = 1$ (интересующее нас $e^- - H$ рассеяние). В случае, если $Z > 1$ (рассеяние электрона на ионе), также можно показать [43], что многоканальная S-матрица является мероморфной функцией импульсов каналов K_α, заданных в соответствующих областях K_α-плоскости. В действительности нас интересует S-матрица как функция энергии. В этом случае каждый матричный элемент S-матрицы является при фиксированном g функцией энергии E, имеющей алгебраические точки ветвления второго порядка в порогах каналов $E = \mathcal{E}_\alpha$, а также полюса в тех точках, где

$$\det f_g(K) = \Delta_g(K) = 0. \tag{38}$$

Многозначность S-матрицы как функции E можно устранить, сконструировав соответствующую риманову поверхность (см., напр., [30,26]), на которой элементы S-матрицы будут мероморфными функциями энергии.

3. Локализация и характер движения полюсов S-матрицы в комплексной g-плоскости и на римановой E-поверхности

Применяя к уравнению (13) теорему Грина, получаем следующее соотношение, справедливое для полюсов, отвечающих связанным состояниям

$$\operatorname{Im} g_0 \int_0^\infty F^+_{g_0}(K,R)\, V(R)\, F_{g_0}(K,R)\, dR = 0, \tag{39}$$

из которого сразу следует, что $\operatorname{Im} g_0 = 0$. Это означает, что если при некотором $g = g_0$ имеется связанное состояние, то соответствующий полюс S-матрицы будет располагаться на вещественной g-оси. Будем считать теперь, что энергия может принимать комплексные значения. В этом случае применение теоремы Грина и использование асимптотического вида функций $F^\pm_{g_0}(K,R)$ приводит к выражению

$$\operatorname{Im} g_0 = -\Big[\lim_{R\to\infty} \vec{A}^+ \operatorname{Re} K^\circ e^{-2\operatorname{Im} K^\circ R} \vec{A} + 2 \operatorname{Re} K_1^\circ \operatorname{Im} K_1^\circ \int_0^\infty F^+_{g_0}(K^\circ,R) F_{g_0}(K^\circ,R)\, dR\Big]\Big[\int_0^\infty F^+_{g_0}(K^\circ,R)\, V(R)\, F_{g_0}(K^\circ,R)\, dR\Big]^{-1}, \tag{40}$$

$$2E = K_1^2 \quad (\mathcal{E}_1 = 0)\,, \quad \vec{\tilde{A}} \cdot \mathcal{F}^+_{g_0}(K) = 0.$$

Анализ уравнения (40) позволяет получить информацию о локализации полюсов в g-плоскости. Выделим в (40) определенный канал, например, с импульсом K_α°. Пусть $\mathcal{E}_\beta < E < \mathcal{E}_{\beta+1}$, где $\mathcal{E}_\beta$ - порог некоторого фиксированного канала β. В этом случае для всех каналов с $\alpha \leqslant \beta$ имеем

$$\operatorname{Im} K_\alpha^\circ = 0\,, \quad \operatorname{Re} K_\alpha^\circ > 0\,. \tag{41}$$

Выражение (40) переходит при этом в

$$\operatorname{Im} g_0 = -\sum_{\alpha=1}^{\beta} \operatorname{Re} K_\alpha^\circ |A_\alpha|^2 \Big[\sum_{\alpha,\alpha'=0}^{N} \int_0^\infty F^*_\alpha(K_\alpha^\circ,R)\, V_{\alpha\alpha'}(R)\, F_{\alpha'}(K_\alpha^\circ,R)\, dR\Big]^{-1}. \tag{42}$$

Для открытых каналов $A_\alpha = 0$ [26,34], поэтому для всех $\alpha \leqslant \beta$ имеем $\operatorname{Im} g_0 = 0$. Для всех закрытых каналов при $\alpha \geqslant \beta + 1$:

$$\operatorname{Re} K_\alpha^\circ = 0\,, \quad \operatorname{Im} K_\alpha^\circ > 0\,, \tag{42}$$

откуда, согласно (40), получаем $\operatorname{Im} g_0 = 0$. Таким образом, если энергия является вещественной, то полюса в комплексной g-плоскости будут локализованы на действительной g-оси. Справедливо и обратное утверждение [26]: полюс, расположенный на вещественной оси g-плоскости, соответствует связанному состоянию. Если энергия комплексна, то полюса S-матрицы будут располагаться согласно (40) в комплексной g-плоскости в верхней или нижней ее полуплоскости в зависимости от знаков числителя и знаменателя формулы (40).

Движение полюсов S-матрицы, отвечающих связанным состояниям, задается уравнением

$$\frac{dg_0}{dE} = \Big[\int_0^\infty F^+_{g_0}(K,R) F_{g_0}(K,R)\, dR\Big]\Big[\int_0^\infty F^+_{g_0}(K,R)\, V(R)\, F_{g_0}(K,R)\, dR\Big]^{-1} = \tag{43}$$

$$= 2g_0\left[\int_0^\infty F^+_{g_0}(K,R)F_{g_0}(K,R)dR\right]\left[\int_0^\infty F^+_{g_0}(K,R)\left(\frac{d^2}{dR^2}-\frac{\gamma(\gamma+1)+\mathcal{K}(\mathcal{K}+4)}{R^2}+K^2\right)F_{g_0}dR\right]^{-1}.$$

При выводе этого уравнения использовалась теорема Гельмана-Фейнмана. Направление движения полюсов определяется знаком правой части (43). Рассмотрим два частных случая, для которых удается оценить знак в правой части (43), а именно: а) адиабатическое приближение, в пренебрежении недиагональными матричными элементами радиальной связи, б) в пренебрежении связи закрытых каналов с открытыми. Тогда справедливо выражение

$$\{1/g_0\}\{dg_0/dE\} < 0. \tag{44}$$

Отсюда следует, что с возрастанием энергии полюсы $g_0(E)$ в g-плоскости, соответствующие связанным состояниям и расположенные на вещественной g-оси, будут двигаться вдоль этой оси в направлении меньших значений константы связи. При достижении критического значения $g = g_\alpha^{crit}$, отвечающего точке столкновения полюсов в E-плоскости при $E = \mathcal{E}_\alpha$, полюсы будут выходить в комплексную g-плоскость.

Локализация полюсов $E_0(g)$ определяется также выражением (40), а движение полюсов, соответствующих связанным состояниям, удовлетворяет уравнению, обратному (43). Классификация разных типов полюсов S-матрицы и картина их движения по многолистной римановой E-поверхности рассмотрены в [26]. Данная картина сохраняется и в ситуации общего положения, которая детально исследована в различных приближениях [44-47].

Сформулируем основной результат данного раздела: все основные типы состояний двухэлектронных атомных систем отождествляются с полюсами S-матрицы на соответствующих листах римановой E-поверхности, положения которых являются функциями константы связи g. Это дает возможность соответствующим изменением константы связи g переводить один тип состояний в другой, например, связанные состояния в резонансные. Таким образом, задача нахождения резонансных состояний сводится к двум более простым задачам. А именно, к задаче нахождения связанных состояний и последующего их перевода в резонансные состояния с помощью аналитического продолжения полюсных траекторий $E_0(g)$ по g из области связанных состояний в область резонансных состояний.

4. Описание связанных и резонансных состояний методом аналитического продолжения по константе связи

В качестве метода аппроксимации полюсных траекторий используем паде-аппроксиманты (ПА) второго рода [19,23,26,27]. Поскольку техника

описания разных типов резонансных состояний (резонансов формы и резонансов Фешбаха [35]) различная, то рассмотрим описание каждого типа состояний в отдельности.

Начнем с резонансов формы. Описание таких резонансов проведем с помощью траекторий полюсов $E_0(g)$. Для определения явного вида полюсной траектории $E_0(g)$ необходимо для заданного набора значений $\{g_i\}_{i=1}^{p}$ из области связанных состояний найти соответствующие энергии $\{E_i\}_{i=1}^{p}$. Введем N наборов униформизационных переменных

$$x_\alpha = (g - g_\alpha^{crit})^{1/2}, \quad \alpha = 1,2,\dots,N, \tag{45}$$

в терминах которых траектория полюсов $E_0(x_1,x_2,\dots,x_N)$ будет голоморфной функцией. Здесь N - число каналов, $g_\alpha^{crit} = g_0(K_\alpha = 0)$ - критические значения константы связи, соответствующие точкам ветвления по энергии в порогах каналов α. Построим ПА от N-переменных [36]

$$E^{[m,n]}(x_1,\dots,x_N) = P_m(x_1,\dots,x_N)/Q_n(x_1,\dots,x_N), \tag{46}$$

где

$$P_m(x) = \sum_{\alpha_1=0}^{m_1}\dots\sum_{\alpha_N=0}^{m_N} a_{\alpha_1\dots\alpha_N} x_1^{\alpha_1}\dots x_N^{\alpha_N},$$

$$Q_n(x) = \sum_{\beta_1=0}^{n_1}\dots\sum_{\beta_N=0}^{n_N} b_{\beta_1\dots\beta_N} x_1^{\beta_1}\dots x_N^{\beta_N}, \tag{47}$$

$$x = (x_1,\dots,x_N), \quad m = (m_1,\dots,m_N), \quad n = (n_1,\dots,n_N).$$

Подставляя $\{E_i\}$ и $\{x_\alpha^{(i)}\}$, $i = 1,2,\dots,p$, в (46), имеем систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов ПА. Для определения положения E_r и ширины Γ_r искомого резонанса формы необходимо продолжить полюсную траекторию (46) в точку $g = 1$:

$$E(g=1) = \lim_{\substack{m\to\infty \\ n\to\infty}} E^{[m,n]}(\tilde{x}_1,\dots,\tilde{x}_N)\Big/_{g=1} = E_r - \frac{i\Gamma_r}{2}, \tag{48}$$

где

$$\tilde{x}_\alpha = (1 - g_\alpha^{crit})^{1/2}, \quad \alpha = 1,2,\dots,N.$$

Значения g_α^{crit} определяются с помощью тех же наборов $\{E_i\}$ и $\{g_i\}$ выражением

$$g_\alpha^{crit} = \lim_{\substack{m\to\infty \\ n\to\infty}} g^{[m,n]}(\tilde{K}_1,\tilde{K}_2,\dots,\tilde{K}_N)\Big/_{K_\alpha=0}, \tag{49}$$

где

$$K_\alpha = [2(E - \mathcal{E}_\alpha)]^{1/2}, \quad \tilde{K}_\beta = [2(\mathcal{E}_\beta - \mathcal{E}_\alpha)]^{1/2}, \quad \alpha,\beta = 1,2,\dots,N.$$

При использовании ПА от N переменных необходимо вычислять значения опорных наборов для большого числа точек по g, в которых нужно решить задачу на собственные значения. Это число растет с увеличением числа каналов, соответствующая оценка дана в [26]. Поэтому следует использовать однопараметрическое представление ПА [26], учитывающее поведение аппроксимируемой функции на разрезах, обусловленных точками ветвления в порогах каналов.

В отличие от резонансов формы описание резонансов Фешбаха (автоионизационных или двукратно возбужденных состояний) следует проводить с помощью траекторий полюсов $g_0(E)$, поскольку в этом случае неизвестны положения точек ухода полюсов данного типа с физического на нефизические листы римановой E-поверхности. Эти точки являются точками столкновения полюсов - алгебраическими точками ветвления второго порядка. Их определение является сложной задачей, особенно если эти точки расположены на нефизических листах E-поверхности. Для нахождения указанных точек ветвления можно использовать непрерывный аналог метода Ньютона [37]. Согласно этому методу, добавление к дифференциальному уравнению (I3) соответствующих граничных условий, условия нормировки (оно может быть выбрано в одном из двух видов $\langle F|F\rangle-1=0$ или $\langle F|\hat D(g)-E|F\rangle=0$, где $\hat D(g)=\hat I\cdot d/dR-[\gamma(\gamma+1)+\varkappa(\varkappa+4)]R^{-2}+gV$, а также дополнительного пятого условия $\langle F|V(R)|F\rangle=0$ (это условие следует из определения корневой точки ветвления $dE/dg=0$ и использования теоремы Гельмана-Фейнмана), позволяет сформулировать рассматриваемую спектральную задачу с указанными дополнительными условиями в виде нелинейного функционального уравнения

$$\Phi(Z)=0\,,\qquad Z=\{g,E(g),F(E(g),g)\}. \tag{50}$$

В рамках непрерывного аналога метода Ньютона нелинейное уравнение (50) заменяется эволюционным уравнением по параметру t $(0\leq t<\infty)$

$$\frac{d}{dt}\Phi(Z(t))=-\Phi(Z(t)) \tag{5I}$$

с начальным условием

$$Z(t=0)=Z(g(t=0)=0,E_0,F_0)=Z_0\,.$$

Это уравнение решают с помощью метода Эйлера (подробности см. в [37]). При $t\to\infty$ g будет стремиться к g_0 —искомому значению константы связи, отвечающему точке столкновения полюсов. Рассматриваемый метод позволяет также находить соответствующие собственные значения E_i и собственные функции $F_i(R)$ связанных состояний для заданного набора констант связи $\{g_i\}_{i=1}^{P}$. Дополнительное пятое условие следует

выбрать в виде $\langle F|\hat D(g=g_i)-E|F\rangle=0$, где $\{g_i\}_{i=1}^{P}$ - набор констант связи из области связанных состояний. Решение эволюционного уравнения (5I) по t дает при $t\to\infty$ $(g(\infty)=g_i)$ соответствующие наборы значений энергии $\{E_i\}_{i=1}^{P}$ и волновых функций $\{F_i\}_{i=1}^{P}$. Этот метод следует использовать и для вычисления параметров резонансов формы, а также виртуальных состояний.

Явный вид полюсной траектории $g_0(E)$ в области связанных состояний также аппроксимируем ПА

$$g^{[m,n]}(k_1,\dots,k_N)=P_m(k_1,\dots,k_N)/Q_n(k_1,\dots,k_N). \tag{52}$$

Положение E_r и ширина Γ_r искомого резонанса Фешбаха есть решение нелинейного алгебраического уравнения

$$g^{[m,n]}(E_0=E_r-i\Gamma_r/2)=1 \tag{53}$$

относительно E_0. Эти решения также можно найти, используя непрерывный аналог метода Ньютона.

5. Расчет параметров ${}^1P^0$ резонанса формы в e^--H рассеянии

Применим метод аналитического продолжения по константе связи к расчету ${}^1P^0$ резонанса формы в рассеянии электрона на атоме водорода. Известно, что задача аналитического продолжения относится к классу некорректных задач [48]. Однако при ее практической реализации можно использовать обычные методы экстраполяции (при условии, что экстраполяция осуществляется в близкую область). В качестве метода экстраполяции используем ПА второго рода.

Задача определения параметров резонанса формы решается поэтапно: а) вычисление термов $U_\mu(R)$ и соответствующих базисных функций задачи (II)-(I2); б) вычисление эффективного потенциала $V_{\mu\nu}(R)$; в) решение задачи (I3), (9) для заданного набора констант связи $\{g_i\}_{i=1}^{P}$ из области связанных состояний; г) определение значения g^{crit}; д) экстраполяция полюсной траектории $E_0(g)$ по g в точку $g=1$.

Для решения системы связанных дифференциальных уравнений (II) используется метод конечных разностей. Задача Штурма-Лиувилля (II)-(I2) аппроксимировалась конечно-разностными формулами второго порядка относительно шага сетки h_α. При этом задача (II)-(I2) сводится к решению обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения. Для ее решения применялся метод итерации подпространств [38]. Как показали наши предыдущие расчеты [27], точность определения параметров резонанса крайне чувствительна к точности входных данных - наборов $\{X_\alpha\}$ и $\{K_\alpha\}$, а они в свою очередь зависят от точности определения

$\{E_i\}_{i=1}^{P}$ и g_α^{crit}. При экстраполяции обычно теряются I-2 знака. Поэтому важно иметь оценку точности вычисления $U_\mu(R)$ и соответствующих функций. Точность вычисления $U_\mu(R)$ и $g_{l_1 l_2}(R;\alpha)$ определяется числом уравнений N_α системы (II) и числом узлов n_α конечноразностной сетки по α и зависит от значения гиперрадиуса R. В таблицах I и 2 приведены значения термов $U_\mu(R)$, μ= 2,3, в зависимости от числа уравнений N_α и числа узлов сетки n_α для двух значений гиперрадиуса R =I и 20 при фиксированных n_α и N_α, соответственно. Видно, что при малых R имеет место медленная сходимость значений термов от числа уравнений N_α (числа бисферических гармоник), с ростом R скорость сходимости резко возрастает. Поскольку нас интересуют резонансные состояния (в потенциальных кривых, сходящихся ко второму порогу и имеющих минимум при $R > 5$ а.е.), то точность вычисления термов $\sim 10^{-4}$-10^{-5} а.е. достигается при N_α =6-8 уравнений и n_α = 600-800 узлов.

В каждой точке по R вычислялись одновременно первые 4 собственных значения (терма) и собственных функций задачи (II)-(I2). Конечноразностная сетка содержала 720 узлов при N_α=6. Расчеты проводились в следующих точках по R : 0.2(0.2)5(0.I)I6(0.2)25(0.25)30(0.5)40(I)50 (2)60 (в скобках указан шаг). В таблице 3 приведены для сравнения численные и асимптотические значения термов, позволяющие оценить точность при больших R. Для вычисления производных функций $g_{l_1 l_2}(R;\alpha)$ по R использовались конечно-разностные формулы четвертого порядка точности. Таблично заданный потенциал $V_{\mu\nu}(R)$ сглаживался с помощью кубической сплайн-интерполяции. В окрестности точки квазипересечения R_0= I3.65 [39,40] потенциальные кривые $V_{\mu\mu}(R)$, μ= 2,3, в области $12.5 < R < 14.8$ были получены с помощью диабатической интерполяции [39].

Для решения задачи Штурма-Лиувилля (I3), (9) применялся метод конечных элементов, использующий разработанные нами схемы высокого порядка точности. Это связано с необходимостью обеспечить точность вычисления ($\sim 10^{-4}$ а.е.) уровней энергии H^-, требуемую для последующей процедуры экстраполяции с помощью ПА. В данном расчете использовались изопараметрические лагранжевы элементы четвертого порядка, обеспечивающие точность $O(h_R^8)$ для собственных значений (здесь h_R - длина элемента). Для проверки погрешности вычисления уровней энергии с использованием разработанного нами пакета программ HSATOM был выполнен расчет положения E_r $^1P^o$ резонанса формы в одноканальном адиабатическом (μ=2) и двухканальном (μ =2,3) приближениях при g =I : E_r^{1c} =-0.I24358 а.е. (I0.22I8 эВ) и E_r^{2c} = -0.I24339 а.е. (I0.2223 эВ). В расчете были использованы следующие значения параметров: число элементов NEL=3I0 , число узлов сетки n_R =I24I, значе-

Таблица I. Зависимость $U_\mu(R)$, μ=2,3, от числа N_α уравнений системы (II) при фиксированном числе узлов сетки n_α (=I00) и R =I,20

N_α	U_2(R=1)	U_3(R=1)	U_2(R=20)	U_3(R=20)
2	I9.I308I6	42.532574	-0.260355	-0.24I479
4	I9.02735I	22.0I49I3	-0.263007	-0.25060I
6	I9.026086	2I.928692	-0.263035	-0.250755
8	I9.025703	2I.9I4773	-0.263035	-0.250757
I0	I9.025548	2I.9I03I2	-0.263035	-0.250757
I2	I9.025473	2I.908409	-0.263035	-0.250757

Таблица 2. Зависимость $U_\mu(R)$, μ =2,3, от числа узлов конечноразностной сетки n_α при фиксированном числе уравнений N_α (=4) и R =I,20

n_α	U_2(R=1)	U_3(R=1)	U_2(R=20)	U_3(R=20)
200	I9.02869I	22.0I5237	-0.263I20	-0.250580
400	I9.029025	22.0I53I8	-0.263I49	-0.250575
600	I9.029087	22.0I5334	-0.263I55	-0.250574
800	I9.029I09	22.0I5339	-0.263I57	-0.250573
I000	I9.029II9	22.0I534I	-0.263I58	-0.250573

Таблица 3. Сравнение вычисленных значений термов $U_\mu(R)$, μ=I,...,4, с асимптотическими $U_\mu^{as}(R) = -Z^2/n^2 + U_\mu^{(2)} R^{-2}$ при больших R. Здесь $U_\mu^{(2)}$ есть собственные значения дипольного интеграла движения [8]

μ	U_μ(R=40)	U_μ^{as}(R=40)	U_μ(R=60)	U_μ^{as}(R=60)	$U_\mu^{(2)}$
I	-0.9986	-0.999I	-0.9985	-0,9996	I.5
2	-0.2532	-0.2533	-0.25I4	-0.25I5	0.8253
3	-0.2497	-0.2495	-0.2498	-0.2498	-5.2053
4	-0.2445	-0.2447	-0.2476	-0.2477	8.3799

ние правой границы области интегрирования R_{max}= I24. Приведем для сравнения результаты других вычислений: E_2^{cc} = -0.I2434 а.е. (I0.2223 эВ) - метод сильной связи каналов с учетом корреляций [4I], E_2^{CR} = -0.I2435I а.е. (I0.2220 эВ) - метод комплексных координат [42]. Наши результаты согласуются с приведенными выше с точностью $\sim 3\cdot 10^{-5}$ а.е. ($5\cdot 10^{-4}$ эВ). Это дает оценку погрешности вычисления параметров резонанса (после экстраполяции) в несколько мэВ.

В качестве исходного оптимального набора констант связи из области связанных состояний $(g_i > g^{crit})$ выбирались нули многочлена Чебышева. Расчеты проводились для различных опорных наборов $\{g_i\}$ и $\{E_i\}$. Это необходимо для исследования сходимости параметров резонанса от порядка ПА, а также для обнаружения и устранения ложных особенностей. В данной работе при вычислении параметров резонанса использовалось одноканальное (адиабатическое) и двухканальное приближения. Обнаружено, что для этих двух приближений области констант связи, соответствующих связанным состояниям, различны и соответственно равны: $\{g\}_{1c}$ = {I.005I46÷3.88} и $\{g\}_{2c}$ = {I.0053÷3.86}. Поэтому при вычислении параметров резонанса в одно- и двухканальном приближениях следует использовать указанные наборы $\{g\}$. Результаты вычислений g^{crit} в зависимости от порядка ПА и числа уравнений представлены в таблице 4. В таблице 5 приведены результаты вычисления положения E_r и ширины Γ_r резонанса формы в зависимости от порядка ПА и числа уравнений в системе (8) для области констант связи {I.0053÷3.85}. Заметим, что связь каналов практически не отражается на положении резонанса (демонстрирующем стабильность при изменении порядка ПА), в то время как включение второго канала приводит к незначительному увеличению ширины резонанса на I-2 мэВ. Это обстоятельство позволяет в рамках HSA-подхода при расчете резонансных параметров экстраполяцией по константе связи ограничиться простым адиабатическим приближением. Об этом свидетельствуют результаты проведенных численных экспериментов для различных наборов констант связи.

Вычисленные в адиабатическом приближении положение и ширина $^1P^o$ резонанса формы в e^--H рассеянии для некоторых наборов констант связи представлены в таблице 6. Если не приближаться при выборе интервала констант связи очень близко к пороговому значению g^{crit}, то стабильность определения положения резонанса (при невысоких порядках ПА) несколько ухудшается, при этом увеличивается значение ширины резонанса. Это обстоятельство связано с погрешностями в определении g^{crit}, которые сказываются при экстраполяции, если близко подходить к g^{crit} при выборе интервала $\{g\}$ констант связи.

Таблица 4. Зависимость g^{crit} от порядка ПА и числа уравнений. В фигурных скобках указан интервал констант связи из области связанных состояний

[m,m]	{I.005I46÷3.88}	{I.0053÷3.85}	
	I канал	I канал	2 канала
2,2	I.02I789	I.02II82	I.0226I8
3,3	I.009032	I.009036	0.998087
4,4	I.0063I3	I.00638I	I.004088
5,5	I.005385	I.00535I	I.004975
6,6	I.004757	I.005052	I.00564I
7,7	I.005I50	I.005I48	I.005757
8,8	I.005I44	I.005I44	I.005564
9,9	I.005I45	I.005I45	I.005523
I0,I0	I.005I45	I.005I45	I.005339
II,II	I.005I45	I.005I45	I.005305
I2,I2	I.005I45	I.005I45	I.00530I

Таблица 5. Зависимость $E_{res} = E_r - i\Gamma_r/2$ (в эВ) от порядка ПА и числа уравнений N_R в системе (8). Область констант связи $\{g\}$ = {I.0053÷3.85}.

[m,m]	I канал (μ=2)		2 канала (μ=2,3)	
	E_r	Γ_r	E_r	Γ_r
2,2	0.0I4	0.003	0.0I4	0.005
3,3	0.0I4	0.005	0.0I4	0.005
4,4	0.0I4	0.006	0.0I4	0.006
5,5	0.0I4	0.006	0.0I4	0.008
6,6	0.0I4	0.005	0.0I4	0.007
7,7	0.0I4	0.006	0.0I4	0.007

Положение и ширина $^1P^o$ резонанса формы, вычисленные в настоящей работе в адиабатическом приближении, равны: E_r =0.0I5 эВ и Γ_r =0.0I2 эВ. Ниже мы приводим для сравнения результаты других подходов: E_r^{ad} = 0.032 эВ и Γ_r^{ad} =0.028 эВ - гиперсферический адиабатический расчет [39], E_r^{cc} =0.0I8 эВ и Γ_r^{cc} =0.0I5 эВ - метод сильной связи каналов с двадцатью корреляционными членами [4I], E_r^{CR} = = 0.0I76 эВ и Γ_r^{CR} =0.0I4I эВ - метод комплексных координат [42]. Наш расчет, выполненный в том же приближении, что и в работе [39], лучше согласуется с результатами работ [4I,42].

Таблица 6. Зависимость $E_{res} = E_r - i\Gamma_r/2$ (в эВ) от порядка ПА для различных интервалов констант связи, взятых из области связанных состояний. Расчеты выполнены в адиабатическом приближении

$[m,m]$	$\{1.005146 \div 3.88\}$		$\{1.00525 \div 3.8\}$		$\{1.00523 \div 3.88\}$	
	E_r	Γ_r	E_r	Γ_r	E_r	Γ_r
2,2	0.0I4	0.003	0.0I5	0.02I	0.0I4	0.003
3,3	0.0I4	0.004	0.0I0	0.007	0.007	0.0I2
4,4	0.0I4	0.006	0.0I6	0.0I5	0.0I6	0.0I7
5,5	0.0I4	0.007	0.0I9	0.043	0.0I5	0.0II
6,6	0.0I4	0.008	0.0I5	0.0I0	0.0I5	0.0II
7,7	0.0I4	0.007	0.0I5	0.0I2	0.0I5	0.0I2
8,8	0.0I4	0.008	0.0I5	0.0I2	0.0I5	0.0I2

Заключение

В работе развит метод расчета параметров резонансных состояний с помощью экстраполяции по константе связи соответствующих характеристик связанных состояний с использованием техники паде-аппроксимантов второго рода. Развитый подход применен к расчету положения и ширины H^- $^1P^o$ резонанса формы в адиабатическом и двухканальном приближениях. Показано, что связь каналов незначительно увеличивает ширину резонанса и практически не меняет его положение. Это показывает, что в HSA-подходе для вычисления параметров резонансов достаточно ограничиться простым адиабатическим приближением. Вычисленные в настоящей работе положение E_r =0.0I5 эВ и ширина Γ_r =0.0I2 эВ $^1P^o$ резонанса формы отрицательного иона водорода, находятся в хорошем согласии с другими теоретическими расчетами.

Литература

1. Smith K. The calculation of atomic collision processes. J.Wiley & Sons, New York, 1971.
2. Гайлитис М.К. УФН, II6 (I975) 665.
3. Burke P.G., Robb W.D. Adv. Atom. Mol. Phys., 11 (1975) 143.
4. Nesbet R.K. Comput. Phys. Comm., 6 (1974) 275.
5. Callaway J. Phys. Rep., 45 (1978) 89.
6. Lipsky L., Russek A. Phys. Rev. 142 (1966) 59.
7. Fischer C.F. The Hartree-Fock method for atoms. J.Wiley & Sons, New York, 1977.

8. Macek J. J.Phys. B, 1 (1968) 831.
9. Fano U. Rep. Progr. Phys. 46 (1983) 97; Lin C.D. Adv. At. Mol. Phys., 22 (1986) 77.
10. Reinhardt W.P. Comput. Phys. Comm., 17 (1979) 1.
11. Ho Y.K. Phys. Rep. 99 (1983) 1; Reinhard W.P. Ann. Rev. Phys. Chem., 33 (1982) 223.
12. Junker B.R. Adv. At. Mol. Phys., 18 (1982) 207.
13. McNutt J.F., McCurdy C.W. Phys. Rev., A27 (1983) 132.
14. Reinhardt W.P. Comput. Phys. Comm., 6 (1974) 303.
15. Heller E.J., Yamani H.A. Phys.Rev. A9 (1974) 1201; Broad I.J. Phys. Rev., A18 (1978) 1012.
16. Langhoff P.W. Int. J. Quant. Chem. 11 (1977) 301; Hazi A.U. J.Phys.B, 11 (1978) L259; Whitten B., Hazi A.U. Phys. Rev., A33 (1986) 1039.
17. Winick J.R., Reinhardt W.P. Phys. Rev., A18 (1978) 910.
18. Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Препринт ОИЯИ, Р4-8884, Дубна, I975; Бакг Е. и др. Препринт ОИЯИ, Р4-9054, Дубна, I975; Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сомов Л.Н. Препринт ОИЯИ, Р4-99I5, Дубна, I976. Melezhik V.S., J. Comput. Phys. , 65 (1986) 1.
19. Schlessinger L., Schwartz C. Phys. Rev. Lett., 16 (1966) 1173; Schlessinger L. Phys. Rev. 167 (1968) 1411.
20. Stern M.S., Warburton A.E.A. J. Phys. A, 5(1972)112, 426.
21. Murtaugh T.S., Reinhardt W.P. Chem. Phys. Lett. 11 (1971) 562; J. Chem. Phys., 57 (1972) 2129; Heller E.J., Reinhardt W.P. Phys. Rev. A5 (1972) 757.
22. Lomsadze Yu.M., Khimich I.V., Shuba J.M. Nucl. Phys., 67 (1965) 631; "Известия вузов. Физика", 3 (I965) 86.
23. Гареев Ф.А. и др. Препринт ОИЯИ Р4-I200I, Дубна, I978; Кукулин В.И. и др. ЯФ, 29 (I979) 8I8; 30 (I979) I428; Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M. J. Phys. A, 10 (1977) L33; Phys. Lett. A, 83 (1981) 98.
24. D'yachkov L.G., Kobsev G.A. J. Phys. B, 14 (1981) L 689.
25. Орлов Ю.В. Письма в ЖЭТФ, 33 (I98I) 380.
26. Абрашкевич А.Г., Химич И.В. Деп. в УкрНИИНТИ, № 890 Ук-Д83, I983, 88 с; N I756 Ук-84, I984, 22 с.; ДАН УССР. Сер. А, I985, № 4, 45.
27. Абрашкевич А.Г., Химич И.В. УФЖ, 30 (I985) I303; Известия АН СССР. Сер. физич., 50 (I986) I250.
28. Абрашкевич А.Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р4-88-640, Дубна, I988.
29. Виницкий С.И. и др. Препринт ОИЯИ, Р4-88-532, Дубна, I988.

30. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М., Мир, 1969.
31. Newton R.G. J.Math.Phys., 2(1961)188.
32. Де Альфаро В., Редже Т. Потенциальное рассеяние. М., Мир, 1966.
33. Рисс Ф., Секефальви-Надь Б. Лекции по функциональному анализу. М., Мир, 1979.
34. Glöckle W. Z.f. Phys., 9 (1966) 391.
35. Taylor H.S. Adv. Chem. Phys., 19 (1970) 91.
36. Chisholm J.S.R. Lect. Notes Phys., 47 (1976) 33.
37. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Препринт ОИЯИ, Р4-10942, 1977, Дубна; Виницкий С.И., Гочева А.Д., Пузынин И.В. Препринт ОИЯИ, Р11-81-837, 1981; Р11-82-314, Р11-82-315, 1982, Дубна.
38. Bathe K.J. Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1982.
39. Lin C.D. Phys.Rev.Lett., 35 (1975) 1150.
40. Christensen-Dalsgaard B.L. Phys.Rev., A29 (1984) 470.
41. Taylor A., Burke P.G. Proc. Phys. Soc. Lond., 92 (1967) 336; Macek J., Burke P.G. ibid., 92 (1967) 351.
42. Wendoloski J.J., Reinhardt W.P. Phys. Rev., A17 (1978) 195.
43. Ментковский Ю.Л. Частица в ядерно-кулоновском поле. Москва. Энергоатомиздат, 1982.
44. Гайлитис М.К. ТМФ, 3 (1970) 364.
45. Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 90 (1986) 1165; Овчинников С.Ю., Соловьев Е.Ю. ЖЭТФ, 90 (1986) 921.
46. Domcke W.J. Phys. B, 16 (1983) 359.
47. Kok L.P., van Haeringen H. Ann. Phys., 131 (1981) 426.
48. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 октября 1988 года.

Абрашкевич А.Г. и др. Р4-88-746

Адиабатическое описание резонансных состояний двухэлектронных систем методом экстраполяции по константе связи

В рамках адиабатического гиперсферического представления для двухэлектронных атомных систем исследованы аналитические свойства по энергии и константе связи g многоканальной матрицы рассеяния, изучены локализация и характер движения ее полюсов в комплексных плоскостях константы связи и энергии. На этой основе развит метод получения характеристик резонансных состояний двухэлектронных систем с помощью экстраполяции по константе связи соответствующих характеристик связанных состояний, которая реализована с помощью паде-аппроксимантов второго рода. Развиваемый подход применен для расчета положения и ширины $^1P^0$ резонанса формы отрицательного иона водорода.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Abrashkevich A.G. et al. P4-88-746

Adiabatic Description of Two-Electron Resonant States by the Method of Extrapolation on Coupling Constant

Analytical properties on energy and coupling constant of multichannel scattering matrix and localization and character of poles' motion in complex energy and coupling constant planes are studied in the framework of adiabatic hyperspherical representation for two-electron atomic systems. On this basis a method for obtaining characteristics of resonant states with the help of extrapolation on coupling constant of corresponding characteristics of bound states is developed. This extrapolation is realized with the help of Pade approximants of second type. The considered approach is used for calculating the position and width of $^1P^0$ shape resonance of negative hydrogen ion.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automations, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988